

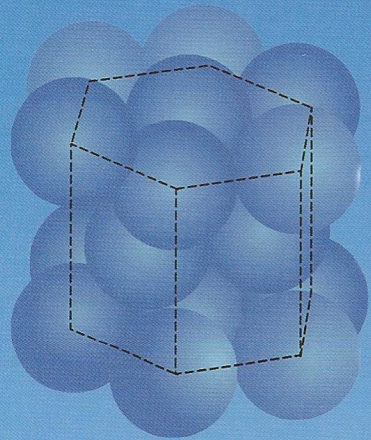
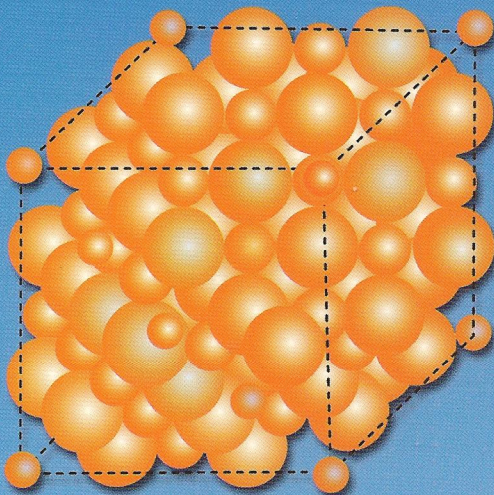


۶۵/۶

فیزیک حالت جامد

ترجمہ: غلامرضا نیونی

تألیف: علی عمر



چاپ دوم

پیش‌گفتار

این کتاب به عنوان یک کتاب درسی فیزیک حالت جامد برای دانشجویان رشته‌های فیزیک، فیزیک کاربردی، مهندسی و دیگر رشته‌های علوم تهیه شده است. امیدوارم بتواند به عنوان یک مرجع مفید برای اشخاصی که در یکی از زمینه‌های پژوهشی حالت جامد کار می‌کنند ولی آموزش رسمی در فیزیک حالت جامد ندیده‌اند نیز به کار رود.

در حال حاضر کتاب‌های بسیاری در فیزیک حالت جامد در دسترس دانشجویان قرار دارد و لازم است قضاوتی در مورد آن‌ها صورت گیرد. شاید بهترین کاری که من می‌توانم انجام دهم این است که بر اهداف خود پایبند بمانم و قضاوت را به خواننده‌ی کتاب واگذارم که تا چه اندازه در این هدف موفق بوده‌ام.

- اول این که تلاش کرده‌ام، محدوده‌ی وسیعی از سرفصل‌ها را که با هدف من از نوشتن یک کتاب درسی عمومی و کامل سازگار است در این کتاب وارد کنم به طوری که بتواند به عنوان یک کتاب مرجع عمومی به کار رود. این محدوده شامل پژوهش‌هایی که اخیراً در زمینه فیزیک حالت جامد صورت گرفته نیز می‌باشد. علاوه بر این تلاش نموده‌ام تا رابطه‌ی نزدیکی بین قسمت‌های مختلف موضوع ایجاد کنم و تمام مطلب را در قالب یک موضوع یگانه بگنجانم.

- دوم؛ سعی کرده‌ام مطالب کاربردی بیش‌تری در این کتاب یک جلدی بگنجانم. در این راستا نه تنها به خوانندگان علاقه‌مند به کاربردهای این مباحث توجه شده بلکه سعی شده است خواننده را به تفکر راجع به فیزیک این مباحث وادارد. این نکته‌ی اخیر از این جهت حایز اهمیت است که علوم نه تنها در پیشرفت تکنولوژی بلکه در حل بسیاری از مسائل علوم اجتماعی و اقتصادی نیز سهم بسزایی دارد.

- سوم؛ علاوه بر مباحث عمومی فیزیک حالت جامد که در ده فصل اول کتاب آمده، در سه فصل آخر به مباحثی پرداخته شده است که فیزیک‌دانان حالت جامد سهم مهمی در توسعه‌ی آن‌ها داشته‌اند. این مباحث که در عصر حاضر توجه و علاقه‌ی بسیاری را به خود معطوف کرده است عبارتند از، متالوژی، نقایص بلوری در جامدات، مواد جدید و بیوفیزیک.

- چهارم این که، سعی بسیار کرده‌ام که یک کتاب درسی مدرن و روزآمد تهیه کنم. فیزیک حالت جامد در چند دهه‌ی گذشته خیلی سریع پیشرفت کرده است ولی بسیاری از مباحث پیشرفته را هنوز نمی‌توان در یک کتاب درسی مقدماتی وارد کرد.

- پنجم و مهم‌ترین نکته این که این کتاب ماهیتاً یک کتاب درسی مقدماتی در فیزیک حالت جامد است. تلاش بسیاری کرده‌ام تا برای دانشجویان دوره‌ی کارشناسی قابل فهم باشد. سعی کرده‌ام مفاهیم جدید را تدریجاً ارائه کنم و توضیحات ریاضی لازم برای بیان این مفاهیم را در خلال مراحل درسی

بیان نماید. سپس نتایج نهایی را بر اساس معانی فیزیکی آن‌ها بیان نموده و هر جا لازم بوده رابطه‌ی آن‌ها را با حالت‌های آشنا تر فیزیکی توضیح دهم. شکل‌های بسیاری در کتاب گنجانده و لیست کاملی از منابع و مراجع در پایان هر فصل ارائه نموده‌ام تا خواننده علاقه‌مند را تشویق به مطالعه‌ی بیشتر در زمینه‌ی بحث‌های ارائه شده در این کتاب نمایم.

- فصل اول راجع به ساختار بلوری جامدات و نیروهای بین اتمی است که سبب به وجود آمدن این ساختارها می‌شود. فصل دوم شامل تکنیک‌های تجربی همچون پراش پرتوهای ایکس است که برای تحلیل این ساختارها به کار می‌روند. به جز در دماهای خیلی پایین، اتم‌ها در جامدات ساکن نیستند، بلکه حول موضع تعادل شان نوسان می‌کنند. در فصل سوم، ارتعاشات شبکه و همین طور تأثیر این ارتعاشات بر خواص حرارتی، آکوستیکی و اپتیکی جامدات مورد مطالعه قرار می‌گیرد. در فصل چهارم راجع به مدل الکترون آزاد بحث می‌شود. این الکترون‌ها همان الکترون‌های ظرفیت هستند که به صورت ذرات آزاد فرض می‌شوند. بررسی واقعی تر این الکترون‌ها در فصل پنجم ارائه می‌گردد. در آن جا نوارهای انرژی در جامدات معرفی می‌گردند. دانشجو قبل از مطالعه‌ی این فصل باید با مراجعه به پیوست آخر کتاب مباحثی از مکانیک کوانتومی را دوره نماید. در بررسی نسبتاً مختصر این موضوع پیچیده، هدف این نبوده که یک دوره درسی برای افراد نا آشنا به موضوع ارائه گردد، بلکه خلاصه‌ی نکات مهمی که در فصل پنجم به کار می‌رود در پیوست آخر کتاب آمده است. در واقع فصل پنجم، فصل محوری کتاب است و امید است علی‌رغم طبیعت مشکل آن، خواننده درک عمیقی نسبت به خواص الکترونی جامدات بلوری به دست آورد.

نیمه رساناها در فصل شش بحث می‌شوند. این فصل شامل معرفی این مواد و بررسی خواص بسیار جالب آن‌ها و همین طور نقش حیاتی ه نیمه رساناها در تکنولوژی امروزه دارند می‌باشد. قطعات و دستگاه‌های نیمه رسانا به تفصیل در فصل هفت بررسی می‌شوند. هنگامی که یک میدان الکتریکی ایستا یا متناوب بر جسم جامدی اعمال گردد، میدان الکتریکی، بارهای مثبت و منفی ماده را قطبیده می‌کند. تأثیر قطبش بارها بر خواص اپتیکی و دی الکتریکی جامدات، موضوع فصل هشت است. خواص مغناطیسی مواد که شامل پیشرفت‌های اخیر در تشدیدهای مغناطیسی نیز می‌باشد در فصل نه و پدیدهای بسیار جالب ابررسانایی در فصل ده مطالعه می‌شوند.

هر فصل با تعدادی تمرین خاتمه می‌یابد. این تمرین‌ها دو نوع‌اند، پرسش‌ها که نسبت کوتاه‌ترند و مفاهیم را مورد سؤال قرار می‌دهند؛ و مسائل که تمام فصل را می‌پوشاند. اساساً همه‌ی مسائل بر مبنای مطالب ارائه شده در فصل قابل حل‌اند و به مراجع پیشرفته‌تر نیازی نیست. تمرین‌ها قسمت مهم درس‌اند و دانشجو یان باید تلاش کنند که اکثر آن‌ها را حل کنند.

افراد بسیاری مستقیم یا غیر مستقیم در این امر من را یاری کرده‌اند. پروفیسور هربرت کرومر^۱ از دانشگاه کلرادو^۲ دیدگاه‌های خود را در مراحل اولیه نگارش کتاب در اختیار من قرار داد. پروفیسور ماساتاکا می‌زوشیما^۳ که او هم از دانشگاه کلرادو است در خلال چندین سال مرا حمایت و تشویق به این کار کرد. تئوری نوار در فصل پنج برگرفته از یادداشت‌های درسی پروفیسور هنری اهرنریچ^۴ از دانشگاه هاروارد^۵ و مبحث مغناطیس در فصل نه نتیجه‌ی بحث‌های مفید با پروفیسور مارسل مولر^۶ از دانشگاه واشنگتن است.

پروفیسور جی. اچ‌تریپ^۷ از دانشگاه کانکتی کات^۸ راهنمایی‌های مفیدی ارائه و بعضی اشتباهات ویراستاری را در متن دستنویس اولیه صلاح کرد پروفیسور دیوید لازاروس^۹ از دانشگاه ایلی‌نویز - اوربانا^{۱۰} با دقت بسیار تمام متن دستنویس اولیه را خواند. توصیه‌ها و پیشنهادهای او که بر اساس تجربه‌ی بسیار او در تدریس و پژوهش استوار بود منجر به بهبود اساسی در این کتاب گردید و آن را به صورت یک کتاب درسی مفید در فیزیک حالت جامد درآورد.

ضمن تشکر صمیمانه از این مساعدت‌ها، مسئولیت اشتباهات باقی مانده در کتاب و نقایص آن به عهده‌ی خود من است.

جویسی ری^{۱۱} نه تنها متن دستنویس را با توانایی تحسین برانگیزی تایپ کرد، بلکه با دقت، حوصله و درک صحیح، آن را اصلاح کرد. به خاطر تلاش‌های او در انگلیسی کردن سبک نگارش (که شاید کمی بیش از حد و سواس به خرج داد)، بیش از همه به جویسی مدیونم. در پایان عبارتی از رایف^{۱۲} (مؤلف کتاب مبانی فیزیک آماری) نقل می‌کنم:

«یک نویسنده هرگز یک کتاب را به پایان نمی‌رساند، بلکه فقط آن را متوقف می‌کند. من به درستی این عبارت رسیده‌ام و می‌توانم روزی را تجسم می‌کنم که این متن چاپ شده است و درمی‌یابم، که

-
1. Herbert Kroemer
 2. University of Colorado
 3. Masataka Mizushima
 4. Henry Ehrenreich
 5. Harvard University
 6. Marcel W. Muller
 7. J. H. Tripp
 8. University of Connecticut
 9. David Lazarus
 10. University of Illinois - Urbana
 11. Joyce Rey
 12. Reif

می‌توانست خیلی بهتر از این باشد. به هر روی اگر چه کار این کتاب را متوقف کرده‌ام ولی امیدوارم که علی‌رغم نقایص آن، برای علاقه‌مندان مفید باشد.»

علی عمر

لوول، ماساچوست

مقدمه مترجم بر چاپ دوم

کتاب‌های بسیاری در زمینه‌ی فیزیک حالت جامد نوشته شده ولی تعداد بسیار کمی از آن‌ها به فارسی ترجمه شده است. کتاب حاضر تألیف دانشمند مسلمان علی عمر، از کتاب‌های است که دریغ است دانشجویان ایرانی به خصوص آن‌هایی که به منابع انگلیسی دسترسی ندارند و یا تسلط کافی به این زبان ندارند، از آن بی‌بهره باشند. این کتاب در عین حال که تقریباً تمام مطالب کلاسیک یک کتاب درسی فیزیک حالت جامد را دربرمی‌گیرد، درک آن برای دانشجوی متوسط مشکل نیست. مطالب پنج فصل اول کتاب دقیقاً منطبق بر سر فصل‌های درس فیزیک حالت جامد ۱ و مباحث پنج فصل بعدی منطبق بر سرفصل‌های درس فیزیک حالت جامد ۲ در دوره‌ی کارشناسی فیزیک دانشگاه‌های ایران است. بر آن شدم که ترجمه‌ی آن را در اختیار دانشجویان و دانش‌پژوهان قرار دهم.

چاپ اول این کتاب در سال ۱۹۷۵ منتشر شد و پس از تجدید چاپ‌های مکرر در سال ۱۹۹۳ تصحیح، ویراستاری و مجدداً تجدید چاپ گردید. چاپ‌های بعدی این ویرایش در سال‌های ۱۹۹۶، و ۱۹۹۸ به بازار عرضه شده است.

همان‌گونه که مولف در پیش‌گفتار بیان کرده است، با توجه به پیشرفت سریع فیزیک حالت جامد در چند دهه‌ی اخیر، لزوم آشنایی دانشجویان رشته‌های فیزیک و مهندسی با این مبحث ویژه کاملاً احساس می‌شود و می‌توان از طریق انتشار یک کتاب جامع، با تکیه بر مطالب کاربردی و بدون وارد شدن در تفصیل‌ها و استدلال‌های ریاضی که گاهی برای دانشجویان ملال‌آور است به این مهم دست یافت.

بی‌تردید، آن‌چه با زبان ریاضی بیان گردد از زیبایی و شیوایی خاصی بهره‌مند می‌شود؛ ولی نتیجه‌گیری‌های فیزیکی نباید در لابه‌لای فرمول‌های ریاضی گم گردد. گرچه در این کتاب، استفاده از زبان شیوای ریاضی هرگز از نظر دور نبوده است (برای نمونه می‌توان به مطالعه‌ی تئوری پراش پرتوهای ایکس در فصل دو، مدل‌های گرمای ویژه در فصل سه تئوری نوارهای انرژی در فصل پنج و خواص مغناطیسی مواد در فصل نه اشاره کرد)؛ ولی هنر مؤلف در نتیجه‌گیری‌های فیزیکی پس از ارائه استدلال ریاضی به راستی قابل تحسین است. امیدوارم در ترجمه این کتاب توانسته باشم مفاهیم فیزیکی را به زبان فارسی انتقال دهم به طوری که برای دانشجویان ابهامی از جهت درک مفاهیم پیش نیاید.

چاپ اول ترجمه کتاب در دو جلد (حالت جامد ۱ و ۲) به دانشجویان و دانش‌پژوهان تقدیم گردید. پس از تمام شدن چاپ اول کتاب‌های فوق بر آن شدم تا با بازبینی کلی در متن ترجمه، به کارگیری

قواعد ویرایش ادبی که اخیراً توسط فرهنگستان زبان و ادب پارسی اعلام گردیده است و هم چنین بازنویسی قسمت‌هایی از متن که احیاناً برای بعضی از دانشجویان مبهم به نظر می‌رسید. چاپ دوم کتاب را در یک جلد تقدیم دانشجویان و دانش پژوهان رشته‌های فیزیک و مهندسی بنمایم. امید است مفید و موثر واقع گردد. علی‌رغم تلاشی که در این زمینه کرده‌ام قطعاً این ترجمه نیز خالی از نقص نیست. از صاحب نظران این رشته و همین‌طور دانشجویان عزیز می‌خواهم که این کتاب را مطالعه می‌کنند تقاضا دارم که ابهامات متن و اشتباهات مترجم را متذکر شوند تا در چاپ‌های بعدی اصلاح گردد.

سپاس‌گزاری

افراد بسیاری در تدوین این کتاب به من کمک کردند که بدون یاری شان چاپ کتاب میسر نمی‌شد. از خواهر عزیزم سرکار خانم حشمت نبیونی دبیر فرهیخته ادبیات فارسی که با دقت و حوصله‌ی بسیار ویرایش ادبی متن ترجمه کتاب را انجام دادند متشکرم.

از آقای کامبیز هدایتی دانشجوی دکتری و خانم‌ها آسیه یوسف نژاد، طاووس حسین آباد، اکرم کبیری، مینو سراج، الهه عزیزی و بیتا شاهدوست دانشجویان کارشناسی ارشد فیزیک حالت جامد (همه از اعضای گروه تحقیقاتی رشد نانوساختارهای دانشگاه اراک) که در تصحیح متن ترجمه، فرمول‌ها و تطبیق آن با متن اصلی کتاب مرا یاری کردند تشکر می‌کنم.

از جناب آقای مجید میناعراقی که زحمت صفحه‌آرایی و طرح روی جلد کتاب را تقبل کردند و همچنین سرکار خانم اویسی سپاسگزارم.

از انتشارات دانشگاه اراک و کارکنان صدیق آن که عهده دار مسئولیت چاپ این کتاب بودند صمیمانه تشکر می‌کنم.

در خاتمه و بیش از همه خود را مدیون خانواده‌ام می‌دانم که صبورانه و صمیمانه محیط خانه را برای پرداختن به امر ترجمه‌ی این کتاب مساعد کردند و هرگز گله‌ای از آنان نشنیدم.

سپاسی ز دامان گل پاک تر

غلامرضا نبیونی

زمستان ۹۰ - دانشگاه اراک

فصل ۱: ساختارهای بلوری و نیروهای بین اتمی

۳	۱-۱ مقدمه.....
۳	۱-۲ حالت بلوری.....
۵	۱-۳ تعاریف پایه.....
۱۰	۱-۴ چهارده شبکه براوه و هفت سیستم بلوری.....
۱۳	۱-۵ عناصر تقارن.....
۱۶	۱-۶ نام گذاری جهت ها و صفحات بلوری.....
۲۱	۱-۷ مثال هایی از ساختارهای ساده بلوری.....
۲۷	۱-۸ جامدات بی شکل و مایعات.....
۳۰	۱-۹ نیروهای بین اتمی.....
۳۲	۱-۱۰ انواع پیوندها.....
۴۰	مراجع.....
۴۱	پرسش ها.....
۴۳	مسائل.....

فصل ۲: پراش پرتوهای ایکسنوترون و الکترون در بلورها

۴۷	۲-۱ مقدمه.....
۴۷	۲-۲ تولید و جذب پرتوهای ایکس.....
۴۹	۲-۳ قانون براگ.....
۵۱	۲-۴ پراکندگی از یک اتم.....
۵۶	۲-۵ پراکندگی از یک بلور.....
۶۱	۲-۶ شبکه وارون و پراش پرتوهای ایکس.....
۶۷	۲-۷ شرط پراش و قانون براگ.....

۷۰	پراکندگی از مایعات
۷۲	تکنیک‌های تجربی
۷۵	کاربردهای دیگر پرتوهای ایکس در فیزیک حالت جامد
۷۶	پراش نوترون
۷۸	پراش الکترون
۸۱	خلاصه مطالب
۸۳	مراجع
۸۴	پرسش‌ها
۸۶	مسائل

فصل ۳: ارتعاشات شبکه: خواص حرارتی، آکوستیکی و اپتیکی

۹۱	۳-۱ مقدمه
۹۱	۳-۲ امواج کشسان
۹۵	۳-۳ شمارش مدها: چگالی حالت‌ها در یک محیط پیوسته
۱۰۰	۳-۴ گرمای ویژه مدل‌های انیشتین و دی
۱۱۵	۳-۵ فونون
۱۱۶	۳-۶ امواج شبکه
۱۳۸	۳-۷ چگالی حالت‌های یک شبکه
۱۴۲	۳-۸ گرمای ویژه: تئوری دقیق
۱۴۳	۳-۹ رسانایی حرارتی
۱۴۸	۳-۱۰ پراکندگی پرتوهای ایکس؛ نوترون و نور توسط فونون‌ها
۱۵۵	۳-۱۱ فراصوتی‌های مایکروموج
۱۶۰	۳-۱۲ خواص نوری شبکه در ناحیه‌ی فرو سرخ
۱۷۱	خلاصه مطالب
۱۷۷	مراجع

پرسش ها ۱۷۸

مسائل ۱۸۰

فصل ۴: فلزات I: مدل الکترون آزاد

۴-۱ مقدمه ۱۸۵

۴-۲ الکترون های رسانش ۱۸۶

۴-۳ گاز الکترون آزاد ۱۸۸

۴-۴ رسانای الکتریکی ۱۹۰

۴-۵ مقاومت الکتریکی بر حسب دما ۱۹۸

۴-۶ ظرفیت گرمائی الکترون های رسانش ۲۰۲

۴-۷ سطح فرمی ۲۰۶

۴-۸ رسانائی الکتریکی؛ آثار سطح فرمی ۲۰۸

۴-۹ رسانائی حرارتی در فلزات ۲۱۱

۴-۱۰ حرکت در میدان مغناطیسی، تشدید سیکلوترونی و اثر هال ۲۱۳

۴-۱۱ رسانائی AC و خواص اپتیکی ۲۱۸

۴-۱۲ گسیل گرما یونی ۲۲۳

۴-۱۳ شکست مدل الکترون آزاد ۲۲۵

خلاصه مطالب ۲۲۶

مراجع ۲۳۰

پرسش ها ۲۳۱

مسائل ۲۳۲

فصل ۵: فلزات II: نوارهای انرژی در جامدات

۵-۱ مقدمه ۲۳۷

۵-۲ طیف انرژی در اتم ها، مولکول و جامدات ۲۳۷

۵-۳ نوارهای انرژی در جامدات؛ قضیه ی بلوخ ۲۴۱

- ۲۴۸..... ۵-۴ تقارن نواری در فضای k ؛ مناطق بریلیون
- ۲۵۴..... ۵-۵ تعداد حالت‌ها در نوار
- ۲۶۳..... ۵-۶ مدل الکترون تقریباً آزاد
- ۲۶۶..... ۵-۷ گاف انرژی و بازتاب براگ
- ۲۷۵..... ۵-۸ مدل بستگی قوی
- ۲۸۲..... ۵-۹ محاسبات نوارهای انرژی
- ۲۸۹..... ۵-۱۰ فلزات، عایق‌ها و نیمه رساناها
- ۲۸۵..... ۵-۱۱ چگالی حالت‌ها
- ۲۸۹..... ۵-۱۲ سطح فرمی
- ۲۹۵..... ۵-۱۳ سرعت الکترون بلوخ
- ۳۰۰..... ۵-۱۴ دینامیک الکترون در یک میدان الکتریکی
- ۳۰۳..... ۵-۱۵ جرم موثر دینامیکی
- ۳۰۶..... ۵-۱۶ اندازه حرکت، اندازه حرکت بلور، مبداء فیزیکی جرم موثر
- ۳۱۰..... ۵-۱۷ حفره
- ۳۱۲..... ۵-۱۸ رسانائی الکتریکی
- ۳۱۶..... ۵-۱۹ دینامیک الکترون در یک میدان مغناطیسی: تشدید سیکلوترونی و اثر هال
- ۳۲۰..... ۵-۲۰ روش‌های تجربی در تعیین ساختار نوار
- ۳۲۴..... ۵-۲۱ محدودیت‌های تئوری نوار، گذار فلز-عایق
- ۳۲۷..... خلاصه مطالب
- ۳۳۱..... مراجع
- ۳۳۲..... پرسش‌ها
- ۳۳۳..... مسائل

فصل ۶: نیمه رساناها I: تئوری

- ۳۴۱..... ۶-۱ مقدمه

- ۶-۲ پیوند و ساختار بلوری ۳۴۲
- ۶-۳ ساختار نواری ۳۴۵
- ۶-۴ چگالی حامل‌ها؛ نیمه رساناهای ذاتی ۳۴۸
- ۶-۵ حالت‌های ناخالصی ۳۵۴
- ۶-۶ آمار نیمه رسانا ۳۵۹
- ۶-۷ رسانایی الکتریکی: تحرک ۳۶۳
- ۶-۸ آثار میدان مغناطیسی: تشدید سیلکوتونی و اثر هال ۳۷۰
- ۶-۹ ساختارهای نواری نیمه رساناهای واقعی ۳۷۵
- ۶-۱۰ میدان الکترونی و الکترون‌های داغ ۳۸۱
- ۶-۱۱ اثر گان ۳۸۳
- ۶-۱۲ خواص اپتیکی؛ فرآیندهای جذب ۳۸۸
- ۶-۱۳ فوتورسانش ۳۹۷
- ۶-۱۴ لومینسانس ۴۰۰
- ۶-۱۵ اثرهای دیگر اپتیکی ۴۰۱
- ۶-۱۶ تقویت موج - صدا (اثر آکوستوالکتریک) ۴۰۲
- ۶-۱۷ پخش ۴۰۴
- خلاصه مطلب ۴۱۲
- مراجع ۴۱۵
- پرسش‌ها ۴۱۷
- مسائل ۴۱۹

فصل ۷: نیمه رساناها II: قطعات

- ۷-۱ مقدمه ۴۲۷
- ۷-۲ پیوند n-p: یکسو کننده‌ها ۴۲۷
- ۷-۳ پیوند n-p: خود پیوند ۴۴۰

۴۴۵.....	۷-۴ ترانزیستور پیوندی
۴۴۹.....	۷-۵ دیود تونل
۴۵۲.....	۷-۶ دیود گان
۴۵۹.....	۷-۷ لیزر نیمه رسانا
۴۶۷.....	۷-۸ ترانزیستور اثر میدان، لامپ نیمه رسانا و قطعات دیگر
۴۷۹.....	۷-۹ مدارهای مجتمع و میکرو الکترونیک
۴۸۳.....	خلاصه مطالب
۴۸۶.....	مراجع
۴۸۸.....	پرسش ها
۴۸۹.....	مسائل

فصل ۸: خواص اپتیکی و مغناطیسی جامدات

۴۹۳.....	۸-۱ مقدمه
۴۹۳.....	۸-۲ مروری بر فرمول های بنیادی
۴۹۸.....	۸-۳ ثابت دی الکتریک و قطبش پذیری؛ میدان موضعی
۵۰۴.....	۸-۴ چشمه های قطبش پذیری
۵۰۹.....	۸-۵ قطبش پذیری دو قطبی
۵۱۴.....	۸-۶ پاشندگی دو قطبی
۵۲۱.....	۸-۷ قطبیدگی دو قطبی در جامدات
۵۲۶.....	۸-۸ قطبش پذیری یونی
۵۲۸.....	۸-۹ قطبش پذیری الکتریکی
۵۳۶.....	۸-۱۰ پیمزوالکتریسته
۵۳۸.....	۸-۱۱ فروالکتریسته
۵۴۸.....	خلاصه مطالب
۵۵۲.....	مراجع

پرسش‌ها ۵۵۴

مسائل ۵۵۵

فصل ۹: مغناطیس و تشدید مغناطیسی

۹-۱ مقدمه ۵۶۳

۹-۲ مروری بر فرمول‌های بنیادی ۵۶۳

۹-۳ پذیرفتاری مغناطیسی ۵۶۹

۹-۴ طبقه‌بندی مواد ۵۷۱

۹-۵ دیامغناطیس لائزومین ۵۷۲

۹-۶ پارامغناطیس ۵۷۵

۹-۷ مغناطیس در فلزات ۵۸۴

۹-۸ فرومغناطیس در عایق‌ها ۵۸۹

۹-۹ آنتی فرومغناطیس و فری مغناطیس ۵۹۷

۹-۱۰ فرومغناطیس در فلزات ۶۰۱

۹-۱۱ حوزه‌های فرومغناطیسی ۶۰۵

۹-۱۲ تشدید پارامغناطیسی؛ میزر ۶۱۳

۹-۱۳ تشدید مغناطیسی هسته‌ای ۶۲۷

۹-۱۴ تشدید فرومغناطیس؛ امواج اسپین ۶۳۳

خلاصه مطالب ۶۴۳

مراجع ۶۴۶

پرسش‌ها ۶۴۸

مسائل ۶۵۱

فصل ۱۰: ابر رسانایی

۱۰-۱ مقدمه ۶۵۷

۱۰-۲ مقاومت صفر ۶۵۸

- ۶۶۲..... ۱۰-۳ دیامغناطیس کامل، اثر مایسنر
- ۶۶۴..... ۱۰-۴ میدان بحرانی
- ۶۶۵..... ۱۰-۵ ترمودینامیک گذار ابررسانایی
- ۶۷۱..... ۱۰-۶ الکترو دینامیک ابررساناها
- ۶۷۶..... ۱۰-۷ تئوری ابررسانایی
- ۶۸۱..... ۱۰-۸ تونل زنی و اثر جوزفسون
- ۶۸۴..... ۱۰-۹ مباحث گوناگون
- ۶۸۹..... خلاصه مطالب
- ۶۹۱..... مراجع
- ۶۹۲..... پرسش‌ها
- ۶۹۳..... مسائل

پیوست A: مکانیک کوانتومی

- ۶۹۷..... A-۱ مفاهیم اساسی
- ۶۹۷..... A-۲ معادله شرودینگر
- ۶۹۸..... A-۳ مثالهای یک بعدی
- ۶۹۸..... A-۴ اندازه حرکت زاویه ای
- ۶۹۹..... A-۵ اتم هیدروژن؛ اتم‌های چند الکترونی، جدول تناوبی عناصر
- ۷۰۰..... A-۶ تئوری پیرشیدگی
- ۷۰۴..... A-۷ مولکول هیدروژن و پیوند کووالان
- ۷۰۸..... A-۸ پیوندهای جهت دار

پیوست B: جدول‌ها

واژه‌نامه فارسی به انگلیسی

فصل اول

ساختارهای بلوری و نیروهای بین اتمی

- ۱-۱ مقدمه
- ۱-۲ حالت بلوری
- ۱-۳ تعاریف پایه
- ۱-۴ چهارده شبکه براوه و هفت سیستم بلوری
- ۱-۵ عناصر تقارن
- ۱-۶ نام‌گذاری جهت‌ها و صفحات بلوری
- ۱-۷ مثال‌هایی از ساختارهای ساده بلوری
- ۱-۸ جامدات بی‌شکل و مایعات
- ۱-۹ نیروهای بین اتمی
- ۱-۱۰ انواع پیوندها

اگر با چشم غیر مسلح به یک جسم جامد بنگریم، آن را به صورت یک جسم صلب پیوسته می‌بینیم، در حالی که آزمایش‌های تجربی ثابت کرده است که تمام جامدات از واحدهای پایه‌ی ناپیوسته (اتم‌ها) تشکیل یافته‌اند. این اتم‌ها به طور کاتوره‌ای توزیع نشده‌اند، بلکه با نظم بسیار در کنار یکدیگر قرار گرفته‌اند. چنین گروه منظمی از اتم‌ها بلور نامیده می‌شوند. بسته به ترتیب قرار گرفتن اتم‌ها در بلور، ساختارهای متعدد بلوری می‌تواند وجود داشته باشد، و داشتن اطلاعاتی در مورد آن‌ها در فیزیک حالت جامد مهم است؛ زیرا خواص فیزیکی جامدات معمولاً متأثر از ساختار بلوری آن‌ها است. این موضوع در فصل بعد کاملاً تبیین خواهد شد.

در قسمت اول این فصل توضیحاتی راجع به ساختار بلوری خواهیم داد و بعضی از تعاریف پایه‌ی ریاضی را توضیح می‌دهیم. سپس ساختارهای بلوری ممکن و هم چنین اندیس‌های میلر را معرفی و مثال‌هایی در این زمینه ارائه خواهیم کرد.

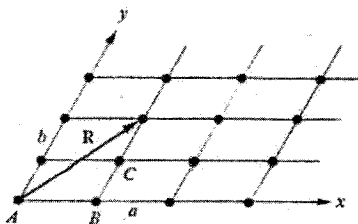
در بعضی از جامدات به نظر می‌رسد که اتم‌ها بطور کاتوره‌ای قرار گرفته‌اند، یعنی ساختار منظم بلوری وجود ندارد. چنین جامدات غیر بلوری یا بی‌شکل^۱ نیز مختصراً توصیف خواهند شد.

این فصل با بیان نیروهای بین اتمی که پیوندهای بلوری را ایجاد می‌کنند خاتمه می‌یابد.

راجع به تعیین تجربی ساختار بلور توسط پرتوهای ایکس در فصل ۲ بحث خواهد شد.

۱-۲ حالت بلوری

یک جسم جامد در صورتی بلور نامیده می‌شود که اتم‌های آن در چنان نظمی قرار گرفته باشند که مکان آن‌ها کاملاً تناوبی باشد. شکل (۱-۱) این مفهوم را نشان می‌دهد. فاصله بین هر دو اتم مجاور در امتداد محور x ‌ها برابر a و در امتداد محور y ‌ها برابر b است (محورهای x و y الزاماً متعامد نیستند). یک بلور کامل چنین خاصیت تناوبی را در هر دو امتداد x و y از $-\infty$ تا $+\infty$ حفظ می‌کند. از تناوبی بودن نتیجه می‌شود که اتم‌های A, B, C, \dots معادل هم هستند. به بیان دیگر از دیدگاه ناظری که در هر یک از این مکان‌های اتمی قرار دارد بلور کاملاً مشابه به نظر می‌رسد.



شکل ۱-۱ یک بلور جامد. تمام اتم ها بطور تناوبی مرتب شده اند

مفهوم فوق را می توان این گونه نیز بیان کرد: "بلور تقارن انتقالی دارد". یعنی اگر بلور تحت هر برداری (مانند بردار R در شکل ۱-۱) که دو اتم را به هم متصل می کند، انتقال داده شود، بلور دقیقاً آن گونه که قبل از انتقال بود به نظر می رسد. نتایج این تقارن انتقالی یا ناوردایی بسیار است و قسمت بزرگی از این کتاب به این بحث مربوط می شود.

بلور کامل به معنای مطلق کلمه وجود ندارد. حتی سطح یک بلور، باعث ناکاملی یا نقص بلور است، زیرا تناوبی بودن در سطح بلور از بین می رود. محیطی که اتم های مجاور سطح مشاهده می کنند با محیط حاکم بر اتم های لایه های درونی بلور متفاوت است. در نتیجه این دو نوع اتم رفتار متفاوتی بروز خواهند داد. مثال دیگر: ارتعاشات حرارتی اتم ها حول مکان تعادلشان در درجه حرارت های $T > 0^\circ K$ باعث برهم خوردن تناوب و نظم بلور می شود. به عنوان سومین مثال یادآوری می کنیم که یک بلور واقعی همیشه شامل تعدادی از اتم های خارجی یعنی اتم های ناخالصی است. حتی با بهترین تکنیک های رشد بلور، ناخالصی $(10^{12} \text{ cm}^{-3})$ وجود دارد که کامل بودن بلور را نقض می کند.

باوجود این مشکلات عملاً می توان بلورهایی تهیه کرد که اثرهای ناکاملی روی پدیده های مورد مطالعه بسیار ناچیز باشد. مثلاً می توان یک بلور سدیم به بزرگی (1 cm^{-3}) تهیه کرد که نسبت اتم های سطحی به کل اتم ها بسیار کوچک و بلور آن قدر خالص باشد که ناخالصی های آن قابل صرف نظر کردن باشد. در دماهای به اندازه کافی پایین، ارتعاش های شبکه آن چنان ضعیف اند که تأثیر تمام این ناکاملی ها روی بعضی از خواص بلور مانند خواص نوری ناچیز باشد. در چنین حالتی است که نمونه را به عنوان بلور کامل در نظر می گیریم.

ناکاملی ها به خودی خود بسیار مورد توجه هستند. مثلاً ارتعاش های حرارتی اتم ها منشاء اصلی مقاومت الکتریکی در فلزات است. در چنین حالتی مفهوم بلور را نباید کاملاً کنار نهاد بلکه باید ناکاملی ها را به عنوان یک آشفتگی کوچک در ساختار بلور در نظر گرفت.

بسیاری از پدیده های جالب در جامدات مربوط به این ناکاملی ها است، به همین دلیل در بخش های مختلف این کتاب راجع به آنها به طور نسبتاً مفصل بحث خواهیم کرد.

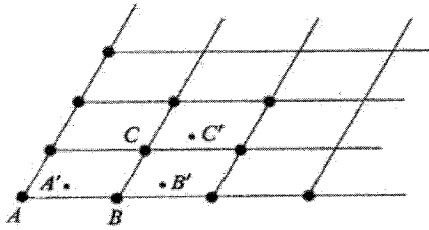
۳-۱ تعاریف پایه

برای اینکه بتوان به طور دقیق درباره ساختار بلوری صحبت کنیم باید در اینجا تعاریف پایه ای را ارائه دهیم که به عنوان زبان بلورشناسی بکار می روند. این تعاریف برای بلورهای یک، دو و سه بعدی بکار می روند. گرچه اغلب مثال هایی که ارائه می دهیم دو بعدی هستند ولی نتایج آن ها را بعداً برای حالت های سه بعدی به کار خواهیم بست.

شبکه بلور

در بلور شناسی خواص هندسی بلور بیش از خواص یک اتم خاص که جزئی از یک بلور است مورد توجه می باشند. بنابراین می توان اتم ها را با نقاط هندسی که در جای گاه اتم ها قرار می گیرند جایگزین کرد. بدین ترتیب نقشی از نقاط بدست می آید که دارای خواص هندسی بلور است ولی خالی از هر گونه محتوای فیزیکی است. این نقش هندسی، شبکه بلوری یا به طور ساده شبکه نامیده می شود. به جای تمام جای گاه های اتمی نقطه های شبکه قرار گرفته اند.

دو نوع شبکه وجود دارد: شبکه *ی* برآوه و شبکه *ی* غیر برآوه. در یک شبکه *ی* برآوه تمام نقاط شبکه معادل یک دیگرند بنابراین لزوماً تمام اتم های بلور از یک نوعند. ولی در شبکه *ی* غیر برآوه بعضی از نقاط شبکه معادل دیگر نیستند. شکل (۲-۱) این مطلب را به وضوح نشان می دهد. محل های شبکه ای A, B, C معادل یک دیگرند. همین طور A', B', C' معادل یک دیگرند، ولی دو جای گاه شبکه ای A و A' معادل یک دیگر نیستند و همان گونه که ملاحظه می شود شبکه تحت انتقال AA' هم وردا نیست، خواه اتم های A و A' هم نوع باشند (مثلاً دو اتم H) یا از دو نوع متفاوت (مثلاً اتم ها H و Cl). گاهی از شبکه *ی* غیر برآوه به عنوان شبکه ای با یک پایه نیز نام برده می شود. منظور از پایه، یک سری از اتم های نزدیک به هم در یک شبکه *ی* برآوه است. بنابراین در شکل (۲-۱)، پایه عبارتست از دو اتم A و A' .



شکل ۱-۲ یک شبکه غیر براوه

شبکه ی غیر براوده را می توان ترکیبی از دو یا چند شبکه ی براوه دانست که در هم فرو رفته اند و جهشان نسبت به یک دیگر ثابت است. بنابراین نقاط A, B, C و ... تشکیل یک شبکه براوه و هم چنین نقاط A', B', C' و ... تشکیل شبکه براوه ی دیگری را می دهند.

بردارهای پایه:

شبکه ای که در شکل ۱-۳ نشان داده شده است را در نظر بگیرید. مبدا مختصات را در یک نقطه مشخص مثلاً A انتخاب کند. بردار مکان هر نقطه از شبکه را می توان بصورت زیر نوشت:

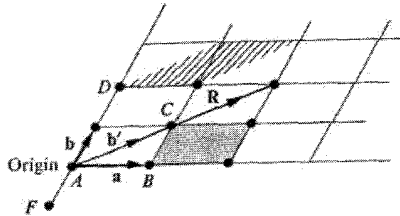
$$R_n = n_1 a + n_2 b \quad (1-1)$$

a و b بردارهایی هستند که در شکل نشان داده شده اند و (n_1, n_2) یک زوج عدد صحیح هستند که مقادیر آن ها بستگی به نقطه ی شبکه دارد. بنابراین برای نقطه ی D , $(n_1, n_2) = (0, 2)$ ، برای نقطه ی B , $(n_1, n_2) = (1, 0)$ و برای نقطه ی F , $(n_1, n_2) = (0, -1)$ است.

بردارهای a و b (که نباید در یک امتداد باشند)، یک سری از بردارهای پایه ی شبکه را تشکیل می دهند. بدین ترتیب موقعیت مکانی تمام نقاط شبکه را می توان با استفاده از رابطه ی (۱-۱) به راحتی بیان کرد. مجموعه ی تمام بردارهایی که با این رابطه تعریف می شوند، بردارهای شبکه نامیده می شوند. هم چنین می توان گفت که شبکه تحت تمام گروه انتقال هایی که با رابطه ی (۱-۱) بیان می شوند، ناوردا است. این مطلب اغلب تحت این عنوان بیان می شود که شبکه تحت تمام جابه جایی های معینی که توسط بردار شبکه R_n انتقال می یابند، تقارن انتقالی دارد.

بردارهای پایه ی یگانه نیستند. چرا که می توان بردارهای a و $b' = (a + b)$ را نیز به عنوان یک بردار پایه در نظر گرفت (شکل ۱-۳). احتمال های دیگری نیز وجود دارد. معمولاً بردارهای پایه ای

انتخاب می شوند که راحت تر باشند. برای تمام شبکه هایی که در این کتاب مطالعه می شوند همواره چنین ملاکی مورد نظر بوده است.



شکل ۱-۳ بردارهای a و b بردارهای پایه شبکه هستند. بردارهای a و b' تشکیل سری دیگری از بردارهای پایه را می دهند. نواحی سایه دار و هاشورزده به ترتیب یاخته ها واحد متناظر با اولین و دومین سری بردارهای پایه را نشان می دهند.

یاخته واحد

سطح متوازی الاضلاعی که اضلاعش بردارهای a و b باشند یاخته واحد شبکه نامیده می شوند (شکل ۱-۳). اگر چنین یاخته ای توسط تمام بردارهای شبکه انتقال یابد، مساحت کل شبکه را یک بار و فقط یک بار می پوشانند. این یاخته واحد معمولاً کوچک ترین سطحی است که می تواند چنین پوششی را تولید کند. بنابراین شبکه را می توان به عنوان ترکیبی از تعداد بسیاری از یاخته های واحد معادل در نظر گرفت که پهلو به پهلو در کنار یک دیگر مانند نقش موزاییک چیده شده اند.

به همان دلیلی که برای بردارهای پایه ذکر شد، برای یک شبکه نیز انتخاب یاخته واحد منحصر به فرد نیست. بنابراین متوازی الاضلاعی که توسط بردارهای a و b' ساخته می شود (شکل ۱-۳) نیز به عنوان یک یاخته واحد قابل قبول است. بار دیگر متذکر می شویم که ملاک انتخاب یاخته واحد، فقط سهولت آن است.

موارد زیر می تواند مفید واقع شود.

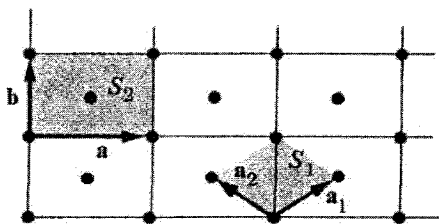
(i) تمام یاخته های واحد مساحت های یکسانی دارند. بنابراین یاخته ای که توسط a و b ساخته می شود دارای مساحت $S = |a \times b|$ است، در حالی که یاخته ای که توسط بردارهای a و b' ساخته می شود مساحت $S' = |a \times b'| = |a \times (a + b)| = |a \times b| = S$ را دارد (از نتیجه $a \times a = 0$

استفاده شده است). بنابراین گرچه شکل بخصوصی از یاخته واحد منحصر به فرد نیست ولی مساحت آن منحصر به فرد است.

(ii) برای اینکه بدانیم چند نقطه ی شبکه متعلق به یک یاخته واحد است می توانیم به شکل ۳-۱ مراجعه کنیم. یاخته واحدی که از $a \times b$ شکل می گیرد، چهار نقطه در چهار گوش اش دارد ولی هر کدام از این نقاط بین چهار یاخته مجاور مشترک است. بنابراین هر یاخته واحد تنها یک نقطه شبکه دارد.

یاخته‌های بسیط و غیر بسیط

یاخته واحدی که در بالا راجع به آن بحث شد، یاخته ی بسیط نامیده می شود. گاهی اوقات راحت تر است که با یاخته واحد بزرگ تری که تقارن شبکه را واضح تر نشان می دهد کار کرد. این ایده در شبکه ی براوه شکل (۴-۱) نمایان است. واضح است که بردارهای a_1 و a_2 را می توان به عنوان بردارهای پایه انتخاب کرد که در این صورت یاخته واحد متوازی الاضلاع S_1 است. در عین حال می توان شبکه را به صورت مجموعه ای از مستطیل هایی در نظر گرفت که در کنار هم چیده شده اند، به طوری که بردارهای a و b به عنوان اضلاع یکی از این مستطیل ها باشد. در این صورت یاخته واحد سطح S_2 است که توسط این بردارها ساخته می شود. این یاخته علاوه بر نقاطی که در گوشه هایش دارد یک نقطه نیز در مرکز دارد. این یاخته یک یاخته غیر بسیط است.



شکل ۴-۱ سطح S_1 یک یاخته واحد بسیط و سطح S_2 یک یاخته واحد غیر بسیط است

دلیل این که یاخته غیر بسیط S_2 انتخاب شده، این است که تقارن مستطیل واضح تر نمایان است. گرچه تقارن در یاخته بسیط S_1 نیز وجود دارد (باید این طور باشد زیرا هر دو به یک شبکه مربوط اند) گاهی این تقارن واضح نیست. لازم است به نکات زیر توجه کرد.

(i) مساحت یاخته‌ی غیر بسیط مضرب درستی از مساحت یک یاخته‌ی بسیط است. در شکل (۱-۴) این ضریب ۲ است.

(ii) ارتباطی بین یاخته‌های غیر بسیط و شبکه‌های غیر براوه نیست. اولی مربوط است به انتخاب خاصی (که یک چیز اختیاری است) از بردارهای پایه‌ی یک شبکه براوه است؛ در حالی که دومی مربوط به واقعیت فیزیکی مکان‌های نامعادل است.

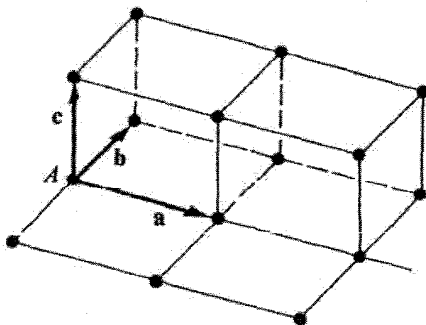
حالت سه بعدی

تمام مطالبی را که قبلاً در یک یا دو بعد بیان شد می‌توان به سه بعد نیز تعمیم داد. در این حالت بردارهای شبکه سه بعدی هستند و با رابطه‌ی زیر بیان می‌شوند:

$$R_n = n_1 a + n_2 b + n_3 c \quad (1-2)$$

سه بردار a و b و c در یک صفحه واقع نیستند و نقطه‌ای از شبکه را به نقاط همسایه نزدیکش وصل می‌کند (شکل ۱-۵)، n_1 و n_2 و n_3 اعداد درستی مانند ۰ و ۱ و ۲ و... هستند و مقادیر آن‌ها به نقطه شبکه بستگی دارد.

بردارهای سه گانه a و b و c بردارهای پایه هستند و متوازی السطوحی که اضلاعش را این بردارها تشکیل می‌دهند، یک یاخته واحد است. مجدداً یادآوری می‌کنیم: اگر چه یاخته‌های بسیط حجم‌های مساوی دارند، یاخته بسیط منحصر به فرد نیست. هم چنین گاهی ساده تر است که با یک یاخته غیر بسیط کار کرد که نقاطی اضافه در داخل یا در سطوح خود دارد. شبکه‌های غیر براوه در سه بعد نیز وجود دارند که از تقاطع دو یا چند شبکه براوه ساخته می‌شوند.

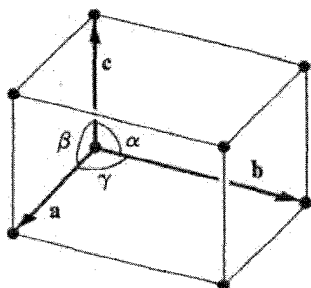


شکل ۱-۵ یک شبکه سه بعدی. بردارهای a و b و c بردارهای پایه اند.

۴-۱ چهارده شبکه براوه و هفت سیستم بلوری

تنها چهارده شبکه براوه وجود دارد. این تعداد نسبتاً اندک نتیجه‌ی شرط تقارن انتقالی است که برای یک بلور لازم می‌باشد. برای بررسی این مطلب ابتدا حالت دو بعدی را در نظر بگیریم که خواننده راحت‌تر می‌تواند خود را مجاب کند. برای مثال نمی‌توان شبکه‌ای ساخت که یاخته واحد آن یک پنج ضلعی منظم باشد. پنج ضلعی منظم را می‌توان به صورت یک شکل منزوی رسم کرد ولی نمی‌توان تعداد بسیاری از این پنج ضلعی‌ها را پهلو به پهلو کنار هم چید به طوری که تمام صفحه را بپوشاند. در واقع می‌توان نشان داد که لزوم تقارن انتقالی در دو بعد، منجر به محدود کردن تعداد شبکه‌های ممکن به فقط پنج عدد می‌شود (به بخش مسائل در انتهای این فصل مراجعه کنید).

در حالت سه بعدی تعداد شبکه‌های براوه چهارده تا است. تعداد شبکه‌های غیر براوه خیلی بیشتر (۲۳۰ عدد)، ولی باز هم متناهی است.



شکل ۶-۱ یاخته واحد که توسط طول بردارهای پایه a و b و c و همچنین زوایای بین این بردارها مشخص شده است.

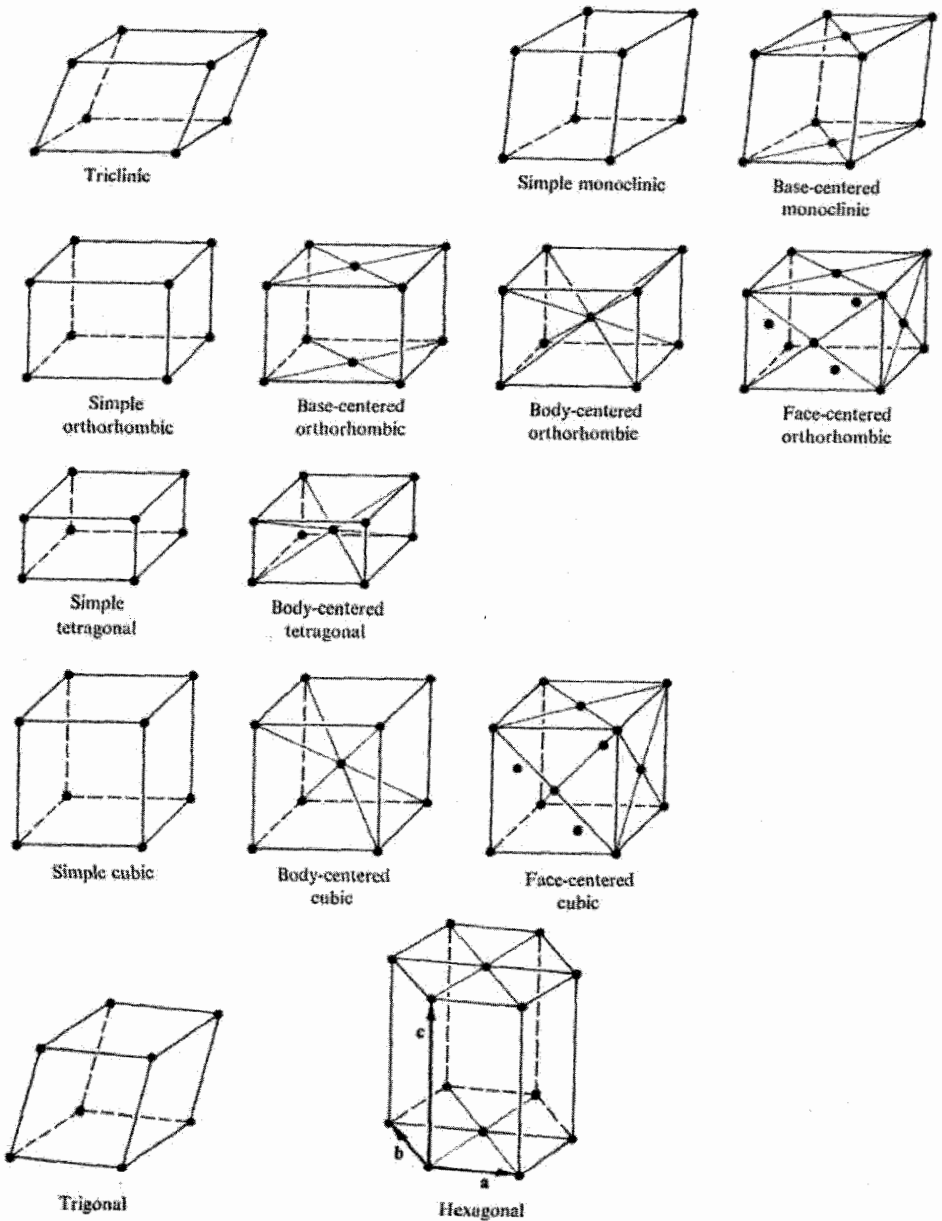
چهارده شبکه (یا گروه بلوری) به هفت سیستم بلوری گروه بندی می‌شوند که هر کدام با شکل و تقارن یاخته واحد مشخص می‌شود. این سیستم‌ها، سه میلی^۱، تک میلی^۲، راست گوشه^۳، چهار گوشه^۴، مکعبی^۵، شش گوشه^۶، و سه گوشه^۷ نامیده می‌شوند. در هر حالت شبکه، متوازی

1. Triclinic
2. Monoclinic
3. Orthorhombic
4. Tetragonal
5. Cubic
6. Hexagonal
7. Trigonal

السطوحی است که اضلاعش a, b, c و هستند. شکل (۷-۱) چهارده شبکه ی براوه و جدول (۱-۱) سیستم ها، شبکه ها و مقادیر مناسب برادرهای a, b, c و همین طور زوایای α, β و γ را نشان می دهد. شکل (۷-۱) و جدول (۱-۱) باید به دقت مطالعه گردند. ستون مربوط به اجزاء تقارن در جدول (۱-۱) به زودی مورد بحث قرار خواهد گرفت.

جدول ۱-۱ هفت سیستم بلوری که به چهارده شبکه براوه تقسیم می شوند.

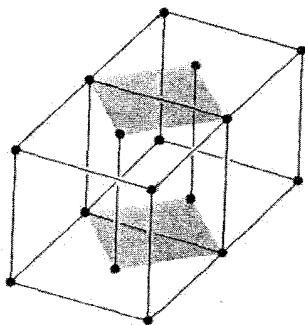
مشخصه‌های عنصر تقارن	مشخصه‌های باخته واحد	شبکه براوه	سیستم بلوری
هیچ	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	ساده	سه میلی (Triclinic)
یک محور چرخشی دوفولد	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$	ساده مرکز قاعده ای	تک میلی (Monoclinic)
سه محور چرخشی عمود بر هم دوفولد	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	ساده- مرکز قاعده‌ای- مرکز حجمی- مرکز سطحی	راست گوشه (Orthorhombic)
یک محور چرخشی سه فولد	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	ساده	سه گوشه (Trigonal) (rhombohedral)
یک محور چرخشی چهار فولد	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	ساده مرکز حجمی	چهار گوشه (Tetragonal)
چهار محور چرخشی سه فولد (در امتداد قطرهای مکعب)	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	ساده مرکز سطحی- مرکز حجمی	مکعبی (Cubic)
یک محور چرخشی سه فولد	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	ساده	شش گوشه (Hexagonal)



شکل ۷-۱ چهارده شبکه ی براوه که در هفت سیستم بلوری طبقه بندی شده اند.

شبهه‌ی مکعبی ساده فقط نقاطی در رئوسش دارد، شبهه‌ی مرکز حجمی یک نقطه‌ی اضافه در مرکز یاخته و شبهه‌ی مرکز سطحی شش نقطه اضافه، (یکی در هر وجهش) دارد. مجدداً یاد آور می‌شویم که در تمام شبهه‌های غیر ساده، یاخته‌های واحد غیر بسیط هستند.

چهارده شبهه‌ای که در جدول ۱-۱ از آن‌ها نام برده شد تمام شبهه‌های براوه ممکن هستند. اثبات ریاضی کامل این مطلب بسیار طولانی است. ممکن است فکر کنیم که شبهه سه گوشه مرکز قاعده‌ای را نیز می‌توان به جدول (۱-۱) اضافه کرد. ولی می‌توان به آسانی متوجه شد که با انتخاب یک یاخته‌ی واحد مناسب این شبهه به یک شبهه‌ی سه گوشه ساده تبدیل می‌گردد (شکل ۱-۸).



شکل ۱-۸ یک شبهه‌ی سه گوشه مرکز حجمی معادل است با یک شبهه‌ی سه گوشه ساده با یاخته واحد متفاوت. ناحیه‌ی سایه دار، پایه یاخته سه گوشه ساده را نشان می‌دهد.

سیستمی که بیش از سایر سیستم‌ها در این کتاب مورد مطالعه قرار می‌گیرد سیستم مکعبی به ویژه سیستم‌های مکعبی مرکز سطحی (fcc) و مرکز حجمی (bcc) می‌باشند. سیستم شش گوشه نیز گاهی مورد توجه قرار می‌گیرد.

۱-۵ عناصر تقارن

هر کدام یاخته‌های واحد از چهارده شبهه براوه دارای یک یا چند نوع خاصیت تقارنی مانند وارونی، بازتاب یا چرخش می‌باشند. در اینجا مفهوم هر یک از این عبارات را بررسی می‌کنیم.

مرکز وارونی^۱: یک یاخته در صورتی مرکز وارونی دارد که در اثر انتقال ریاضی r به $-r$ یاخته ناوردا باقی بماند. تمام شبکه های براوه متقارن وارونی هستند. این واقعیتی است که می توان آن را یا با مراجعه به شکل (۷-۱) و یا با توجه به این نکته که به هر بردار شبکه $R_n = n_1 a + n_2 b + n_3 c$ ، بردار $R_n \equiv -R_n = -n_1 a - n_2 b - n_3 c$ وابسته است، نشان داد. شبکه های غیر براوه بسته به تقارنشان در پایه ممکن است مرکز وارونی داشته یا نداشته باشند.

صفحه بازتابی^۲: صفحه بازتابی صفحه ای است در یاخته که اگر بازتاب آینه ای نسبت به آن اجرا شود، یاخته ناوردا بماند. با مراجعه به شکل (۷-۱) ملاحظه می شود که شبکه ی سه میلی صفحه بازتابی ندارد، شبکه ی تک میلی یک صفحه ی بازتابی دارد که در وسط بین قاعده های موازی آن واقع است. یاخته ی مکعبی نه صفحه ی بازتابی دارد که سه صفحه به موازات وجوه آن و شش صفحه ی دیگر که هر کدام از دو ضلع مقابل می گذرد.

محور چرخش^۳: محور چرخش محوری است که اگر یاخته تحت زاویه ای حول آن دوران کند، یاخته ناوردا باقی بماند. اگر زاویه چرخش $\frac{2\pi}{n}$ باشد، محور چرخش n -فولد نامیده می شود. با نگاه مجدد به شکل (۷-۱) در می یابیم که سیستم سه میلی محور چرخش ندارد (صرف نظر از محور یک فولد) و سیستم تک میلی یک محور ۲-فولد ($\theta = \frac{2\pi}{2} = \pi$) عمود بر قاعده اش دارد. یاخته ی واحد شبکه ی مکعبی سه محور ۴-فولد عمود بر وجوهش و چهار محور ۳-فولد هر کدام از دو راس مقابل می گذرند، دارد.

در اینجا ساده ترین تقارن یعنی آن هایی که بیش از بقیه به کار می روند، مورد بحث قرار گرفته اند اجزاء پیچیده تر مانند محور چرخش - بازتاب و صفحات لغزش^۴ نیز وجود دارند. ولی ما در این مرحله آن ها را بررسی نمی کنیم زیرا در این کتاب به آن ها نیازی نخواهد بود.

باید توجه کرد اجزاء تقارن ممکن است همگی مستقل نباشند، مثلاً می توان نشان داد که یک مرکز وارونی به اضافه صفحه ی بازتاب دلالت بر وجود یک محور ۲-فولد دارد که از مرکز می گذرد و بر صفحه عمود است. قضایای مشابه جالب بسیاری می توان اثبات کرد ولی ما در این جا از آن ها می گذریم.

-
1. Inversion Center
 2. Reflection plane
 3. Rotation axis
 4. glide planes

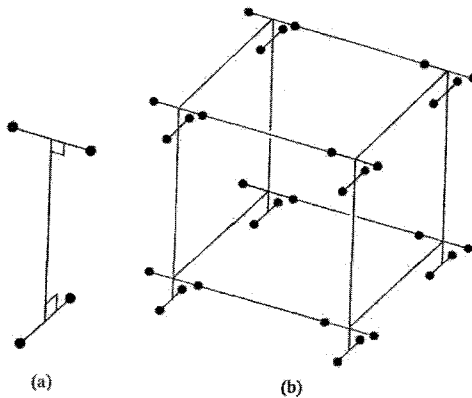
گروه‌های نقطه‌ای، گروه‌های فضایی و شبکه‌های غیر براوه.

یک شبکه‌ی غیر براوه شبکه‌ی ای است که به هر مکان آن گروهی از اتم‌ها که پایه‌ی نامیده می‌شود وابسته باشد. بنابراین می‌توان تقارن چنین شبکه‌ای را با معین کردن تقارن پایه به اضافه تقارن شبکه براوه‌ای که این پایه بر آن نهاده شده است توصیف کرد.

تقارن پایه تقارن گروه نقطه‌ای نامیده می‌شود که به تمام چرخش‌های ممکن (شامل وارونی و بازتاب) که پایه را ناوردا نگه می‌دارد مربوط می‌شود. در تمام این عملیات یک نقطه در پایه باید ثابت بماند (که به همین دلیل عبارت تقارن گروه نقطه‌ای بکار می‌رود). بررسی مساله مشخص می‌کند که تنها ۳۲ گروه نقطه‌ای متفاوت می‌تواند وجود داشته باشد که با شرایط تقارن انتقالی برای شبکه سازگار می‌باشند. راجع به محدود بودن تعداد گروه‌های نقطه‌ای به کمک بحث فیزیکی زیر می‌توان پی برد.

ساختار پایه را نمی‌توان به طور اختیاری پیچیده (مثل شکل یک سیب زمینی) در نظر گرفت. این با تقارن نیروهای بین اتمی که بین پایه و پایه‌های مجاور عمل می‌کند سازگار نیست. در درجه نخست این نیروها هستند که ساختار بلورها را تعیین می‌کنند. بنابراین تقارن‌های چرخشی ممکن برای شبکه باید اساساً مشابه با همان تقارن‌های چرخشی یاخته‌های واحد چهارده شبکه‌ی براوه‌ای باشند که در بخش (۴-۱) از آن‌ها نام برده شد.

اگر تقارن چرخشی گروه‌های نقطه‌ای را با تقارن‌های انتقالی ترکیب کنیم تقارن گروه فضایی بدست می‌آید. در این حالت تعداد زیادی گروه فضایی (دقیقاً ۷۲ عدد) تولید می‌شود، و این علاوه بر آن گروه‌های فضایی هستند که از ترکیب گروه‌های نقطه‌ای ساده و گروه‌های انتقالی بدست می‌آیند. چنین گروه‌هایی شامل اجزاء تقارنی مانند محور پیچشی، صفحات لغزشی و غیره‌اند. وقتی ما این‌ها را به ۷۲ گروه فضایی اضافه کنیم در مجموع تعداد ۲۳۰ گروه فضایی متفاوت بدست می‌آید (Buerger, 1963). شکل (۹-۱) یک گروه فضایی D_{2d} چهارگوشی را نشان می‌دهد. بحث بیشتر راجع به این گروه‌ها را می‌توان در کتاب‌های بلورشناسی دنبال کرد.



شکل ۹-۱ (الف) پایه ای که تقارن گروه نقطه ای D_{2d} دارد (دو محور ۲- فولد افقی بعلاوه دو صفحه بازتاب قائم) (ب) یک شبکه ی سه گوشه با پایه ای که گروه نقطه D_{2d} دارد.

۶-۱ نام گذاری جهت ها و صفحات بلوری؛ اندیس های میلر

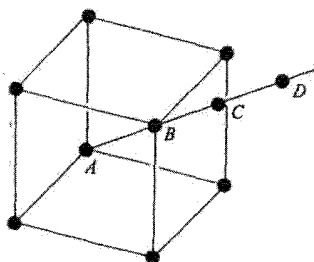
در توصیف پدیده های فیزیکی در بلورها اغلب لازم است جهت های معین یا صفحات بلور مشخص شوند. زیرا بلورها معمولاً ناهمگن هستند. قواعد استاندارد معینی به تدریج تکمیل گردیده که در این زمینه مورد استفاده قرار می گیرند.

جهت های بلور

خط مستقیمی را در نظر بگیرید که از نقاط شبکه C, B, A ... می گذرد (شکل ۱۰-۱) برای مشخص کردن جهت آن به طریق زیر عمل می کنیم. یک نقطه ی شبکه روی خط مثال نقطه ی A را به عنوان مبداء انتخاب می کنیم سپس بردار شبکه ای را که نقطه ی A را به هریک از نقاط خط مثلاً B متصل می کند رسم می کنیم. این بردار را می توان به صورت زیر نوشت.

$$R_n = n_1 a + n_2 b + n_3 c$$

جهت بلوری را می توان بوسیله اعداد صحیح سه گانه $[n_1, n_2, n_3]$ مشخص کرد. اگر اعداد n_1, n_2, n_3 مقسوم علیه مشترکی داشته باشند آن را حذف می کنیم به طوری که $[n_1, n_2, n_3]$ کوچکترین اعداد صحیحی باشند که همان نسبت را داشته باشند. بدین ترتیب جهت نشان داده شده در (شکل ۱۰-۱) جهت $[111]$ است.



شکل ۱۰-۱ جهت [۱۱۱] در یک شبکه ی مربعی

وقتی صحبت از جهت می کنیم منظورمان یک خط مستقیم خاص نیست بلکه مجموعه ای است از خطوط مستقیم موازی (شکل ۱۰-۱) که به واسطه ی تقارن انتقالی کاملاً معادل یک دیگرند. چنان چه یاخته واحد تقارن چرخشی داشته باشد، ممکن است جهت های غیر موازی ای وجود داشته باشند که به واسطه ی این تقارن باهم معادل اند. بنابراین در بلور مکعبی جهت های [۱۰۰] و [۰۱۰] و [۰۰۱] معادلند. در چنین حالتی تمام جهت های معادل $[n_1, n_2, n_3]$ را می توان با استفاده از پرانتز زاویه دار به صورت $\langle n_1, n_2, n_3 \rangle$ نشان داد. بنابراین در سیستم مکعبی نماد $\langle ۱۰۰ \rangle$ نمایان گر تمام شش جهت [۱۰۰]، [۰۱۰]، [۰۰۱]، [۱۰۰]، [۰۱۰] و [۰۰۱] می باشد. علامت منفی بالای اعداد نمایان گر مقادیر منفی است. به طور مشابه نماد $\langle ۱۱۱ \rangle$ نمایان گر تمام قطر های مکعب است. جهت های $\langle ۱۰۰ \rangle$ و $\langle ۱۱۱ \rangle$ معادل نیستند.

توجه: جهت های با اندیس های بزرگ مثلاً [۱۵۷] نسبت به جهت هایی با اندیس های کوچک تر مانند [۱۱۱] تعداد کم تری اتم بر واحد طول دارند.

صفحات بلوری و اندیس های میلر

جهت یک صفحه ی بلوری با اندیس های میلر آن مشخص می شود که به صورت زیر تعریف می شوند: برای تعیین اندیس های صفحه P در شکل (۱۱-۱) (الف) محل برخورد آن را با محورهایی که در امتداد بردارهای پایه c, b, a هستند پیدا می کنیم. فرض کنیم فاصله این نقاط تا مبدا z, y, x باشد. معمولاً x مضرب کسری ای از a و y مضرب کسری ای از b و z مضرب کسری ای از c است. کسرهای سه گانه ی زیر را تشکیل می دهیم:

$$\left(\frac{x}{a}, \frac{y}{b}, \frac{z}{c}\right)$$

آن را معکوس می کنیم تا کسر سه گانه ی زیر بدست آید:

$$\left(\frac{a}{x}, \frac{b}{y}, \frac{c}{z}\right)$$

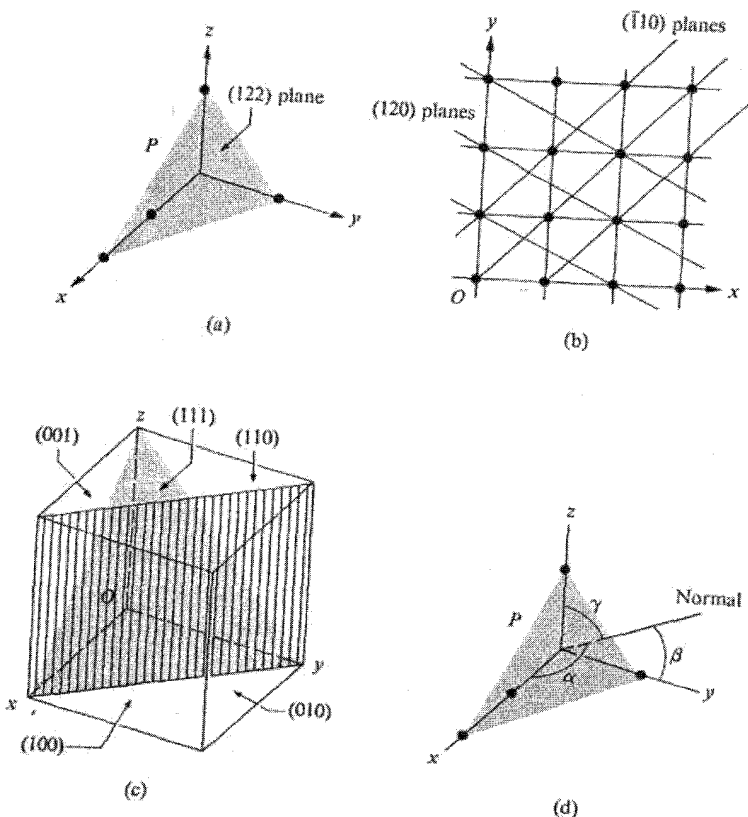
سپس با ضرب کردن آن ها در یک فاکتور مشترک، آن را به کوچک ترین اعداد صحیحی که همان نسبت ها را داشته باشند تبدیل می کنیم. این سری از اعداد اندیس های میلر صفحات نامیده و با (hkl) مشخص می شوند. در این مورد مثالی می زنیم؛ فرض کنید محل برخورد صفحه با محورها، $x = 2a$ و $y = \frac{3}{4}b$ و $z = 1c$ باشد، ابتدا سری زیر را تشکیل می دهیم:

$$\left[\frac{x}{a}, \frac{y}{b}, \frac{z}{c}\right] = \left(2, \frac{3}{4}, 1\right)$$

سپس آن را معکوس می کنیم که می شود $\left(1, \frac{4}{3}, \frac{1}{2}\right)$ و بالاخره در مخرج مشترک شان که در این جا ۶ است ضرب می کنیم تا اندیس های میلر (۳۴۶) (بخوانید سه، چهار، شش) بدست آید.

اشاره کردیم که اندیس های میلر به گونه ای تعریف شده اند که تمام صفحات موازی معادل اند. صفحات موازی نمایان گر مجموعه مشابهی از اندیس ها هستند. بنابراین صفحاتی که محل برخوردشان با محورهای x, y, z برابر است با $2x, 2y, 2z$ یا $-3x, -3y, -3z$ و غیره همگی با یک دسته اندیس میلر مشخص می شوند. می توانیم این مطلب را با روشی مشابه با آن چه در بالا آمد اثبات کنیم. بنابراین مجموعه ی اندیس های میلر نه یک صفحه بلکه تعداد نامتناهی از صفحات معادل را آن چنان که شکل (۱۱-۱) (الف) نشان می دهد مشخص می کنند. چنان چه در مطالعه ی پراش پرتوهای ایکس ملاحظه خواهد شد، دلیل خوبی برای این نماد گذاری وجود دارد. باریکه ی پرتوهای پراشیده نتیجه ی پراکندگی از تعداد بسیاری صفحات موازی معادل می باشد که همگی باریکه ی پرتوهای تابشی را پراشیده می کنند. شکل (۱۱-۱) (ج) چند تا از این صفحات مهم را در یک بلور مکعبی نشان می دهد.

[در معکوس کردن مقادر عرض از مبدا در تعریف اندیس های میلر نکته ی ظریف و باریکی وجود دارد. باید به این واقعیت اشاره کرد که مختصر ترین و به لحاظ ریاضی راحت ترین روش نمایش صفحات شبکه، استفاده از شبکه وارون است. در این مورد در فصل ۲ در جایی که به طور روشن این ارتباط را مشخص خواهیم کرد بحث خواهیم کرد.]



شکل ۱۱- الف) صفحه ی (۱۲۲) ، (ب) تعدادی از صفحات موازی معادل که با اندیس های میلر مشخص شده اند (ج) تعدادی از صفحات در بلور مکعبی ، (د) یافتن فواصل بین صفحات

گاهی که یاخته واحد تقارن چرخشی دارد، به خاطر این تقارن، چندین صفحه غیر موازی معادل یک دیگرند. در چنین حالتی راحت تر است که تمام این صفحات را با یک سری از اندیس های میلر که در آکولاد قرار می گیرند مشخص کرد. بنابراین اندیس های $\{hkl\}$ نمایان گر تمام صفحات معادل با صفحه (hkl) تحت تقارن چرخشی می باشد. برای مثال در یک سیستم مکعبی اندیس های $\{۱۰۰\}$ نمایان گر شش صفحه (۱۰۰) ، (۰۱۰) ، (۰۰۱) ، $(\bar{۱}۰۰)$ ، $(۰\bar{۱}۰)$ ، $(۰۰\bar{۱})$ می باشند.

فاصله‌ی بین صفحات با اندیس‌های میلر یکسان

وقتی پراش پرتوهای ایکس از یک بلور را مطالعه می‌کنیم (فصل ۲)، لازم است اطلاعاتی راجع به فاصله‌ی بین صفحاتی که اندیس‌های میلر یکسان (hkl) دارند را داشته باشیم. این فاصله را به d_{hkl} نشان می‌دهیم. فرمول واقعی و صحیح بستگی به ساختار بلور دارد، ولی ما خود را محدود به حالتی می‌کنیم که محورها متعام باشند. با مراجعه به شکل (۱۱-۱) (د) و تجسم یک صفحه دیگر که موازی با صفحه‌ای که در شکل نشان داده شده و از مبدا می‌گذرد، می‌توانیم فاصله بین صفحات را محاسبه نماییم.

فاصله بین صفحات d_{hkl} ، طول خطی است که از مبدا بر آن صفحه عمود شود. فرض کنید زاویه‌هایی که خط عمود بر صفحات با محور مختصات می‌سازد α, β, γ و محل تقاطع صفحه با محورهای مختصات تا مبدا به ترتیب x, y, z باشد. از روی شکل در می‌یابیم که:

$$d_{hkl} = x \cos \alpha = y \cos \beta = z \cos \gamma$$

رابطه‌ای بین کسینوس‌های α, β, γ وجود دارد که چنین است:

$$\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1$$

اگر $\cos \alpha, \cos \beta, \cos \gamma$ را از رابطه‌ی قبل بیابیم و در رابطه‌ی اخیر قرار دهیم و d_{hkl} را بر حسب x, y, z بدست آوریم خواهیم داشت:

$$d_{hkl} = \frac{1}{\left(\frac{1}{x^2} + \frac{1}{y^2} + \frac{1}{z^2}\right)^{1/2}} \quad (1-3)$$

x, y, z به اندیس‌های میلر h, k, l مربوط اند. اگر مراحل را که به تعریف این اندیس‌ها منجر شد مرور کنیم در می‌یابیم:

$$k = n \frac{b}{y}, \quad l = n \frac{c}{z}, \quad h = n \frac{a}{x} \quad (1-4)$$

N فاکتور مشترکی است که از آن برای ساده کردن اندیس‌ها به کوچک‌ترین اعداد صحیح ممکن استفاده می‌شود. با بدست آوردن مقادیر x, y, z از معادله (۱-۴) و جای‌گزینی آن در معادله‌ی (۱-۳) بدست می‌آید.

$$d_{hkl} = \frac{n}{\left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}\right)^{1/2}} \quad (1-5)$$

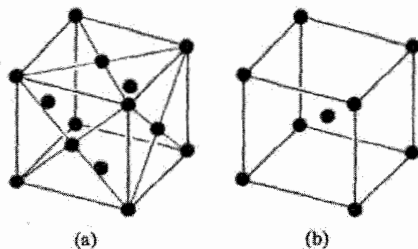
که همان فرمولی است که در پی آن بودیم. بدین ترتیب فاصله ی صفحات (۱۱۱) در یک بلور مکعبی ساده برابر است با $d = n \frac{a}{\sqrt{3}}$ که a ضلع مکعب است.

۱-۷ مثال هایی از ساختارهای بلوری ساده

به منظور درک بلورهای واقعی ابتدا با ساختارهایی که بهتر شناخته شده اند و همین طور با اندازه یاخته های واحد آن ها آشنا می شویم. اطلاعاتی که در مورد ساختار بلورهای مختلف در طی سالیان متعدد به تدریج بدست آمده بسیار است، ولی ما در این جا به چند مورد از ساختارهایی که بهتر شناخته شده اند و در این کتاب مکرر به آنها مراجعه می شود بسنده می کنیم.

مکعب مرکز سطحی و مرکز حجمی

بسیاری از فلزات به صورت یکی از این دو شبکه متبلور می شوند. اغلب فلزات آشنا مانند Ag، Cu، Pb، Pt، Co، Ni، Fe، Au، Al همه به صورت ساختار fcc متبلور می شوند (شکل ۱-۱۲ الف)). یاخته ی واحد شامل چهار اتم است، از هشت اتم که در رئوس مکعب قرار دارند و با یاخته های دیگر مشترکند، یک اتم و از شش اتمی که در وجوه یاخته های دیگر مشترکند، سه اتم، متعلق به این یاخته ی واحدند.



شکل ۱-۱۲ الف) یک یاخته واحد fcc، ب) یک یاخته واحد bcc

بعضی از فلزاتی که به صورت ساختار bcc متبلور می شوند عبارتند از Fe(α) و قلیایی های Rb، Li، Na، K (شکل ۱-۱۲ ب)). در این حالت یاخته ی واحد دو اتم دارد، یکی اتمی که در

راس با یاخته های دیگر مشترک است و دیگری اتم مرکزی است که با یاخته ی دیگری مشترک نیست.

ساختار سدیم کلراید

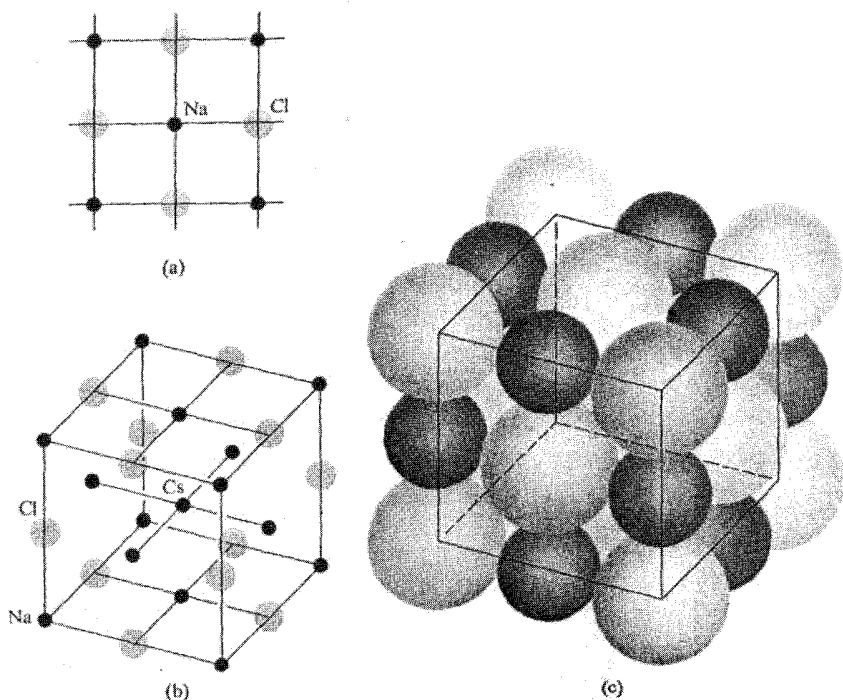
این ساختار نمک خوراکی معمولی NaCl است، که ساختاری مکعبی است و همان طور که در شکل (۱۳-۱) (الف) نشان داده شده است در امتداد سه جهت اصلی (محورها) متناوباً اتم های Cl و Na قرار گرفته اند. در سه بعد، یاخته ی واحد مانند شکل (۱۳-۱) (ب) است که یاخته ی یک مکعب مرکز سطحی است. موقعیت چهار اتم Na عبارتند از (۰۰۰)، $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ ، $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ و $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. در حالیکه چهار اتم Cl در مکان های $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ، $(0, 0, \frac{1}{2})$ ، $(\frac{1}{2}, 0, 0)$ و $(0, \frac{1}{2}, 0)$ قرار دارند (اعداد به صورت کسری از اضلاع مکعب هستند).

به طور خلاصه می گوئیم که NaCl یک ساختار غیر براوه است که از ترکیب دو زیر شبکه ی fcc که در هم فرو رفته اند ایجاد شده است. یکی از این زیر شبکه ها از اتم های Na و دیگری از اتم های Cl تشکیل شده است که یکی نسبت به دیگری به اندازه $\frac{1}{2}a$ جابجا شده است.

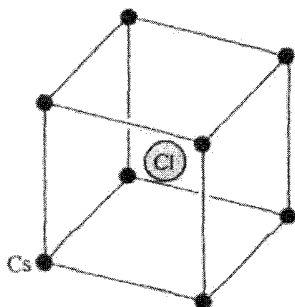
بسیاری از بلورهای یونی مانند KCl و PbS نیز چنین ساختاری دارند. برای ملاحظه ی لیست کامل تری که شامل ثابت شبکه نیز باشد به جدول (۲-۱) مراجعه نمایید.

ساختار سزیم کلراید

این ساختار نیز بلور مکعبی است ولی سزیم و کلر روی خطوطی که در امتداد چهار قطر مکعب هستند قرار گرفته اند. بنابراین همان گونه که در شکل (۱۴-۱) نشان داده شده است یاخته واحد bcc است. در هر یاخته واحد یک اتم Cs در نقطه (۰۰۰) و یک اتم Cl در نقطه $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ وجود دارد. بنابراین این ساختار یک شبکه غیر براوه است که از ترکیب دو شبکه مکعبی ساده که در امتداد قطر و به اندازه ی نصف مقدار قطر مکعب نسبت به یک دیگر جابه جا شده اند تشکیل یافته است. برای ملاحظه ی لیستی از ترکیبات یونی که با این ساختار متبلور می شوند به جدول (۲-۱) مراجعه نمایید.



شکل ۱۳-۱، (الف) پلان دو بعدی ساختار NaCl، (ب) ساختار NaCl در سه بعد، اتم های Na یک ساختار fcc را تشکیل می دهند که با ساختار دیگری از اتم های Cl در هم ادغام شده اند. (ج) ساختار با مقیاسی متناسب و با یون هایی که با یکدیگر در تماس اند رسم شده است. اتم های سدیم کره های کوچک سیاه در فضای بین اتم های کلر جای گرفته اند.



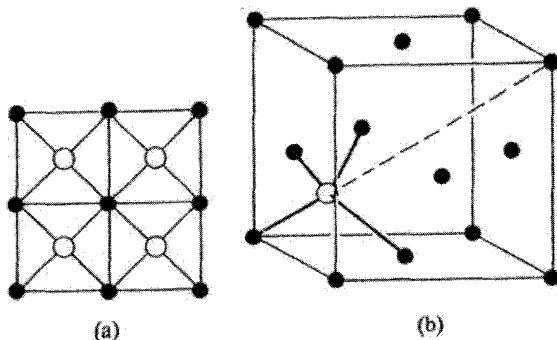
شکل ۱۴-۱ ساختار سزیم کلراید. اتم های سزیم به صورت شبکه مکعبی ساده که با یک شبکه ی مکعبی ساده مرکب از یون های کلر در هم فرو رفته اند.

جدول ۱-۲ ساختار و ابعاد یاخته ی تعدادی از عناصر و ترکیب ها

عنصر	ساختار	$a(\text{\AA})$	$c(\text{\AA})$
Al	fcc	۴/۰۴	-
Be	hcp	۲/۲۷	۳/۵۹
Ca	fcc	۵/۵۶	-
C	الماسی	۳/۵۶	-
Cr	bcc	۲/۸۸	-
Co	hcp	۲/۵۱	۴/۰۷
Cu	fcc	۳/۶۱	-
Ge	الماسی	۵/۶۵	-
Au	fcc	۴/۰۷	-
Fe	bcc	۲/۸۶	-
Pt	fcc	۳/۹۲	-
Si	الماسی	۵/۴۳	-
Ag	fcc	۴/۰۸	-
Na	bcc	۴/۲۸	-
Zn	hcp	۲/۶۶	۴/۹۴
LiH	سدیم کلراید	۴/۰۸	-
NaCl	سدیم کلراید	۵/۶۳	-
AgBr	سدیم کلراید	۵/۷۷	-
MnO	سدیم کلراید	۴/۴۳	-
CsCl	سزیم کلراید	۴/۱۱	-
TlBr	سزیم کلراید	۳/۹۷	-
CuZn(-brass) β	سزیم کلراید	۲/۹۴	-
Cu ₂ F	سولفید روی	۴/۲۶	-
Ag ₂ I	سولفید روی	۶/۴۷	-
ZnS	سولفید روی	۵/۴۱	-
CdS	سولفید روی	۵/۸۲	-

ساختار الماسی

یاخته ی واحد برای این ساختار یک یاخته ی fcc است با یک پایه که در هر جای گاه شبکه ای آن دو اتم کربن قرار گرفته است. موقعیت مکانی این دو اتم پایه عبارتست از (۰۰۰) و $(\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4})$. پلان دو بعدی یاخته در شکل (۱-۱۵) (الف) و تمام یاخته در سه بعد در شکل (۱-۱۵) (ب) نشان داده شده است. هشت اتم در هر یاخته این ساختار وجود دارد.



شکل ۱-۱۵ ساختار الماسی (الف) طرح واره اتم های پایه در مکعب. یک دایره سیاه به اضافه دایره سفید مجاورش یک پایه ساختار الماسی را تشکیل می دهد. (ب) نمای سه بعدی ساده شده این ساختار. تنها یکی از ۴ کره سفید همراه با پیوند چهار وجهی ۱ در شکل نشان داده شده است.

توجه کنید که در این ساختار هر اتم توسط چهار اتم همسایه نزدیک تشکیل یک چهار وجهی منظمی را می دهد که یک اتم در مرکز آن قرار دارد. چنین پیکربندی در نیمه رساناها متداول است و موسوم به پیوند چهار وجهی می باشد. بسیاری از نیمه رساناها نظیر Si، Ge و غیره چنین ساختاری دارند. مثال هایی به همراه مقادیر عددی مناسب در جدول (۱-۲) آمده است.

ساختار سولفید روی $(ZnS)^2$

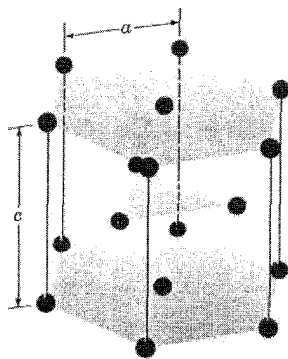
این ساختار بسیار نزدیک به ساختار الماسی است. تنها اختلاف در این است که دو اتمی که پایه را تشکیل می دهند از دو نوع مختلف اند (مثلا اتم های Zn و S). در این جا هر یاخته واحد شامل

چهار مولکول ZnS می باشد و هر اتم Zn (یا S) در مرکز یک چهار وجهی است که توسط اتم های از نوع مخالف تشکیل یافته است.

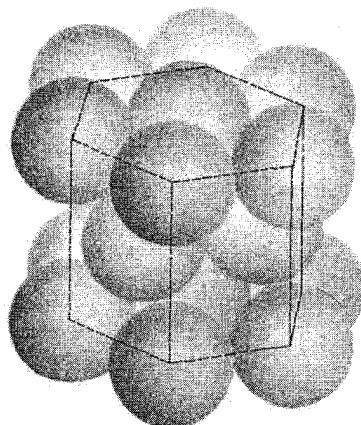
بسیاری از ترکیبات نیمه رسانا مانند GaSb و GaAs و InSb و غیره به این ساختار متبلور می شوند (جدول ۲-۱ را ملاحظه کنید).

ساختار تنگ پکیده شش گوشه^۱

این ساختاری است که بویژه در فلزات متداول است. شکل (۱-۱۶) این ساختار را نمایش می دهد. علاوه بر دو لایه ای از اتم ها که وجه بالایی شش وجهی را تشکیل می دهند یک لایه میانی از اتم ها طوری چیده شده اند که هر کدام از این اتم ها بین سه اتم در پایه قرار گرفته است. اتم ها در ساختار تنگ پکیده شش گوشه (hcp) کاملاً تنگ در کنار یک دیگر قرار دارند و این امر توضیح می دهد که چرا این ساختار در فلزات، که اتم های آن ها بسیار نزدیک در کنار یک دیگر قرار می گیرند بسیار متداول است. مثال هایی از بلورهای با ساختار hcp عبارتند از $\text{Ca}, \text{Mg}, \text{Be}, \text{Hg}, \text{Zn}$ و بسیاری از فلزات دو ظرفیتی.



(a)



(b)

شکل ۱-۱۶ (الف) ساختار تنگ پکیده شش گوشه (ب) ساختار hcp وقتی که اتم ها تقریباً در تماس با یکدیگرند هم چنان که موقعیت واقعی آن ها است.

۸-۱ جامدات بی شکل و مایعات

در سال های اخیر وبه خصوص پس از کشف خواص الکتریکی نیمه رساناهای بی شکل، این گونه جامدات مورد توجه قرار گرفته اند (بخش ۲-۱۳) و این نکته ما را وا می دارد که نگاهی هر چند مختصر به ساختار این جامدات داشته باشیم.

آشنا ترین مثال برای یک جامد بی شکل شیشه معمولی است. این ماده به لحاظ شیمیایی اکسید سیلیسیوم است. به لحاظ ساختاری به هیچ وجه ساختار بلوری ندارد. سیلیسیوم و اکسیژن به گونه ای توزیع شده اند که کاملاً کاتوره ای به نظر می رسند.

حالت آشنای دیگری از یک ساختار بی شکل ساختار مایعات است که در آن نیز ساختار بلوری وجود ندارد. اتم های مایعات از ناحیه ای به ناحیه دیگر جابه جا می شوند به گونه ای که توزیع آن ها کاتوره ای باقی می ماند.

بدین لحاظ تشابهی بین مایعات و جامدات بی شکل ملاحظه می شود. البته اتم ها در جامدات بی شکل در مکان های خود ثابت شده اند و برخلاف اتم های مایعات از جایی به جای دیگر تغییر مکان نمی یابند. در واقع اگر بتوان یک عکس لحظه ای از اتم های مایعات گرفت نتیجه از آن چه در مورد جامدات بی شکل بدست می آید غیر قابل تشخیص خواهد بود. بنابراین می توان فرمالیزم ریاضی یکسانی برای توصیف هر دو نوع ماده بکار برد.

در مایعات نیز نوعی از نظم ساختاری (هر چند که این ساختار بلوری نیست) مشاهده می شود. برای مثال ساختار جیوه را بررسی کنیم. این فلز به صورت hcp متبلور می شود. وقتی که این ماده در دمای پایین تر از نقطه ذوب و به صورت جامد است، تمام اتم ها در مکان های خود به صورت منظم قرار گرفته اند، به طوری که هر اتم در میان تعداد معینی از اتم های همسایه نزدیک، اتم های همسایه بعدی و... قرار می گیرد، و هر اتم همسایه به فاصله ی کاملاً معینی از آن اتم جای دارد.

وقتی که این فلز را حرارت می دهیم، اتم ها دیگر در مکان های منظم باقی نمی مانند و ساختار بلوری در هم فرو می ریزد. هنوز هم اگر از دیدگاه اتم مرکزی به همسایگان نزدیک و همسایگان بعدی و فاصله آن ها بنگریم در می یابیم که موقعیت اتم ها در حالت مایع اساساً به همان شکل که در حالت جامد است باقی می ماند. البته هنگامی که در مورد تعداد همسایگان نزدیک به یک اتم در حالت مایع صحبت می کنیم منظورمان تعداد متوسط آن ها است زیرا تعداد واقعی آن ها به دلیل حرکت اتم ها به طور پیوسته تغییر می کند.

بنابراین مایعات نیز ساختار نسبتاً منظمی دارند و این ساختار از تصویرهای پراش نوترون مایعات کاملاً معلوم می شود. به هر صورت نکته مهم این است که این نظم در مایعات فقط به چند لایه از اتم های همسایه ای که اتم مرکزی را در بر گرفته اند محدود است. چنان چه به سمت اتم های دور و دورتر پیش برویم توزیع اتم ها نسبت به اتم مرکزی کاملاً کاتوره ای می شود. به این دلیل است که می گوییم مایعات تنها یک نظم کوتاه برد دارند و نظم بلند برد در آنها وجود ندارد. خلاف این در بلورها مشاهده می شود. در یک بلور هنگامی که موقعیت اتم مرکزی مشخص می شود موقعیت تمام اتم ها حتی دورترین آن ها را می توان معلوم کرد. بنابراین بلورها هم نظم کوتاه برد و هم نظم بلند برد را دارند. یعنی کاملاً منظم هستند.

بنابراین دور از انتظار نیست که حتی در حالت مایع نیز نوعی نظم وجود دارد. از این گذشته نیروهای بین اتمی که مسئول تبلور جامدات هستند حتی پس از آن که جامد ذوب و به مایع تبدیل می شود موثر باقی می ماند. علاوه بر آن از آن جا که انبساط حجم که نتیجه ی ذوب شدن است معمولاً کوچک است میانگین فواصل بین اتمی و بنابراین بزرگی نیروها آن اندازه که قبلاً بوده اند باقی می ماند. حالا عنصر جدیدی وارد مسأله می شود که انرژی جنبشی حرارتی اتم ها است که از حرارت دادن ناشی می شود و آن ها را از این که در مکان های منظمی جای بگیرند باز می دارد. ولی هنوز هم نیروهای بین اتمی آن قدر قوی هستند که یک نظم معین جزئی و ناحیه ای را به مایع تحمیل نمایند.

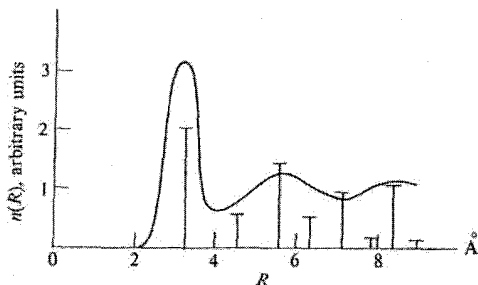
برای بررسی ریاضی این موضوع یک اتم نوعی را در نظر می گیریم و آن را اتم مرکزی می نامیم. این به منظور مطالعه ی توزیع اتم های دیگر سیستم نسبت به اتم مرکزی است. پوسته ای کروی به شعاع R و ضخامت ΔR بدون این اتم رسم می کنیم. تعداد اتم های این پوسته با رابطه زیر بیان می شود:

$$\Delta N(R) = n(R) 4\pi R^2 \Delta R \quad (1-6)$$

که $n(R)$ چگالی اتم ها در سیستم است. کمیت $4\pi R^2 \Delta R$ حجم پوسته ی کروی است که چون در چگالی ضرب شود تعداد ذرات حاصل می شود. از آن جا که مایعات همگون هستند، چگالی اتم ها بر حسب زاویه تغییر نمی کند و تنها بستگی شعاعی در اینجا مطرح است.

می توان گفت که چگالی $n(R)$ خواص ساختاری مایعات را مشخص می کند. چنان چه این کمیت و تغییرات آن بر حسب شعاع R مشخص شود ساختار مایع کاملاً تعیین می گردد. نمودار

چگالی $n(R)$ بر حسب R در جیوه مایع آن چنان که از پراش نوترون معلوم گردیده در شکل (۱۷-۱) نشان داده شده است. منحنی یک قله اولیه ای در $R \approx 3\text{Å}$ دارد و بعد از آن و قبل از رسیدن به یک مقدار ثابت معین چند بار نوسان می کند. چگالی اتم ها در $R \leq 2/2\text{Å}$ صفر می شود.



شکل ۱۷-۱ چگالی اتم ها در جیوه مایع. خطوط قائم بیان کننده توزیع اتمی در جیوه بلوری است.

این نقاط مشخصه ی منحنی ها را می توان بر حسب نیروهای بین اتمی کاملاً درک کرد. صفر شدن $n(R)$ در مقادیر کوچک R به سادگی قابل فهم است. با نزدیک شدن اتم های دیگر به اتم مرکزی نیروهای دافعه ی قوی ظاهر می شوند که این اتم ها را به کنار می رانند (دو بخش آینده را ملاحظه نمایید). بدین ترتیب این نیروهای دافعه، اتم های دیگر را از نزدیک شدن به اتم مرکزی باز می دارند. و این توضیح می دهد که چرا در مقادیر کوچک R مقدار $n(R)$ مساوی صفر است. انتظار می رود که مقدار R وقتی که $n(R) = 0$ است تقریباً برابر با قطر اتم باشد.

دلیل وجود پیک اصلی منحنی در شکل (۱۷-۱) نیروهای جاذبه ی بین اتمی است که آن را توضیح می دهیم: به جز در فواصل خیلی کم، اتم ها یک دیگر را جذب می کنند. این نیروها تمایل دارند اتم های دیگر را به طرف مرکز بکشانند که نتیجه ی آن یک چگالی بزرگ به خصوص در یک فاصله ی معین و مشخص می باشد. نوسانات دیگر منحنی ناشی از تاثیر متقابل بین نیروی اتم مرکزی و نیروهایی است که همسایگان نزدیک روی همسایگان دورتر اعمال می کنند.

مقدار چگالی $n(R)$ برای مقادیر بزرگ R به مقدار ثابت N می رسد که در واقع مساوی است با چگالی متوسط سیستم. انتظار این نتیجه را داشتیم چرا که قبلاً دیده ایم مایعات نمی توانند نظم

بلند برد داشته باشند. بنابراین در مقادیر بزرگ R توزیع اتم ها کاملاً کاتوره ای و مستقل از موقعیت اتم مرکزی یعنی مستقل از R است.

معمول است بجای $n(R)$ ، رابطه ی متقابل بین اتم ها با تابعی که اصطلاحاً تابع توزیع جفت، $g(R)$ نامیده می شود بیان گردد. این تابع به صورت زیر تعریف می گردد:

$$g(R) = \frac{n(R)}{n_0} \quad (1-7)$$

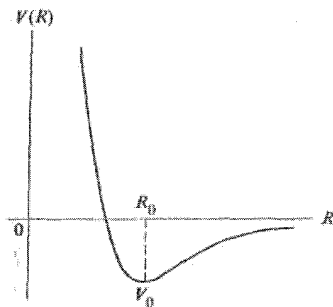
این تابع به معنای احتمال یا چگالی نسبی است. از آن جا که n_0 یک مقدار ثابت است شکل $g(R)$ شبیه شکل $n(R)$ است که در شکل (1-17) نشان داده شده است. توجه کنید در حالت خاص که $R \rightarrow \infty$ ، $g(R) \rightarrow 1$. این وضعیت متناظر است با عدم وجود یک رابطه متقابل بین اتم ها.

آن چنان که مختصراً در بالا اشاره شد، تابع جفت $g(R)$ بوسیله پراش نوترون معین می گردد که راجع به آن در بخش ۸-۲ بحث خواهد شد.

۹-۱ نیروهای بین اتمی

جامدات ساختار پایداری دارند. یک بلور NaCl از مجموعه ای از اتم های Na و Cl و یک بلور Ge از مجموعه ای از اتم های Ge پایدارتر است. این موضع بیان گر این است که اتم های Ge وقتی به هم نزدیک شوند، یک دیگر را جذب می کنند یعنی یک نیروی جاذبه ی بین اتمی وجود دارد که اتم ها را در کنار یک دیگر نگه می دارد. این نیرو عامل تشکیل بلور است.

این موضوع هم چنین بدین معنی است که انرژی بلور از انرژی اتم های آزاد تشکیل دهنده آن به اندازه مقداری که مساوی «انرژی لازم برای جدا کردن اجزاء یک بلور به اتم های آزاد» است، کمتر است. این انرژی، انرژی بستگی^۱ یا انرژی همدوسی^۲ یک بلور نامیده می شود.



شکل ۱-۱۸ پتانسیل بین اتم $V(R)$ بر حسب فاصله بین اتمی.

انرژی پتانسیل که نمایان گر اندرکنش بین دو اتم است، بر حسب فاصله بین اتم ها به شدت تغییر می کند. یک منحنی نوعی از این پتانسیل در شکل (۱-۱۸) نشان داده شده است. این منحنی یک مقدار کمینه در فاصله R_0 دارد. برای $R > R_0$ پتانسیل به آهستگی افزایش می یابد و در $I \rightarrow \infty$ پتانسیل به سمت صفر میل می کند. در حالی که برای $R < R_0$ پتانسیل به سرعت افزایش می یابد و در مقادیر کوچک R به سمت بی نهایت میل می کند.

از آن جا که سیستم (متشکل از یک جفت اتم) تمایل دارد که کم ترین انرژی را داشته باشد، پایدارترین حالت این است که پتانسیل آن کمینه باشد. فاصله ی بین اتمی در حالت تعادل سیستم R_0 و انرژی بستگی در این حالت $-V_0$ است. از آن جا که $-V_0 < 0$ است، سیستم پایدارو انرژی آن کم تر از حالتی است که دو اتم به اندازه ی کافی از هم دور باشند (اتم های آزاد).

شعاع تعادل R_0 نوعاً در حدود چند آنگستروم است. بنابراین نیروهای مورد بررسی در این حالت کوتاه برد هستند. کاهش پتانسیل نسبت به فاصله، بسیار سریع است به طوری که وقتی فاصله از مقداری در حدود 10 \AA تجاوز نماید ممکن است مقدار نیرو ناچیز گردد و بتوان اتم ها را به عنوان ذرات آزاد و بدون اندرکنش در نظر گرفت و این توضیح می دهد که چرا مدل الکترون آزاد در گازها که فاصله های بین اتمی بزرگ است چنین خوب جواب می دهد.

نیروهای بین اتمی $F(R)$ را می توان با مشتق گیری از پتانسیل $V(R)$ بدست آورد. از مباحث فیزیک عمومی می دانیم که نیرو برابر گرادیان پتانسیل با علامت منفی است.

$$F(R) = -\frac{\partial V(R)}{\partial R} \quad (1-18)$$

اگر این رابطه را بر منحنی شکل (۱۸-۱) اعمال کنیم خواهیم دید که برای $R > R_0$ ، $F(R) < 0$ می شود. بدین معنی که در ناحیه $R > R_0$ نیرو جاذبه است و تمایل دارد اتم ها را به سمت یک دیگر بکشد. از طرف دیگر برای $R < R_0$ ، $F(R) > 0$ است و بدین معنی است که وقتی $R < R_0$ است نیرو دافعه است و تمایل دارد که اتم ها را از یک دیگر دور کند.

از بحث فوق نتیجه می شود که نیروی بین اتمی ترکیبی از دو قسمت است؛ یک نیروی جاذبه که در فواصل بزرگ نیروی غالب است و یک نیروی دافعه که در فواصل کوچک غالب است. در نقطه R_0 که همان نقطه ی تعادل است این نیروها دقیقاً یک دیگر را خنثی می کنند دربارہ ی طبیعت نیروهای جاذبه و دافعه در بخش آینده بحث خواهیم کرد.

۱-۱۰ انواع پیوندها

وجود نیروهای جاذبه بین اتمی ناشی از وجود پیوندها در جامدات است. این نیروها پیوندهای بین اتم ها در جامدات را تشکیل می دهند و این پیوندها هستند که مسئول پایداری بلورها می باشند.

سته به منشاء فیزیکی و طبیعت نیروهای پیوندی چندین نوع پیوند وجود دارد که سه تا از مهم ترین آنها عبارتند از پیوند یونی، پیوند کووالان و پیوند فلزی.

حال یکا یک آن ها را به اضافه ی نوع دومی از پیوندها که فقط در حالت های خاص و معینی مهم هستند را بررسی می کنیم.

پیوند یونی

ساده ترین پیوند به لحاظ درک آن، پیوند یونی است. به عنوان مثال NaCl را در نظر می گیریم. در حالت بلوری هر اتم Na، تنها الکترون ظرفیت خود را به اتم همسایه ی خود می دهد و نتیجه ی آن یک بلور یونی می شود که شامل یون های مثبت و منفی است. بنابراین هم چنان که در بخش ۷ اشاره شد هر یون Na با شش یون Cl^- (و بالعکس) احاطه شده است.

اگر یک جفت از یون های Na و Cl را مشاهده و مطالعه نماییم، آشکار می گردد که یک نیروی

کولنی الکترونی $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^2}$ بین یون های با بار مخالف وجود دارد. این همان نیرویی است که

مسئول پیوند NaCl و بلورهای یونی دیگر است.

البته درک منشاء نیروهای دافعه که در فواصل کوتاه اثر می کنند مشکل تر است. فرض کنید که یون های NaCl را به وسیله کاهش دادن (فرضی) ثابت شبکه، خیلی به هم نزدیک نماییم. در این صورت یک نیروی دافعه شروع به عمل کردن می کند. در غیر این صورت یون ها به جذب یک دیگر ادامه می دهند و بلور فرو می ریزد که البته این با تجربه سازگار نیست. چنین نیروی دافعه‌ای را نمی توان بر مبنای جاذبه کولنی توضیح داد. پس باید ناشی از نوع جدیدی از اندرکنش باشند.

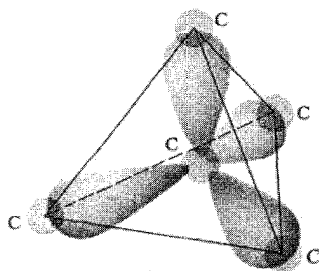
تصویری کیفی از منشاء نیروی دافعه را می توان به صورت زیر ترسیم کرد. وقتی یون های Na^+ و Cl^- آنقدر به هم نزدیک شوند که مدارهای الکترونی یون ها شروع به هم پوشی یک دیگر نمایند، به دلیل نیروی الکترو استاتیکی کولنی دافعه، الکترون ها (که دارای بار منفی هستند) شروع می کنند به دفع یک دیگر. البته هر چه یون ها بیشتر به هم نزدیک شوند. نیروی دافعه بیشتر می شود که این به طور کمی با شکل (۱۸-۱) در ناحیه $R < R_0$ سازگار است. علاوه بر این، عامل مهم دیگری در نیروی دافعه سهمیم است و آن اصل طرد پائولی است. هنگامی که یون ها شروع به نزدیک شدن کنند، مدارهای الکترون ها شروع می کنند به هم پوشی یک دیگر. یعنی بعضی از الکترون ها تلاش می کنند مدارهایی را اشغال کنند که قبلاً توسط الکترون های دیگر اشغال شده اند. ولی این امر به جهت اصل طرد ممنوع است، زیرا هر دو یون Na^+ و Cl^- لایه های خارجی کاملاً پری دارند. به منظور جلوگیری از نقض اصل طرد انرژی پتانسیل سیستم سریعاً افزایش می یابد که باز هم با شکل (۱۸-۱) در ناحیه $R < R_0$ سازگاری دارد.

پیوند کووالان

برای معرفی این پیوند، الماس را که یک جامد کووالان است بررسی می کنیم. از بخش ۷ یادآوری می کنیم که این بلور از اتم های کربن که به شکل fcc مرتب شده اند طوری ایجاد می شود که هر اتم توسط چهار اتم دیگر احاطه شده و یک چهار وجهی منظم را تشکیل می دهد. پیوند یونی نمی تواند بلور الماس را توجیه کند، چرا که در این جا هر اتم الکترون های خود را حفظ می کند و هیچ گونه انتقال الکترون بین اتم ها وجود ندارد. در نتیجه هیچ یونی شکل نمی گیرد. این امر نمایان گر این واقعیت است که تمام اتم ها معادل یک دیگرند. بنابراین دلیلی وجود ندارد که یک الکترون از اتمی به اتم دیگر منتقل شود.

پیوندها در الماس به این صورت ایجاد می شوند: هر اتم چهار الکترون ظرفیت دارد و چهار پیوند با چهار همسایه ی نزدیکش ایجاد می کند (شکل ۱۹-۱). این پیوند از دو الکترون تشکیل یافته است که هر یک از آن ها سهم اتمی است که در پیوند شرکت کرده است. این پیوند دو الکترونی در فیزیک و شیمی کاملاً شناخته شده است و به پیوند کووالان موسوم است.

به عنوان دلیلی بر مناسب بودن این پیوند برای الماس متذکر می شویم که در نتیجه اشتراک الکترونی، حالا هر اتم کربن با ۸ الکترون احاطه شده است که یک ساختار لایه ای کامل و پایدار برای لایه ظرفیت (در این جا لایه ی آشنای p) بدست می آید.



شکل ۱۹-۱ پیوند کووالان چهار وجهی در الماس. هر ناحیه دوکی شکل نمایانگر توزیع بار دو الکترونی است که پیوند مربوطه را تشکیل می دهد.

این محاسبه ساده هنوز نمی تواند توضیح دهد چرا یک ترکیب دو الکترونی می توان چنین پیوندی که حاصل آن یک نیروی جاذبه ی بین اتمی است، ایجاد نماید. توجیه پیوند کووالان تنها به کمک مکانیک کوانتومی میسر است. ساده ترین مثال در پیوند کووالان مولکول هیدروژن (H_2) است که در آن دو اتم به واسطه ی این پیوند در کنار یک دیگر قرار گرفته اند و اتم ها الکترون هایشان را به اشتراک گذاشته اند. توجیه کوانتومی پیوند H_2 در بخش ۷-A و کاربست آن در پیوند چهار وجهی (آن چنان که در الماس است) در بخش ۸-A بحث می شود. برای تفصیل بیشتر به آن بخش ها مراجعه نمایید.

آن چنان که از سختی بسیار زیاد الماس و نقطه ی ذوب بالای آن (بیش از $3000^\circ C$) بر می آید پیوند کووالان بسیار قوی است. مقدار انرژی پیوند کووالان نوعاً در حدود چند الکترون ولت بر پیوند است.

پیوند کووالان به ویژه برای عناصر ستون IV جدول تناوبی اهمیت دارد. عناصر دیگر این گروه مانند Ge, Si و Sn همگی به شکل ساختار الماسی متبلور می شوند. عناصر سیلیسیوم (Si) و ژرمانیوم (Ge) توجه بیشتری را به خود جلب کرده اند چرا که هر دو از بهترین نیمه رساناهای شناخته شده هستند. این دو عنصر در فصول ۶ و ۷ که خواص نیمه رسانایی جامدات مطالعه می شود به تفصیل مورد بحث قرار خواهند گرفت.

بلورهای کووالان سخت و شکننده و غیر قابل خم شدن هستند. این واقعیت بر مبنای نیروهای اتمی قابل درک است. از آنجا که پیوندها در جهت مناسبی در فضای بلور ایجاد گردیده اند تلاش برای جایگزین کردن آن ها شدیداً با مقاومت بلور مواجه می شود.

در بحث راجع به پیوندها، تنها پیوند های یونی خالص را بررسی کردیم ولی بلورهای زیادی وجود دارند که پیوند در آن ها خالص نیست بلکه ترکیبی از پیوندهای یونی و کووالان است. یک مثال خوب در این مورد نیمه رسانای GaAs است، که در آن گرچه انتقال بار صورت می گیرد ولی انتقال بار کامل نیست و تنها به طور متوسط در حدود 0.46 بار یک الکترون از اتم Ga به اتم As انتقال می یابد. این انتقال بار مسئول قسمتی از نیروی بستگی در GaAs است، ولی قسمت عمده نیروی بستگی مربوط به پیوند کووالان یا اشتراکی بین Ga و اتم های همسایه As می باشد.

پیوند فلزی

اغلب عناصر فلز هستند. مشخصه فلزات رسانایی الکتریکی و مقاومت مکانیکی زیادشان است. فلزات همچنین خاصیت انعطاف پذیری دارند. ما در این جا به ویژه به مکانیسم پیوند علاقه مندیم، ولی مدلی که بدین منظور استفاده خواهیم کرد قادر است خواصی که در بالا بدان اشاره شده را نیز به خوبی مد نظر قرار دهد. (این خواص موضوع بسیاری از بحث های بعدی ما خواهند بود، (به فصول ۴، ۵ و ۱۱ مراجعه نمایید).

برای درک پیوند فلزی ابتدا یک فلز ساده نوعی مثلاً سدیم را در نظر می گیریم. چگونه می توان اتم های سدیم را در کنار یک دیگر قرار داد تا یک بلور ساخته شود؛ اتم ها یک دیگر را جذب و یک جامد پایدار تشکیل گردد. پاسخ سریع این است که نه پیوند یونی و نه پیوند کووالان هیچ کدام نمی توانند جاذبه بین اتمی در فلز سدیم را به حساب آورند. پاسخ صحیح چنین است: هر اتم سدیم آزاد یک الکترون ظرفیت دارد که به طور ضعیف به اتم مقید است. وقتی یک بلور ایجاد

می‌شود الکترون ظرفیت از اتم خودش جدا و اساساً یک الکترون آزاد می‌شود که قادر است در داخل بلور حرکت کند. این تصویر از الکترون‌های آزاد ظرفیت (در فلزات به الکترون‌های رسانش یا ظرفیت) قویاً با الکترون‌های ظرفیت در جامدات کووالانی و یونی که در آنها الکترون‌ها پیوند محکمی با اتمشان دارند متفاوت است. این در واقع نخستین وجه تمایز برجسته‌ای است که فلزات را از بلورهای یونی و کووالان جدا می‌کند.

مدلی که ما اکنون از فلز سدیم داریم مجموعه‌ای مرکب از یون‌های مثبت است که یک شبکه را تشکیل می‌دهند و در گازی از الکترون‌های آزاد غوطه‌ورند. سوآلی که با آن مواجه می‌شویم این است که چرا انرژی چنین سیستمی کمتر از انرژی اتم‌های آزاد سدیم است. واضح است که یون‌ها به دلیل نیروی الکترواستاتیکی کولنی تمایل به دفع یکدیگر دارند ولی این نیرو که در خلاف پایداری عمل می‌کند، چندان موثر نیست. زیرا الکترون‌های آزاد به شدت یون‌ها را از یکدیگر جدا می‌کنند و نتیجه آن اساساً خنثی کردن یون‌هایی است که اندرکنش ندارند. افت شدید انرژی که برای این پیوند لازم است تنها بر مبنای مکانیک کوانتومی قابل توجیه است. از بررسی کوانتومی مسأله نتیجه می‌شود که وقتی ذره‌ای مقید به حرکت در حجم کوچکی است لزوماً باید انرژی جنبشی بزرگی داشته باشد. این انرژی متناسب با $V^{-2/3}$ است که V حجم محدودی حرکتی ذره است. (بخش ۳-A را ملاحظه نمایید). منشاء این انرژی کاملاً طبیعت کوانتومی دارد و مربوط به اصل عدم قطعیت هایزنبرگ است.

حال این نظریه‌ی جالب را برای فلزات بکار می‌بریم. وقتی اتم‌های Na در حالت گازی هستند الکترون‌های ظرفیتشان انرژی جنبشی بزرگی دارند. زیرا آن‌ها مقید به حرکت در حجم بسیار کوچک اتمی هستند. ولی در حالت بلوری الکترون‌ها در سرتاسر حجم بلور که فضای بزرگی است سرگردانند. در نتیجه انرژی جنبشی و بنابراین انرژی کل سیستم به نحو قابل ملاحظه‌ای کاهش می‌یابد که این، منشاء پیوند فلزی است (با بیان مجازی، الکترون‌های آزاد منفی مانند چسبی عمل می‌کنند که یون‌های مثبت را در کنار یکدیگر نگه می‌دارند).

پیوند فلزی از پیوندهای یونی و کووالان ضعیف‌تر است (نقطه ذوب سدیم فقط $97/7^{\circ}\text{C}$ است). ولی هنوز بزرگ‌تر از آن است که قابل چشم‌پوشی باشد.

به منظور بررسی مختصر خواص فلزی دیگری که قبلاً بر آنها اشاره شد، باید در نظر داشته باشیم که رسانایی الکتریکی زیاد فلزات مربوط به توانایی حرکتی الکترون‌های ظرفیت تحت تأثیر یک

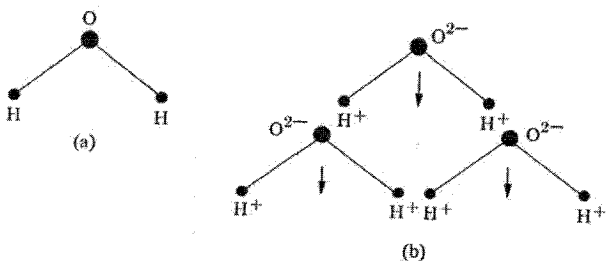
میدان الکتریکی است، که نتیجه ی آن ایجاد یک جریان الکتریکی در امتداد میدان است. توجیه مشابهی را نیز می توان برای رسانایی حرارتی بکار بست. چگالی زیاد فلزات مربوط به این واقعیت است که یون های فلزی را می توان خیلی نزدیک به یک دیگر پکیده کرد. البته الکترون های آزاد، دیوار قوی و مؤثری بین آن ها ایجاد می کنند. خاصیت انعطاف پذیری زیاد نتیجه این واقعیت است که پیوندهای فلزی به جهت خاصی وابسته نیستند، به طوری که اگر گشتاور خم کننده ای بر فلز اعمال گردد، موقعیت مکانی یون به گونه ای تغییر می کند که خود را با این گشتاور هماهنگ نماید. الکترون ها که خیلی کوچک و به شدت متحرک هستند به سادگی خود را با موقعیت جدید تطبیق می دهند.

این مدل پیوند فلزی برای فلزات ساده بویژه قلیایی ها به خوبی جواب می دهد. آن چنان که انتظار می رود فلزات پیچیده تر به خصوص عناصر واسطه نظیر Ni, Fe و... مدل های پیچیده تری را طلب می کند. در Fe و Ni الکترون های $3d$ به خوبی جای گزیده شده اند و بنابراین تمایل دارند با همسایگان شان پیوندهای کووالان تشکیل دهند. این پیوند کووالان علاوه بر سهم الکترون های ظرفیت $4s$ است که پیوند فلزی را ایجاد می نمایند.

پیوندهای ثانوی

علاوه بر پیوندهای اولیه ای که در بالا بحث شد (یونی، کووالان و فلزی) پیوندهای ضعیف تری نیز وجود دارند که اغلب نقش مهمی در توجیه بعضی از خواص پیوندی ظرفیت^۱ ایفا می کنند. برای مثال می توان از بلور یخ (H_2O) نام برد. ابتدا پیوند یک تک مولکول آب را بررسی می کنیم. یک پیوند کووالان بین اتم اکسیژن و هر یک از دو اتم هیدروژن ایجاد می شود (شکل ۲۰-۱ الف) الکترون های به اشتراک گذاشته شده این امکان را برای اکسیژن فراهم می کنند که ۸ الکترون ظرفیت (یعنی ساختار لایه ای پایدار) داشته باشد. بنابراین در یک مولکول H_2O مولکول ها شدیداً مقید هستند. ولی وقتی که پیوند بین خود مولکول های آب که یخ را تشکیل می دهند در نظر می گیریم در می یابیم که قدرت پیوند خیلی ضعیف تر است. مثلاً نقطه ی ذوب آب فقط $0^{\circ}C$ است. توجیه آن این است که گرچه هر مولکول در مجموع از نظر الکتریکی خنثی است ولی توزیع بار در داخل مولکول به گونه ای است که اندرکنشی بین مولکول ها وجود دارد. بنابراین در توصیف الکترونی که در پیوند بین $H-O$ به اشتراک گذاشته می شود باید این واقعیت

را متذکر شد که الکترون ها در واقع بیشتر طرف اتم اکسیژن کشیده می شوند و نتیجه ی آن تجمع یک بار خالص منفی در اطراف اتم اکسیژن و یک بار مثبت در اطراف اتم هیدروژن است (شکل ۲۰-۱). این بارها یک گشتاور دو قطبی الکتریکی در مولکول آب ایجاد می کند. این گشتاورها به صورت بردارهایی در شکل زیر نشان داده شده اند. بنابراین مولکول های آب با ربایش یک دیگر تشکیل یک بلور می دهند (شکل ۲۰-۱ ب) ربایش دو قطبی ها را می توان به شکل مقدماتی و ساده تری توجیه کرد. بدین صورت که اتم اکسیژن منفی در یک مولکول آب به طرف گوشه ای از مولکول دیگر آب که شامل اتم مثبت هیدروژن است جذب می شود.



شکل ۲۰-۱ الف) مولکول آب (ب) ترکیب مولکول های آب در نتیجه پیوند هیدروژنی. گشتاورهای دو قطبی الکتریکی مولکول ها توسط پیکان هایی نشان داده شده اند.

پیوندی که در این جا توصیف شد به پیوند هیدروژنی موسوم است و گاهی به خاطر نقش مهمی که هسته های کوچک هیدروژن (که پروتون هستند) ایفا می کند، پل هیدروژنی نیز نامیده می شود.

پیوند دیگری که یک نقش اساسی در حالت جامد عناصر بی اثر ایفا می کند، پیوند واندرالس است از شیمی پایه می دانیم که عناصر گاز بی اثر یعنی آن ها که ستون VII دوم تناوبی را اشغال کرده اند (Ar, Ne, He و غیره ...) جاذبه ی فوق العاده اندکی با خود و با عناصر دیگر دارند. این عناصر معمولاً در واکنش های شیمیایی وارد نمی شوند (به همین دلیل بی اثر نامیده می شوند). آن ها برخلاف گازهای دو اتمی مانند O_2 و H_2 یا گازهای دیگر چند اتمی، تک اتمی هستند. ضعیف بودن نیروی بین اتمی در حالت جامد گازهای بی اثر نیز از پایین بودن نقطه ذوبشان که به ترتیب برای Ar, Ne, He و Ar به ترتیب مساوی ۰/۹۵، ۲۴/۴۵، و $83/95^\circ K$ است نمایان می گردد. هلیوم تا دمای یک درجه کلوین مایع باقی می ماند.^۱

۱- در واقع He در صورتی منجمد می شود که فشار خارجی حداقل ۲۶ اتمسفر بر آن اعمال گردد.

اگر از مبانی تئوری کوانتومی استفاده کنیم، توجیه این که چرا نیروهای بین اتمی در گازهای بی اثر ضعیف هستند، مشکل نخواهد بود. اتم هر یک از این گازها لایه خارجی کاملاً پری دارند. در نتیجه تمایل بسیار کمی به تبادل یا اشتراک الکترون با اتم های دیگر دارد. این خاصیت مانع از وجود هرگونه نیروی کووالان یا یونی و یا نیروهای پیوندی فلزی در بلور گازهای بی اثر می شود.

باوجود این بین اتم های گازهای بی اثر یک نیروی بین اتمی بسیار ضعیف وجود دارد. این واقعیت که مثلاً Ne در $24/45^\circ \text{K}$ منجمد می شود به طور روشن بیان گر این است که یک نیروی بین اتمی وجود دارد که عامل این انجماد می باشد. سیستمی که واقعاً هیچ اندرکنشی بین اتم های آن وجود نداشته باشد در پایین تری دما نیز به صورت گاز باقی می ماند. بنابراین مساله ما توجیه ضعیف بودن این نیروها نیست بلکه در مرحله اول به حساب آوردن وجود این نیروها است. بدون وارد شدن در پیچیدگی های فیزیکی و مکانیکی مدل زیر را برای توصیف ربایش بین عناصر گازی بی اثر ارائه دهیم.

دو تا از این اتم ها را در نظر بگیرید. هر اتم شامل تعدادی الکترون مداری است که به طور پیوسته به دور هسته گردش می نمایند. اگر حرکت آن ها به گونه ای بود که همیشه بار آن ها به طور متقارن اطراف هسته توزیع می شود، هسته کاملاً محافظت می شد و دو اتم اندرکنشی نداشتند. ولی این فرضیه کاملاً درست نیست. گرچه توزیع الکترون ها اساساً متقارن است (قطعاً بطور متوسط چنین است) ولی با گذشت زمان افت و خیز کوچکی وجود دارد که اثر آن تولید یک دو قطبی الکتریکی متغیر در هر یک از اتم ها است. این دو قطبی ها تمایل به جذب یکدیگر دارند (هم چنان که در مورد پیوند هیدروژنی بیان شد) و این منشاء نیروهای واندروالس است.

مشخص شده است که پتانسیل وان در والس با فاصله بصورت $\frac{1}{R^6}$ کاهش می یابد این خیلی سریع تر از پتانسیل یونی است که بصورت $\frac{1}{R}$ کاهش می یابد.

دو دلیل برای کوچک بودن نیروی واندروالس (که به نیروی لندن نیز موسوم است) می توان ارائه داد: الف) دو قطبی های افت و خیز کننده کوچک هستند. ب) دو قطبی ها در اتم های مختلف با یک دیگر هم زمان نیستند، واقعیتی که تمایل به حذف اثرهای جاذبه دارد. این نوسان ها منجر به وجود یک نیروی جاذبه خالص می شوند.

References

Crystals

- I V. Azaroff, 1960, *Introduction to Solids*, New York: McGraw-Hill
- C. S. Barrett and T Massalski. 1966. *Structure of Metals*. third edition, New York: McGraw-Hill
- F. C. Phillips, 1963. *An Introduction to Crystallography*. third edition, New York: John Wiley
- G. Weinreich. 1965, *Solids*. New York: John Wiley
- J. Wulff *et al.* 1963. *Structure and Properties of Material*. Vol. I, Cambridge, Mass: MIT Press
- R. W. G. Wykoff, 1963, *Crystal Structures*, second edition, New York: John Wiley/ Interscience

Interatomic bonds

- A. Holden, 1970. *Bond, Between Atoms*. Oxford University Press
- W. Hume-Rothery, 1955. *Atomic Theory for Student, in Metallurgy*. London: Institute of Metals
- Linus Pauling, 1964, *General Chemistry*, San Francisco: Freeman
- Linus Pauling, 1948. *The Nature of the Chemical Bond*. Ithaca, N. Y.: Cornell University Press
- B. L. Smith, "Inert Gas Crystals," *Contem. Phys.* **11**, 125. 1970
- J. Wulff *et al.* 1963. *Structure, and Properties of Materials*, Vol. I. Cambridge, Mass.: M/T Press

پرسش‌ها

- ۱- چرا پیوند الماسی در ترکیبات کربن، پیوند چهار وجهی است؟
- ۲- قدرت پیوند هیدروژنی در آب را برآورد کنید (برحسب الکترون ولت بر پیوند).
- ۳- نشان دهید که دو دوقطبی مساوی ی کدیگر را جذب می کنند.
- ۴- قدرت پیوند واندروالس را برای نئون تخمین بزنید.

مسائل

۱- بردارهای پایه بسیط یک شبکه به صورت $a = \frac{a}{\sqrt{2}}(i + j)$ و $b = \frac{a}{\sqrt{2}}(j + k)$ و $c = \frac{a}{\sqrt{2}}(k + i)$ داده شده اند که i, j, k بردارهای یکه در امتداد مختصات معینی هستند، شبکه ی براوه ی مربوط کدام است؟

۲- با استفاده از جدول ۱-۲ و اطلاعات زیر چگالی های جامدات زیر را محاسبه نمایید: Fe, Zn, Si و Al که وزن اتمی آن ها به ترتیب برابر است با ۲۶/۹۸، ۵۵/۸۵، ۶۵/۳۷ و ۲۸/۰۹.

۳- نشان دهید که در یک ساختار شش گوشه تنگ پکیده (hcp) که اتم ها کره هایی مماس بر یک دیگرند و نسبت $\frac{c}{a}$ از رابطه ی زیر بدست می آید:

$$\frac{c}{a} = \left(\frac{8}{3}\right)^{1/2} = 1.633$$

(ساختار hcp در بخش ۷-۱ بحث شده است)

۴- نسبت پکیدگی (packing ratio) به صورت کسری از حجم کل یاخته که به وسیله ی اتم ها اشغال می شود تعریف می شود. بیشینه ی مقادیر این نسبت را برای کره های مساوی که در نقاط بلورهای مکعبی ساده، مکعبی مرکز حجمی و مکعبی مرکز سطحی بیان کنید.

۵- مسأله ی ۴ را برای شبکه های شش گوشه ولوزی رخ (سه گوشه) تکرار کنید.

۶- مسأله ی ۴ را برای یک ساختار hcp تکرار کنید.

۷- یک یاخته ی مربعی مرکز سطحی را در نظر بگیرید. یک یاخته ی بسیط در این یاخته ی بزرگ بسازید و آن دو را باهم مقایسه کنید. چند اتم در یاخته بسیط هست و چگونه این با تعداد اتم ها در یاخته های اصلی مقایسه می شود.

۸- الف) نشان دهید که یک شبکه ی دو بعدی نمی تواند یک تقارن ۵- فولد داشته باشد. ب) این واقعیت که تعداد شبکه های دو بعدی براوه پنج عدد است را اثبات کنید.

این شبکه ها، عبارتند از: مایل، مربعی، شش گوشه، مستطیلی ساده و مستطیلی مرکزدار (اثبات در کتاب Kittel آمده است)

۹- ثابت کنید: اگر جسمی دو صفحه ی بازتابی متقاطع که با هم زاویه $\frac{\pi}{4}$ می سازند داشته باشد، یک محور ۴- فولد که در امتداد فصل مشترک صفحات خواهد داشت.

۱۰- صفحات و جهت های زیر را در یک یاخته واحد مکعبی رسم کنید.

$$[11\bar{2}], [12\bar{2}], [1\bar{1}2] \text{ و } [1\bar{1}\bar{2}]$$

۱۱- الف) کدام صفحات در یک ساختار fcc بیش ترین چگالی اتم ها را دارد؟

ب) این چگالی را برای Cu بر حسب $\frac{\text{اتم}}{\text{cm}^3}$ بدست آورید.

۱۲- مساله ۱۱ را برای Fe که ساختار bcc دارد تکرار کنید.

۱۳- نشان دهید که بیشینه ی نسبت پکیدگی در ساختار الماسی $\frac{\pi\sqrt{3}}{16}$ است.

راهنمایی: این ساختار می تواند از در هم رفتن دو شبکه الماسی باشد که به طوری مرتب شده اند که هر اتم توسط چهار اتم دیگر احاطه شده است و یک چهار وجهی منظم را تشکیل می دهند.

۱۴- یک تئوری کمی درباره پیوند در بلورهای یونی توسط بورن و مایر به صورت زیر توسعه یافته است. انرژی پتانسیل کل یک سیستم یا رابطه زیر بیان می شود:

$$E = N \frac{A}{R^n} - N \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 R}$$

که N تعداد زوج یون های مثبت- منفی است. اولین جمله در طرف راست بیان گر پتانسیل دافعه است و A و n مقادیر ثابتی هستند که به طور تجربی بدست می آیند. جمله ی دوم پتانسیل کولنی جاذبه را بیان می دارد α به نام ثابت مادولنگ (*Madelung constant*) موسوم است و به ساختار بلور در جامد بستگی دارد.

الف) نشان دهید که فاصله ی بین اتمی تعادل با عبارت زیر بیان می شود:

$$R_0^{n-1} = \frac{4\pi\epsilon_0}{\alpha e^2} An$$

ب) ثابت کنید که انرژی پیوندی در حالت تعادل برابر است با:

$$E_0 = -\frac{\alpha Ne^2}{4\pi\epsilon_0 R_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

ج) مقدار ثابت n را برای NaCl با استفاده از جدول (۲-۱) و این واقعیت که انرژی بستگی اندازه گیری شده برای این بلور $1/83 \text{ kcal/mol}$ (یا $7/95 \frac{\text{eV}}{\text{مولکول}}$) می باشد محاسبه نمایید. ثابت α برای NaCl برابر $1/75$ است.

فصل دوم

پراش پرتوهای ایکس، نوترون و الکترون در بلورها

- ۲-۱ مقدمه
- ۲-۲ تولید و جذب پرتوهای ایکس
- ۲-۳ قانون براگ
- ۲-۴ پراکندگی از یک اتم
- ۲-۵ پراکندگی از یک بلور
- ۲-۶ شبکه وارون و پراش پرتوهای ایکس
- ۲-۷ شرط پراش و قانون براگ
- ۲-۸ پراکندگی از مایعات
- ۲-۹ تکنیک‌های تجربی
- ۲-۱۰ کاربردهای دیگر پرتوهای ایکس در فیزیک حالت جامد
- ۲-۱۱ پراش نوترون
- ۲-۱۲ پراش الکترون

در این فصل راجع به ساختارهای بلوری بحث می‌کنیم. با مطالعه نقش پراش یک باریکه‌ی تابش فرودی به یک بلور می‌توان ساختار آن را تعیین کرد. هم چون نوری که توسط یک شبکه پراشیده می‌شود، پراش از یک بلور نیز تنها در جهت خاصی صورت می‌گیرد. یا اندازه‌گیری جهت‌های پراش و شدت‌های مربوطه می‌توان اطلاعاتی راجع به ساختار بلوری بدست آورد.

در پراش از سه نوع تابش استفاده می‌شود: پرتوهای ایکس، نوترون و الکترون. رفتار این سه نوع تابش کاملاً مشابه است. بنابراین فقط در مورد پرتوهای ایکس به تفصیل بحث خواهیم کرد.

بعد از بحث مختصری راجع به چگونگی تولید و جذب پرتوهای ایکس استنتاج ساده‌ای برای قانون براگ بیان خواهیم کرد. نشان خواهیم داد که این قانون از مفاهیم تئوری پراکندگی پیروی می‌کند. راجع به شبکه‌ی وارون و ملاحظات تجربی مرتبط با تعیین ساختار بلوری توسط پرتوهای ایکس بحث خواهیم کرد. سپس راجع به پراش الکترون و نوترون صحبت خواهیم کرد و به مزایا و محدودیت‌های آن‌ها اشاره می‌کنیم.

تعیین ساختار مایعات در بخش ۸-۲ بحث خواهد شد. در آن جا نشان خواهیم داد که چگونه می‌توان با اندازه‌گیری آن چه به ضریب ساختار مایع موسوم است به توزیع جفت دست یافت و ساختار مایع را تبیین کرد.

بعضی از مفاهیمی که در اینجا ارائه می‌گردد به ویژه پراش و شبکه وارون در بحث مربوط به ارتعاشات شبکه (بخش ۳) و حالت‌های الکترونی در یک بلور (بخش ۵) بسیار مفید خواهند بود.

۲-۲ تولید و جذب پرتوهای ایکس

پرتوهای ایکس امواج الکترومغناطیسی هستند که طول موج آنها در حدود 1 \AA است. خواص پرتوهای ایکس به جز در طول موجشان که خیلی کوتاه است در بقیه موارد شبیه امواج الکترومغناطیسی دیگر مانند امواج نوری است. طول موج پرتوهای ایکس از همان مرتبه‌ی بزرگی ثابت شبکه‌ی بلورها است و همین خاصیت است که پرتوهای ایکس را برای تحلیل ساختار بلورها مفید کرده است. انرژی یک فوتون پرتو ایکس با رابطه‌ی $E = h\nu$ بیان می‌شود که h ثابت پلانک و ν بسامد پرتو ایکس است (بخش ۱-۱) با جای‌گزینی $h = 6.6 \times 10^{-34} \text{ j.s}$ و

$\lambda = 1\text{ \AA}$ (یادآوری می‌کنیم که $\nu = \frac{c}{\lambda}$)، انرژی فوتون $E = 1.0^4 \text{ ev}$ بدست می‌آید که یک

مقدار نوعی است.

طرحی از وسایل آزمایشگاهی تولید باریکه پرتو ایکس در شکل (۲-۱) رسم شده است. الکترون‌هایی که از کاتد داغ در یک لوله خلاء گسیل می‌شوند توسط یک پتانسیل زیاد که در طول لوله برقرار است شتاب می‌گیرند. الکترون‌ها انرژی جنبشی زیادی کسب می‌کنند و هنگامی که به یک هدف فلزی (همان‌آند که در انتهای لوله قرار گرفته است)، برخورد می‌کنند، پرتوهای ایکس تولید و از هدف گسیل می‌شوند. مقداری از این پرتوهای ایکس که از لوله خارج می‌شوند به منظور مقاصد خاص مورد استفاده قرار می‌گیرند. تابش گسیلی، طیف پیوسته پهنی دارد که با مجموعه‌ای از خطوط برهم نهاده شده است. طیف پیوسته مربوط به الکترون‌های فرودی است که تحت تأثیر بار هسته هدف منحرف می‌شوند؛ در حالی که خطوط گسسته، مربوط به گسیل پرتوهای ایکس توسط اتم‌های هدف است که در اثر برخورد با الکترون‌ها فرودی برانگیخته می‌شوند. فرکانس بیشینه‌ی طیف پیوسته ν با پتانسیل شتاب دهنده با رابطه $ev = h\nu$ مربوط است، چرا که انرژی بیشینه‌ی یک فوتون نمی‌تواند از انرژی جنبشی الکترون‌های فرودی تجاوز کند. رابطه‌ی بین طول موج λ_0 (برحسب آنگستروم) و پتانسیل شتاب‌دهنده V به صورت زیر است.

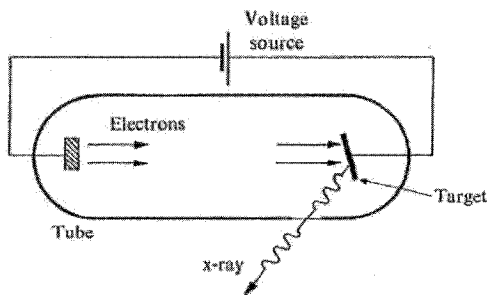
$$\lambda_0 = \frac{12.3}{V} (\text{Å}) \quad (2-1)$$

که V برحسب کیلوولت است.

وقتی باریکه‌ای از پرتوهای ایکس از یک محیط مادی می‌گذرد بطور جزئی جذب می‌شود. شدت باریکه مطابق رابطه زیر کاهش می‌یابد.

$$I = I_0 e^{-\alpha x} \quad (2-2)$$

که I_0 شدت اولیه در سطح محیط مادی و x فاصله‌ای است که پرتو ایکس طی کرده است. پارامتر α ضریب جذب نامیده می‌شود. کاهش شدت که با رابطه‌ی (۲-۲) بیان گردید مربوط به پراکندگی و جذب باریکه پرتوهای ایکس توسط اتم‌های محیط است.



شکل ۲-۱ تولید پرتوهای ایکس

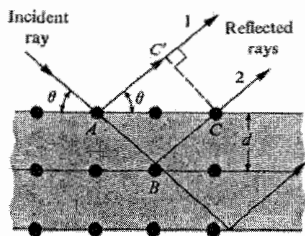
۳-۲ قانون براگ

وقتی یک باریکه ی تکفام پرتوایکس به سطح یک بلور برخورد کند بازتاب می یابد. بازتاب فقط وقتی صورت می گیرد که زاویه برخورد مقدار معینی داشته باشد. این مقدار بستگی به طول موج و ثابت های شبکه ی بلور دارد. بنابراین، سعی می کنیم این بازتاب انتخابی را بر مبنای آثار تداخلی (آن چنان که در اپتیک صورت می گیرد) توجیه نماییم. در شکل (۲-۲ الف) بلور به وسیله مجموعه ای از صفحات موازی متناظر با صفحات اتمی نشان داده شده است. باریکه فرودی به طور جزئی توسط هریک از این صفحات که هم چون آینه عمل می کنند، بازتاب می یابد. پرتوهای بازتابی سپس به طور هم زمان توسط یک آشکار ساز که در فاصله ای از بلور قرار گرفته است، جمع می شوند. پرتوهای بازتابی در آشکار ساز مطابق قوانین اپتیک تداخل می یابند. تداخل در صورتی سازنده است که اختلاف بین مسیرهای هریک از دو پرتو متوالی مضرب درستی از طول موج باشد، یعنی:

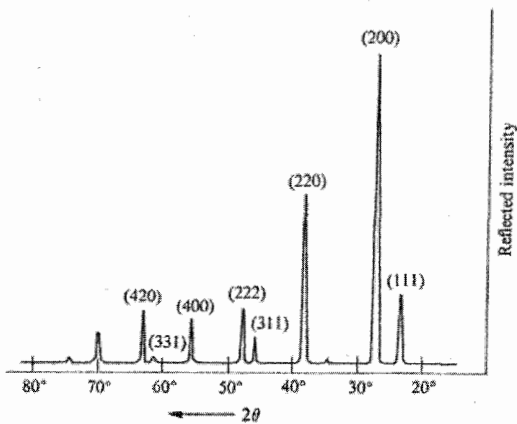
$$\Delta = n\lambda, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2-3)$$

که λ طول موج و n یک عدد صحیح مثبت است. اختلاف راه Δ بین پرتوهای ۱ و ۲ در شکل برابر است با:

$$\Delta = \overline{AB} + \overline{BC} - \overline{AC'} = 2\overline{AB} - \overline{AC'}$$



(a)



(b)

شکل ۲-۲ الف) بازتاب پرتوهای ایکس از یک بلور. پرتوهای بازتابی تقریباً موازی اند زیرا آشکار ساز دور از بلور قرار گرفته است. ب) شدت بازتابی از یک بلور KBr صفحات بازتاب برای پیک های مختلف مشخص شده اند.

در برابر گرفتن BC و AB، فرض کردیم که بازتاب آینه ای^۱ است یعنی زاویه تابش مساوی زاویه بازتاب است. اگر فاصله بین صفحات به d نمایش داده شود با توجه به شکل خواهیم داشت.

$$\overline{AB} = \frac{d}{\sin \theta}, \overline{AC'} = \overline{AC} \cos \theta = \left(\frac{2d}{\tan \theta} \right) \times \cos \theta$$

که θ زاویه بین پرتو تابش و صفحات بازتابی است.^۲ با جای‌گزینی این‌ها در (۲-۳) و انجام بعضی عملیات مثلثاتی به رابطه‌ی زیر برای تداخل سازنده می‌رسیم.

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (۲-۴)$$

این رابطه به نام قانون براگ نام‌گذاری شده است. به ازای مقادیر معین d و λ زوایایی که با رابطه‌ی (۲-۴) بیان می‌گردند، تنها زوایایی هستند که بازتاب تحت آن زاویه صورت می‌پذیرد. باریکه‌ی بازتابی ناپدید می‌گردد، یعنی باریکه‌های تابشی بدون پراکندگی از میان بلور عبور می‌کنند. بازتاب‌های متناظر با $n = 1, 2, 3, \dots$ به ترتیب مربوط به اولین، دومین، سومین و ... مرتبه پراش هستند. شدت باریکه‌ی بازتاب یافته با افزایش مرتبه پراش کاهش می‌یابد.^۳

از آن‌جا که مفهوم تداخل قسمت اساسی این فرایند است، مناسب‌تر است که بازتاب‌هایی را که در این‌جا صورت می‌گیرند به عنوان پراش در نظر بگیریم. برای استفاده از قانون براگ در مطالعه‌ی ساختارهای بلوری به سادگی می‌توان از رابطه‌ی (۲-۴) استفاده کرد. λ را می‌توان مستقلاً تعیین کرد و θ را می‌توان مستقیماً و به‌طور تجربی از پرتوهای بازتاب اندازه گرفت. (همان‌گونه که در شکل نشان داده شده است θ برابر نصف زاویه بین باریکه‌های فرودی و پراشیده است). فاصله‌ی بین صفحات را می‌توان با استفاده از رابطه‌ی (۲-۴) محاسبه کرد. توجه کنید که مطابق رابطه‌ی (۲-۴) پراش در صورتی ممکن است که $\lambda < 2d$ باشد و این شرط نشان می‌دهد چرا مثلاً امواج نوری در اینجا قابل استفاده نیستند. هم‌چنین توجه کنید که اگر بلور بچرخد باریکه‌ی جدیدی از پرتو پراشیده ممکن است ظاهر گردد که متناظر با سری جدیدی از صفحات است. شکل (۲-۲ب) بازتاب براگ از بلور KBr را نشان می‌دهد.

مدلی که ما برای استفاده از قانون براگ به کار بردیم بسیار ساده شده است. در موارد واقعی پراکندگی باریکه‌ی پرتوهای ایکس توسط اتم‌های گسسته ایجاد می‌گردد، بنابراین نمایش

1. Specular
2. glancing angle

صفحات اتمی به صورت مجموعه ای از صفحات بازتابی پیوسته منتفی است. بلکه باریکه‌ای پراشیده را ترجیحاً باید متناظر با تداخل پرتوهای جزئی که توسط تمام اتم‌های شبکه تداخل می‌یابند در نظر گرفت. بدین معنی که شبکه را باید به عنوان یک توری پراش سه بعدی در نظر گرفت. علاوه بر سهم پرتوهای جزئی همان گونه که در اپتیک نیز مطرح است باید به نقش فاز این پرتوها نیز توجه کرد. روشی که در بخش‌های آینده پیگیری خواهد شد ما را به استفاده از قانون براگ رهنمون می‌کند ولی در این راه درک عمیق تری از فرایند پراش کسب می‌نمائیم.

۴-۲ پراکندگی از یک اتم

فرآیند پراش به طور طبیعی به دو مرحله تقسیم یم شود: (۱) پراکندگی توسط تک تک اتم‌ها، (۲) تداخل متقابل بین پرتوهای پراکنده. از آن جا که این دو مرحله متمایز از یکدیگرند برای سادگی آنها را مستقلاً بررسی می‌کنیم.

چرا یک اتم باریکه پرتوهای ایکس را پراکنده می‌کند؟ هر اتم را الکترون‌هایی احاطه می‌کنند که تحت تاثیر میدان الکتریکی مربوط به باریکه شتاب می‌گیرند. هر بار شتاب دار (از جمله الکترون‌های اتمی) انرژی تابش می‌کند (واقعیتی که از تئوری الکترومغناطیسی می‌دانیم) در این پدیده الکترون‌ها از باریکه‌ی پرتو ایکس انرژی جذب می‌کنند و آن را در تمام جهات منتشر می‌کنند. ولی الکترون‌ها یک ابر الکترونی در اطراف اتم تشکیل می‌دهند و هنگامی که پراکندگی از یک اتم را به عنوان یک مجموعه بررسی می‌کنیم باید اختلاف فاز بین پرتوهای پراکنده شده از نواحی مختلف ابر الکترونی را نیز به حساب بیاوریم. این کار را به صورت زیر انجام می‌دهیم: یک الکترون منفرد را مطابق شکل (۳-۲) در نظر می‌گیریم یک میدان موج تخت که با رابطه‌ی زیر داده می‌شود:

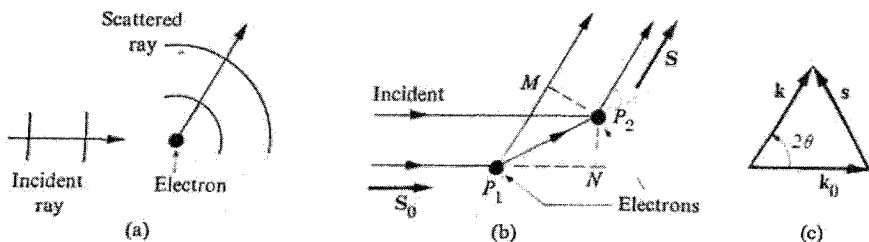
$$u = Ae^{i(k_e \cdot r - \omega t)} \quad (۲-۵)$$

به الکترون برخورد می‌کند، A دامنه موج، k_e بردار موج، $(k_e = \frac{2\pi}{\lambda})$ و ω فرکانس زاویه‌ای است.

میدان پرتوهای پراکنده یک موج کروی است که با عبارت زیر بیان می‌شود:

$$u' = f_e \frac{A}{D} e^{i(kD - \omega t)} \quad (۲-۶)$$

f_e پارامتری است که طول پراکندگی^۱ الکترون نامیده می‌شود و D فاصله شعاعی الکترون تا نقطه‌ای است که میدان در آن نقطه اندازه‌گیری می‌شود. کمیت k عدد موج موج پراکنده است و همان بزرگی k_0 را دارد، توجه کنید که دامنه موج پراکنده با فاصله به صورت $\frac{1}{D}$ کاهش می‌یابد خاصیتی که در همه‌ی امواج کروی مشترک است.



شکل ۲-۳ پراکندگی از (الف) یک الکترون منفرد، (ب) دو الکترون، (ج) بردار پراکندگی s توجه کنید که بردارهای k_0 ، k و s یک مثلث متساوی الاضلاع را تشکیل می‌دهند.

حال فرض کنید که موج تابشی مطابق شکل (۲-۳) بر دو الکترون فرود می‌آید. در این حالت هر دو الکترون امواج کروی گسیل می‌کنند و در نقطه‌ای که در فاصله‌ای از الکترون‌ها قرار دارد میدان موج پراکنده به صورت جمع دو میدان جزئی مشاهده می‌شود که اختلاف فاز آن‌ها نیز به حساب آمده است. بنابراین داریم:

$$u' = f_e \frac{A}{D} [e^{ikD} + e^{i(kD+\delta)}] \quad (2-7)$$

به طوری که δ تاخیر فاز موج الکترون ۱ نسبت به الکترون ۲ است^۲ (فاکتور زمان برای اختصار حذف شده است ولی وجود دارد). با مراجعه به شکل می‌توان نوشت:

$$\delta = (\overline{P_1M} - \overline{P_1N}) \frac{2\pi}{\lambda} = (r \cdot \hat{S} - r \cdot \hat{S}_0) \kappa$$

که r بردار شعاع الکترون ۲ نسبت به الکترون ۱ است و \hat{S}_0 و \hat{S} به ترتیب بردارهای یک‌جهت تابش‌های فرودی و پراکنده هستند. عبارت مربوط به δ را می‌توان به صورت زیر مرتب کرد:

1. Scattering length

۲- فرض می‌شود فاصله به اندازه کافی بزرگ باشد در غیر این صورت مخرج در رابطه‌ی ۲-۷ مشابه حالت دو الکترون نخواهد شد این شرط محاسبه را ساده می‌کند و به همین دلیل است که آشکار ساز معمول دور از بلور قرار می‌گیرد.

$$\delta = s.r \quad (2-8)$$

که بردار پراکندگی به صورت زیر تعریف می گردد:

$$s = k(\hat{S} - \hat{S}_0) = k - k_0 \quad (2-9 \text{ الف})$$

هم چنان که در شکل (۲-۳ ج) دیده می شود بزرگی بردار پراکندگی برابر است با:

$$s = 2k \sin \theta \quad (2-9 \text{ ب})$$

که θ نصف زاویه ی پراکندگی است. از جایگزین کردن δ از رابطه (۲-۸) در رابطه (۲-۷) بدست می آید:

$$u' = f_e \frac{A}{D} e^{ikD} [1 + e^{is.r}] \quad (2-10)$$

در بدست آوردن این رابطه، مبداء مختصات را بر الکترون ۱ منطبق گرفته ایم. ولی راحت تر آن است که مبداء را در یک نقطه اختیاری بگیریم. در این صورت دو الکترون وضعیت مشابهی خواهند داشت. عبارت مربوط به میدان پراکنده شده چنین می شود:

$$u' = f_e \frac{A}{D} e^{ikD} [e^{is.r_1} + e^{is.r_2}] \quad (2-11)$$

که r_1 و r_2 بردارهای مکان دو الکترون نسبت به مبداء جدید هستند. معادله ی (۲-۱۰) حالت خاصی از معادله (۲-۱۱) است و هم چنان که اشاره شد مبداء روی الکترون ۱ قرار گرفته شده است یعنی $r_1 = 0$ حال بلافاصله می توان رابطه (۲-۱۱) را به هر تعداد الکترون پراکنده کننده تعمیم داد که نتیجه چنین می شود:

$$u' = f_e \frac{A}{D} e^{ikD} \sum_1 e^{is.r_i} \quad (2-12)$$

r_i موقعیت الکترون i ام است و جمع روی تمام الکترون ها منظور شده است. حال طول پراکندگی کل سیستم با مقایسه با حالت تک الکترون، معادله (۲-۶) به صورت جمع زیر بیان می گردد:

$$f = f_e \sum_1 e^{is.r_i} \quad (2-13)$$

که در آن طول پراکندگی کل با در نظر گرفتن عبارت مربوط به فازها، برابر است با مجموع طول های تک تک الکترون ها. شدت باریکه پراکنده I ، متناسب با مربع بزرگی های میدان است. بنابراین:

$$I \sim |f|^2 = f_e^2 \left| \sum_1 e^{is.r_i} \right|^2 \quad (2-14)$$

روابط (۲-۱۳) و (۲-۱۴) معادلات اساسی در بررسی فرایندهای پراکنده‌گی و پراش اند و ما از آن‌ها در صفحات آینده به دفعات استفاده خواهیم کرد.

در این جا به جنبه‌ی مهمی از فرآیند پراکنده‌گی که خاصیت همدوستی است اشاره می‌کنیم. این خاصیت بیان می‌دارد که پراکنده‌کننده‌ها در رابطه فازی معینی نسبت به یک دیگر باقی می‌مانند و در نتیجه می‌توانیم راجع به تداخل بین پرتوهای جزئی صحبت کنیم. برعکس اگر پراکنده‌کننده‌ها به طور کاتوره‌ای یا غیر همدوستی نوسان کنند، پرتوهای جزئی تداخل نمی‌کنند و شدت باریکه در آشکار ساز صرفاً مجموع شدت‌های جزئی است یعنی:

$$I \sim Nf_e^2 \quad (2-15)$$

که N تعداد پراکنده‌کننده‌ها است. به اختلاف بارز بین این نتیجه و پراکنده‌گی همدوس (رابطه‌ی (۲-۱۴) توجه کنید. طول پراکنده‌گی الکترون کمیت معلومی است که در کتاب‌های الکترومغناطیسی یافت می‌شود مقدار آن برابر است با:

$$f_e = \left[\frac{1 + \cos^2 \theta}{2} \right]^{1/2} r_e$$

که r_e شعاع کلاسیک الکترون نامیده می‌شود و مقدار آن $2.8 \times 10^{-15} \text{ m}$ است.

حال می‌توان این نتیجه را برای یک الکترون منفرد آزاد بکار بست. وقتی رابطه‌ی (۲-۱۳) را به کار می‌بریم در جایی که جمع روی تمام الکترون‌ها بسته می‌شود باید توجه کنیم که الکترون‌ها، موقعیت‌های مکانی گسسته‌ای ندارند، بلکه در یک ابر الکترونی به طور پیوسته در تمام حجم اتم پراکنده شده‌اند. بنابراین لازم است که جمع گسسته (سیکما) به انتگرال مربوطه تبدیل گردد که به رابطه‌ی زیر منجر می‌شود:

$$f_e \sum e^{is \cdot r_i} \rightarrow f_e \int \rho(r) e^{is \cdot r} d^3r$$

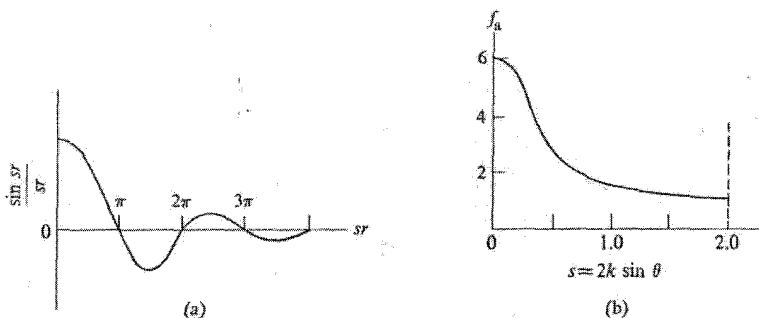
$\rho(r)$ چگالی ابر الکترونی (برحسب الکترون بر واحد حجم) و انتگرال روی تمام حجم اتمی گرفته شده است ضریب پراکنده‌گی اتمی f_a به صورت انتگرالی که در بالا ظاهر شده است تعریف می‌شود. یعنی:

$$f_a = \int d^3r \rho(r) e^{is \cdot r} \quad (2-16)$$

(توجه کنید که f_a یک کمیت بدون بعد است.) وقتی که چگالی $\rho(r)$ اطراف هسته تقارن کروی داشته باشد. این انتگرال ساده می‌شود، زیرا به سادگی می‌توان روی قسمت زاویه‌ای المان حجم انتگرال گرفت (مسائل آخر این فصل را ببینید) نتیجه عبارت چنین خواهد شد:

$$f_a = \int^R 4\pi r^2 \rho(r) \frac{\sin(sr)}{sr} dr \quad (2-17)$$

که R شعاع اتم است (هسته در مبداء قرار گرفته است). چنان چه در رابطه ی (۲-۱۷) ملاحظه می شود ضریب پراکندگی به زاویه پراکندگی بستگی دارد (یادآوری می شود $s = 2k \sin \theta$)، که این از وجود فاکتور نوسان $\frac{\sin(sr)}{sr}$ در انتگرالده نتیجه می شود. طول موج نوسان نسبت معکوس با s در شکل (۲-۴) (الف) دارد و هرچه نوسان سریع تر یعنی طول موج کوتاه تر باشد به دلیل تداخل بین پرتوهای جزئی پراکنده شده توسط نواحی مختلف ابر بار، f_a کوچک تر می شود. با یادآوری $s = 2k \sin \theta$ از رابطه ی (۲-۹) ملاحظه می شود که چون زاویه پراکندگی 2θ افزایش یابد s نیز افزایش می یابد و این باعث کاهش ضریب پراکندگی f_a می شود.



شکل ۲-۴ (الف) فاکتور نوسان $\frac{\sin(sr)}{sr}$. (ب) ضریب پراکندگی اتمی برای یک اتم کربن به صورت تابعی از زاویه پراکندگی

برای ارزیابی بیشتر f_a لازم است چگالی الکترونی $\rho(r)$ را برای اتم بدانیم. برای بدست آوردن این اطلاعات باید به کتاب های فیزیک اتمی مراجعه نماییم. شکل (۲-۴) (ب) ضریب پراکندگی را برای کربن نشان می دهد.

یک جهت بخصوص وجود دارد که f_a را می توان یک باره ارزیابی کرد و آن جهت به سمت جلو است. در این حالت $\theta = 0$ و $s=0$ و بنابراین فاکتور نوسان $\frac{\sin(sr)}{sr}$ به سمت یک میل می کند (یادآوری می شود که $\lim_{s \rightarrow 0} \frac{\sin s}{s} = 1$). پس معادله ی (۲-۱۷) چنین می شود:

$$f_a = \int^R 4\pi r^2 \rho(r) dr$$

و به سادگی انتگرال مساوی تعداد کل الکترون ها در اتم یعنی عدد اتمی Z می شود. بنابراین می توان نوشت:

$$f_a(\theta=0) = Z \quad (2-18)$$

برای کربن $f_a(\theta=0) = 6$ بدست می آید که با شکل (۴-۲) سازگار است. توجه فیزیکی معادله ی (۲-۱۸) کاملاً واضح است. وقتی به طرف جلو بنگریم تمام پرتوهای جزئی هم فاز هستند و بنابراین آن ها به طور سازنده تداخل می کنند.

۲-۵ پراکندگی از یک بلور

هدف اولیه ما در این فصل بررسی پراکندگی از یک بلور است و حالا می خواهیم معادله ی (۱۳-۲) را برای این وضعیت بکار ببریم. با مقایسه حالت اتمی ضریب پراکندگی بلور f_{cr} را چنین تعریف می کنیم:

$$f_{cr} = \sum_1 e^{is \cdot r_i} \quad (2-19)$$

که در این جا عمل جمع آوری روی تمام الکترون های بلور گرفته شده است. برای استفاده از ضریب پراکندگی اتمی که در بخش قبل بحث شد، باید جمع (سیکمای) ۱۹-۲ را به دو قسمت تقسیم کرد. یکی جمع روی تمام الکترون های یک اتم منفرد و سپس جمع روی تمام اتم های شبکه. بدین ترتیب مقدار جمع دو گانه با جمع روی تمام الکترون های بلور برابر خواهد شد. از آن جا که اولین جمع فوق به ضریب پراکندگی اتمی منجر می گردد معادله ی (۱۹-۲) را می توان به صورت زیر نوشت:

$$f_{cr} = \sum_1 f_{a1} e^{is \cdot R_1} \quad (2-20)$$

که R_f موقعیت اتم I ام و f_{cr} ضریب اتمی مربوط به آن است. حال ساده تر است که رابطه ی (۲۰-۲) را به عنوان حاصل ضرب دو فاکتور، که یکی شامل جمع روی یاخته واحد و دیگری شامل تمام یاخته های واحد در بلور است، بازنویسی نماییم. بنابراین ضریب ساختار هندسی F را به صورت زیر تعریف می کنیم:

$$F = \sum_j f_{aj} e^{is \cdot \delta_j} \quad (2-21)$$

که عمل جمع روی تمام اتم های یاخته واحد انجام گرفته و δ_j موقعیت نسبی j امین اتم است. به طور مشابه ضرایب ساختار شبکه را به صورت زیر تعریف می کنیم:

$$S = \sum_l e^{is.R_l^{(c)}} \quad (2-22)$$

که جمع روی تمام یاخته های واحد بلور بسته شده است و $R_l^{(c)}$ موقعیت یاخته l ام است برای این که f_{cr} را برحسب S, F بنویسیم به رابطه ی (۲-۲۰) بر می گردیم و می نویسیم $R_l = R_l^{(c)} + \delta_j$ و سپس از روابط (۲-۲۱) و (۲-۲۲) استفاده می کنیم نتیجه چنین خواهد شد:

$$f_{cr} = F \cdot S \quad (2-23)$$

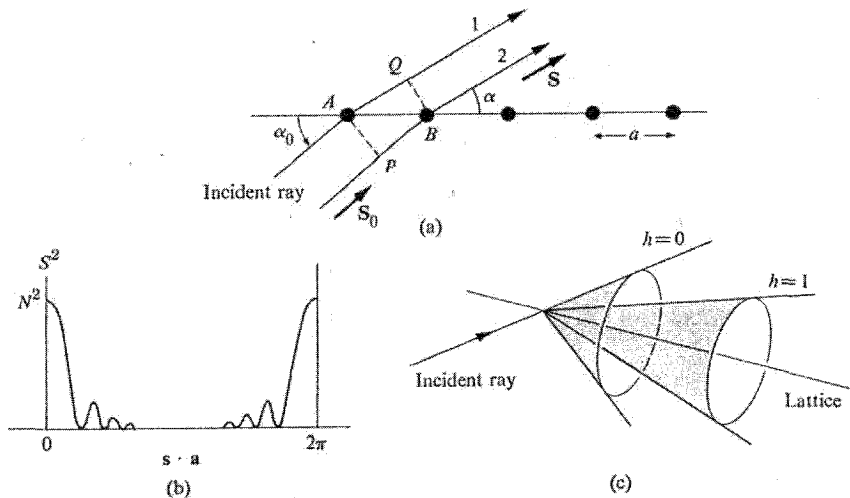
توجه کنید که ضریب شبکه ی S تنها به سیستم شبکه ای مربوطه بستگی دارد در حالی که F علاوه بر محتویات یاخته واحد به شکل هندسی یاخته واحد نیز بستگی دارد. در حالت خاص یک شبکه ی ساده که یاخته واحد شامل یک اتم منفرد است ضریب F مساوی f_a می شود. نوشتن f_{cr} به صورت حاصل ضرب آن چنان که در رابطه ی (۲-۲۳) نشان داده شده است چند حسن دارد: S را که شامل خواص ساختاری خالص شبکه است از F که شامل خواص اتمی است جدا کرده ایم. ساده سازی بیش تری نیز ممکن است زیرا دو ضریب را حالا می توان مستقلاً بررسی کرد. از آن جا که ضریب F شامل جمع روی تنها چند عامل اتمی است آن را می توان برحسب عوامل اتمی ارزیابی کرد. بنابراین فعلاً خود را درگیر این موضوع نمی کنیم بلکه تاکید و بررسی مان بر ارزیابی ضریب شبکه خواهد بود.

ضریب ساختار شبکه

ضریب ساختار شبکه S که در رابطه ی (۲-۲۲) تعریف شد، اهمیت بسیاری در بحث پراش پرتوهای ایکس دارد. ابتدا بستگی آن را به بردار پراکندگی S بررسی می کنیم و نشان می دهیم مقادیر S برای S هایی که صفر نمی شوند تشکیل مجموعه ی گسسته ای را می دهند که با قانون براگ ارتباط دارد.

ابتدا از حالت ساده ای آغاز می کنیم که یک باریکه ی پرتو ایکس هم چنان که در شکل (۲-۵) الف) نشان داده شده است، از یک شبکه ی تک اتمی یک بعدی پراکنده می شود. اگر بردار پایه شبکه را به a نمایش دهیم ضریب ساختار به صورت زیر در می آید:

$$S = \sum_{l=1}^N e^{is.la} \quad (2-24)$$



شکل ۵-۲ (الف) پراکندگی از یک شبکه یک بعدی. (ب) بیشینه ی پراش. (ج) مخروط پراش برای بیشینه ی مرتبه اول ($n=0$) و مرتبه دوم ($n=1$)

که $R_1^{(c)}$ را با $1/a$ جایگزین کرده ایم و N تعداد کل اتم ها است. سری (۲-۲۴) یک تصاعد هندسی است که قدر نسبت آن $e^{is \cdot a}$ است و مقدار آن به سادگی قابل محاسبه است نتیجه چنین است:

$$S = \frac{\sin[(1/2)Ns \cdot a]}{\sin[(1/2)s \cdot a]} \quad (2-25)$$

به لحاظ فیزیکی اندازه گیری S^2 از S معنی دار تر است زیرا این کمیت در محاسبات مربوط به شدت مستقیماً وارد می شود.

$$S^2 = \frac{\sin^2[(1/2)Ns \cdot a]}{\sin^2[(1/2)s \cdot a]} \quad (2-26)$$

حال می خواهیم ببینیم چگونه این تابع به بردار پراکندگی S بستگی دارد. همان گونه از رابطه (۲-۲۶) دیده می شود که S^2 نسبت دو تابع نوسانی با پریود یکسان $s \cdot a = 2\pi$ است، ولی به خاطر این که در مورد هر ذره ای N خیلی بزرگ تر از واحد است، صورت خیلی سریع تر از مخرج نوسان می کند. به هر صورت برای مقدار خاص $s \cdot a = 0$ صورت و مخرج هر دو به صورت هم زمان صفر می شوند ولی مقدار حدی S مساوی N است که مقدار خیلی بزرگی است. به طور مشابه همان طور که از تناوبی بودن S^2 بر می آید مقدار حدی S^2 مساوی N^2 است. تابع S^2 به

صورت تابعی از $S.a$ برای بازه $0 < S.a < 2\pi$ در شکل (۵-۲) رسم شده است. این تابع در بیشینه ی اولیه $S.a = 0$ و $S.a = 2\pi$ دارد که توسط تعداد زیادی بیشینه های میانی از یک دیگر جدا شده اند که از نوسانات سریع صورت در رابطه ی (۲۶-۲) نتیجه می شود.

محاسبه نشان می دهد که وقتی تعداد یاخته ها خیلی بزرگ باشد (هم چنان که در حالت واقعی چنین است)، بیشینه های میانی در مقایسه با بیشینه های اولیه قابل چشم پوشی می باشند (بخش مسائل را ملاحظه نمایید) مثلاً ارتفاع بلندترین بیشینه های میانی فقط 0.04 ارتفاع بیشینه اولیه است. بنابراین با تقریب خوبی می توان از تمام بیشینه های میانی چشم پوشی کرد و تابع S^2 را تنها در نزدیکی های بیشینه ی اولیه غیر صفر گرفت. علاوه بر آن می توان نشان داد که عرض هر بیشینه ی اولیه با افزایش N به سرعت کاهش می یابد و این عرض در حالت حدی که $N \rightarrow \infty$ صفر می شود. بنابراین S^2 تنها در مقادیری که دقیقاً توسط رابطه ... و 2π و $S.a = 0$ داده می شود غیر صفر است. ولی به خاطر اینکه S^2 تناوبی و دوره تناوب آن 2π است؛ به ازای، تمام مقادیر ممکن مقدار آن متناهی است.

$$S.a = 2\pi h \quad \text{هر عدد صحیح } h \quad (27-2)$$

در این مقادیر S^2 مساوی N^2 و بنابراین $S=N$ می شود.

معادله ی (۲۶-۲) تمام جهت هایی را که در آن ها S یک مقدار غیر صفر دارد و بنابراین جهت هایی که در آن پراش صورت می گیرد را بیان می کند. توجه فیزیکی معادله سراسر است. با یادآوری تعریف S از معادله (۹-۲) و مراجعه به شکل (۵-۲) بدست می آید؛

$$s.a = \frac{2\pi}{\lambda} (S - S_0).a = \frac{2\pi}{\lambda} (\overline{AQ} - \overline{PB})$$

که بیان گراختلاف فاز بین دو پرتو پراکنده متوالی است. بنابراین معادله ی (۲۷-۲) شرط تداخل سازنده است بدین معنی که ضریب پراکندگی شبکه تنها برای این جهت به کار می رود و این نکته قابل انتظار است. در واقع برای یک h معلوم شرط (۲۷-۲) تنها یک جهت خاص را بیان نمی کند. بلکه بیان گر تعداد بی شماری جهت است که سطح جانی مخروطی را که محور آن در امتداد خط شبکه قرار گرفته است تشکیل می دهند. برای روشن شدن مطلب رابطه ی (۲۷-۲) را به صورت زیر می نویسیم:

$$\frac{2\pi a}{\lambda} (\cos \alpha - \cos \alpha_0) = 2\pi h \quad (28-2)$$

که α_0 زاویه بین باریکه فرودی و امتداد خط شبکه و α زاویه متناظر برای پرتو پراشیده است. بنابراین برای یک α_0 و h معلوم، باریکه‌ی پرتوها در امتداد کلیه‌ی جهاتی پراشیده می‌شوند که α معادله‌ی (۲-۲۸) را ارضا کند. این جهت‌ها مخروطی را تشکیل می‌دهند که محور آن در امتداد شبکه است و نصف زاویه‌ی آن مساوی α می‌باشد. حالت $h=0$ حالت خاصی است که مخروط مربوط به آن شامل جهت پراکندگی رو به جلو است. مخروط‌های پراش متناظر با مقادیر مختلف h در شکل (۲-۵) نشان داده شده‌اند.

در بررسی ضریب ساختار شبکه تاکنون خود را محدود به حالت شبکه‌ی یک بعدی کرده‌ایم. حال بحث را به حالت واقعی که شبکه سه بعدی است تعمیم می‌دهیم. با مراجعه به رابطه (۲-۲۲) و جای‌گزینی بردار شبکه خواهیم داشت:

$$R^{(c)} = l_1 a + l_2 b + l_3 c$$

که a, b, c بردارهای پایه هستند. ضریب ساختار را می‌توان بدست آورد؛

$$S = \sum_{l_1, l_2, l_3} e^{is(l_1 a + l_2 b + l_3 c)} \quad (2-29)$$

که جمع سه گانه روی تمام یاخته‌های واحد شبکه انجام شده است. این جمع سه گانه را می‌توان سه جمع جزئی تجزیه کنیم.

$$S = \left(\sum_{l_1} e^{is.l_1 a} \right) \left(\sum_{l_2} e^{is.l_2 b} \right) \left(\sum_{l_3} e^{is.l_3 c} \right) \quad (2-30)$$

در این حالت ضریب S به صورت حاصل ضرب ضرایب ساختار یک بعدی نوشته شده است. بنابراین می‌توان از نتایجی که قبلاً بدست آمده است استفاده کرد. شرط تداخل سازنده این است که هر کدام از سه ضریب باید انفراداً متناهی باشند. بدین معنی که باید سه معادله‌ی زیر را به طور هم زمان ارضا کند.

$$s.a = h2\pi, s.b = k2\pi, s.c = l2\pi \quad (2-31)$$

که h, k, l و مجموعه‌ای از اعداد صحیح هستند. چنان‌چه این روابط را برحسب زاویه‌ای که S با بردارهای پایه می‌سازد، بنویسیم، با مقایسه با روابط (۲-۲۷) و (۲-۲۸) معادلات فوق به ترتیب به صورت زیر در می‌آیند:

$$a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) = h\lambda$$

$$b(\cos \beta - \cos \beta_0) = k\lambda \quad (2-32)$$

$$c(\cos \gamma - \cos \gamma_0) = l\lambda$$

α ، β و γ زوایایی هستند که باریکه ی فرودی با بردارهای واحد می سازند، در حالی که α ، β و γ زوایایی هستند که باریکه ی پراکنده با بردارهای واحد تشکیل می دهند. معادلات (۲-۳۱) و (۲-۳۲) به نام معادلات لاهو، فیزیک دانی که برای اولین بار آن ها را استخراج کرد نام گذاری شده اند.

حال سوال این است: چگونه می توان اندازه ی بردار پراکندگی S که شرط پراش (۲-۳۱) را ارضا کند تعیین کرد. در بخش بعد نشان خواهیم داد که این مقادیر مجموعه ای گسسته متناظر با قانون براگ را تشکیل می دهند.

۲-۶ شبکه وارون و پراش پرتوهای ایکس

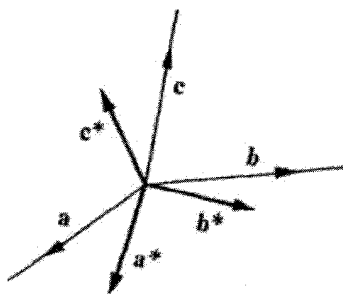
از شبکه ای با بردارهای پایه a ، b و c شروع می کنیم، مجموعه ای از بردارهای پایه a^* ، b^* و c^* را برطبق رابطه ی زیر تعریف می کنیم:

$$a^* = \frac{2\pi}{\Omega_c}(b \times c), \quad b^* = \frac{2\pi}{\Omega_c}(c \times a), \quad c^* = \frac{2\pi}{\Omega_c}(a \times b), \quad (2-33)$$

که $\Omega_c = a \cdot (b \times c)$ حجم یاخته واحد است. حال می توانیم از a^* ، b^* و c^* به عنوان پایه برای شبکه ی جدیدی استفاده کنیم که بردارهای آن با رابطه ی زیر بیان می گردد:

$$G_n = n_1 a^* + n_2 b^* + n_3 c^* \quad (2-34)$$

که n_1 ، n_2 و n_3 مجموعه ای از اعداد صحیح هستند، شبکه ای که بدین ترتیب تعریف می شود شبکه وارون و a^* ، b^* و c^* بردارهای پایه وارون^۱ نامیده می شوند.



شکل ۲-۶ بردارهای شبکه وارون

۱- برای این که ساختن شبکه وارون معتبر باشد، باید بردارهای a ، b و c تشکیل یک پایه ی بسیط بدهند؛ به بیان دیگر یاخته ی شبکه مستقیم باید بسیط باشد (بخش ۳-۱)

رابطه‌ی بین بردارهای پایه‌ی وارون a^* ، b^* و c^* با بردارهای پایه‌ی مستقیم a ، b و c در شکل (۲-۶) نشان داده شده است. مثلاً بردار a^* عمود بر صفحه‌ی b و c می‌گذرد و به همین قیاس در مورد بردارهای b^* و c^* . هم چنین اگر بردارهای پایه‌ی مستقیم a ، b و c تشکیل یک مجموعه متعامد را دهند a^* ، b^* و c^* نیز مجموعه‌ی متعامد دیگری را تشکیل می‌دهند به طوری که $a^* \cdot a = 1$ ، $b^* \cdot b = 1$ و $c^* \cdot c = 1$ در حالت کلی هیچ کدام از این مجموعه‌ها متعامد نیستند.

روابط ریاضی زیر در بررسی شبکه وارون مفید هستند:

$$\begin{aligned} a^* \cdot a &= 2\pi, & a^* \cdot b &= a^* \cdot c = 0 \\ b^* \cdot b &= 2\pi, & b^* \cdot a &= b^* \cdot c = 0 \\ c^* \cdot c &= 2\pi, & a^* \cdot a &= c^* \cdot b = 0 \end{aligned} \quad (2-35)$$

معادلات ردیف اول را می‌توان به صورت زیر تحقیق کرد. برای اثبات معادلات اول $a^* \cdot a$ را از (۲-۳۳) جای‌گزین می‌کنیم خواهیم داشت:

$$a^* \cdot a = \frac{2\pi}{\Omega_c} (b \times c) \cdot a$$

ولی $(b \times c) \cdot a$ نیز مساوی حجم یاخته واحد Ω_c است و بنابراین $a^* \cdot a = 2\pi$ دو معادله‌ی دوم در ردیف اول بیان‌گر واقعیتی است که قبلاً ذکر شد. یعنی a^* بر صفحه‌ی b و c می‌گذرد عمود است. بقیه معادلات (۲-۳۵) را می‌توان به طریق مشابه اثبات کرد.

مثال‌هایی از شبکه وارون در شکل (۲-۷) نشان داده شده است. شکل (۲-۷الف) یک شبکه‌ی مستقیم یک بعدی و شبکه‌ی وارون آن را نشان می‌دهد. توجه کنید که در این صورت a^*

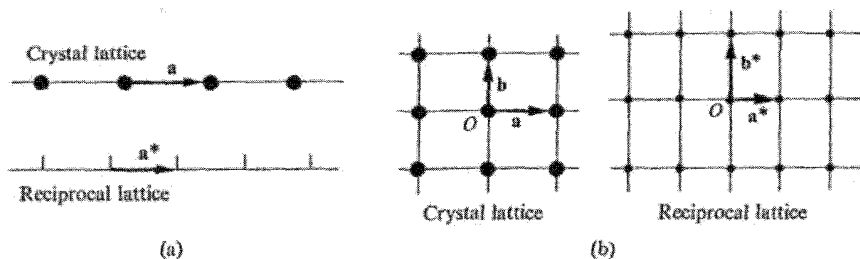
موازی با a و $a^* = \frac{2\pi}{a}$. شکل (۲-۷ب) یک شبکه‌ی مستطیلی و شبکه‌ی وارون آن را نشان می‌دهد^۱. مثال‌های سه بعدی پیچیده‌تر هستند ولی روش بدست آوردن آن‌ها سرراست است و آن بکار بردن رابطه‌ی (۲-۳۳) برای یافتن a^* ، b^* و c^* و سپس استفاده از رابطه (۲-۳۴) برای پیدا کردن تمام نقاط شبکه می‌باشد. مثلاً معلوم می‌شود که شبکه وارون یک شبکه‌ی مکعبی ساده

به ضلع a یک شبکه‌ی مکعبی ساده است که ضلع مکعب آن مساوی $\frac{2\pi}{a}$ است شکل (۲-۸).

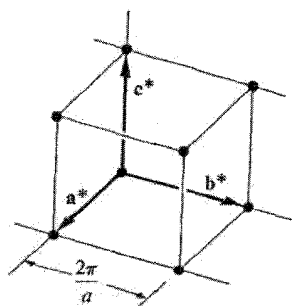
۱- معادلات (۲-۳۳) که تعریف‌کننده شبکه وارون هستند در یک یا دو بعد بکار نمی‌روند زیرا بردار حاصل ضرب برداری تنها در حالت سه بعدی تعریف می‌شود. بنابراین در بررسی شبکه‌های یک یا دو بعدی بجای معادلات (۲-۳۳) از روابط (۲-۳۵) برای تعریف شبکه وارون استفاده می‌کنیم.

به طور مشابه می توان ثابت کرد که شبکه ی وارون یک bcc یک شبکه ی fcc است و بالعکس (بخش مسائل را ملاحظه نمایید). می توان این بحث را به سیستم های دیگر بلور تعمیم داد. اگر در نظر بگیریم که شبکه وارون شبکه ای است در فضای وارون و دارای همان تقارن دورانی است که شبکه مستقیم آن داراست، خواهیم دید که شبکه ی وارون همیشه در همان سیستم بلوری قرار می گیرد که شبکه ی مستقیم آن است. (جدول ۱-۱ را ملاحظه نمایید).

بنابراین شبکه های وارون شبکه های تک میلی، سه میلی و شش گوشه نیز به ترتیب تک میلی، سه میلی و شش گوشه هستند (توجه کنید که در یک سیستم بلوری لازم نیست دو شبکه ساختار برآهه ی یکسانی داشته باشند، مثال بالا مورد bcc و fcc را ملاحظه نمایید).



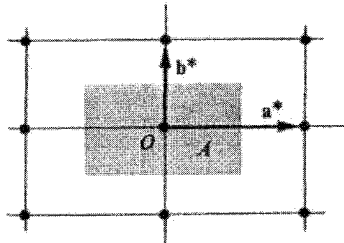
شکل (۷-۲ الف) شبکه ی وارون برای یک شبکه ی بلوری یک بعدی. (ب) شبکه ی وارون برای یک شبکه ی دو بعدی



شکل ۸-۲ جزئی از شبکه ی وارون برای یک شبکه

یاخته واحد شبکه ی وارون به صورت ویژه ای انتخاب شده است. برای شبکه ی مستطیلی شکل (۹-۲)، نقطه ی C را مبدا می گیریم و بردارهای شبکه ی مختلفی را که مبدا را به نقاط شبکه ی همسایه متصل می کند رسم می کنیم. سپس عمود منصف این بردارها را رسم می کنیم.

کوچک‌ترین سطحی که به این خطوط محصور است (مستطیل A در شکل ۹-۲)، یاخته‌ی واحدی است که در جستجوی آنیم. این سطح اولین منطقه‌ی برلیون نامیده می‌شود. این منطقه‌ی برلیون (BZ) یک یاخته واحد قابل قبول است چرا که تمام شرایط لازم را ارضاء می‌کند. بر خلاف شبکه‌ی مستقیم که نقاط شبکه معمولاً در گوشه‌های یاخته قرار دارند، در منطقه‌ی برلیون نقاط شبکه دقیقاً در مرکز یاخته قرار می‌گیرند. حال اگر اولین BZ تحت تمام بردارهای وارون G_n انتقال یابد، تمام فضای شبکه را می‌پوشاند. در واقع باید چنین باشد زیرا که BZ یک یاخته‌ی واحد واقعی است.



شکل ۹-۲ اولین منطقه برلیون برای یک شبکه مستطیلی

منطقه‌ی برلیون برای یک شبکه‌ی سه بعدی را می‌توان به طریق مشابهی ساخت ولی باید توجه داشت که در این حالت صفحات عمود منصف بردارهای شبکه را باید رسم کرد و حالا اولین BZ کوچک‌ترین حجم محصور به این صفحات است. در ساده‌ترین حالت در شبکه مکعبی ساده، منطقه‌ی برلیون مکعبی است به ضلع $\frac{2\pi}{a}$ که مرکز آن در مبدا قرار گرفته است. شکل BZ برای شبکه‌های مکعبی دیگر پیچیده‌تر است و ما بحث راجع به آن‌ها و هم چنین شبکه‌های دیگر را به بخش بعد واگذار می‌نماییم.

می‌توان از مرتبه‌های بالاتر مناطق برلیون نیز استفاده کرد. این مناطق متناظر با بردارهایی هستند که مبدا را به نقاط دورتر شبکه‌ی وارون وصل می‌کنند. ولی چون نیازی به آن نداریم در این جا راجع به آن بحث نمی‌کنیم. هم‌چنان که بعداً خواهیم دید مفهوم منطقه‌ی برلیون در ارتباط با ارتعاشات شبکه (بخش ۳) و حالت‌های الکترون در یک بلور (بخش ۵) مفهوم بسیار مفیدی است. پس از تعریف شبکه‌ی وارون و بحث پیرامون خواص آن، حال سودمندی آن را نشان می‌دهیم. یک کاربرد مهم آن در ارزیابی مجموع‌های شبکه است که با عبارت ریاضی زیر بیان می‌گردد:

$$\sum_{l=1}^N e^{iA.R_l} = N\delta_{A,G_n} \quad (2-36)$$

که در اینجا A یک بردار اختیاری است. عمل جمع روی بردارهای شبکه ی مستقیم انجام می شود و N تعداد کل یاخته های شبکه مستقیم است. علامت δ در رابطه ی (۲-۳۶) بدین معنی است که هنگامی که بردار A مساوی با بردار شبکه وارون G_n نیست، مجموع شبکه در طرف چپ مساوی صفر می شود. ولی هنگامی که بردار A مساوی G_n شود مجموع شبکه مساوی N می شود، برای تحقیق رابطه ی (۲-۳۶) ابتدا حالت $A=G_n$ را بررسی می کنیم. برای ارزیابی مقدار نمای $A.R_l$ در طرف چپ رابطه ی (۲-۳۶) با جایگزین کردن $A = G_n = n_1 a^* + n_2 b^* + n_3 c^*$ نتیجه می شود که

$$A.R_l = G_n . R_l = (n_1 a^* + n_2 b^* + n_3 c^*) . (l_1 a + l_2 b + l_3 c) \quad (2-37)$$

$$= (n_1 l_1 + n_2 l_2 + n_3 l_3) 2\pi$$

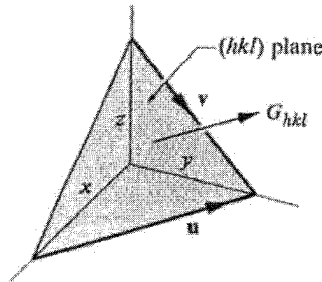
که در محاسبه حاصل ضرب نرده ای از روابط (۲-۳۵) مثلاً $a^* . a = 2\pi$ و $a^* . b = 0$ استفاده کرده ایم. هر جمله در جمع (۲-۳۶) به شکل $e^{im2\pi}$ در می آید که m یک عدد صحیح است و در نتیجه $e^{im2\pi}$ مساوی واحد است. بنابراین همان طور که رابطه ی (۲-۳۶) اقتضا می کند مجموع کل مساوی N می شود. برای $A \neq G_n$ می توان از روشی مشابه آن چه برای محاسبه رابطه ی (۲-۲۴) بیان شد، پیروی کرد و نتیجه نیز مانند قبل است یعنی به ازای مقادیر بزرگ N ، به جز برای مقادیر معینی از A عبارت مجموع مساوی صفر می شود. در واقع مقدار استثناء آن مقداری است که در بالا انتخاب شد یعنی $A = G_n$.

به عنوان آخرین نکته نشان خواهیم داد که بردارهای شبکه وارون به صفحات بلوری شبکه مستقیم مرتبط اند. در این حالت بردارهای شبکه وارون معنی خاصی طلب می کنند. مجموعه ای از صفحات بلوری که اندیس های میلر آنها (hkl) متناظر با بردارهای شبکه ی وارون $G_{hkl} = ha^* + kb^* + lc^*$ می باشند را در نظر می گیریم. l, k, h و مجموعه ای از اعداد صحیح اند. حال خواص زیر را ثابت می کنیم:

(i) بردار G_{hkl} بر صفحات بلوری (hkl) عمود است.

(ii) فاصله بین صفحات d_{hkl} و بزرگی بردار G_{hkl} با رابطه زیر به هم مربوط اند:

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{G_{hkl}} \quad (2-38)$$



شکل ۲-۱۰ بردار شبکه‌ی وارون G_{hkl} عمود بر صفحه (hkl) است

برای اثبات این روابط به شکل (۲-۱۰) مراجعه می‌کنیم که در آن یکی از صفحات (hkl) رسم شده است. این صفحه محورها را در x, y, z قطع می‌کند که با اندیس‌های میلر به صورت زیر مرتبط هستند:

$$(h, k, l) \sim \left(\frac{1}{x}, \frac{1}{y}, \frac{1}{z} \right) \quad (2-39)$$

که از تعریف اندیس‌های میلر (بخش ۶-۱) استفاده شده است. بردارهای u و v به ترتیب در امتداد فصل مشترک صفحه (hkl) با صفحات xy و yz قرار گرفته‌اند. این بردارها مطابق شکل با روابط $u = (yb - xa)$ و $v = yb - zc$ بیان می‌گردد. برای اثبات رابطه‌ی (i) تنها باید ثابت کنیم که G_{hkl} عمود بر هر دو بردار u و v می‌باشد.

$$u \cdot G_{hkl} = (xa - yb) \cdot (ha^* + kb^* + lc^*) = 2\pi(xh - yk) = 0$$

که از رابطه‌ی (۲-۳۵) برای اثبات تساوی دوم استفاده کرده‌ایم و تساوی آخر از رابطه‌ی (۲-۳۹) نتیجه شده است. به طور مشابه می‌توان نشان داد که G_{hkl} عمود بر v است و خاصیت (i) اثبات می‌شود.

برای اثبات (۲-۳۸) توجه می‌کنیم که d_{hkl} فاصله‌ی بین صفحات مساوی تصویری xa در امتداد

عمود بر صفحات (hkl) است. این جهت را می‌توان با بردار $\hat{G}_{hkl} = \frac{G_{hkl}}{G_{hkl}}$ نمایش داد. زیرا

اثبات کردیم G_{hkl} که بردار عمود بر صفحه (hkl) است بنابراین:

$$d_{hkl} = xa.G_{hkl} = \frac{(xa.G_{hkl})}{G_{hkl}} \quad (۲-۴۰)$$

حال توجه کنیم که $xa.G_{hkl} = 2\pi h x$ و این مساوی با 2π است زیرا مطابق رابطه (۲-۳۹) $xh = 1$ و این اثبات رابطه (۲-۳۸) را کامل می کند.

حال ارتباط بین بردارهای شبکه وارون و صفحات بلوری کاملاً واضح می گردد. بردار G_{hkl} مربوط به صفحات بلوری (hkl) است که در واقع بر آن عمود هستند و فاصله بین صفحات 2π برابر معکوس طول G_{hkl} در فضای وارون می باشد. بلور شناسان ترجیح می دهند راجع به صفحات بلوری و اندیس های میلر آن ها که واقعیت فیزیکی دارند فکر کنند. در حالی که فیزیک دانان حالت جامد شبکه ی وارون را ترجیح می دهند که به لحاظ ریاضی زیبا است ولی هر دو معادل یک دیگرند و می توان با استفاده از روابطی که آن دو را به هم پیوند می دهند از یکی به دیگری تغییر روش داد. در این کتاب اغلب از روش شبکه وارون استفاده خواهیم کرد.

۲-۷ شرط پراش و قانون براگ

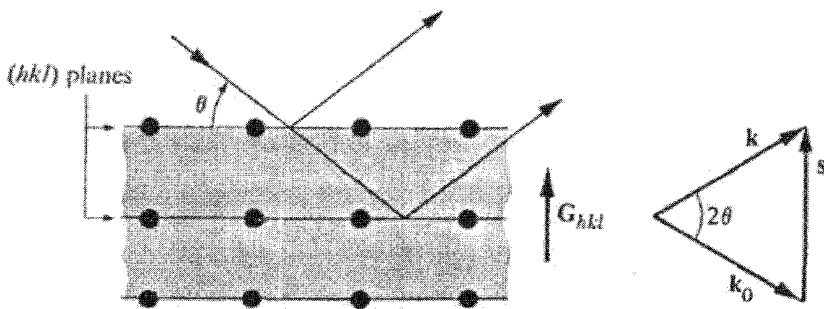
حال مفهوم شبکه ی وارون را برای ارزیابی ضریب ساختار شبکه S که مسئول فرآیند پراکندگی پرتوهای ایکس است بکار می بریم. این ضریب در رابطه ی (۲-۲۲) داده شده است. در مقایسه با رابطه ی (۲-۳۶)، ملاحظه می کنیم که S برای تمام مقادیر S صفر می شود غیر از:

$$s = G_{hkl} \quad (۲-۴۱)$$

بنابراین شرط پراش این است که بردار پراکندگی S مساوی با بردار شبکه ی وارون باشد. همان گونه در شکل ۱۱-۲ نشان داده شده است معادله ی (۲-۴۱) بیان می کند که S عمود بر صفحات (hkl) می باشد (خاصیت (i) از بخش ۶). این معادله را می توان به صورت متفاوتی بازنویسی کرد. با یادآوری این که $s = 2\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) \sin \theta$ و $G_{hkl} = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$ و جای گزینی آن ها در (۲-۴۱) خواهیم داشت:

$$2d_{hkl} \sin \theta = \lambda \quad (۲-۴۲)$$

که این دقیقاً همان شکل قانون براگ، معادله ی (۲-۴) است که از رفتار کلی تئوری پراکندگی پیروی می کند. بنابراین به لحاظ فیزیکی کاملاً با معنی است که از مدل براگ (بخش ۳) استفاده کنیم و در پی بازتاب از صفحات اتمی باشیم. این نگاه به فرایند پراش به لحاظ مفهومی ساده تر است از تئوری پراکندگی است.



شکل ۱۱-۲ بردار پراکندگی مساوی بردار شبکه وارون است.

وقتی شرط (۲-۴۱) ارضا شود. ضریب ساختار غیر صفر است و چنان که از رابطه ی (۲-۳۶) دیده می شود مقدار آن مساوی N می شود:

$$S_{hkl} = N \quad (2-43)$$

با جای گزینی رابطه ی فوق در رابطه ی (۲-۲۳) ضریب پراکندگی بلور f_{cr} بدست می آید که برابر است با:

$$f_{cr,hkl} = N f_{hkl} \quad (2-44)$$

و شدت I چنین خواهد شد:

$$I_{hkl} \sim |f_{cr,hkl}|^2 \sim |F_{hkl}|^2 \quad (2-45)$$

شدت پرتوهای پراکنده در همه ی جهت ها صفر است و فقط در جهت هایی که ضریب ساختار S غیر صفر باشد، یک مقدار غیر صفر دارد. این جهت ها همان جهت های پراش هستند و جهت هایی هستند که شرط تداخل سازنده را ارضا می کنند. وقتی شرط براگ ارضا شود باریکه های فرودی در یک جهت خاص پراشیده می شوند (مرتب های بالاتر پراش ناچیزند) و به صورت یک تک نقطه در روی فیلم آشکار ساز ثبت می شود. این تک نقطه نمایان گر مجموعه صفحات بازتابی (hkl) است. چنان چه بلور طوری دوران کند که مجموعه جدیدی از صفحات بازتاب براگ را ارضا کنند، این مجموعه ی جدید به صورت نقطه ی جدیدی در فیلم آشکار ساز ظاهر می گردد. بنابراین هر نقطه از فیلم نمایان گر مجموعه ی کاملی از صفحات بلوری است و هم چنان که در بخش ۹ بحث شد، از ترتیب قرار گرفتن این نقاط می توان ساختار بلور را تعیین کرد.

مطابق آن چه گفته شد هر باریکه‌ی پراکنده را می‌توان متناظر با مجموعه‌ای از صفحات با اندیس‌های میلر معین در نظر گرفت (رابطه‌ی ۲-۴۵). ولی به طور تجربی مشاهده شده است که ممکن است از صفحات معینی پراش صورت نگیرد. این مطلب مربوط به ضریب ساختار هندسی می‌شود که بستگی به شکل و محتویات یاخته واحد دارد بنابراین اگر f_{hkl} به ازای اندیس‌های معینی صفر گردد، حتی اگر صفحات مربوطه شرط براگ را ارضا کنند؛ ولی بر طبق رابطه‌ی (۲-۴۵) شدت صفر می‌گردد. برای تعیین f_{hkl} به رابطه‌ی (۲-۲۱) بر می‌گردیم. فرض می‌کنیم اتم‌ها یکسان باشند δ_j موقعیت اتم j ام را چنین اختیار می‌کنیم:

$$\delta_j = U_j a + V_j b + w_j c$$

علاوه بر آن فرض می‌کنیم:

$$S = G_{hkl} = ha^* + kb^* + lc^*$$

بنابراین:

$$F_{hkl} = f_a \sum_j e^{i2\pi(h u_j + k v_j + l w_j)} \quad (2-46)$$

برای مثال شبکه‌ی bcc را در نظر بگیرید. یاخته واحد آن دو اتم دارد که مختصات آن عبارتند از

$$(u_j, v_j, w_j) = (0, 0, 0) \text{ و } \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

$$F_{hkl} = f_a (1 + e^{i\pi(h+k+l)})$$

این عبارت فقط می‌تواند دو مقدار داشته باشد. هنگامی که $(h+k+l)$ زوج است، $F_{hkl} = 2f_a$ می‌شود و وقتی $(h+k+l)$ فرد است $F_{hkl} = 0$ می‌شود. بنابراین در شبکه bcc برای تمام صفحاتی که مجموع $(h+k+l)$ آن‌ها فرد است پراش وجود ندارد و برای صفحاتی که $(h+k+l)$ زوج است پراش ظاهر می‌گردد. ما این را به صورت یک مساله مطرح خواهیم کرد که: نشان دهید در یک شبکه fcc بازتاب‌های مجاز متناظر با حالتی هستند که (h, k, l) هر سه یا فرد و یا هر سه زوج باشند. توجه کنید که صفحاتی که در آن‌ها پراش صورت نمی‌گیرد، اطلاعات مستقیمی راجع به تقارن یاخته واحد بدست می‌دهند.^۱

معادله (۲-۴۱) را می‌توان به شکل دیگری نیز بازنویسی کرد. از رابطه‌ی (۲-۹ الف) داریم

$$s = k - k_0 \text{ که } k \text{ و } k_0 \text{ بردارهای فرودی و پراکنده هستند. با جای‌گزینی در رابطه‌ی (۲-۴۱)}$$

خواهیم داشت:

۱- فرمولی که بر صفحاتی که در آن‌ها پراش صورت نمی‌گیرد حاکم است به نام قاعده خاموشی (Extinction rule) نامیده می‌شود.

$$k = k_0 + G \quad (2-47)$$

طرفین رابطه فوق را در \hbar ضرب می کنیم:

$$\hbar k = \hbar k_0 + \hbar G$$

ولی کمیت $\hbar k$ اندازه حرکت فوتون های پرتو ایکس باریکه است (رابطه ی دو بروی را در بخش ۱-۸ ملاحظه نمایید). بنابراین معادله ی بالا را می توان به عنوان اصل پایستگی اندازه حرکت و فرآیند پراش را به عنوان فرآیند برخورد بین فوتون های پرتو ایکس و بلور در نظر گرفت. فوتون ها در اثر برخورد پس زده می شوند و اندازه حرکت کسب می کنند. متقابلاً بلور نیز در خلاف جهت پس زده می شود و اندازه حرکت $-\hbar G$ را کسب می کند. انرژی پس زده بلور بسیار کوچک است، زیرا متناظر با جابه جایی جسم صلب است. انرژی جنبشی بلور $\frac{(\hbar G)^2}{2M}$ می شود که M جرم کل بلور است. از آن جا که M در مقایسه با جرم اتم فوق العاده بزرگ است، انرژی پس زده بلور بسیار کوچک و قابل چشم پوشی است. بنابراین برخورد را می توان کشسان در نظر گرفت. این مطلب قبلاً نیز منظور شده است، زیرا k را مساوی k_0 در نظر گرفته ایم.

۲-۸ پراکندگی از مایعات

از پراکندگی پرتوهای ایکس می توان برای بررسی ساختار مایعات نیز استفاده کرد. با مشاهده نقش باریکه ی پراکنده توان تابع توزیع زوج مایع را تعیین کرد (بخش ۸-۱ را ملاحظه نمایید). با مراجعه به نتیجه ی (۲-۲۰) ضریب پراکندگی مایع را به صورت زیر می نویسیم:

$$f_{lq} = f_a \sum_l e^{is.R_l} \quad (2-48)$$

که f_a ضریب اتمی است و عمل جمع روی تمام اتم های مایع انجام شده است. فرض کرده ایم مایع یکنواخت است. برخلاف جامدات که اتم ها مقید و محدود به مکان های معینی هستند، در مایعات اتم ها به طور پیوسته از ناحیه ای به ناحیه ی دیگر حرکت می کنند بنابراین محاسبه ی جمع (۲-۴۸) مشکل است. این مشکل را می توان با بررسی شدت پرتوهای پراکنده که به طور تجربی قابل اندازه گیری است، تا حدودی برطرف کرد. شدت متناسب با $|f_{lq}|^2$ است که با استفاده از رابطه ی (۲-۴۸) می توان آن را به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$|f_{lq}|^2 = f_a^2 \sum_{j,l} e^{is.(R_l - R_j)} \quad (2-49)$$

حال ضریب ساختار مایع S_{lq} را به صورت جمع دو گانه‌ی این معادله تعریف می‌کنیم که چنین است:

$$S_{lq} = \sum_{j,l} e^{is \cdot (R_j - R_l)} \quad (2-50)$$

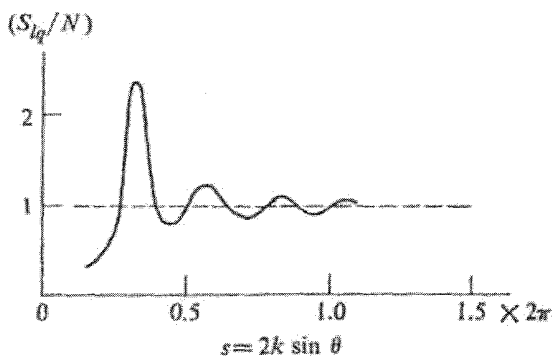
و این مانسته‌ی ضریب ساختار شبکه‌ی S در رابطه‌ی (۲-۲۲) است. جمع را می‌توان به دو جمله مختلف تجزیه کرد: جملاتی با $j=1$ که در آن‌ها اندیس‌های j و l مربوط به یک اتم می‌شود و جملاتی با $j \neq 1$. به سادگی ملاحظه می‌شود که حاصل جمع جملات نوع اول N است، زیرا کلاً N جمله داریم و جملات نوع دوم را می‌توان برحسب تابع توزیع زوج بیان کرد. نتیجه چنین است:

$$\frac{S_{lq}}{N} = 1 + n_0 \int d^3R \operatorname{Re} e^{is \cdot R} g(R) \quad (2-51)$$

که n_0 چگالی اتمی متوسط و $g(R)$ تابع زوج (بخش ۸-۱) است. انتگرال روی تمام حجم مایع گرفته شده است. فقط انحراف $g(R)$ از واحد است که در پراکندگی سهمیم است زیرا $g(R) = 1$ متناظر با توزیع یک نواخت است که در آن باریکه بدون پراکندگی عبور می‌کند. بنابراین می‌توان رابطه‌ی (۲-۵۱) را به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$\frac{S_{lq}}{N} = 1 + n_0 \int d^3R \cdot e^{is \cdot R} [g(R) - 1] \quad (2-52)$$

که حالا انتگرال روی تمام فضا گسترش یافته است. از آن جا که $[g(R) - 1]$ برای R ‌های بزرگ خیلی سریع کاهش می‌یابد (بخش ۸-۱)، خطای قابل ملاحظه‌ای در اثر گسترش انتگرال روی تمام فضا وارد نمی‌شود.



شکل ۲-۱۲ ضریب ساختار برای جیوه مایع

چنان چه $g(R)$ معلوم باشد از معادله (۲-۵۲) می توان S_{lq} را محاسبه کرد. ولی مساله ای که اغلب با آن مواجه هستیم عکس آن است. S_{lq} را می توان اندازه گیری کرد و از آن $g(R)$ را باید نتیجه گرفت. بنابراین باید رابطه ی (۲-۵۲) را معکوس کرد. این عمل معکوس سازی را می توان با استفاده از قضیه تبدیل فوریه انجام داد. با بررسی (۲-۵۲) متوجه می شویم که $\frac{S_{lq}-1}{n_0}$ تبدیل فوریه $[g(R)-1]$ است بنابراین با استفاده از تبدیل فوریه می توان نوشت:

$$g(R)-1 = \frac{1}{(\sqrt{\pi})^r} \frac{1}{n_0} \int d^r s e^{-is.R} \left[\frac{S_{lq}(s)-1}{N} \right] \quad (2-53)$$

انتهای روی تمام فضای بردار پراکندگی S گرفته شده است. شکل (۲-۱۲) ضریب ساختار جیوه مایع را آن چنان که توسط پراکندگی پرتوهای ایکس تعیین شده است نشان می دهد. تکنیک پراکندگی دیگری که به طور فزاینده در مطالعه ساختار مایعات استفاده می شود، پراکندگی نوترون است که در بخش ۱۱ بحث خواهد شد.

۹-۲ تکنیک های تجربی

در این بخش تکنیک های تجربی را که در جمع آوری اطلاعات مربوط به پراش پرتوهای ایکس استفاده می شوند مرور می کنیم. بحث ما مختصر و شامل اصول اساسی فیزیکی است که مبنای این تکنیک ها است. به جای بحث تفصیلی پیرامون هر روش، مشکلات عملی و تصحیح های لازم برای هر روش بیان می شود. خواننده ی علاقه مند می تواند به کتاب های Guinier, Buerger, Cullity, Woolfson و همین طور کتاب شناسی آن ها مراجعه نماید.

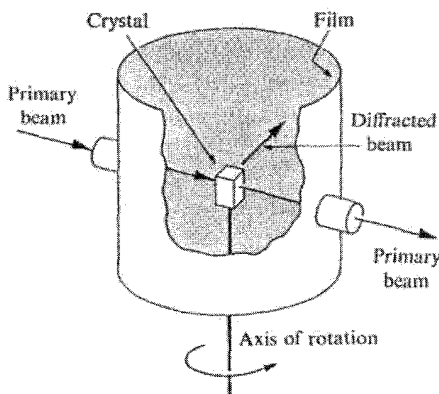
اساساً سه روش تجربی پراش پرتوهای ایکس موجود است، روش بلورچرخان، روش لایه و روش پودری. کمیت هایی که اندازه گیری می شوند، بدون ملاحظه ی تکنیک مورد استفاده اساساً یکسانند.

(i) زاویه پراکندگی 2θ بین باریکه های فرودی و پراکنده. با جایگزینی $\sin \theta$ در قانون براگ می توان فاصله بین صفحات و هم چنین جهت گیری صفحات، عامل پراش را تعیین کرد.

(ii) شدت باریکه ی پراکنده I . این کمیت ضریب ساختار یاخته F_{hkl} را تعیین می کند و بنابراین اطلاعاتی راجع به ترتیب قرار گرفتن اتم ها در یاخته واحد به دست می دهد.

روش بلورچرخان

این روش برای تحلیل ساختار تک بلور بکار می رود. شکل ۱۳-۲ طرح آزمایش را نشان می دهد. بلور که معمولاً در حدود ۱mm قطر دارد روی پایه ای قرار گرفته که می تواند دوران کند. یک فیلم عکاسی در قسمت داخل استوانه ای که محور آن در امتداد محور دوران قرار می گیرد، باریکه ی تک فامی به طول موج λ به بلور برخورد می کند. نمونه حول محور دوران آن قدر چرخانده می شود که شرط پراش حاصل آید، یعنی λ و θ شرط براج را ارضا کنند. وقتی چنین شد باریکه ی پراکنده از بلور خارج شده و به صورت نقطه ای روی فیلم ثبت می گردد.



شکل ۱۳-۲ ترتیب قرار گرفتن اجزاء آزمایش در روش بلور چرخان.

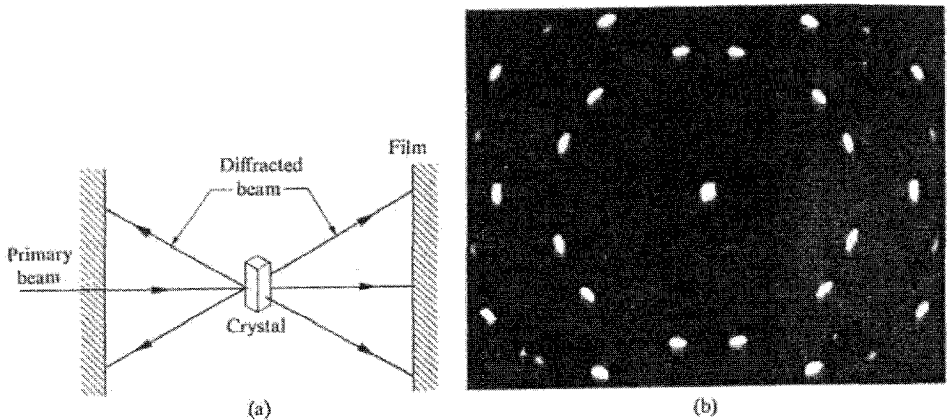
با ثبت نقوش پراش (زاویه و شدت پرتوهای پراشیده) برای جهت های مختلف بلوری می توان اندازه و شکل یاخته واحد و همین طور ترتیب قرار گرفتن اتم ها درون یاخته را معین کرد.

روش لائو

از این روش می توان به منظور تعیین سریع تقارن و جهت یک تک بلور استفاده کرد. ترتیب قرار گرفتن اجزاء آزمایش در شکل (۱۴-۲ الف) نشان داده شده است. یک باریکه «سفید» پرتوهای ایکس یعنی باریکه ای با طیفی از طول موج های پیوسته، به بلور برخورد می کند. بلور در جهت ثابتی نسبت به باریکه قرار دارد. فیلم عکاسی مسطحی در جلو یا عقب نمونه قرار می گیرد. از آن جا که λ محدوده ی پیوسته ای را شامل می شود، بلور آن طول موجی را بر می گزیند که شرط

برآنگ را در آن جهت بلوری ارضا کند و یک باریکه ی پراشیده تحت زاویه مربوطه ظاهر گردد. بنابراین باریکه پراکنده به شکل نقطه هایی روی فیلم ثبت می گردد. ولی از آن جا که طول موج متناظر با نقاط ثبت شده روی فیلم اندازه گیری نمی شود، نمی توان مقدار واقعی فواصل بین صفحات را تعیین کرد و فقط نسبت آن ها تعیین می شود. بنابراین می توان شکل (و نه اندازه مطلق) یاخته واحد را معین کرد. شکل (۱۴-۲ ب) یک عکس لایه را نشان می دهد.

توجه کنید که اگر جهت باریکه در امتداد یکی از محورهای تقارن بلور باشد، نقش پراشیده این تقارن را نشان می دهد. (شکل ۱۴-۲ ب) تقارن ۶- فولد از محور تقارن Mg را نشان می دهد که ساختار شش گوشه دارد.



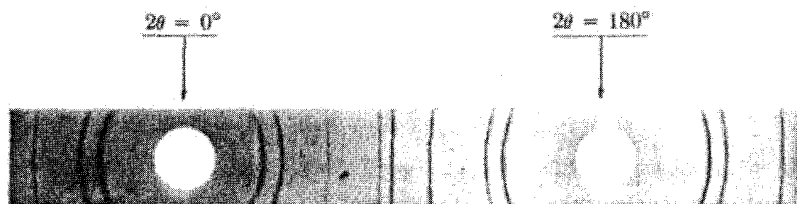
شکل ۱۴-۲ روش لایه (الف) تر تیب قرار گرفتن اجزاء آزمایش. (ب) نقش لایه برای بلور Mg باریکه پرتو ایکس موازی با محور تقارن ۶- فولد است

روش پودری

این روش برای تعیین ساختار بلور (حتی اگر نمونه تک بلور نباشد) استفاده می شود. نمونه را به صورت پودر با دانه های بسیار ریز در می آورند و درون یک لوله شیشه ای استوانه ای قرار می دهند نمونه ممکن است بس بلور^۱ باشد. چنین نمونه ای از تعداد بسیار زیادی بلورک که کم و بیش کاتوره ای جهت گیری شده اند تشکیل شده است. یک باریکه ی تک فام به نمونه برخورد کرده و باریکه های پراکنده روی فیلم استوانه ای که نمونه را در بر گرفته است ثبت می شود.

به خاطر وجود مقدار بسیار زیاد بلورک ها که کاتوره‌ای جهت گیری شده‌اند، همیشه به اندازه‌ی کافی بلورک وجود دارد که جهت مناسبی نسبت به باریکه‌ی تک فام فرودی داشته باشند که شرط براگ را ارضا کنند. بنابراین باریکه‌ی پراکنده در زاویه مربوطه ظاهر می‌گردد (شکل ۱۵-۲). از آن جا که λ و θ قابل اندازه گیری هستند می‌توان فاصله بین صفحات را تعیین کرد.

مجموعه‌ی دیگر صفحات باریکه های پراکنده دیگری را ایجاد می‌کنند که متناظر با فاصله‌های صفحه‌ای مربوطه می‌باشند. بنابراین می‌توان پارامترهای شبکه را دقیقاً تعیین کرد، به خصوص اگر ساختار بلور از قبل معلوم باشد. از آن جا که نمونه حول باریکه فرودی که به عنوان محور دوران انتخاب می‌شود متقارن است، باریکه‌ی پراکنده متناظر با هر زاویه پراکندگی 2θ در سطح جانبی مخروطی که محور آن در امتداد باریکه‌ی فرودی است پخش می‌شود.



شکل ۱۵-۲ نقش پراش پودری پرتوهای ایکس برای Cu، زاویه پراکندگی 2θ می‌باشد (Cullity).

۱۰-۲ کاربردهای دیگر پرتوهای ایکس در فیزیک حالت جامد

علاوه بر استفاده‌ی عمده و اصلی پروهای ایکس در تحلیل ساختارهای بلوری، این پرتوها کاربردها بسیار دیگری در فیزیک حالت جامد دارند. قسمت اعظم دانش ما درباره‌ی دنیای میکروسکوپی در نتیجه استفاده‌ی مداوم از تکنیک‌های پرتوهای ایکس حاصل گردیده است. برای این که مفید بودن این ابزار قوی را نشان دهیم بعضی از کاربردهای آن را در این جا بررسی می‌کنیم. ولی بحث ما فوق العاده مختصر خواهد بود و خواننده‌ی علاقه مند را به مراجع بسیار خوبی که در کتابشناسی آمده است ارجاع می‌دهیم.

هدف ایده آل، ترسیم توزیع الکترون‌ها درون جسم جامد است. بدین معنی که یک نقشه‌ی چگالی الکترونی رسم کنیم. این کار معادل این است که بتوانیم ابر الکترونی درون جسم جامد را ببینیم. رسیدن به این اهداف به کمک پراش پرتوهای ایکس علی‌الاصول باید ممکن باشد، زیرا همین الکترون‌ها هستند که عامل فرآیند پراش می‌باشند. برای این که ببینیم چگونه این کار ممکن است انجام گیرد، به رابطه‌ی (۲۱-۲) مراجعه می‌کنیم که در آن f_e شامل چگالی الکترونی نیز

می‌باشد. اگر ضریب ساختار بلور اندازه گیری شود، این معادله را می‌توان معکوس کرد و بدین ترتیب چگالی الکترونی $\rho(r)$ برحسب $f_{cr}(s)$ بدست می‌آید. تکنیک ریاضی آن شامل تبدیلات فوریه و شبیه روشی است که برای مطالعه ی مایعات در بخش قبل استفاده شد.

کاربرد مهم دیگر این پرتوها در مطالعه ی ناکاملی های شبکه مانند ناخالصی ها، در رفتگی ها، نواحی تحت فشار و غیره می باشد. باوجود چنین ناکاملی ها، نقش پراش دیگر شبیه نقش پراش بلور کامل نیست و با مطالعه این انحراف اطلاعاتی راجع به نوع ناکاملی ها و توزیع آن ها در بلور بدست می آید. چنین تکنیک هایی در بین شیمیست ها، متالورژیست ها و کسانی که در زمینه ی علم مواد کار می کنند کاملاً متداول است.

در مطالعه ی بلورهای خالص فرض کرده ایم که در آن ها خاصیت تناوبی کامل باشد (به جز در پاراگراف قبل) به بیان دیگر فرض کرده ایم که هر اتم همواره در جای گاه خود جای گزیده شده باشد. ولی معلوم است که اتم ها در دماهای بالاتر از صفر مطلق به دلیل تحریکات حرارتی در اطراف و حول جای گاه خود ارتعاش می کنند. وجود این ارتعاشات شبکه ای باعث دگرگونی نقش پراش پرتوهای ایکس می گردد، به خصوص این که در جهت هایی پراش مشاهده می شود که در آن ها شرط براگ ارضاء نمی گردد. این پراش به پراکندگی پخش شده^۱ موسوم است. این نوع پراکندگی در مطالعه ی ارتعاشات شبکه استفاده می شود و به درک ما کمک بزرگی می کند. ما ارتعاشات شبکه را به تفصیل در بخش بعد بررسی خواهیم کرد.

سرانجام این که از پراش پرتوهای ایکس برای تعیین ساختار مولکول های بیولوژیکی نیز استفاده می شود بسیاری از گام های بلندی که در توسعه دانش بیولوژیکی مولکولی برداشته شده است به واسطه ی همین تکنیک بوده است. کشف ساختار مارپیچی دوگانه در مولکول DNA تنها یک مورد از آن ها است.

۱۱-۲ پراش نوترون

قبلاً بیان کردیم که علاوه بر پرتوهای ایکس از اشکال دیگر تابش نیز می توان برای بررسی ساختارهای بلور و مسائل وابسته به آن استفاده کرد. شرایط اولیه بدین قرارند: اولاً تابش باید خاصیت موجی داشته باشد به طوری که موج های پراکنده را بتوان به طور همدوس بر هم نهاد و ساختار محیط پراکندگی را معلوم کرد. ثانیاً طول موج تابش باید از همان مرتبه ی بزرگی ثابت شبکه باشد. تابش نوترونی این شرایط را برآورده می کند.

از مبانی فیزیک کوانتومی می دانیم، نوترون (و ذرات دیگر) دارای خاصیت موجی اند (بخش A-1 را ملاحظه نمایید) طول موج این ذرات که به طول موج دوپروی موسوم است با رابطه ی $\lambda = \frac{h}{p}$ داده می شود که P اندازه حرکت نوترون است. طول موج را بر حسب انرژی $E = \frac{P^2}{2m}$ نیز می توان بیان کرد که m جرم ذرات است با جای گزین کردن مقدار جرم نوترون خواهیم داشت .

$$\lambda = \frac{0.28}{E^{1/2}} \quad (2-54)$$

λ بر حسب آنگستروم و E بر حسب الکترون ولت است. برای این که λ در تحلیل ساختار بلوری مفید واقع گردد باید در حدود 1 \AA باشد، که چون در رابطه ی (2-54) جای گزین گردد، انرژی نوترون در حدود 0.08 eV بدست می آید. این انرژی از مرتبه ی بزرگی انرژی حرارتی (kT) است که در دمای اتاق مساوی 0.025 eV است. به همین دلیل به این نوترون ها، نوترون های حرارتی می گویند.

مکانیزم پراکندگی نوترون مربوط به اندرکنش بین نوترون و هسته اتم موجود در بلور است. این اندرکنش همان اندرکنش قوی است که عامل نگه داشتن نوکلئون ها (نوترون ها و پروتون ها) درون هسته می باشد. نوترون که به لحاظ الکتریکی خنثی است با الکترون های بلور اندرکنشی ندارد . بنابراین برخلاف پرتوهای ایکس که کاملاً توسط الکترون ها پراکنده می شوند، نوترون کاملاً توسط هسته پراکنده می گردد (مورد استثناء زیر را ملاحظه نمایید).

از آن جا که تفصیل پراکندگی نوترون دقیقاً شبیه پرتوهای ایکس است، در این جا نیازی نداریم که بیش از این پیش رویم. تنها اختلاف در این نهفته است که برای نوترون در رابطه ی (2-6) به جای طول پراکندگی الکترون، طول پراکندگی نوترون قرار می گیرد. نتایج مورد علاقه ی ما در این جا مثل قانون براگ، معادلات لاهو و غیره دقیقاً مانند قبل اند. این نتایج از مطالعه ی ضریب ساختاری بدست می آید که به ساختار شبکه بستگی دارد و به ضریب ساختار اتمی و به نوع تابش مورد استفاده مربوط نمی شود.

پراکندگی نوترون چندین مزیت بر پراکندگی پرتوهای ایکس دارد.

الف) اتم های سبک مانند هیدروژن را از نقش پراش نوترون بهتر می توان تحلیل کرد. زیرا این اتم ها تنها چند الکترون برای پراکنده کردن پرتوهای ایکس دارند و نمی توانند به طور قابل ملاحظه ای در نقش پراش پرتوهای ایکس سهم باشند.

(ب) نقش پراش نوترون بین ایزوتوپ های اتمی مختلف تفاوت قائل است در حالی که نقش پراش پرتو ایکس چنین نیست.

(ج) پراش نوترون سهم عمده ای در مطالعات مواد مغناطیسی دارد. در بلورهای مغناطیسی، الکترون های مدارهای اتمی یک اسپین خالص و بنابراین یک گشتاور مغناطیسی خالص دارند. جهت های نسبی این گشتاورها ممکن است یا کاتوره ای یا موازی و یا پادموازی (بسته به محدوده ی دمای بلور) باشند. به دلیل این که نوترون با گشتاورهای مغناطیسی اندرکنش دارد، می توان از پراش نوترون برای تعیین نقش مغناطیسی بلوری استفاده کرد. این اندرکنش از این واقعیت ناشی می شود که نوترون یک گشتاور مغناطیسی مربوط به خودش دارد (مثل یک مغناطیس بسیار کوچک است) و تحت تاثیر میدان حاصل از گشتاور مغناطیسی الکترون ها قرار می گیرد. مثال هایی از کاربرد پراش نوترون در این شاخه ی مهم مغناطیس، در بخش های ۹-۹ و ۹-۱۴ ارائه گردیده است.

(د) در مطالعه ی ارتعاشات شبکه که در فصل بعد مورد بحث قرار می گیرد، تکنیک پراش نوترون از پراش پرتوهای ایکس مفیدتر است.

محدودیت های تکنیک پراش نوترون به قرار زیر است:

(الف) نیاز به استفاده از راکتور نوترون که به طور عمومی در دسترس نیست. علاوه بر آن حتی قوی ترین چشمه های نوترون فقط شدتی معادل 10^{-5} برابر شدت چشمه های پرتوایکس قابل دسترسی دارند. به این دلیل بلورهای بزرگ در پراش نوترون استفاده می شوند و زمان پرتو دهی را تا حد ممکن بزرگ اختیار می کنند.

(ب) نوترون ها از لحاظ الکتریکی خنثی هستند، بنابراین آشکار سازی آن ها مشکل تر از پرتوهای یون ساز ایکس است. برای این کار ابتدا نوترون ها را با یک واکنش، مثلاً برخورد با هسته بورون به یک تابش یون ساز مثل پروتون تبدیل می کنند، و سپس تابش یون ساز را اندازه گیری می کنند.

۱۲-۲ پراش الکترون

در برخورد باریکه ی الکترونی با یک بلور نیز ممکن است شرط براگ به طریقی مشابه آن چه قبلاً در مورد پرتوهای ایکس و نوترون بیان شد، ارضا گردد. الکترون نیز مانند نوترون خاصیت

موجی دارد و طول موج آن با رابطه $\lambda = \frac{h}{p}$ بیان می گردد. با نوشتن P برحسب انرژی E و

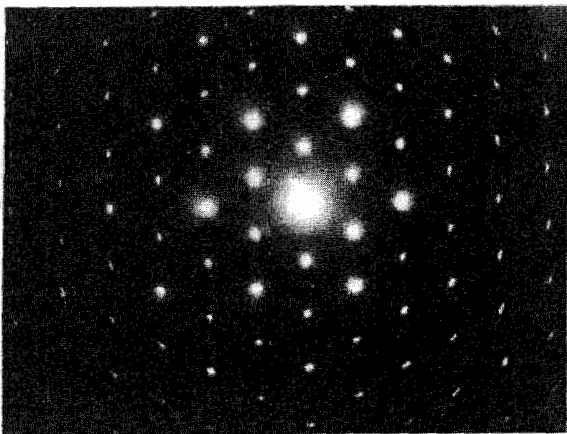
انرژی بر حسب پتانسیل شتاب دهنده V یعنی $E = ev$ و جایگزین کردن مقادیر مناسب برای الکترون خواهیم داشت:

$$\lambda = \sqrt{\frac{150}{V}} \quad (2-55)$$

که λ بر حسب آنگستروم و V بر حسب ولت است. به ازای $\lambda = 1 \text{ \AA}$ ، پتانسیل $V = 150 \text{ V}$ یا $E = 150 \text{ eV}$ می باشد.

مکانیزم موثر در پراکندگی الکترون، میدان الکتریکی مربوط به اتم‌ها در جسم جامد است. این میدان هم توسط هسته و هم توسط الکترون‌های مداری اتم تولید می شود. این میدان در نزدیکی هسته بزرگ است ولی در فواصل دور از هسته به سرعت کاهش می یابد. در این نواحی، الکترون‌های مداری حفاظی به دور هسته تشکیل می دهند.

محاسبه نشان می دهد که طول پراکندگی، مربوط به پراکندگی الکترون از یک اتم، مقدار بزرگی است. این بدین معنی است که یک باریکه ی الکترونی شدیداً پراکنده می شود و فاصله ای که تا قبل از توقف می پیماید کوتاه است. مثلاً این فاصله برای $v = 50 \text{ kV}$ فقط 50 \AA است. گرچه باریکه ی الکترونی تا عمق نسبتاً کم نزدیک به سطح نفوذ می کند، ولی این عمق کم نیز شامل تعداد بسیاری لایه اتمی است، به طوری که یک نقش پراش بلوری بدست می آید (شکل ۱۶-۲). نقش پراش الکترون شدیداً متأثر از خواص فیزیکی سطح نمونه است. بدین جهت در مطالعه ی سطوح لایه های اکسید که در سطح جامد شکل می گیرد، فیلم های نازک و نظایر آن‌ها از این تکنیک استفاده وسیع می شود.



شکل ۱۶-۲ نقش پراش الکترون از یک تک بلور نقره. محور دوران عمود بر صفحه است

در این جا ما فقط به پراش الکترون های خارجی می پردازیم ولی الکترون های داخلی نیز به دلیل این که درون بلور حرکت می کنند همان نوع پراش را ایجاد می کنند. این موضوع برای بحث ما درباره حالت های الکترون در بلور (فصل ۵) مفید خواهد بود^۱.

و بالاخره نکته ای که به لحاظ تاریخی مهم است، خاصیت موجی ذرات مادی است که اولین بار در ارتباط با پراش الکترون نشان داده شد. در سال ۱۹۲۷ دیویسون و گرمر پراکندگی یک باریکه ی الکترون از سطح یک بلور نیکل را مشاهده کردند. مشاهده ی نقش پراش حاصل از خاصیت موجی الکترون، فرضیه ای را که قبلاً توسط دو بروی ارائه گردیده بود، تایید کرد. در بزرگداشت این کار دیویسون جایزه نوبل سال ۱۹۳۷ را دریافت کرد.

۱- برای یک مقاله ی مروری و خواندنی در این موضوع به مرجع زیر مراجعه نمائید.

K.A.R Mitchell, *Conternp, Physics* 14, 251(1973)

این مقاله راجع به این مطلب بحث می کند که چگونه می توان از تکنیک (Low Energy Electron Diffraction) LEED در مطالعه ی بلور شناسی و شیمی سطح استفاده کرده و پیوندهای بین اتمی سطح اتم ها و همین طور موضوعات مهم تکنولوژیکی مانند کاتالیزوری سطح، خوردگی و رشد برآرستی بلور درک شود

خلاصه

هنگامی که بلور تحت تابش پرتوهای ایکس قرار می گیرد ساختار بلور آن توسط نقش پراش تعیین می گردد. این نتیجه ی اساسی قانون براگ است:

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

که d فاصله ی بین صفحات، θ زاویه برخورد و λ طول موج باریکه است. با اندازه گیری θ و λ می توان d و نهایتاً ساختار بلور را تعیین کرد.

در بررسی دقیق تر فرآیند پراش، بلور را به صورت ترکیبی از الکترون های گسسته در نظر می گیرند. ضریب پراکندگی برابر است با:

$$f = \sum_j e^{is \cdot r_j}$$

که جمع روی تمام الکترون های سیستم است و S بردار پراکندگی می باشد.

$$s = k - k_0$$

به کار بستن این نتیجه برای یک اتم منفرد منجر به ضریب پراکندگی اتمی می شود.

$$f_a = \int^R 4\pi r^2 \rho(r) \frac{\sin(sr)}{sr} dr$$

به دلیل تداخل بین لایه ها مختلف از ابر الکترونی درون اتم، با افزایش زاویه پراکندگی 2θ ، ضریب f_a کاهش می یابد.

ضریب پراکندگی برای یک بلور را می توان به صورت حاصل ضرب زیر نوشت:

$$f_{cr} = FS$$

که F ضریب ساختار هندسی و S ضریب ساختار شبکه می باشد این ضرایب به ترتیب به صورت زیر داده می شوند:

$$F = \sum_j f_{aj} e^{is \cdot r_j}$$

عمل جمع روی تمام اتم های یک یاخته واحد است و:

$$S = \sum_l e^{is \cdot R_l^{(e)}}$$

این جمع روی تمام یاخته های واحد بلور است. ضریب F فقط به خواص اتمی و شکل یاخته واحد بستگی دارد و S فقط به ساختار شبکه بستگی دارد. نوشتن f_{cr} به صورت حاصل ضرب دو عامل S, F مفید است. زیرا ما را قادر می سازد که خواص شبکه ای و اتمی بلور را مستقلاً بررسی نماییم.

بررسی ضریب شبکه S نشان می دهد که این ضریب به جز وقتی که :

$$s = G$$

است، یعنی هنگامی که بردار پراکندگی مساوی یک بردار شبکه وارون باشد، صفر می شود. این شرط شبیه شرط قانون براگ برای بازتاب از صفحات اتمی عمود بر G است. ساختار مایعات را نیز می توان به کمک پراش پرتوهای ایکس مطالعه کرد. با اندازه گیری ضریب ساختار مایع می توان تابع توزیع زوج را برای اتم های دورن مایع محاسبه کرد.

نقش پراش پرتوهای ایکس روی فیلمی که به باریکه های پراشیده از بلور احساس است ثبت می شود. هر باریکه نمایان گر بازتاب از یک سری از صفحات اتمی بلور است و به صورت یک نقطه روی فیلم ثبت می شود. موقعیت و تقارن نقش نقاط فیلم، حاوی اطلاعات لازم برای کشف ساختار بلور است.

باریکه نوترون را نیز می توان برای تعیین ساختار بلور به کار برد. فرمولی مشابه با فرمول فوق در این جا نیز به کار می رود؛ به این شرط که طول موج دوبروی به جای طول موج پرتو ایکس بکار رود.

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

انرژی نوترون ها خیلی کم و در حدود 0.1 eV است که در محدوده ی انرژی های حرارتی است. بنابراین نوترون های حرارتی نامیده می شوند. پراکندگی نوترون ها به واسطه اندرکنش آن ها با هسته بلور است و نه به خاطر اندرکنش با الکترون آن چنان که در پرتوهای ایکس انجام می گیرد. پراش الکترون برای تحلیل ساختار بلور نیز استفاده می شود. از آن جا که الکترون ها خیلی شدید با اتم های بلور اندرکنش می کنند، فاصله ای که الکترون ها قبل از توقف در ماده طی می کنند فقط در حدود 50 \AA است. پراش الکترون برای مطالعه ی پدیده های سطحی مورد استفاده قرار می گیرد.

References

X-ray diffraction

- C. S. Barrett and T. B. Massalski, 1966, *Structure of Metal*, third edition, New York: McGraw Hill,
- J. M. Buerger, 1960, *Crystal Structure Analysis*, New York: John Wiley,
- B.D. Cullity, 1972, *X-ray Diffraction*, New York: Freeman; Reading, Mass.: Addison Wesley
- A. Guinier and D. L. Dexter, 1963, *X-Ray Studies of Material*, New York: John Wiley, Interscience (These last two references discuss scattering by crystals and liquids.)
- C. Kittel, 1966, *Introduction to Solid State Physics*, New York: John Wiley
- T. Kovacs, 1969, *Principles of X-Ray Metallurgy*, New York: Plenum,
- M. M. Woolfson, 1970, *X-Ray Crystallography*, Cambridge: Cambridge University Press.

(All excellent treatment which had great influence on the presentation of this chapter.)

Neutron diffraction

- G. E. Bacon, 1962, *Neutron Diffraction*, Oxford: Oxford University Press.
- P. A. Egelstaff, editor, 1965, *Thermal Neutron Scattering*, New York: Academic press.

Electron diffraction

- B. K. Vainstein, 1964, *Structure Analysis by Electron Diffraction*, London, Pergamon press.

Liquids

- P. A. Egelstaff, 1967, *An Introduction to the Liquid State*, New York: Academic press.

پرسش‌ها

۱) چرا پرتوهای پراکنده در شکل (۲-۲ الف) به صورت تقریباً موازی رسم شده اند؟

۲) در پراکندگی پرتوهای ایکس توسط الکترون‌ها، احتمال اندکی وجود دارد که فوتون‌ها توسط الکترون‌ها پراکندگی کامپتون بیابند، این علاوه بر پراکندگی است که در این فصل بررسی شده و به پراکندگی تامسون موسوم است. پراکندگی کامپتون ناکشسان است و فوتون مقداری از انرژی اش را به الکترون می‌دهد. انرژی از دست داده شده به زاویه ی پراکندگی بستگی دارد آیا انتظار دارید پراکندگی کامپتون نقش پرآش ایجاد کند؟ چرا؟

۳) در پی رابطه‌ی ۶-۲ بیان شد که دامنه‌ی موج پراکنده به طور معکوس با فاصله‌ی شعاعی از مرکز پراکندگی کاهش می‌یابد این مطلب را بر مبنای پایستگی انرژی توجیه نمایید.

۴) ضریب پراکندگی بلور f_{cr} در رابطه ی (۱۹-۲) یک عدد مختلط است. مزیت استفاده از نمایش مختلط چیست؟

۵) الماس و سیلیسیم ساختار بلوری یکسانی دارند؛ یک ساختار fcc با یک پایه ولی با ثابت‌های شبکه ی متفاوت. آیا ضریب ساختار شبکه S برای هر دو ماده یکسان است؟

۶) بعد بردار شبکه ی وارن عکس بعد طول (Cm^{-1}) است. آیا با معنی است که بزرگی‌های یک بردار شبکه ی مستقیم R را با یک بردار شبکه ی وارون یعنی G مقایسه کنیم. آیا معنی دارد که جهت‌های آن‌ها را باهم مقایسه نماییم. اگر جواب سوال اخیر مثبت است، زاویه ی بین R و G را بر حسب مؤلفه‌ها نشان در یک بلور مکعبی بیابید؟ زاویه ی بین $R = [111]$ و $G = [110]$ چقدر است؟

۷) آیا بردار شبکه ی مستقیم یک بردار وارون یگانه ی متناظر دارد؟

۸) شکلی رسم کنید که پایستگی اندازه حرکت را در بازتاب براگ که به صورت برخورد بلور - فوتون بررسی می‌شود نمایش دهد.

۹) چرا انرژی نوترون خیلی کمتر از انرژی باریکه الکترونی است که در پرآش بلور مورد استفاده قرار می‌گیرد.

۱۰) آیا یک باریکه ی نوری را می توان برای تحلیل ساختار بلور بکار برد؟ ثابت شبکه برای بلوری که بتوان آن را با نور مرئی تحلیل کرد را تخمین بزنید.

۱۱) چرا نوترون در تحلیل ساختاری مفیدتر است؟

مسائل

۱) طول موج کمینه ای که در تابش پرتو ایکس مشاهده شده $\lambda = 1/23 \text{ \AA}$ است. انرژی جنبشی (برحسب eV) الکترون های اولیه ای که به هدف برخورد کرده اند چقدر است؟

۲) هر ضلع یک یاخته واحد مکعبی $\lambda = 1/23 \text{ \AA}$ است زاویه ی براگ متناظر از صفحات بازتاب (۲۰۰) و (۲۱۰) و (۱۰۰) و (۱۱۰) و (۱۱۱) و (۲۱۱) را پیدا کنید. طول موج باریکه ی پرتو ایکس فرودی $\lambda = 1/54 \text{ \AA}$ است.

۳) یک هدفی مسی در لوله پرتو ایکس، پرتوی با طول موج $\lambda = 1/54 \text{ \AA}$ گسیل می کند، (الف) چنان چه زاویه ی بازتاب براگ از صفحات (۱۱۱) آلومینوم مساوی $19/2^\circ$ باشد فاصله ی بین این صفحات را محاسبه کنید. یاد آوری می کنیم که Al ساختار fcc دارد.

ب) با دانستن چگالی و وزن اتمی Al که به ترتیب 2.7 g/cm^3 و ۲۷ می باشند، عدد آووگادرو را محاسبه نمایید.

۴) الف) زاویه ی براگ برای بازتاب از صفحات (۱۱۰) در آهن bcc برای پرتو ایکسی با طول موج $\lambda = 1/54 \text{ \AA}$ مساوی 22° می باشد. ضلع مکعب آهن را محاسبه نمایید.

ب) زاویه ی براگ برای بازتاب از صفحات (۱۱۱) چقدر است؟

ج) چگالی آهن bcc را محاسبه نمایید.

۵) اعتبار رابطه ی (۲-۱۱) را برای یک مبداء اختیاری تحقیق کنید.

۶) نتیجه ی (۲-۱۷) را ثابت کنید.

۷) نتیجه ی (۲-۲۰) را تحقیق کنید.

۸) این واقعیت که معادله ی (۲-۳۳) از معادله ی (۲-۲۰) و تعاریف ۲۱-۲ و ۲۲-۲ نتیجه گرفته می شود را تحقیق کنید.

۹) چگالی الکترونی در یک اتم هیدروژن در حالت پایه ی خود تقارن کروی دارد و با رابطه ی زیر داده می شود:

$$\rho(r) = \frac{e^{-2r/a_0}}{\pi a_0^3}$$

که a . اولین شعاع بور مساوی $\frac{a}{\sqrt{3}}$ است. ضریب پراکندگی f_a را برای هیدروژن محاسبه نمایید و آن را به صورت تابعی از $s = 2k \sin \theta = 4\pi \sin \frac{\theta}{\lambda}$ رسم کنید. به لحاظ فیزیکی

توضیح دهید چرا ضریب پراکندگی برای پس بازتاب $\theta = \frac{\pi}{2}$ کوچک است؟

(۱۰) ساختار بلوری fcc به مبداء مختصات سیستم بستگی دارد. نشان دهید چگالی که یک کمیت مشاهده پذیر است از انتخاب مبداء مستقل است.

(۱۱) مقدار اولین بیشینه جزئی K^2 (شکل ۵-۲ ب) را ارزیابی کنید و نشان دهید که مقدار حدی آن برای N های بزرگ مساوی $0.04N^2$ می باشد.

(۱۲) ضریب ساختار F_{hkl} در کتاب های درسی با این فرض که یاخته شامل یک اتم در رأس و یک اتم در مرکز یاخته است محاسبه شده است. نشان دهید با این فرض که در هر رأس مکعب یک هشتم اتم و یک اتم در مرکز آن قرار دارد نیز نتیجه ی مشابهی بدست می آید.

(۱۳) ضریب ساختار هندسی F_{hkl} را برای بازتاب از صفحات hkl در شبکه ی fcc ارزیابی کنید و نشان دهید که این ضریب مگر برای حالتی که h و k و l همگی فرد یا همگی زوج هستند، صفر می شود.

(۱۴) کدام یک از بازتاب های زیر در یک شبکه ی bcc ظاهر نمی گردد: (110) ، (111) ، (200) ، (210) ، (220) و (211) به سوال مشابه در مورد یک شبکه ی fcc پاسخ دهید.

(۱۵) الماس ساختار fcc دارد. پایه ی آن از دو اتم مشابه تشکیل یافته است که یکی در یک نقطه ی شبکه (مبداء) و دیگری در نقطه ی $(\frac{a}{4}, \frac{a}{4}, \frac{a}{4})$ نسبت به اتم اول جای گرفته اند و a ضلع مکعب است (شکل ۱۵-۱ را ملاحظه نمایید). ضریب ساختار هندسی برای الماس را محاسبه نمایید و آن را بر حسب ضریب متناظر با یک شبکه ی fcc بیان کنید. کدام یک از بازتاب های مسأله ی ۱۴ در الماس ظاهر نمی گردد.

(۱۶) سزیم کلراید (CsCl) به ساختار bcc متبلور می شود به طوری که هر اتم از یک نوع در یک رأس و اتم نوع دیگر در مرکز مکعب قرار گرفته اند. با فرض $f_{Cs} = 3f_{Cl}$ ، ضریب ساختار هندسی

F_{100} را محاسبه نمایید. توضیح دهید قانون خاموشی^۱ که در متن درس استنتاج شده است در این جا نقض می شود.

(۱۷) مساله ی ۱۶ را برای GaSb که به صورت ساختار سولفید روی^۲ متبلور می شود، تکرار کنید فرض کنید $f_{Sb} = 2f_{Ga}$.

(۱۸) نشان دهید که حجم یاخته ی وارون مساوی عکس حجم یاخته ی مستقیم است.

(۱۹) شبکه ی وارونی برای یک شبکه ی دو بعدی با $a = 1/25 \text{ \AA}$ ، $b = 2/50 \text{ \AA}$ ، $\gamma = 120^\circ$ بسازید.

(۲۰) یک یاخته ی واحد با ابعاد مفروض است: $a = 4 \text{ \AA}$ ، $b = 6 \text{ \AA}$ ، $c = 8 \text{ \AA}$

$$\alpha = \beta = 90^\circ \text{ و } \gamma = 120^\circ$$

مقادیر زیر را تعیین کنید:

الف) a^* ، b^* و c^* را برای یاخته ی وارون

ب) حجم یاخته های واحد مستقیم و وارون

ج) زوایه ی براگ θ برای بازتاب از صفحات فوق

(۲۱) نشان دهید که اگر حجم بلور افزایش یابد، باریکه ی بازتاب تحت زاویه ی زیر می چرخد:

$$\delta\theta = -\frac{\gamma}{3} \tan \theta$$

که δ ضریب انبساط حجم و θ زاویه ی براگ است.

(۲۲) راجع به تغییرات شدت بر حسب نصف زاویه ی پراکندگی θ بحث کنید. تأثیر ضریب

ساختار شبکه، ضریب ساختار هندسی و طول پراکندگی الکترون را منظور نمایید.

(۲۳) مقاله ای راجع به ملاحظات تجربی پراش پرتو ایکس بنویسید.

(۲۴) نتایج ۲-۵۲ را ثابت کنید.

(۲۵) یک باریکه ی الکترون به انرژی 150 eV به یک نمونه ی پودری شکل برخورد می کند.

کوچک ترین دو زاویه ی براگ را که در آن بازتاب صورت می گیرد پیدا کنید. یاد آوری

می شود که Ni ساختار fcc با ضلع مکعبی برابر $3/25 \text{ \AA}$ دارد.

1. extinction rule

2. zinblend

فصل سوم

ارتعاشات شبکه: خواص حرارتی، آکوستیکی و اپتیکی

- ۳-۱ مقدمه
- ۳-۲ امواج کشسان
- ۳-۳ شمارش مدها: چگالی حالت‌ها در یک محیط پیوسته
- ۳-۴ گرمای ویژه مدل‌های انیشتین و دبی
- ۳-۵ فونون
- ۳-۶ امواج شبکه
- ۳-۷ چگالی حالت‌های یک شبکه
- ۳-۸ گرمای ویژه: تئوری دقیق
- ۳-۹ رسانایی حرارتی
- ۳-۱۰ پراکندگی پرتوهای ایکس: نوترون و نور توسط فونون‌ها
- ۳-۱۱ فراصوتی‌های مایکروموج
- ۳-۱۲ خواص نوری شبکه در ناحیه‌ی فرو سرخ

در دو فصل گذشته در مطالعه‌ی ساختارهای بلوری، فرض کردیم که اتم‌ها در مکان‌های شبکه‌ای خود ساکن هستند. ولی در واقع اتم‌ها کاملاً ساکن نیستند، بلکه به واسطه‌ی انرژی گرمایی حول موقعیت تعادل خود نوسان می‌کنند. در این فصل راجع به ارتعاشات شبکه به تفصیل بحث می‌کنیم و تأثیر آن را بر خواص حرارتی، آکوستیکی و نوری بلورها بررسی می‌کنیم.

در این فصل ابتدا ارتعاشات بلور را در محدوده‌ی طول موج‌های بلند (امواج کشسان) که در آن می‌توان بلور را به صورت محیطی پیوسته در نظر گرفت بررسی می‌کنیم. مدل‌های گوناگونی که از آن‌ها برای توجیه گرمای ویژه استفاده می‌شود را با یکدیگر مقایسه می‌کنیم. معلوم شده است که در صورتی سازگاری با تجربه وجود دارد که از مفاهیم کوانتومی استفاده شود. فوتون، کوانتوم امواج صوتی را معرفی خواهیم کرد. به دنبال آن و با در نظر گرفتن طبیعت گسسته شبکه، بحثی راجع به ارتعاشات شبکه خواهد آمد و سپس بحث را با رسانایی گرمایی توسط شبکه ادامه خواهیم داد.

راجع به مشاهدات مستقیم امواج شبکه توسط پراکندگی تابش (مانند پرتوهای ایکس) بحث می‌کنیم و به دنبال آن بحثی راجع به بعضی جنبه‌های جالب امواج شبکه در ناحیه میکرو موج خواهد آمد. سرانجام بازتاب و جذب نور فرسرخ توسط ارتعاشات شبکه در بلورهای یونی را بحث خواهیم کرد.

۲-۳ امواج کشسان

یک جسم جامد از اتم‌های گسسته تشکیل شده است، و در بحث راجع به ارتعاشات شبکه باید این گسستگی منظور گردد. ولی وقتی طول موج خیلی بلند باشد می‌توان طبیعت اتمی را نادیده و جامد را به عنوان محیطی پیوسته در نظر گرفت. چنین ارتعاشاتی به امواج کشسان موسومند.

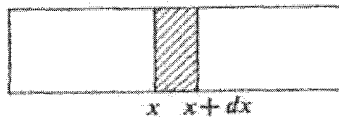
انتشار یک موج کشسان در نمونه‌ای به شکل یک میله‌ی بلند (شکل ۱-۳) را بررسی می‌کنیم. فرض می‌کنیم که موج طولی باشد و جابه‌جایی کشسان در نقطه‌ی x را به $u(x)$ نشان می‌دهیم. کرنش^۱ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$e = \frac{du}{dx} \quad (۳-۱)$$

که برابر است با تغییر طول واحد طول. تنش^۱ به صورت نیروی وارد بر واحد سطح تعریف می شود که آن نیز تابع x است. مطابق قانون هوک تنش متناسب با کرنش است به طوری که:

$$S = Ye \quad (۳-۲)$$

که ثابت Y مدول یانگ نامیده می شود.



شکل (۳-۱) موج کشسان در یک میله

برای بررسی دینامیک میله ها، هم چنان که در شکل نمایش داده شده است، یک قطعه اختیاری از میله ای به طول dx را در نظر می گیریم. با استفاده از قانون دوم نیوتن، حرکت این المان را می توان به صورت زیر نوشت:

$$(\rho A' dx) \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = [S(x + dx) - S(x)] A' \quad (۳-۳)$$

که ρ چگالی جرمی و A' سطح مقطع میله است. جمله ی طرف چپ حاصل ضرب جرم در شتاب است. در حالی که طرف راست نیروی خالصی است که از تنش های وارد بر انتهای قطعه ناشی می شود. برای یک قطعه ی کوچک می توان نوشت: $S(x + dx) - S(x) = \frac{\partial S}{\partial x} dx$ که با جایگزینی آن در رابطه ی (۳-۲) و سپس استفاده از (۳-۱) برای کرنش می توان معادله ی دینامیکی (۳-۳) را به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\rho}{Y} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0 \quad (۳-۴)$$

که معادله ی موج در یک بعد است. حال جوابی به شکل یک موج تخت منتشر شونده برای آن ارائه می دهیم:

$$u = Ae^{i(qx - \omega t)} \quad (۳-۵)$$

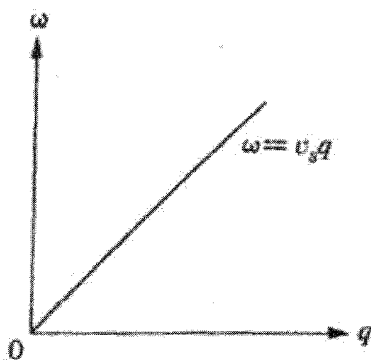
که $q = \frac{2\pi}{\lambda}$ عدد موج مقدار ثابتی است، ω فرکانس موج و A دامنه است. با جانشانی آن‌ها در معادله‌ی (۳-۴) خواهیم داشت:

$$\omega = v_s q \quad (۳-۶)$$

$$v_s = \left(\frac{Y}{\rho}\right)^{1/2} \quad (۳-۷)$$

رابطه‌ی (۳-۶) که فرکانس و عدد موج را به هم مربوط می‌کند به رابطه‌ی پاشندگی^۱ موسوم است. از آن جا که سرعت موج مساوی با $\frac{\omega}{q}$ است (این واقعیت را از تئوری موج می‌دانیم)، مقدار ثابت v_s در رابطه‌ی (۳-۶) مساوی با سرعت موج می‌باشد. سرعت v_s بر حسب خواص محیط در رابطه‌ی (۳-۷) بیان شده است. موج مورد بحث در این جا موج آشنای صوتی است.

شکل (۳-۲) رابطه‌ی پاشندگی را برای موج کشسان نشان می‌دهد. نمودار خط مستقیمی است که شیب آن مساوی سرعت صوت است. این نوع رابطه‌ی پاشندگی که ω به صورت خطی به q وابسته است در امواج آشنای دیگر نیز برقرار است. مثلاً یک موج نوری که در خلاء حرکت می‌کند رابطه‌ی پاشندگی‌ای به صورت $\omega = cq$ دارد که c سرعت نور است. امواج صوتی در مایعات و گازها از روابط مشابه‌ای پیروی می‌کند.



شکل (۳-۲) منحنی پاشندگی یک موج کشسان

گرچه اغلب انحراف هایی از رابطه‌ی خطی (۶-۳) مشاهده می‌شود، ولی رابطه‌ی موجود باز هم رابطه‌ی پاشندگی نامیده می‌شود. در بخش ۶ خواهیم دید، گسسته بودن شبکه به خصوص هنگامی که طول موج آن قدر کوتاه است که قابل مقایسه با فواصل بین اتمی باشد، باعث افزایش مقدار قابل ملاحظه‌ای پاشندگی (نسبت به منحنی پاشندگی شکل ۲-۳) خواهد شد.

معادله‌ی (۷-۳) را می‌توان برای ارزیابی مدول یانگ استفاده کرد. اندازه‌گیری نشان می‌دهد که مقادیر نوعی در جامدات عبارتند از $v_s = 5 \times 10^5 \text{ cm/s}$ و $\rho = 5 \text{ g/cm}^3$ که به مقدار $Y = 5 \times (5 \times 10^5)^2 = 1/25 \times 10^{12} \text{ g/cm} - \text{s}^2$ منجر خواهد شد.

در این جا یک موج طولی را بررسی کرده‌ایم ولی تحلیل مشابه‌ای را نیز می‌توان برای موج عرضی یا برشی بکار برد. برای این کار باید یک ثابت کشسانی برشی که مانسته‌ی مدول یانگ است معرفی کنیم و سرعت موج برشی توسط معادله‌ای شبیه رابطه‌ی (۷-۳) به آن مرتبط شود. ثابت کشسانی را می‌توان برای توصیف انتشار یک موج کشسان اختیاری در جامدات بکار برد. به طور ضمنی فرض شده است که جامدات همسان گردند ولی در واقع بلورها همسان گرد نیستند و اثر ناهمسان گردی در خواص کشسانی به خوبی ظاهر می‌گردد. در حالت کلی این ناهمسان گردی منجر به معرفی تعدادی ثابت کشسانی، (خیلی بیشتر از دو ثابتی که در جامدات همسان گرد لازم است)، می‌شود. ولی بررسی‌های تقارنی نشان می‌دهد که بسیاری از این ثابت‌ها به هم مربوطند و در نتیجه تعداد ثابت‌های مستقل کشسانی کاهش می‌یابد. مثلاً در یک حالت مهم که بلور مکعبی است، می‌توان نشان داد که تنها سه ثابت مستقل مورد نیاز است. این ثابت‌ها به C_{11} ، C_{12} و C_{44} ، نشان داده می‌شوند. ثابت C_{11} مربوط به تنش و کرنش تراکمی در امتداد جهت [۱۰۰] مثلاً محور x ها است، در حالی که C_{44} مربوط به تنش و کرنش برشی در همان جهت می‌باشد. ثابت C_{12} مربوط به تنش تراکمی در یک جهت به کرنش در جهت دیگر است. مثلاً این جهت‌ها ممکن است، محورهای x و y باشند. سه ثابت C_{11} ، C_{12} و C_{44} ، به وسیله‌ی اندازه‌گیری سرعت‌های صوت در جهت‌های خاصی در بلور تعیین می‌گردند. مثلاً می‌توان نشان داد آن چنان که از رابطه‌ی

$$(۲-۳) \text{ انتظار می‌رود سرعت‌های امواج طولی و برشی در امتداد جهت [۱۰۰] به ترتیب } \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}}$$

$$\text{و } \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}} \text{ می‌باشند. ثابت } C_{12} \text{ را از سرعت امواج در جهت [۱۱۱] را می‌توان تعیین کرد که معلوم}$$

شده است مساوی $\sqrt{\frac{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}}{3\rho}}$ می‌باشد. خواننده‌ی علاقه‌مند به بحث بیشتر در این زمینه

را به بررسی تفضیلی این مطلب در کتاب کیتل مراجعه می‌دهیم.^۱

۳-۳ شمارش مدها، چگالی حالت‌ها در یک محیط پیوسته

امواج کشان در یک میله‌ی بلند، شکل (۳-۱) را در نظر می‌گیریم و فرض می‌کنیم که موج فقط در یک بعد حرکت می‌کند. حل معادله به صورت (۳-۵) نوشته می‌شود، یعنی:

$$u = A^{iqx} \quad (3-8)$$

در این جا ضریب زمانی را حذف کرده‌ایم زیرا به بحث حاضر مرتبط نیست. حال آثار شرایط مرزی را روی حل (۳-۸) بررسی می‌کنیم. این شرایط مرزی توسط فشارهای خارجی وارد بر دو انتهای میله تعیین می‌شوند. مثلاً ممکن است دو انتهای میله را مقید کرد به طوری که قسمت داخلی میله نوسان کند یا ممکن است آنها را آزاد گذاشت تا با بقیه‌ی میله نوسان کنند. نوعی از شرایط مرزی که ما آن را مناسب یافتیم و در این کتاب استفاده می‌شود شرایط مرزی تناوبی نامیده می‌شود. منظور از این عبارت این است که انتهای راست میله را طوری مقید می‌کنیم که همیشه در همان حالت نوسانی انتهای سمت چپ باشد. گویی میله به شکل یک دایره درآمده و انتهای راست به انتهای چپ آن چسبیده است. این شرط تناوبی بدین معنی است که:

$$u(x=0) = u(x=L) \quad (3-9)$$

u همان حلی است که در رابطه‌ی (۳-۸) ارائه شده است. اگر رابطه‌ی (۳-۹) را در معادله‌ی (۳-۸) جای‌گزین کنیم خواهیم داشت:

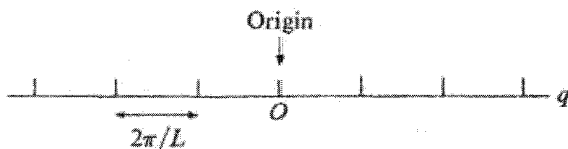
$$e^{iqL} = 1 \quad (3-10)$$

این معادله شرطی را بر مقادیر قابل قبول q اعمال می‌کند؛ تنها مقادیری مجازند که در رابطه‌ی (۳-۱۰) صدق کنند. با توجه به این که به ازای هر مقدار صحیح n داریم $e^{in2\pi} = 1$ می‌توان از رابطه‌ی (۳-۱۰) نتیجه گرفت که مقادیر مجاز عبارتند از:

$$q = n \frac{2\pi}{\lambda} \quad (3-11)$$

۱- لیست مراجعی که اغلب در فیزیک حالت جامد استفاده می‌شود در آخر این کتاب آمده است.

که ... $n = 0, \pm 1, \pm 2$ وقتی این مقادیر را در امتداد محور q ها رسم کنیم، یک شبکه‌ی^۱ یک بعدی از نقاط منظم مانند شکل (۳-۳) تشکیل می‌دهند. فاصله‌ی بین دو نقطه‌ی متوالی $\frac{2\pi}{L}$ است. اگر طول میله بلند باشد، فاصله‌ها کوتاه و نقاط تشکیل یک شبکه نیمه پیوسته را می‌دهند.



شکل (۳-۳) مقادیر مجاز q

هر مقدار q از رابطه‌ی (۳-۱۱)، نمایان گر یک مد ارتعاشی است.^۲ یک بازه‌ی اختیاری dq در فضای q انتخاب می‌کنیم و در پی یافتن تعداد مدهایی هستیم که در این بازه جای می‌گیرند. در این جا فرض می‌کنیم که L بزرگ باشد، به طوری که نقاط نیمه پیوسته باشد. البته این برای اجسام ماکروسکوپی که مورد بحث ماست درست است. از آن جا که فاصله‌ی بین نقاط $\frac{2\pi}{L}$ است، تعداد مدها برابر است با:

$$\frac{L}{2\pi} dq \quad (3-12)$$

ولی q و ω از طریق رابطه‌ی پاشندگی به هم مربوطند و می‌توانیم تعداد مدهایی را که در بازه‌ی فرکانس $d\omega$ در محدوده‌ی $(\omega, \omega + d\omega)$ قرار دارند محاسبه نماییم. چگالی حالت‌ها $g(\omega)$ ، به گونه‌ای تعریف می‌شود که $g(\omega)d\omega$ تعداد این مدها را بدهد. از مقایسه‌ی این تعریف با رابطه‌ی (۳-۱۲) می‌توان نوشت:

$$g(\omega) = \left(\frac{L}{2\pi}\right) \left(\frac{d\omega}{dq}\right) \quad \text{یا} \quad g(\omega)d\omega = \left(\frac{L}{2\pi}\right) dq$$

1. mesh

۲- توجه کنید که $q = \frac{2\pi}{\lambda}$ که λ طول موج است بنابراین کوانتس q در رابطه‌ی (۳-۱۱) معادل با کوانتس طول موج‌های مجاز در میله است.

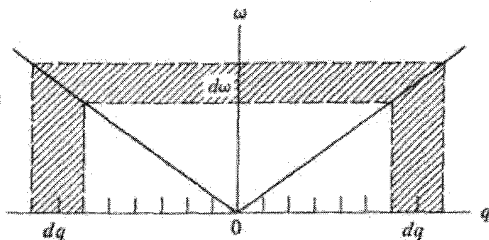
با مراجعه به شکل (۳-۴) در می‌یابیم که در محاسبه‌ی $g(\omega)$ باید مدهایی را که در ناحیه‌ی q های منفی قرار می‌گیرند را نیز منظور نماییم. این مدها نمایانگر امواج رونده به سمت چپ و مدهایی که در طرف راست قرار دارند نمایان گر انواع رونده به سمت راست هستند. در نتیجه باید در عبارت فوق $g(\omega)$ را در یک ضریب ۲ ضرب کنیم. یعنی:

$$g(\omega) = \frac{L}{\pi} \frac{1}{d\omega/dq} \quad (3-13)$$

این یک نتیجه کلی برای حالت یک بعدی است. ملاحظه می‌کنیم که چگالی حالت‌ها $g(\omega)$ توسط رابطه‌ی پاشندگی تعیین می‌شود. در رابطه‌ی خطی معادله‌ی (۳-۶) $\frac{d\omega}{dq} = v_s$ بنابراین:

$$g(\omega) = \frac{L}{\pi} \frac{1}{v_s} \quad (3-14)$$

که مقداری ثابت و مستقل از دما است.



شکل (۳-۴) شمارش مدها، منحنی پاشندگی شامل دو قسمت است: $\omega = -v_s q$, $\omega = v_s q$ ، اولی نمایانگر موج رونده به چپ و دومی نمایانگر موج رونده به راست است.

حال نتایج فوق را به حالت سه بعدی تعمیم می‌دهیم. حل معادله‌ی موج مانسته با رابطه‌ی (۳-۸) چنین است:

$$u = Ae^{i[q_x x + q_y y + q_z z]} = Ae^{iq \cdot r} \quad (3-15)$$

در این رابطه انتشار یک موج با بردار موج q ، که جهت آن در راستای انتشار موج و بزرگی آن متناسب با عکس طول موج است، توصیف شده است. در این جا مجدداً لازم است تأثیر شرایط

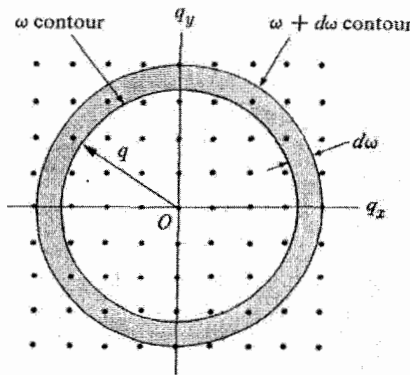
مرزی را منظور کنیم. برای سادگی مکعبی به ضلع a را در نظر می‌گیریم. با اعمال شرایط مرزی تناوبی در می‌یابیم که مقادیر مجاز q باید شرط زیر را ارضا کند:

$$e^{i(q_x L + q_y L + q_z L)} = 1$$

مقادیر آن با رابطه‌ی زیر بیان می‌گردد:

$$(q_x, q_y, q_z) = \left(n \frac{2\pi}{L}, m \frac{2\pi}{L}, l \frac{2\pi}{L} \right) \quad (3-16)$$

L, m, n اعداد صحیح هستند.



شکل (۳-۵) مقادیر مجاز q برای یک موج رونده در ۳ بعد. (تنها مقطع آن در صفحه q_x و q_y نشان داده شده است). لایه دایره‌ای سایه دار برای شمارش مدها استفاده می‌شود.

اگر هم چون شکل (۳-۵) این مقادیر را در فضای q رسم کنیم یک شبکه سه بعدی مکعبی بدست می‌آید. حجمی که به هر نقطه نسبت داده می‌شود، مساوی $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$ است. هر نقطه در شکل (۳-۵) یک مد را بیان می‌کند. حال فرض کنیم که بخواهیم تعداد مدهای داخل یک کره به شعاع q را پیدا کنیم. حجم این کره $\frac{4}{3}\pi q^3$ است و چون حجم به ازای هر نقطه مساوی $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$ می‌باشد تعداد مدها برابر است با:

$$\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \left(\frac{4\pi}{3}\right) q^3 = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} q^3 \quad (3-17)$$

که $V=L^3$ حجم نمونه است. این معادله تعداد موج های مجاز که q آنها کمتر از مقدار معینی است و در تمام جهات حرکت می کند را می دهد. اگر از معادله ی (۳-۱۷) برحسب q دیفرانسیل بگیریم خواهیم داشت :

$$\frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi q^2 dq \quad (3-18)$$

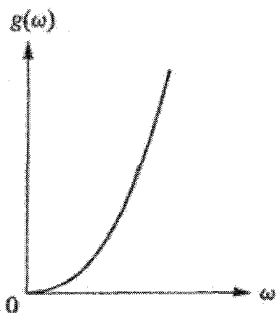
که بنابراین تعداد مدها یا نقاط واقع در لایه ای کروی بین شعاع های q و $q+dp$ (شکل ۳-۵) را می دهد. یادآوری می کنیم که چگالی حالت ها $g(\omega)$ چنان تعریف شده است که $g(\omega)d\omega$ تعداد مدهایی باشد که فرکانس آنها در بازه ی $(\omega, \omega+d\omega)$ قرار می گیرد. این تعداد را می توان از رابطه ی (۳-۱۸) و تغییر متغیر q به ω (با استفاده از رابطه ی پاشندگی) نتیجه گرفت. با استفاده از رابطه ی $\omega = v_s q$ (معادله ی ۳-۶) در می یابیم:

$$g(\omega)d\omega = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \left(\frac{\omega}{v_s}\right)^2 \frac{d\omega}{v_s}$$

این عبارت تعداد نقاط بین سطح فرکانس ثابت در ω و سطح مشابه در $(\omega+d\omega)$ را بیان می کند. از رسم این سطوح در فضای q ، کره هایی بدست می آید حجم بین آن ها همان طور که در شکل ۳-۵ نشان داده شده است یک پوسته کروی است. عبارت فوق برای $g(\omega)d\omega$ تعداد نقاط داخل آن لایه کروی است. بنابراین مطابق معادله ی فوق، $g(\omega)$ چگالی حالت ها، به صورت زیر داده می شود:

$$g(\omega) = \frac{V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{v_s^3} \quad (3-19)$$

این تابع در شکل (۳-۶) برحسب ω رسم شده است. ملاحظه می شود بر خلاف حالت یک بعدی در این جا $g(\omega)$ با ω^2 افزایش می یابد. این افزایش نمایان گر این واقعیت است که حجم لایه ی کروی در شکل ۳-۵ با q^3 و بنابراین با ω^3 افزایش می یابد، زیرا ω متناسب با q است. یک تغییر دیگر لازم است. در بحث فوق به هر حجم q یک مد منفرد را نسبت داده ایم. ولی این برای حالت سه بعدی کاملاً درست نیست، زیرا به ازای هر q ممکن است موج طولی یا عرضی باشد. در واقع سه مد مختلف وجود دارد یک طولی و دو عرضی که به یک مقدار q وابسته است. نسبت های پاشندگی برای امواج طولی و عرضی متفاوت اند زیرا آن ها سرعت های متفاوتی دارند. ولی اگر از این اختلاف چشم پوشی کنیم و سرعت یکسانی برای آن ها فرض کنیم.



شکل ۳-۶ چگالی مدها یا حالت‌ها در یک محیط کشسان

ممکن است چگالی حالت‌های کل را از رابطه‌ی (۳-۱۹) و با ضرب کردن آن در یک ضریب ۳ به دست آوریم؛ یعنی:

$$g(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{v_s^3} \quad (3-20)$$

از این فرمول در ارتباط با تئوری دبی در گرمای ویژه جامدات استفاده خواهیم کرد. ضمناً توجه کنید که $g(\omega)$ با V حجم نمونه، متناسب است. اغلب به خاطر سهولت حجم را مساوی واحد اختیار می‌کنیم و این ضریب حجم را حذف می‌کنیم.

یک نکته‌ی قابل ذکر در شرایط مرزی:

می‌توان نشان داد که وقتی طول موج مدها در مقایسه با ابعاد نمونه کوچک باشد، تابع چگالی حالت‌های $g(\omega)$ مستقل از انتخاب شرایط مرزی است. شرایط تناوبی را به گونه‌ای انتخاب کردیم که به لحاظ ریاضی برای منظور ما راحت‌ترین باشد.

۳-۴ گرمای ویژه مدل‌های انیشتین و دبی

گرمای ویژه بر مول به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$C = \frac{\Delta Q}{\Delta T}$$

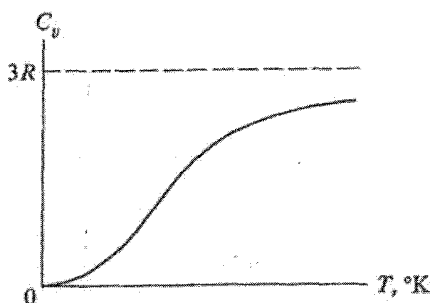
که ΔQ گرمای لازم برای افزایش دمای یک مول به اندازه ΔT می‌باشد. اگر فرایند در حجم ثابت صورت گیرد، $\Delta Q = \Delta E$ است که ΔE افزایش انرژی درونی سیستم می‌باشد. بنابراین

گرمای ویژه در حجم ثابت با رابطه ی زیر بیان می شود:

$$C_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_v \quad (3-21)$$

بستگی گرمای ویژه به دما آن چنان است که در شکل (۳-۷) نشان داده شده است. در دماهای بالا مقدار C_v به $3R$ نزدیک است که R ثابت جهانی گازهاست. از آن جا که $R = 2 \text{ cal}/^\circ \text{K} = 8/26 \text{ Joul}/^\circ \text{K}$ است، در دماهای بالا:

$C_v = 6 \text{ cal}/^\circ \text{K} - \text{mol} = 25 \text{ Joul}/^\circ \text{K} - \text{mol}$ این بازه ی دمایی معمولاً شامل دمای اتاق نیز می باشد.



شکل ۳-۷ بستگی گرمای ویژه جامدات به دما

این واقعیت که در دماهای بالا مقدار C_v بدون توجه به نوع ماده تقریباً مساوی $3R$ است به قانون دولون - پتی موسوم است.

انحراف از این قانون در دماهای پایین در شکل نشان ۳-۷ داده شده است. اگر T کاهش یابد C_v نیز کاهش می یابد و در دمای صفر مطلق کاملاً صفر می شود. مشاهده ی تجربی دیگری که مربوط به بحث های آینده ما است؛ این است که در نزدیکی صفر مطلق گرمای ویژه C_v متناسب با T^3 است.

حال مقدار C_v را به طور تئوری ارزیابی می کنیم و آن را با مقداری که از نتایج تجربی بدست می آید مقایسه می کنیم.

ابتدا تئوری کلاسیک: مدلی که برای توصیف جامدات به کار می رود این است که یک نیروی هماهنگ اتم را به جای گاه خود مقید می کند. وقتی که یک جامد را حرارت می دهیم اتم ها مانند یک نوسان گر هماهنگ ساده در اطراف جای گاه خود ارتعاش می کنند. انرژی متناظر با این حرکت همان انرژی E است که در معادله ی (۳-۲۱) ظاهر می گردد. از فیزیک مقدماتی یادآوری می کنیم میانگین E برای یک نوسان گر یک بعدی مساوی kT است.^۱ k ثابت بولتزمن است.

$$\bar{\epsilon} = kT \quad (3-22)$$

بنابراین میانگین انرژی بر اتم (با در نظر گرفتن آن به عنوان یک نوسان گر سه بعدی)، مساوی $3kT$ است. در نتیجه انرژی بر مول مساوی است با:

$$E = 3N_A kT = 3RT \quad (3-23)$$

N عدد آووگادرو و $R = N_A k$ است. اگر رابطه ی (۳-۲۲) را در (۳-۲۱) جایگزین کنیم و سپس عمل مشتق گیری را انجام دهیم خواهیم داشت:

$$C_V = 3R \quad (3-24)$$

این نتیجه قطعاً با نتایج تجربی در دماهای بالا سازگار است ولی در دماهای پایین کاملاً با شکست مواجه می شود. گرچه این تئوری یک مقدار ثابتی برای C_V پیش بینی می کند، مقدار واقعی آن هم چنان که دیده ایم با کاهش T کاهش می یابد و در واقع هنگامی که $T \rightarrow 0^\circ K$ کاملاً صفر می شود. این تناقض بین تئوری و تجربه تا سال ۱۹۰۵ یعنی تا سالی که انیشتین با استفاده از فیزیک کوانتومی آن را بر طرف کرد یکی از پارادوکس های بارز فیزیک بود.

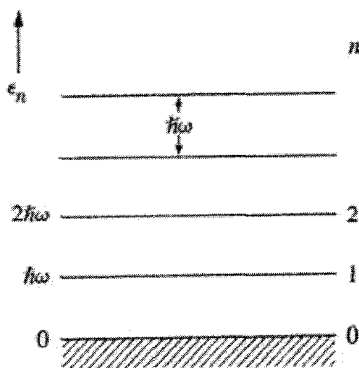
مدل انیشتین

در این مدل اتم ها به عنوان نوسان گرهای مستقل بررسی می شوند. ولی انرژی نوسان گر توسط فیزیک کوانتومی و نه نتایج تجربی (۳-۲۲) داده می شود. بر طبق فیزیک کوانتومی انرژی یک نوسان گر منزوی به مقادیر زیر محدود است:

۱- برای مثال کتاب مبانی فیزیک دانشگاهی، تألیف

$$\varepsilon_n = n\hbar\omega \quad (3-25)$$

که n یک مقدار صحیح مثبت یا صفر است^۱ ($n = 0, 1, 2, \dots$). مقدار ثابت ω فرکانس نوسان گر است. بنابراین انرژی نوسان گر کوانتیده است. تراز پایه متناظر با $n = 0$ دارای انرژی $\varepsilon_0 = 0$ و ترازهای برانگیخته یک طیف گسسته، مانند شکل ۸-۳ را تشکیل می‌دهند که در فضا به طور یک نواخت و با فواصل مساوی $\hbar\omega$ نسبت به یک دیگر قرار گرفته‌اند.



شکل ۸-۳ طیف یک نوسانگر یک بعدی بر طبق تئوری فیزیک کوانتومی

معادله‌ی (۳-۲۵) مربوط به یک نوسان گر منزوی است، ولی نوسان گرهای اتمی در یک جسم جامد منزوی نیستند. بلکه به طور پیوسته با منابع گرمایی که از همه جهت جامد را فرا گرفته‌اند بر هم کنش دارند. بنابراین انرژی نوسان گر به طور پیوسته تغییر می‌کند. ولی مقدار متوسط آن در تعادل گرمایی، با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود:

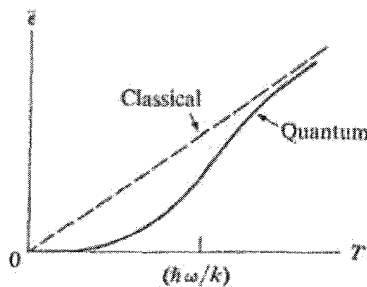
$$\bar{\varepsilon} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n e^{-(\varepsilon_n/kT)}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\varepsilon_n/kT}}$$

۱- در واقع عبارت دقیق مساوی $\varepsilon_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ است پائین ترین تراز $n = 0$ تراز پایه است و ترازهای بالاتر ترازهای تحریک شده هستند. این نشان می‌دهد که حتی در پائین تر از ممکن هر نوسان گر حرکت‌هایی دارد. این حرکت «حرکت نقطه صفر» و انرژی آن به «انرژی نقطه صفر» موسوم است. از آن جا که گرمای ویژه به حرکت نقطه صفر مربوط نمی‌شود در این جا از آن می‌گذریم.

می‌کند و جمع (سیکما) در مخرج برای تصحیح هنجار سازی قرار داده شده است.^۱ اگر رابطه‌ی (۳-۲۵) را در معادله‌ی فوق قرار دهیم و سری‌های مربوطه را محاسبه نماییم نتیجه ساده زیر بدست می‌آید.^۲

$$\bar{\varepsilon}_n = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} \quad (3-27)$$

در شکل ۳-۹ که انرژی ε برحسب دما رسم شده است ملاحظه می‌کنیم. در دماهای بالا $kT \rightarrow \varepsilon$ ، که مشابه همان مقدار کلاسیکی است. ولی با کاهش دما، انرژی ε نیز کاهش می‌یابد و به کاهش ادامه می‌دهد تا $T = 0^\circ K$ که در آن نقطه انرژی ε کاملاً صفر می‌شود. این رفتار ε در دماهای پایین نتیجه طبیعت کوانتومی حرکت است و مسئول کاهش گرمای ویژه در ناحیه دماهای پایین است که در تئوری کلاسیک انتظار آن نمی‌رود.



شکل ۳-۹ انرژی نوسان گر بر حسب دما. منحنی خط چین نتیجه‌ی کلاسیک $\varepsilon = kT$ است. توجه کنید که مقدار کوانتومی ε از مقدار کلاسیک مربوطه در دماهای پایین بسیار کمتر است.

رفتاری که در شکل نشان داده شده است را می‌توان از بحث کیفی زیر درک کرد:

۱- کتاب Alonso and fiun را ملاحظه کنید.

۲- عبارت فوق برای میانگین را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\bar{\varepsilon} = - \frac{\partial}{\partial (1/kT)} \ln \left[\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\varepsilon_n/kT} \right]$$

وقتی عبارت (۳-۲۵) را به جای ε_n جایگزین کنیم، جمع داخل لگاریتم یک سری هندسی نامتناهی می‌شود جمع جبری دیفرانسیل گیری منجر به رابطه‌ی (۳-۲۶) می‌شود.

یک نوسان گر جفت شده با یک منبع گرمایی، به اندازه مقداری که میانگین آن kT است تبادل انرژی می‌کند. در دمای بالا $kT \gg \hbar\omega$ و بدین معنی است که نوسان گر در حالت کوانتمی برانگیخته می‌باشد. از آن جا که انرژی kT خیلی بزرگ تر از پله کوانتمی $\hbar\omega$ است طبیعت کوانتمی طیف بی اهمیت می‌شود و انتظار می‌رود که رابطه ی کلاسیک $\varepsilon = kT$ بدست آید. متقابلاً در دماهای پایین $kT \ll \hbar\omega$ و انرژی تبدلی kT برای ارتقاء نوسان گر به اولین حالت برانگیخته کافی نیست. در این حالت انرژی نوسان گر خیلی کمتر از kT است و در واقع هم چنان که در بالا اشاره شد خیلی نزدیک به صفر است. در این جا طبیعت کوانتمی حرکت نقش غالب را ایفاء می‌کند. معادله ی (۲۶-۳) مشابه فرمولی است که پلانک در تئوری تابش جسم سیاه خود بکار برد. در آن جا مفهوم کوانتش انرژی برای اولین بار به عنوان یک اصل موضوعه مطرح گردید. در واقع بررسی انیشتین از گرمای ویژه بسیار نزدیک و موازی با تئوری تابش جسم سیاه پلانک است.

حال می‌توانیم انرژی جسم جامد را با معادل گرفتن هر اتم به سه نوسان گر پیدا کنیم. بنابراین مجموعاً تعداد $3N_A$ از چنین نوسان گر داریم و انرژی کل برابر است با:

$$E = 3N_A \frac{\hbar\omega_E}{e^{\hbar\omega_E/kT} - 1} \quad (3-27)$$

که فرکانس انیشتین ω_E را برای بیان فرکانس مشترک نوسان گرها به کار برده‌ایم. گرمای ویژه مطابق با رابطه ی (۲۱-۳) با مشتق گیری از رابطه ی فوق بدست می‌آید:

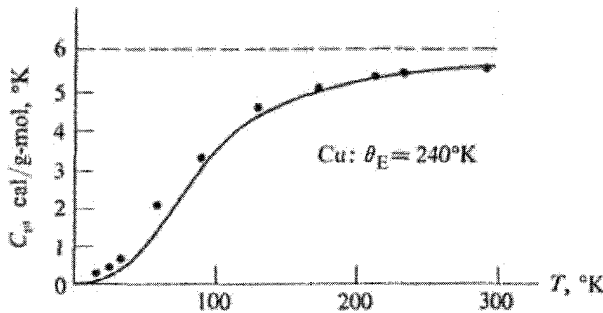
$$C_V = 3R \left(\frac{\hbar\omega_E}{kT} \right)^2 \frac{e^{\hbar\omega_E/kT}}{(e^{\hbar\omega_E/kT} - 1)^2} \quad (3-28)$$

این معادله را می‌توان به معرفی دمای انیشتین θ_E به طوری که $kT = \hbar\omega_E$ ساده کرد. عبارت (۲۸-۳) به صورت زیر در می‌آید:

$$C_V = 3R \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 \frac{e^{\theta_E/T}}{(e^{\theta_E/T} - 1)^2} \quad (3-29)$$

اگر با استفاده از این معادله C_V را بر حسب T رسم کنیم منحنی شبیه شکل (۷-۳) بدست می‌آید که لااقل به طور کیفی در تمام محدوده های دمایی با تجربه سازگار است. به ویژه توجه کنید که اگر T به سمت صفر میل کند C_V هم به سمت صفر میل می‌کند. این یک نمود جدید و مهمی از رابطه ی (۲۹-۳) است که در تئوری کلاسیک وجود نداشت.

دمای θ_E یک پارامتر تنظیم کننده است که انتخاب شده است تا بهترین هم خوانی را با مقادیر اندازه گیری شده و در تمام ناحیه های دمایی ایجاد نماید. شکل (۳-۱۰) این روش را برای مس که در آن θ_E مساوی 24°K است، نشان می دهد. این که با تنظیم یک پارامتر چنین سازگاری خوبی در ناحیه دمایی وسیعی حاصل گردیده است به راستی تحسین برانگیز است.



شکل ۳-۱۰ گرمای ویژه مس بر حسب دما نقاط مقادیر تجربی و منحنی عبارت انیشتین را بیان می کنند.

به مجردی که دمای θ_E را تعیین کردیم می توانیم فرکانس انیشتین ω_E را محاسبه کنیم بنابراین برای $\theta = 24^\circ \text{K}$ فرکانس $\omega_E = \frac{k\theta_E}{\hbar}$ در حدود $2/5 \times 10^{13} \text{S}^{-1}$ است که در ناحیه فرسوخ می باشد.

حال رفتار C_V آن چنان که با رابطه ی (۳-۲۹) در محدوده های دمایی وسیع داده شده است بررسی می کنیم. در محدوده ی دماهای بالا که $T \gg \theta_E$ می توان تابع نمایی $e^{\theta_E/T}$ را به صورت سری های توانی از θ_E/T بسط داد. با انجام این عملیات و حفظ کردن تنها بزرگ ترین جملات سری در می یابیم که $C_V = 3R$ که همان نتیجه ی کلاسیک است. البته این انتظار را داشتیم زیرا در ناحیه ی دماهای بالاتر هم چنان که قبلاً بیان شد ملاحظات کوانتمی مسأله قابل چشم پوشی است.

در ناحیه دماهای پایین که $T \ll \theta_E$ توان $e^{\theta_E/T}$ در رابطه ی (۳-۲۹) خیلی بزرگ تر از واحد است. عبارت مربوط به C_V به صورت زیر تحویل می گردد.

$$C_V \cong 3R \left(\frac{\theta_E}{T}\right)^2 e^{-\theta_E/T} \cong B(T) e^{-\theta_E/T} \quad (3-30)$$

که $B(T)$ یک تابع نسبتاً غیر حساس به دما است. به دلیل تابع نمایی $e^{-\theta_E/T}$ گرمای ویژه خیلی سریع و در واقع به طور نمایی به صفر می‌رسد و در $T = 0^\circ K$ صفر می‌شود. گرچه برای $T = 0^\circ K$ که $C_V \rightarrow 0$ با تجربه سازگار است. معادله ی (۳۰-۳) بیان می‌کند که C_V به طور نمایی به صفر می‌رسد در حالی که تجربه نشان می‌دهد که C_V به صورت T^3 به صفر می‌رسد و کاهشی که توسط رابطه ی (۳۰-۳) پیش بینی می‌شود خیلی سریع تر از آن است که تجربه اجازه می‌دهد. هم چنان که خواهیم دید این یک ضعف اساسی مدل انیشتین است.

مدل انیشتین را می‌توان به صورت زیر خلاصه کرد. در دماهای بالا نوسان گر کاملاً تحریک شده و یک انرژی توسط مساوی kT کسب می‌کند که منجر به گرمای ویژه مولی $C_V \cong 3R$ می‌شود. از طرف دیگر در دماهای پایین نوسان گر اساساً تحریک نشده است و بنابراین $C_V = 0$ به بیان دیگر نوسان گر در تراز پایه خود منجمد^۱ شده است این انجماد دلیلی است براینکه چرا مدهای ارتعاشی در مولکول‌های دو اتمی نظیر H_2 بجز در دماهای بالا در گرمای ویژه سهمی ندارند.

در اغلب ملاحظات مدل انیشتین به طور قابل ملاحظه ای موفق بوده است. نتایج آن در اغلب نواحی دمایی با تجربه سازگاری خوبی دارد ولی در دماهای پایین مدل نادرستی است و یک گرمای ویژه ای پیش بینی می‌کند که خیلی کوچک تر از مقدار مشاهده شده آن است. این عدم سازگاری توسط مدل دبی که حال بدان می‌پردازیم برطرف شده است.

مدل دبی

در مدل انیشتین فرض شده است که اتم‌ها مستقل از یک دیگر نوسان کنند. ولی ایده ی مستقل بودن اتم‌ها در اینجا درست نیست. زیرا از آن جا که اتم‌ها با هم اندرکنش دارند، حرکت یک اتم روی همسایگانش اثر می‌گذارد. حرکت این اتم‌ها به ترتیب روی همسایگان دیگر نیز اثر می‌گذارد. به طوری که حرکت یک اتم در هر جای جسم جامد و در واقع روی تمام اتم‌های موجود اثر می‌گذارد. بنابراین باید حرکت شبکه را به طور کامل، و نه یک اتم منفرد را مستقلاً، بررسی کنیم. یعنی باید مدهای گروهی شبکه را بررسی نماییم.

آشناترین مثال برای چنین مدهای گروهی امواج صوتی در جامدات است که در بخش (۳-۳) مورد بحث قرار گرفت. وقتی یک موج صوتی در یک جامد منتشر می‌شود اتم‌ها به طور مستقل

نوسان نمی کنند بلکه حرکت آن ها به صورتی هماهنگ می شود که تمام آن ها با یک دامنه و با یک نسبت فازی ثابت حرکت می کنند. دبی با استفاده از امواج صوتی به عنوان نمونه ای از مدهای شبکه، فرض کرد که تمام این مدها، مشخصه ای مشابه با امواج صوتی دارند. یعنی همه ی آن ها از نسبت پاشندگی یکسانی نظیر آن چه که در رابطه ی زیر داده شده است پیروی می کنند.

$$\omega = v_s q \quad (3-6)$$

به زودی خواهیم دید که چگونه می توان از این برای ارزیابی و محاسبه ی گرمای ویژه استفاده کرد. توجه کنید که در مدل دبی فرکانس شبکه محدوده ی وسیعی از مقادیر را می پوشاند، بنابراین چون q (یا طول موج در رابطه ی (۳-۶) تغییر کند، ω نیز تغییر می کند. این برخلاف مدل انیشتین است که در آن فرض می شود تنها یک فرکانس منفرد وجود دارد. پایین ترین فرکانس در مدل دبی $\omega = 0$ است که متناظر با $q = 0$ یا یک طول موج نامتناهی می باشد. بالاترین فرکانس مجاز توسط روشی که در زیر بحث می شود تعیین می گردد.

این فرض که رابطه ی پاشندگی (۳-۶) برای امواج شبکه با تقریب برقرار می ماند مثل این است که از گسسته بودن شبکه چشم پوشی کنیم. انتظار می رود که این تعریف برای امواج با طول موج بلند یا فرکانس پایین که در آن ها گسسته بودن مهم نیست خوب باشد ولی هنگامی که طول موج آن قدر کوتاه باشد که قابل مقایسه با فواصل بین اتمی است، قطعاً تقریب دبی رابطه ی (۳-۶) بی اعتبار می شود. حالتی را که در آن رابطه ی (۳-۶) در ناحیه ی طول موج های کوتاه شکست می خورد به تفصیل در بخش (۳-۵) مورد بحث قرار خواهد گرفت.

حال گرمای ویژه را بر مبنای مدل دبی محاسبه می کنیم. برای یافتن انرژی ارتعاش توجه می کنیم که هر مد معادل است با یک نوسان گر هماهنگ منفرد که انرژی متوسط آن با عبارت (۳-۳۶) بیان می گردد. انرژی کل ارتعاش برای تمام شبکه با رابطه ی زیر نشان داده می شود:

$$E = \int \bar{\epsilon}(\omega) g(\omega) d\omega \quad (3-31)$$

که انتگرال گیری روی تمام فرکانس های مجاز انجام شده است. در اینجا $g(\omega)$ تابع چگالی حالت ها است. بخش (۳-۳) و معادله ی (۳-۳۱) با توجه به این نوشته شده است که $g(\omega)d\omega$ تعداد مدها در ناحیه بین $(\omega, \omega + d\omega)$ می باشد و انرژی هر کدام از این مدها مساوی است با $\bar{\epsilon}(\omega)$ به بیان دیگر شبکه مرتعش را به عنوان مجموعه ای از مدهای گروهی که مستقل از یک

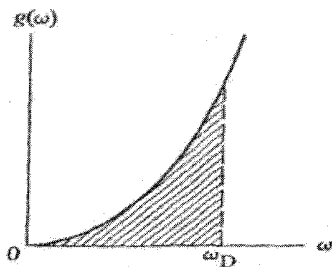
دیگر ارتعاش می کنند در نظر می گیریم^۱. در ارزیابی رابطه ی (۳-۳۱)، $\bar{\varepsilon}(\omega)$ را از رابطه ی (۳-۲۶) جایگزین می کنیم. چگالی حالت های $g(\omega)$ از رابطه ی (۳-۲۰) جایگزین می گردد زیرا در مدل دبی، فرض می شود شبکه به صورت یک محیط پیوسته ارتعاش می کند. عبارتی که برای انرژی کل استفاده می شود چنین است:

$$E = \frac{3V}{2\pi^2 v_s^3} \int_0^{\omega_D} \omega^2 \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} d\omega \quad (3-32)$$

قبل از این که انتگرال (۳-۳۲) را محاسبه نماییم لازم است حدود آن یعنی کم ترین و بیشترین مقادیر طیف را بدانیم. حد پایینی آن $\omega = 0$ و حد بالایی آن که فرکانس قطع نامیده می شود. با در نظر گرفتن این فرض که تعداد مدها باید مساوی تعداد درجات آزادی برای کل جسم جامد باشد، توسط دبی تعیین گردید. این تعداد مساوی $3N_A$ است. زیرا هر اتم سه درجه ی آزادی دارد. شرط فوق را می توان بر حسب چگالی حالت ها به صورت زیر بیان کرد:

$$\int_0^{\omega_D} g(\omega) d(\omega) = 3N_A \quad (3-33)$$

فرکانس قطع را که به فرکانس دبی موسوم است به ω_D نمایش داده ایم. شکل (۳-۱۱) حالتی را که در آن فرکانس قطع عمل می کند به طور گرافیکی نشان می دهد.



شکل ۳-۱۱ فرایند قطع دبی. ناحیه سایه زده مساوی با تعداد مدها است که برابر $3N$ می باشد.

در این جا باید بر اهمیت تعیین فرایند قطع دبی تأکید نماییم و حد بالایی فرکانس معرفی شود زیرا در غیر این صورت مشکلات بسیاری بروز خواهد کرد. مثلاً اگر فرکانس بالایی در شکل (۳-۳۲)

۱- ممکن است مدها را بطور مستقل از یکدیگر بررسی کنیم ولی اتم ها خودشان بایستی اندرکنش داشته باشند بنابراین ممکن است دو موج صوتی در یک جامد به طور مستقل انتشار یابند ولی اتم ها بایستی با یکدیگر اندرکنش کنند تا هر موج کلاً منتشر شود.

به سمت بی نهایت میل کند، چنان انرژی بی نهایتی معنی فیزیکی نخواهد داشت. (وقتی در بخش ۳-۶ راجع به امواج شبکه بحث می کنیم وجود یک فرکانس قطع بالایی به طور طبیعی بروز خواهد کرد).

فرکانس دبی را می توان با جای گزین کردن $g(\omega)$ از رابطه ی (۳-۲۰) در رابطه ی (۳-۳۳) و انتگرال مربوطه تعیین کرد. نتیجه زیر حاصل می آید:

$$\omega_D = v_s (\epsilon \pi^2 n)^{1/2} \quad (3-34)$$

که $n = \frac{N_A}{V}$ چگالی اتم ها در جامد است.

معادله ی (۳-۳۴) را به طریق هندسی نیز می توان استنتاج کرد. چنان چه پرنده^۲ متناظر با $\omega = \omega_D$ در فضای q شکل (۳-۵) را رسم کنیم، هم چنان که در شکل (۳-۱۲) نشان داده شده است، کره ای بدست می آید که تعداد نقاط q داخل آن مساوی N_A است. یادآوری می شود که هر نقطه نمایان گر سه مد است، یکی طولی و دو تا عرضی، بنابراین تعداد مدها مساوی $3N_A$ (تعداد درجات آزادی) می باشد. این سطح را کره ی دبی می نامیم و شعاع آن نیز شعاع دبی q_D نامیده می شود. بنابراین تعداد نقاط داخل کره برابر است با:

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} q_D^3$$

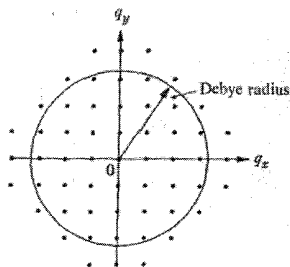
در نتیجه شعاع q_D باید چنان باشد که:

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} q_D^3 = N_A$$

با حل این معادله بر حسب q_D از این معادله در خواهیم یافت که:

$$q_D = (\epsilon \pi^2 n)^{1/2} \quad (3-35)$$

حال فرکانس دبی ω_D را می توان با جای گزین کردن مقدار q_D از رابطه ی پراکنندگی (۳-۶) پیدا کرد که به سادگی نتیجه آن به رابطه ی (۳-۳۴) منتهی می گردد.



شکل ۳-۱۲ کره دبی

با توجه به رابطه‌ی (۳-۳۲) انرژی کل به صورت زیر در می‌آید که:

$$E = \frac{3V}{2\pi^3 v_s^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega^3}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} d\omega \quad (3-36)$$

و گرمای ویژه که با دیفرانسیل‌گیری از این معادله بر حسب T بدست می‌آید برابر است با

$$C_V = \frac{3V}{2\pi^2 v_s^3} \frac{\hbar^2}{kT^2} \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^4 e^{\hbar\omega/kT}}{(e^{\hbar\omega/kT} - 1)^2} d\omega \quad (3-37)$$

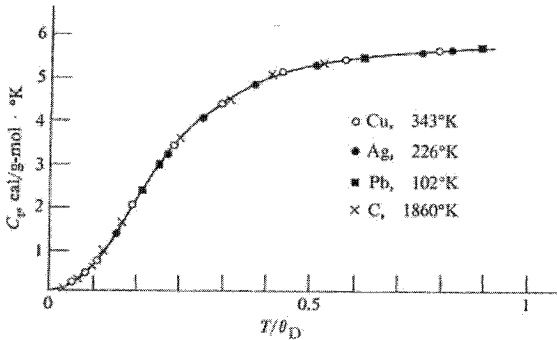
شکل ظاهری این معادله را می‌توان با تغییر متغیر بدون بعد $x = \frac{\hbar\omega}{kT}$ و تعریف دمای دبی θ_D به صورت $k\theta_D = \hbar\omega_D$ ساده‌تر کنیم. در این صورت رابطه‌ی (۳-۳۷) را می‌توان چنین نوشت.

$$C_V = 9R \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx \quad (3-38)$$

که سرعت صوت C_V را با استفاده از رابطه‌ی (۳-۳۴) حذف کرده‌ایم. معادله‌ی (۳-۳۸) گرمای ویژه را بر مبنای مدل دبی بدست می‌دهد همان نتیجه‌ای است که به دنبال آن بودیم.

برای مقایسه رابطه‌ی (۳-۳۸) با نتایج تجربی باید دمای دبی θ_D را بدانیم. این امر با انتخاب مقداری که وقتی در رابطه‌ی (۳-۳۸) جای‌گزین می‌شود بهترین هم‌خوانی را در تمام دامنه‌های دمایی داشته باشد تعیین شده است. از رابطه‌ی (۳-۳۸) ملاحظه می‌کنیم که اگر C_V را برحسب یک دمای کاهش یافته T/θ_D رسم کنیم برای تمام مواد منحنی مشابه‌ای به دست می‌آید. یعنی:

یک منحنی جهانی برای گرمای ویژه وجود دارد. این مشاهده به طور تجربی در شکل (۱۳-۳) برای چهار ماده متفاوت امتحان شده که به طور قابل ملاحظه ای درست در می آید. مقادیر θ_D در جدول هایی آمده است که در جدول ۳-۱ لیست کوتاهی از آن ها را ارائه می گردد.



شکل ۱۳-۳ گرمای ویژه برحسب دمای کاهش یافته برای چهار ماده، اعداد به دماهای دبی مربوط می شوند. به دمای دبی بالا برای الماس توجه کنید.

جدول ۳-۱ دماهای دبی

$\theta_D, ^\circ\text{K}$	ترکیبات	$\theta_D, ^\circ\text{K}$	عناصر
۶۸۰	LiF	۳۳۵	Li
۲۸۰	NaCl	۱۵۶	Na
۲۳۰	KCl	۹۱/۱	K
۴۷۰	CaF _۲	۳۴۳	Cu
۲۵۵	SiO _۲ (کوارتز)	۶۴۷	Si
---	---	۲۲۶	Ag
---	---	۱۶۲	Au
---	---	۴۲۸	Al
---	---	۳۲۵	Ga
---	---	۱۰۲	Pb
---	---	۳۷۸	Ge
---	---	۱۸۶۰	C

مقدار θ_D به ماده مربوطه بستگی دارد ولی آن چنان که جدول ۱-۳ نشان می‌دهد مقدار نوعی آن در حدود 300°K است و مقدار فرکانس دبی متناظر با آن $\omega_D = k\theta_D / \hbar$ در حدود $3 \times 10^{13} \text{S}^{-1}$ است که در ناحیه‌ی طیف فرسرخ می‌باشد. این فرکانس را هم چنین می‌توان از رابطه‌ی (۳-۳۴) به دست آورد. با جای‌گزینی مقادیر نوعی $v_s = 5 \times 10^5 \text{cm/s}$ و v_s^3 / atm $n = 10^{22}$ مقدار $\omega_D \cong 4 \times 10^{13} \text{S}^{-1}$ به دست می‌آید که از همان مرتبه بزرگی فوق می‌باشد. باید توجه کرد که $\theta_D \propto \omega_D \propto v_s n^{1/3}$ و در نتیجه:

$$\theta_D \sim \sqrt{\frac{Y}{\rho} n^{1/3}} \sim \sqrt{\frac{Y}{M}} \quad (3-39)$$

که Y مدول یانگ و M جرم اتمی است، $(\rho = nM)$. بنابراین θ_D به ضریب کشسانی ماده Y ، و جرم اتمی M بستگی دارد. هرچه بلور سخت‌تر و M کوچک‌تر باشد θ_D بزرگ‌تر است. مثلاً θ_D برای کربن که سخت و سبک است بزرگ است (1860°K) در حالی که برای سرب که نرم و سنگین است θ_D کوچک می‌باشد.

می‌توان نشان داد که C_V آن چنان که با رابطه‌ی (۳-۳۸) بیان می‌گردد مقادیر صحیح و در محدوده‌های دمایی مناسبی دارد. در دماهای بالا $T \gg \theta_D$ حد بالایی انتگرال خیلی کوچک است. بنابراین x در انتگرالده به ازاء همه‌ی مقادیر خود کوچک است و می‌توان تقریباً $e^x \cong 1+x$ را به کار برد. در اولین تقریب انتگرال، $\int_0^{\theta_D} x^2 dx = \frac{1}{3}(\theta_D/T)^3$ تبدیل می‌شود که منجر به $C_V = 3R$ خواهد شد که با قانون دولون - پتی سازگار است. این مطلب را از بحث زیر نیز می‌توان دریافت:

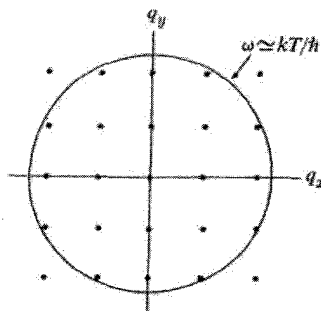
وقتی که $T \gg \theta_D$ است، هر مد نوسانی کاملاً تحریک می‌شود و دارای انرژی‌ای مساوی با مقدار کلاسیک kT است یعنی $\bar{E} = kT$ وقتی این مقدار را در رابطه‌ی (۳-۳۱) قرار دهیم در خواهیم یافت که $E = kT \int g(\omega) d\omega = 3N_A kT = 3RT$ که به $C_V = 3R$ منجر می‌شود. هم چنین توجه کنید که اشباع در گرمای ویژه هنگامی که $T \cong \theta_D$ است نیز مشاهده می‌شود. از آنجا که θ_D نوعاً به دمای اتاق نزدیک است ملاحظه می‌کنیم که C_V برای T های مساوی با دمای اتاق و بالاتر به سمت مقدار کلاسیکی خود میل می‌کند.

محدوده‌ی دماهای پایین جالب تر هستند. در این جا $T \ll \theta_D$ است و بنابراین حد بالایی انتگرال (۳-۳۸) به سمت بینهایت میل می‌کند. انتگرال منتجه $\int_0^{\infty} \frac{x^4}{(e^x - 1)^2} dx$ را می‌توان به طور تحلیلی ارزیابی کرد که مقدار $\frac{4\pi^4}{15}$ را خواهد داشت. حال می‌توان گرمای ویژه را به صورت زیر نوشت:

$$C_v = \frac{12\pi^4}{5} R(T/\theta_D)^3 \quad (3-40)$$

در این رابطه بستگی گرمای ویژه به T^3 که قبلاً به آن اشاره شد مشخص می‌گردد.

بستگی مکعبی (T^3) را ممکن است از بحث کیفی زیر نیز درک کرد: در دماهای پایین فقط تعداد معدودی مد وجود دارد. مدهایی که انرژی کوانتومی $\hbar\omega$ آن‌ها کم تر از kT است. تعداد این مدها را می‌توان با رسم یک کره در فضای Q که فرکانس آن‌ها $\omega = \frac{kT}{\hbar}$ است و شمارش تعداد نقاط داخل آن تخمین زد (شکل ۱۴-۳). این کره را ممکن است در مانستگی با کره‌ی دبی که در بالا بحث شد کره گرمایی نامید. تعداد مدهای داخل کره‌ی گرمایی متناسب با $q^3 \propto \omega^3 \propto T^3$ است. هر مدل کاملاً برانگیخته و انرژی متوسط kT دارد بنابراین انرژی کل برانگیختگی متناسب با T^4 است که منجر به یک گرمای ویژه متناسب با T^3 می‌شود که در سازگاری با رابطه‌ی (۳-۴۰) می‌باشد.



شکل ۱۴-۳ کره‌ی گرمایی که کنطور فرکانس آن $\omega = kT/\hbar$ است.

دلیل خطا در مدل انیشتین در دماهای پایین حالا مشخص می‌گردد. این مدل وجود مدهای با فرکانس پایین یا طول موج‌های بلند را نادیده می‌گیرد. به خاطر این که انرژی کوانتشی این مدها

خیلی کوچک است، حتی در دماهای خیلی پایین می‌توانند گرما را جذب کنند. در حقیقت انجماد نمایی مدها رخ نخواهد داد و اگرچه گرمای ویژه ممکن است کوچک باشد، ولی دارای یک مقدار متناهی خواهد شد.

مدل دبی، علیرغم موقعیت‌های جالب آن هنوز یک مدل تقریبی است. طبیعت تقریبی آن در این فرض نهفته است، که رابطه‌ی پاشندگی پیوسته، و برای تمام مدهای ممکن تحریکی یکسان در نظر گرفته می‌شود. طبیعت تقریبی مدل دبی با رسم θ_D برحسب T در محدوده‌ی وسیعی از دماها به طور تجربی نشان داده شده است. θ_D در هر دمایی با برآزش مقدار تجربی C_V با رابطه‌ی (۳-۳۸) در آن دما پیدا می‌شود. اگر مدل دبی کاملاً معتبر بود، مقدار θ_D که از این طریق بدست می‌آید باید از T مستقل بود ولی θ_D برحسب T تغییر می‌کند و این تغییرات به بزرگی ۱۰٪ یا حتی در مواردی بیشتر می‌باشد. برای بهبود مدل دبی لازم است تقریب طول موج بلند برداشته شود و در عوض رابطه‌ی پاشندگی صحیح و چگالی حالت‌های متناظر با آن استفاده شود. این مطلب در قسمت‌های بعد که با بخش (۳-۶) شروع می‌شود ادامه خواهد یافت.

۳-۵ فونون

فرض‌های تئوری دبی بسیار مهم و دارای مفاهیم گسترده‌ای است. دیدیم که انرژی هر مد کوانتیده، و واحد کوانتوم انرژی $\hbar\omega$ است. از آن جا که مدها امواج کشسان هستند در واقع انرژی کشسانی امواج صوتی کوانتیده‌اند. طرز عمل مانسته‌ی آن است که در کوانتش انرژی یک میدان الکترومغناطیس استفاده شده است. در آن جا طبیعت ذره‌ای میدان با معرفی فوتون بیان گردیده است. در مورد امواج کشسان موجود ذره مانندی که واحد انرژی میدان کشسان در یک مد بخصوص است فونون نامیده می‌شود. بنابراین انرژی فونون با رابطه‌ی زیر بیان می‌گردد.

$$\varepsilon = \hbar\omega \quad (۳-۴۱)$$

از آن جا که فونون نمایان گر یک موج رونده نیز هست، یک اندازه حرکت به آن نسبت داده می‌شود. در قیاس با فونون (رابطه‌ی دوپروی در بخش ۲-A را ملاحظه نمایید)، اندازه حرکت فونون با رابطه‌ی $p = \frac{h}{\lambda}$ بیان می‌گردد. که λ طول موج است. با نوشتن λ به صورت $\lambda = \frac{2\pi}{q}$ که q عدد موج است، اندازه حرکت فونون بدست می‌آید.

$$p = \hbar q \quad (۳-۴۲)$$

درست همان گونه که امواج الکترومغناطیسی را به صورت جریانی از فوتون ها در نظر می گیریم، امواج کشسان را به صورت جریانی از فونون ها که انرژی و اندازه حرکت موج را منتقل می کنند در نظر می گیریم. سرعت حرکت فونون مساوی سرعت صوت در محیط می باشد. تعداد فونون ها در یک مد در تعادل حرارتی را می توان از بررسی معادله‌ی (۳-۲۶) یافت. از آن جا که انرژی هر فونون مساوی $\hbar\omega$ است و همین طور انرژی متوسط فونون ها در یک مد با \bar{n} از رابطه‌ی (۳-۲۶) داده می شود نتیجه می شود که تعداد متوسط فونون ها در یک مد با رابطه‌ی زیر بیان می شود:

$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} \quad (۳-۴۳)$$

این تعداد بستگی به دما دارد. در $T = 0$ ، n مساوی صفر است ولی با افزایش T ، n نیز افزایش می یابد و سرانجام در دماهای بالا به $n \cong kT / \hbar\omega$ می رسد. در این جا نکته جالبی ملاحظه می کنیم. فونون ها در اثر افزایش دما به وجود می آیند و بنابراین تعداد آن ها در سیستم پایسته نیست. این برخلاف الکترون ها و فوتون ها است که تعداد آن ها پایسته است. مفهوم فونون یک مفهوم بسیار مهم در فیزیک حالت جامد است که با آن در این کتاب مجدداً مواجه خواهیم شد (در بخش ۳-۱۰ اندرکنش فوتون ها با اشکال دیگر تابش مانند پرتوهای ایکس، نوترون ها و نور را مطالعه می کنیم). این اندرکنش ها نه تنها معادلات (۳-۴۱) و (۳-۴۲) را برای انرژی و اندازه حرکت فونون تایید می کند بلکه اطلاعات ارزشمندی درباره‌ی حالت ارتعاشی جامدات به دست می آیند.

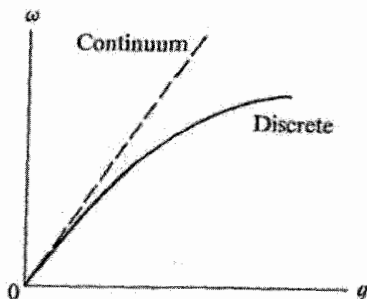
۳-۶ امواج شبکه

در بحث پیرامون امواج در جامدات، تاکنون یک جسم جامد را به صورت محیطی پیوسته که گسستگی شبکه نقش تعیین کننده‌ای در آن ایفا نمی کند در نظر گرفتیم. در این بخش به منظور برطرف کردن این ساده سازی بسیار، جسم جامد را به عنوان موجودی مرکب از اتم های گسسته (که می دانیم چنین اند) در نظر می گیریم.

مهم ترین نکته در بررسی ما شکل رابطه‌ی پاشندگی $\omega = \omega(q)$ است. دیدیم که در محدوده‌ی طول موج های بلند متناظر با $q \rightarrow 0$ ، رابطه‌ی خطی $\omega = v_s q$ به خوبی حفظ می شود. زیرا در آن جا فواصل بین اتم ها بسیار کوچک تر از طول موج است و در مقایسه‌ی آن محیط را می توان

به صورت پیوسته در نظر گرفت. به هر جهت با کاهش طول موج، q افزایش می‌یابد و گسستگی شبکه قابل ملاحظه‌تر می‌شود؛ زیرا اتم‌ها شروع به پراکنده کردن امواج می‌کنند. تأثیر این امواج محدود کردن انتشار امواج در اثر کاهش سرعت امواج است. با افزایش بیشتر q پراکنندگی بزرگ‌تر می‌شود چرا که شدت پراکنندگی با کاهش طول موج افزایش می‌یابد، (واقعی‌تری که به خوبی در فیزیک موج شناخته شده است) و سرعت کاهش بیشتری می‌یابد. تأثیر این روی منحنی پاشندگی هم چنان که شکل (۳-۱۵) نشان می‌دهد خم کردن منحنی به طرف پایین است. زیرا هم چنان که به زودی خواهیم دید شیب منحنی سرعت موج را نشان می‌دهد. حال نشان می‌دهیم که منحنی پاشندگی که از حل معادله حرکت شبکه بدست می‌آید یک شکل عمومی نظیر شکل (۳-۱۵) دارد.

برای سادگی با یک بحث کمی مربوط به شبکه یک بعدی آغاز می‌کنیم.



شکل ۳-۱۵ منحنی پاشندگی چشم‌داشتی یک شبکه ی گسسته، خط مستقیم نقطه چین تقریب مدل پیوسته را نشان می‌دهد. توجه کنید که در منحنی در $q = 0$ برهم منطبق اند.

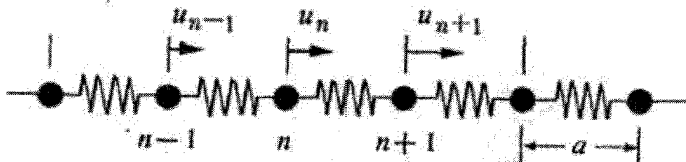
شبکه‌ی تک اتمی یک بعدی

شکل (۳-۱۶) یک شبکه‌ی تک اتمی یک بعدی با ثابت شبکه‌ی a را نشان می‌دهد. وقتی شبکه در حال تعادل است هر اتم دقیقاً در جای گاه شبکه‌ای خود قرار دارد. حال فرض کنیم شبکه شروع به ارتعاش کند به طوری که هر اتم از جای گاه خود به مقدار اندکی جابه‌جا شود. از آن جا که اتم‌ها با یک دیگر اندرکنش دارند اتم‌های گوناگون هم زمان حرکت می‌کنند و حرکت کل شبکه باید بررسی گردد.

اتم n را بررسی می‌کنیم. نیرویی که به واسطه‌ی اندرکنش با اتم $(n+1)$ ام بر این اتم وارد می‌شود برابر است با $\alpha(u_{n+1} - u_n) + \alpha(u_n - u_{n-1})$ که u_{n+1} و u_n به ترتیب جابه‌جایی‌های اتم n ام و $(n+1)$ ام و $(u_{n+1} - u_n)$ جابه‌جایی نسبی اتم‌ها است. پارامتر α ثابت نیروی بین اتمی نامیده می‌شود. این فرض که نیرو متناسب با جابه‌جایی نسبی است تحت عنوان تقریب هماهنگگی^۱ نامیده می‌شود. انتظار می‌رود برای جابه‌جایی‌های کوچک این رابطه حفظ شود. این تقریب معادل با قانون معروف هوک در تئوری مقدماتی کشسانی است (معادله‌ی ۲-۳ را ملاحظه نمایید). گویی که اتم‌ها توسط مدهای کشسانی به هم ارتباط دارند. همین‌طور نیروی وارد بر اتم n ام توسط اتم $(n-1)$ ام مساوی است با $\alpha(u_{n-1} - u_n) + \alpha(u_n - u_{n+1})$. با اعمال قانون دوم نیوتن روی اتم n ام خواهیم داشت:

$$M \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \alpha(u_{n+1} - u_n) + \alpha(u_{n-1} - u_n) = -\alpha(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) \quad (3-44)$$

که M جرم اتم است.



شکل ۱۶-۳ قطعه‌ای از یک شبکه‌ی اتمی. پیکان‌ها نمایانگر جابه‌جایی‌های اتمی از موضع تعادل خود هستند. (جابه‌جایی بزرگ‌تر از آن هستند که نمایش داده شده‌اند). فنرها نمایانگر نیروهای بین‌اتم‌ها هستند.

توجه کنید که فقط اندرکنش بین اتم n ام با نزدیک‌ترین همسایه‌ها را در نظر گرفته‌ایم و از اندرکنش بین این اتم با اتم‌های دیگر صرف‌نظر کرده‌ایم. گرچه این اندرکنش‌ها کوچک هستند، ولی چنان‌چه نیروی سرب‌بر حسب فاصله کاهش یابد دیگر قابل‌نظر کردن نیستند و باید در محاسبات واقعی به حساب آیند. به هر صورت تعریف سده شده (۳-۴۴) برای نمایش این مفهوم جدید فیزیکی بدون وارد شدن در پیچیدگی‌های ریاضی متناسب است.

در تلاش برای حل معادله‌ی (۳-۴۴) توجه کردیم که حرکت اتم n ام با اتم‌ها $(n+1)$ ام و $(n-1)$ ام جفت شده است. به‌طور مشابه حرکت اتم $(n+1)$ ام به دو اتم همسایه‌اش مرتبط

است و به همین ترتیب برای اتم های دیگر. به بیان ریاضی باید معادله‌ی حرکتی مشابه با (۸-۳) برای هر اتم در شبکه بنویسیم. نتیجه‌ی آن N معادله‌ی دیفرانسیل جفت شده است که باید به طور هم زمان حل گردند. N تعداد کل اتم هاست. علاوه بر آن شرایط مرزی که به اتم های انتهایی شبکه اعمال می گردد نیز باید به حساب آیند. برای این معادله حلی به صورت زیر ارائه می دهیم:

$$u_n = Ae^{i(qx_n - \omega t)} \quad (3-45)$$

که X_n موقعیت تعادل اتم n ام است یعنی $X_n = n\alpha$. این معادله یک موج رونده را نشان می دهد که تمام اتم ها با فرکانش مشابه ω و دامنه یکسان A نوسان می کنند. آن چنان که از چنین موجی انتظار می رود فاز اتم ها با هم درگیر می شوند به طوری که فاز منظمأ از یک اتم به اتم دیگر به اندازه‌ی مقدار $q\alpha$ افزایش می یابد.

توجه کنید که به دلیل تقارن انتقالی شبکه یعنی حضور جرم های مساوی در بازه های مساوی، فقط حل (۳-۴۵) امکان پذیر است. به بیان دیگر اگر مقادیر جرم ها کاتوره ای باشند یا اگر جرم ها به طور کاتوره ای در امتداد یک خط توزیع شده باشند، انتظار می رود که حل معادله یک موج شدیدأ مستهلک شونده باشد. در حالت حدی حتی ممکن است اصلاً حل موج منتشر شونده ای بدست نیاید. در بحث سیستم های گسترش یافته یک مد ارتعاشی نظیر (۳-۴۴) که تمام اجزاء سیستم با فرکانس یکسان نوسان می کند مد بهنجار نامیده می شود. در مورد شبکه، مد بهنجار، یک موج منتشر شونده است.

اگر حل (۳-۴۵) را در رابطه (۳-۴۴) جای گزین نماییم و کمیت های مشترک (دامنه و عامل های زمانی) را حذف کنیم خواهیم داشت:

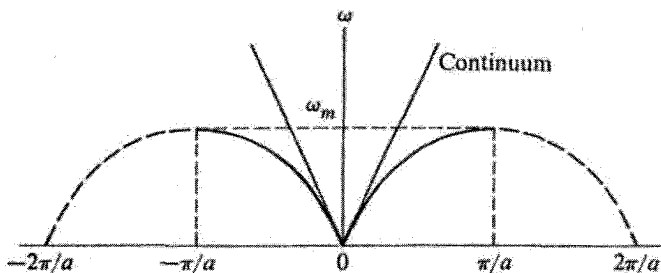
$$M(-\omega^2)e^{iqna} = -\alpha \left[\gamma e^{iqna} - e^{iq(n+1)a} - e^{iq(n-1)a} \right]$$

این معادله را می توان با حذف عامل مشترک e^{iqna} و استفاده از فرمول اولر صورت زیر بنویسیم:

$$\omega = \omega_m \left| \sin\left(\frac{qa}{2}\right) \right| \quad (3-46)$$

به خاطر معنی فیزیکی فرکانس ω فقط مقادیر مثبت را اختیار می کند. $\omega_m = \left(\frac{4\alpha}{M}\right)^{1/2}$

معادله‌ی (۳-۴۶) که رابطه‌ی پاشندگی برای شبکه یک بعدی است همان نتیجه‌ای است که به دنبال آن بودیم. این تابع در شکل (۳-۱۷) رسم شده است. ملاحظه می‌شود که منحنی پاشندگی سینوسی است و دوره‌ی تناوب آن در فضای q مساوی $\frac{2\pi}{a}$ و بیشینه‌ی فرکانس آن ω_m است. رابطه‌ی پاشندگی (۳-۴۶) چندین خاصیت مهم و جالب دارد که آن را نسبتاً به تفصیل بررسی می‌کنیم. زیرا این خواص نه تنها بر شبکه‌های یک بعدی بلکه بر شبکه‌های دو و سه بعدی اعمال می‌گردند.



شکل ۳-۱۷ منحنی پاشندگی ω برحسب q برای یک شبکه یک بعدی که با نزدیک‌ترین همسایگانش اندرکنش دارد. منحنی تناوبی است ولی در نواحی خارج از محدوده‌ی $-\frac{\pi}{a} < x < \frac{\pi}{a}$ به صورت خط چین رسم شده است. (متن درسی را ملاحظه نمایید)

(i) محدوده‌ی طول موج‌های بلند

از آن جا که منحنی پاشندگی تناوبی و نسبت به مبدأ متقارن است، می‌توانیم در اینجا بحث خود را به ناحیه‌ی $0 < q < \frac{\pi}{a}$ محدود کنیم. ملاحظه می‌کنیم فرکانس‌ها محدوده‌ی پیوسته $0 < \omega < \omega_m$ را شامل می‌شوند. این فرکانس‌ها و تنها این‌ها از شبکه عبور می‌کند در حالی که بقیه فرکانس‌ها شدیداً تضعیف می‌شوند. بنابراین شبکه هم چون یک صافی مکانیکی پایین‌گذر عمل می‌کند. در محدوده‌ی طول موج‌های بلند که $q \rightarrow 0$ رابطه‌ی پاشندگی (۳-۴۶) را می‌توان به صورت تقریبی زیر نوشت:

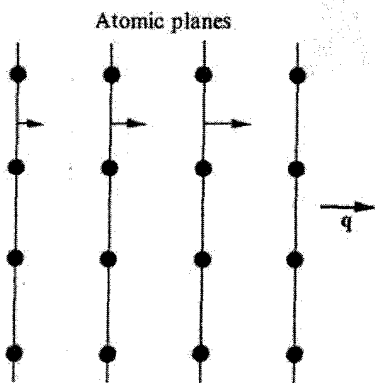
$$\omega = \left(\frac{\omega_m a}{2}\right)q \quad (3-47)$$

که یک رابطه‌ی خطی بین ω و q است. این نتیجه قابل انتظار است زیرا در این محدوده شبکه هم چون یک جسم کشسان پیوسته عمل می‌کند. سرعت صوت U_s توسط رابطه $\frac{\omega_m a}{\rho}$ بیان می‌گردد. می‌توان رابطه‌ی (۳-۴۷) را برای ارتباط بین ثابت نیروی بین اتمی α و مدول یانگ Y بخش (۳-۲) استفاده کرد.

شبکه‌ی مکعبی شکل (۳-۱۸) را در نظر می‌گیریم. ارتعاشات اتمی معادلات مشابه با آن که برای شبکه‌ی یک اتمی به کار می‌رود را ارضاء می‌کند با مساوی قرار دادن سرعت‌های صوت که از (۳-۴۷) و (۳-۷) بدست می‌آیند در می‌یابیم که $\frac{\omega_m a}{\rho} = \sqrt{\frac{Y}{\rho}}$ جای‌گزینی $\omega_m = \left(\frac{4\alpha}{M}\right)^{1/2}$ و در این معادله به رابطه‌ی زیر منجر خواهد شد:

$$\alpha = aY \quad (3-48)$$

که رابطه‌ی مفیدی برای تخمین زدن α است. با قرار دادن مقادیر نوعی برای x و y مقدار نوعی $\alpha = (5 \times 10^{-11})(10^{11}) = 5 \times 10^2 \text{ dynes/cm}$ به دست می‌آید.



شکل ۳-۱۸ حرکات صفحات اتمی

با افزایش q منحنی پاشندگی شروع به انحراف از خط مستقیم می‌کند و همان‌طور که شکل (۳-۱۵) پیش‌بینی می‌کند به سمت پایین خم می‌شود. سرانجام در $q = \frac{\pi}{a}$ منحنی اشباع می‌شود که در آن فرکانس ماکزیمم ω_m مساوی است با:

$$\omega_m = \left(\frac{4\alpha}{M}\right)^{1/2} \quad (3-49)$$

بستگی این فرکانس به ثابت نیرو و جرم اتمی آن چنان است که برای یک نوسان گر هماهنگ انتظار می‌رود به ویژه این که، ω_m معکوساً متناسب با $M^{1/2}$ است. مقدار ω_m را می‌توان تخمین زد. با جای گزینی $\text{cm} / \text{دین} = 5 \times 10^3$ و $\alpha = 2 \times 10^{-24} \text{ g}$ (برای هیدروژن)، $\omega_m \cong 2 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ به دست می‌آید که در ناحیه ی فرو سرخ است.

نتایج فوق در مورد رفتار منحنی پاشندگی در ناحیه ی $0 < q < \frac{\pi}{a}$ را می‌توان از بحث کیفی زیر نیز درک کرد. برای q های کوچک، $a \gg \lambda$ چنان که شکل (۱۹-۳) الف نشان می‌دهد، اتم‌ها اساساً به طور هم فاز نسبت به یک دیگر حرکت می‌کنند. بنابراین نیروی بازگرداننده وارد بر اتم از طرف همسایگانش کوچک و ω نیز کوچک می‌باشد. در واقع برای $q = 0$ ، طول موج λ به سمت بینهایت میل می‌کند و تمام شبکه به صورت یک جسم صلب حرکت می‌کند که نتیجه ی آن صفر شدن نیروی بازگرداننده است. این توضیح می‌دهد که چرا در $q = 0$ ، فرکانس ω صفر است. در طرف مقابل، منحنی در $q = \frac{\pi}{a}$ به حد می‌رسد (شکل ۱۹-ب که در آن $\lambda = 2a$ است). چنان چه در شکل دیده می‌شود اتم‌های همسایه حالا در فاز مخالف‌اند و نیروی بازگرداننده و فرکانس در بیشینه ی مقدار خود هستند.

این بحث را می‌توان با معرفی یک ثابت نیرو که به q بستگی دارد به یک بحث کمی تبدیل کرد. اگر به رابطه ی (۳-۴۴) برگردیم با جای گزینی $u_{n\pm 1} = u_n e^{\pm iqa}$ که از رابطه ی (۳-۴۵) به دست می‌آید، معادله ی (۳-۴۴) را می‌توان به شکل زیر تحویل کرد.

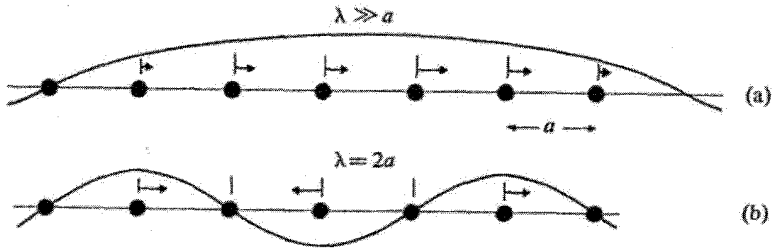
$$M \frac{d^2 u_n}{dt^2} = - \left[4\alpha \sin^2 \left(\frac{qa}{2} \right) \right] u_n \quad (3-50)$$

که متناظر است با یک نوسان گر هماهنگ با ثابت نیروی:

$$\alpha(q) = 4\alpha \sin^2 \left(\frac{qa}{2} \right) \quad (3-51)$$

این ثابت نیرو به q یا λ بستگی دارد زیرا حرکت اتم‌ها به هم مربوط‌اند. فرکانس نوسان گری که توسط رابطه ی (۳-۵۱) توصیف می‌شود با فرمول آشنایی نوسان گر هماهنگ $\omega = \sqrt{\frac{\alpha(q)}{M}}$ بیان

می شود که دقیقاً رابطه ی پاشندگی (۳-۴۶) که قبلاً بدست آمد منجر می گردد.



شکل ۳-۱۹ (الف) جابه جایی های اتمی در محدوده ی طول موج های بلند (ب) جابه جایی های اتمی در

طول موج $\lambda = 2a$ متناظر است با $q = \frac{\pi}{a}$

(ii) سرعت های فاز و گروه

سرعت امواج شبکه کدام است؟ در تئوری امواج تمایزی بین انواع سرعت یعنی سرعت فاز و سرعت گروه وجود دارد. برای یک رابطه ی پاشندگی اختیاری سرعت فاز و گروه با رابطه ی زیر بیان می گردد:

$$v_p = \frac{\omega}{q} \quad (3-52)$$

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial q} \quad (3-53)$$

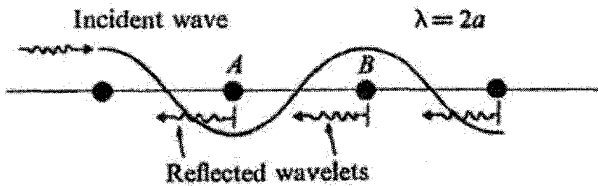
تمایز فیزیکی بین این سرعت ها به این صورت است که v_p سرعت انتشار برای یک موج خالص با فرکانس و عدد موج دقیقاً معین ω و q است، در حالی که v_g سرعت یک پالس موج است که میانگین فرکانس و عدد موجش با ω و q تعیین می گردد. از آن جا که انرژی و اندازه حرکت از طریق پالس ها (و نه امواج خالص) منتقل می گردند، سرعت گروه به لحاظ فیزیکی با معنی تر از سرعت فاز است.

حال سرعت گروه v_g را برای شبکه ی گسسته بررسی می کنیم. در محدوده ی طول موج های بلند که $\omega = v_s q$ است، v_g مساوی با v_p و هردو مساوی سرعت صوت v_s می باشند. در این حالت حدی شبکه مانند یک محیط غیر پاشنده، رفتار می کند و هیچ گونه پاشندگی صورت

نمی‌گیرد. ولی با افزایش q همان گونه که در شکل (۱۷-۳) ملاحظه می‌شود v_g شیب منحنی پاشندگی می‌شود [رابطه‌ی (۳-۵۳) را ملاحظه نمایید] دلیل این کاهش این است که چون q افزایش یابد هم چنان که قبلاً در این بخش بیان شد، پراکندگی موج توسط اتم‌های جدای از هم، مشخص‌تر می‌گردد.

یک وضعیت به ویژه جالب در $q = \frac{\pi}{a}$ یعنی جایی که در شکل (۱۷-۳) سرعت گروه v_g صفر می‌شود بروز می‌کند. چه خصوصیت یگانه‌ای این مقدار q دارد که منجر به صفر شدن v_g می‌گردد؟

در این مقدار q ، طول موج $\lambda = 2a$. در نتیجه امواج کوچک پراکنده شده از اتم‌های همسایه به اندازه‌ی مقدار π باهم اختلاف فاز دارند (شکل ۲۰-۳) ولی هنگامی که موجک‌های بازتاب یافته از B به موجک‌های بازتاب یافته از A می‌رسند هر دو هم‌فازند. از آن جا که این مطلب در مورد بقیه‌ی موجک‌ها نیز اعمال می‌گردد، نتیجه می‌شود که در $q = \frac{\pi}{a}$ تمام موجک‌های پراکنده شده به طور سازنده تداخل می‌کنند و موج بازتاب در ماکزیمم خود می‌باشد. این وضعیت به طور واضح مشابه شرط براگ در بخش (۳-۲) است ولی در این جا به امواج کشسان اعمال گردیده است. حال می‌توان از نظر فیزیکی فهمید که چرا در $v_g = 0$ ، $q = \frac{\pi}{a}$ در این حالت وقتی موج بازتابی با موج فرودی ترکیب یابد آن قدر قوی است که منجر به یک موج ایستاده شود که البته سرعت گروه آن صفر است.



شکل ۲۰-۳ بازتاب براگ امواج شبکه

ظهور مجدد شرط براگ در بحث حاضر جنبه‌ی مهمی از پدیده پاشندگی است. تعجب آور نیست که چنین شرطی در این جا نیز ظاهر شده است، زیرا این نتیجه‌ای از طبیعت موجی میدان فرودی و همین‌طور تناوبی بودن شبکه است. طبیعت ویژه میدان و این که میدان الکترومغناطیسی یا آکوستیکی باشد، مهم نیست.

(iii) تقارن در فضای q : اولین ناحیه ی بریلیون

منحنی پاشندگی شکل (۱۷-۳) خواص تقارنی جالبی دارد. این منحنی در فضای q تناوبی و نسبت به بازتاب حول $q=0$ متقارن است. نشان خواهیم داد که این تقارن ها اتفاقی نیست بلکه مستقیماً از تقارن انتقالی شبکه ی واقعی پیروی می کنند.

ابتدا تقارن تناوبی را بررسی می کنیم که شاید جالب ترین خاصیت باشد. رابطه ی پاشندگی (۴۴-۳)

نشان می دهد که $\omega(q)$ در فضای q تناوبی و دوره ی تناوب آن مساوی $\frac{2\pi}{a}$ است، یعنی:

$$\omega\left(q + \frac{2\pi}{a}\right) = \omega(q) \quad (3-54)$$

منشأ فیزیکی این مطلب با مثال زیر روشن می شود: نقاط $q = \frac{2\pi}{a}$ و $q' = q + \frac{2\pi}{a}$ را در نظر

بگیرید. طول موج های متناظر با این مقدار به ترتیب $\lambda = 4a$ و $\lambda' = \frac{4a}{5}$ است و در شکل (۲۱-۳)

الف) رسم شده است. با توجه به این شکل در می یابیم که این دو موج دقیقاً حرکت فیزیکی یکسانی را نشان می دهند. موج کوتاه تر نوسان های بیشتری دارد. ولی هم چنان که حرکت خود اتم ها (تنها کمیت قابل دسترس برای مشاهده) بیان می دارد، شکل و ترکیب این دو موج از لحاظ فیزیکی یکسان هستند. بنابراین دومد باید فرکانس یکسانی داشته باشند. نتیجه ی مشابه ای را می توان درباره ی هر دو نقطه ی q و q' را در نظر بگیرید. طول موج های متناظر با این مقدار به

ترتیب $\lambda = 4a$ و $\lambda' = \frac{4a}{5}$ است و در شکل (۲۱-۳) الف) رسم شده است. با توجه به این شکل

در می یابیم که این دو موج دقیقاً حرکت فیزیکی یکسانی را نشان می دهند. موج کوتاه تر نوسان های بیشتری دارد ولی هم چنان که حرکت خود اتم ها (تنها کمیت قابل دسترس برای مشاهده) بیان می دارد، شکل و ترکیب این دو موج از لحاظ فیزیکی یکسان هستند. بنابراین دومد باستی فرکانس یکسانی داشته باشند. نتیجه ی مشابه ای را می توان درباره ی هر دو نقطه ی q و

q' که برای هر n صحیح، $q' = q + n\left(\frac{2\pi}{a}\right)$ است، به دست آورید. این توضیح می دهد که چرا

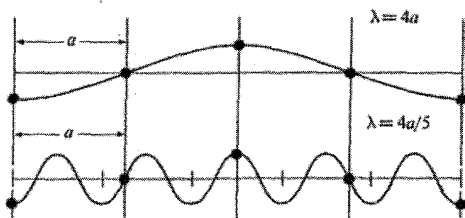
فرکانس ω یک تابع تناوبی از q با دوره ی تناوب $\frac{2\pi}{a}$ است.

این بحث نشان می دهد که در یک شبکه گسسته طول موج مربوط به یک موج معین کمیت یگانه‌ای نیست. زیرا برای این موج تعداد زیادی q معادل می توان اختصاص داد که همه در فضای q با انتقال هایی مساوی $\frac{n\pi}{a}$ به هم مربوط اند. برای هر یک از این q ها یک طول موج متناظر وجود دارد. بنابراین به منظور ارائه ی یک نمایش یگانه باید یک بازه ی معین در فضای q انتخاب کرد که طول آن مساوی دوره ی تناوب $\frac{2\pi}{a}$ است. در حقیقت این انتخاب کاملاً اختیاری است ولی راحت تر و مناسب تر آن است که q در محدوده ی زیر باشد:

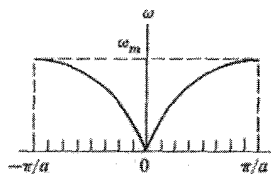
$$-\frac{\pi}{a} < q < \frac{\pi}{a}$$

برای چنین انتخابی یک موج با q یگانه و بنابراین λ یگانه تعریف کردیم. این انتخاب به گونه ای است که λ بیشترین مقدار ممکن و در توافق با مجموعه‌ای از جابه جایی های اتمی باشد. طول موج های متناظر با نوسان های اضافی و غیر قابل مشاهده بین اتم ها حذف شده اند. منحنی پاشندگی شبکه محدود به بازه ی انتخابی در شکل (۲۱-۳) رسم شده است. شکل (۲۱-۳ج)

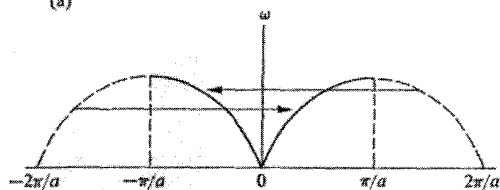
بعضی از نواحی معادل بازه $0 < q < \frac{\pi}{a}$ و بعضی دیگر که معادل بازه $-\frac{\pi}{a} < q < 0$ می باشند را نشان می دهد. بازه های $0 < q < \frac{\pi}{a}$ و $-\frac{\pi}{a} < q < 0$ معادل یک دیگر نیستند زیرا آن ها را نمی توان با انتقالی مساوی $\frac{n\pi}{a}$ به هم مربوط کرد.



(a)



(b)



(c)

(ب) ناحیه $-\frac{\pi}{a} < q < \frac{\pi}{a}$ برای این که طول موج یگانه ای برای همه ی نوسان های فیزیکی در یک شبکه یک بعدی بدهد کافی است. (ج) نواحی ای در فضای q که با پیکان به همدیگر ارتباط داده شده اند و از لحاظ فیزیکی معادل یکدیگرند.

بازه ی $-\frac{\pi}{a} < q < \frac{\pi}{a}$ در واقع اولین ناحیه بریلیون برای یک شبکه ی یک اتمی است. (بخش ۷-۲ را ملاحظه نمایید) در نتیجه می توانیم بررسی خود را در فضای q به اولین ناحیه ی بریلیون محدود کنیم، و نواحی بالاتر را نادیده بگیریم. زیرا نشان دادیم آن نواحی معادل اولین ناحیه ی بریلیون می باشند. این یک سهولت ریاضی است که ما از آن در شبکه ی سه بعدی و هم چنین در بحث های بعدی مربوط به حالت های الکترون در بلور استفاده خواهیم کرد. هم چنین توجه کنید که شرط براگ در دو انتهای ناحیه یعنی $\pm \frac{\pi}{a}$ ارضاء می شود و این در شبکه های دو و سه بعدی نیز درست است.

بعد از این به تقارن بازتابی در فضای q می پردازیم که در آن :

$$\omega(-q) = \omega(q) \quad (3-55)$$

برای اثبات رابطه فوق توجه کنید به شرطی که $q > 0$ یک مد q نمایان گر یک موج رونده به طرف راست در شبکه است [رابطه ی (۳-۴۵) را ملاحظه نمایید]. مد $-q$ نمایان گر یک موج با همان طول موج ولی به طرف چپ است. از آن جا که دو طرف شبکه معادل یک دیگرند، به هر

دو موج به طور یکسان پاسخ می‌دهد و هم چنان که رابطه ی (۳-۵۵) بیان می‌دارد، فرکانس‌ها باید یکسان باشند، مطابق این بحث، خاصیت‌های تقارن بایستی به طور کلی و بدون توجه به اندرکنش بین اتم‌ها درست باشند زیرا این خواص از تقارن شبکه‌ی واقعی پیروی می‌کنند. مثلاً اگر اندرکنش‌های دیگر علاوه بر آن‌هایی که با نزدیک‌ترین همسایه صورت می‌گیرد را شامل نماییم، منحنی‌های پهنایی بسیار پیچیده تر از (۳-۴۶) خواهد شد ولی تقارن‌های انتقالی بازتاب در فضای q معتبر می‌مانند.

(iv) تعداد مدها در اولین ناحیه

حال باید آثار شرایط مرزی را روی ارتعاشات یک شبکه‌ی گسسته بررسی نماییم. هم چون حالت مربوط به خط پیوسته (بخش ۳-۳) فرض می‌کنیم شرایط مرزی تناوبی باشد؛ بدین معنی که اولین و آخرین اتم دقیقاً نوسان یکسانی داشته باشند. با اعمال این شرط روی حل (۳-۴۵) و در قیاس با حالت پیوسته در می‌یابیم که تنها مقادیر مجاز q عبارتند از:

$$q = n \frac{2\pi}{L} \quad (3-56)$$

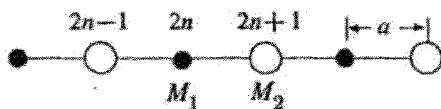
که ... و $n = 0, \pm 1, \pm 2$ آن چنان که در شکل (۳-۲۱) نشان داده شده است، این نقاط به یک شبکه با فواصل مساوی با $\frac{2\pi}{L}$ تبدیل خواهند شد. وقتی L بزرگ باشد، هم چون هر شبکه‌ای با اندازه‌ی ماکروسکوپی که تاکنون با آن مواجه بوده ایم، نقاط مجاز نزدیک یک دیگر خواهند شد و توزیع آن‌ها در امتداد محور q نیمه پیوسته خواهد شد. تعداد کل نقاط درون اولین ناحیه مساوی و نتیجه‌ی مهم است که در حالت کلی درست است. تعداد کل نقاط q مجاز مساوی تعداد یاخته‌های واحد در شبکه است. این نتیجه گیری قابل انتظار است، زیرا مقادیر q داخل منطقه‌ی بریلیون تمام مدهای ارتعاشی شبکه را به طور یگانه توصیف می‌کند. بنابراین تعداد این مقادیر باید مساوی تعداد درجات آزادی در شبکه یعنی N باشد.

در آخر به یک نوع حرکت شبکه که کلی تر از آنچه تاکنون بررسی کرده ایم اشاره می‌کنیم. وقتی چندین موج به طور هم زمان در شبکه انتشار یابند، یک اتم در آن واحد با تمام فرکانس‌های مربوطه ارتعاش می‌کند. با برهم نهی تمام مدهای بهنجار می‌توان هر حرکت اختیاری را در شبکه

ایجاد کرد. این نکته را می‌توان به کمک تحلیل فوریه به صورتی شبیه به آن چه در بحث مربوط به فنر مرتعش استفاده می‌شود اثبات کرد^۱.

شبکه ی دو اتمی یک بعدی

حال شبکه‌ی دو اتمی یک بعدی را در نظر می‌گیریم. شبکه ی دو اتمی علاوه بر داشتن خواص شبکه‌ی اتمی خصوصیات مهمی مخصوص به خود دارد. شکل (۳-۲۲) یک شبکه‌ی دو اتمی را نشان می‌دهد که یاخته‌ی واحد آن از دو اتم به جرم های M_1 و M_2 تشکیل شده اند. فاصله‌ی بین دو اتم همسایه a است به عنوان مثالی از یک شبکه ی دو اتمی می‌توان NaCl نام برد که جرم‌های آن اتم های سدیم و کلر هستند.



شکل ۳-۲۲ یک شبکه ی دو اتمی یک بعدی. طول یاخته واحد $2a$

حرکت این شبکه را می‌توان به شکلی مشابه حرکت شبکه‌ی یک بعدی بررسی کرد از آن جا که دو نوع اتم مختلف وجود دارد می‌توانیم دو معادله‌ی حرکت بنویسیم. از قیاس با (۳-۴۴) داریم:

$$M_2 \frac{d^2 u_{2n+1}}{dt^2} = -\alpha(2u_{2n+1} - u_{2n} - u_{2n+2}) \quad (3-57)$$

$$M_1 \frac{d^2 u_{2n+2}}{dt^2} = -\alpha(2u_{2n+2} - u_{2n+1} - u_{2n+3})$$

که n یک اندیس صحیح است. اندیس‌ها به گونه‌ای هستند که تمام اتم‌ها با جرم M_1 با اعداد زوج و تمام اتم‌های با جرم M_2 با اعداد فرد مشخص شده‌اند. دو معادله‌ی (۳-۵۷) جفت شده‌اند. با نوشتن مجموعه‌ی مشابه‌ی از معادلات برای هر یاخته در بلور، $2N$ معادله‌ی دیفرانسیل جفت شده داریم که بایستی به طور هم‌زمان حل شوند (N تعداد یاخته‌های واحد در شبکه است). برای حل این معادلات به بحث مربوط به شبکه یک اتمی و به دنبال مد بهنجار برای شبکه‌ی دو اتمی می‌گردیم و حلی به صورت موج رونده ارائه می‌دهیم:

$$\begin{bmatrix} u_{2n+1} \\ u_{2n+2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_1 e^{iqx_{2n+1}} \\ A_2 e^{iqx_{2n+2}} \end{bmatrix} e^{-i\omega t} \quad (3-58)$$

که به شکل یک ماتریس نوشته شده است. تمام اتم‌ها با جرم M_1 دارای دامنه‌ی A_1 و تمام اتم‌های با جرم M_2 دارای دامنه‌ی A_2 می‌باشند. با جای‌گزینی حل (3-58) در (3-57) و انجام عملیاتی برای ساده‌سازی در خواهیم یافت:

$$\begin{bmatrix} 2\alpha - M_1\omega^2 & -2\alpha \cos(qa) \\ -2\alpha \cos(qa) & 2\alpha - M_2\omega^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix} = 0 \quad (3-59)$$

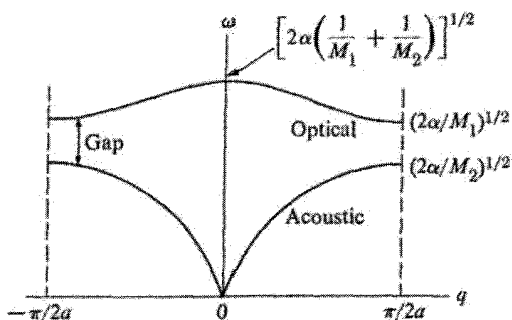
که این یک معادله‌ی ماتریسی و معادل با مجموعه‌ای از دو معادله هم‌زمان از مقادیر مجهول A_1 و A_2 است. از آن‌جا که معادلات همگن تنها در صورتی حل غیر صفر وجود دارد که دترمینان ماتریس در (3-59) صفر شود. این به معادله‌ی پایه‌ی منجر خواهد شد:

$$\begin{vmatrix} 2\alpha - M_1\omega^2 & -2\alpha \cos(qa) \\ -2\alpha \cos(qa) & 2\alpha - M_2\omega^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (3-60)$$

معادله فوق یک معادله‌ی درجه‌ی دوم از ω^2 است که می‌توان به سادگی آن را حل کرد. دو ریشه‌ی آن عبارتند از:

$$\omega^2 = \alpha \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \alpha \sqrt{\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2(qa)}{M_1 M_2}} \quad (3-61)$$

بنابراین دو رابطه‌ی پاشندگی متناظر با دو علامت مثبت یا منفی در رابطه‌ی (3-61) وجود دارد و در نتیجه دو منحنی پاشندگی یا دو شاخه متناظر با شبکه‌ی دو اتمی وجود دارد. این منحنی در شکل (3-23) نشان داده شده است.



شکل ۲۳-۳ دو شاخه پاشندگی یک شبکه‌ی دو اتمی ($M_1 < M_2$)، گاف فرکانس نشان داده شده است.

منحنی پایین تر که متناظر با علامت منفی در رابطه‌ی (۳-۶۱) است شاخه‌ی آکوستیکی و شاخه‌ی بالایی شاخه‌ی اپتیکی نام دارد. شاخه‌ی آکوستیکی از نقطه‌ی $q = 0$ و $\omega = 0$ شروع می‌شود. با افزایش q ابتدا منحنی به طور خطی افزایش می‌یابد (که توضیح می‌دهد چرا این شاخه آکوستیکی نام دارد) ولی سپس آهنگ افزایش منحنی کاهش می‌یابد. سرانجام همان گونه که در رابطه‌ی (۳-۶۱) ملاحظه می‌شود در فرکانس $(\frac{2\alpha}{M_2})^{1/2}$ منحنی در مقدار $q = \frac{\pi}{2a}$ اشباع می‌شود. فرض شده است که $M_1 < M_2$ شاخه‌ی اپتیکی از $q = 0$ با یک فرکانس متناهی

$$\omega = \left[2\alpha \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \right]^{1/2}$$

شروع می‌شود و سپس به آهستگی کاهش می‌یابد و در $q = \frac{\pi}{2a}$ در فرکانس $(\frac{2\alpha}{M_1})^{1/2}$ اشباع می‌شود. فرکانس این شاخه در تمام محدوده‌ی q به طور قابل ملاحظه‌ای تغییر نمی‌کند و در واقع اغلب می‌توان آن را تقریباً ثابت گرفت.

محدوده‌ی فرکانسی بین بالای شاخه‌ی آکوستیکی و پایین شاخه‌ی اپتیکی منطقه‌ی ممنوعه است و شبکه نمی‌تواند چنین موجی را عبور دهد. امواج در این ناحیه به شدت تضعیف می‌شوند. در این جا، یک گاف فرکانس وجود دارد. بنابراین شبکه‌ی دو اتمی به منزله یک صافی مکانیکی باند گذر عمل می‌کند.

تمایز دینامیکی بین شاخه های آکوستیکی و دینامیکی را می توان به طور وضوح با مقایسه بین آن ها در مقدار $q = 0$ (طول امواج نامتناهی) مشاهده کرد. برای پیدا کردن نسبت دامنه های $\frac{A_r}{A_l}$ می توان از رابطه ی (۳-۵۹) استفاده کرد. با قرار دادن $\omega = 0$ برای شاخه آکوستیکی در می یابیم که معادله فقط در صورتی ارضاء می شود که:

$$A_l = A_r \quad (3-62)$$

بنابراین برای این دو شاخه، دو اتم موجود در یک یاخته یا در یک مولکول، دامنه های مساوی دارند و همین طور هم فاز هستند^۱ به بیان دیگر مولکول (و در واقع تمام شبکه) به صورت یک جسم صلب نوسان می کند و مرکز جرم آن همان گونه که در شکل (۳-۲۴ الف) نشان داده شده است به جلو و عقب حرکت می کند. با افزایش q ، دو اتم موجود در مولکول، رابطه ی (۳-۶۲) را دقیقاً ارضاء نمی کنند، به بیان دیگر با جای گزینی

$$\omega = \left[2\alpha \left(\frac{1}{M_l} + \frac{1}{M_r} \right) \right]^{1/2}$$

برای شاخه ی اپتیکی خواهیم یافت که:

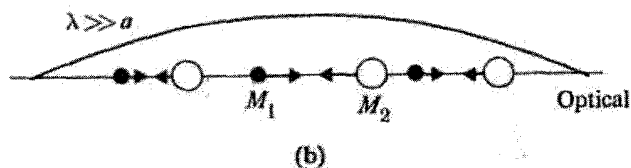
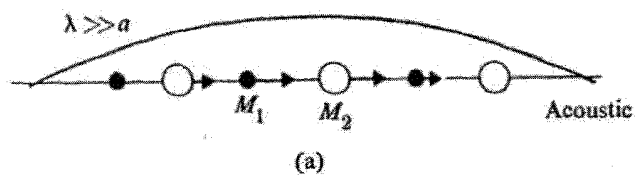
$$M_1 A_1 + M_2 A_2 = 0 \quad (3-63)$$

این بدین معنی است که نوسان اپتیکی به طریقی صورت می گیرد که مرکز جرم یاخته ثابت می ماند و دو اتم با اختلاف فاز π و نسبت دامنه های $\frac{A_r}{A_l} = -\frac{M_1}{M_r}$ نسبت به یک دیگر حرکت می کنند. این نوع نوسان اطراف مرکز جرم در مطالعه ی ارتعاشات مولکولی یک مثال آشنا است.

با افزایش q از صفر فرکانس ارتعاشات دو اتمی کاهش می یابد، ولی این کاهش زیاد نیست زیرا اتم ها تقریباً با اختلاف فاز π نسبت به یک دیگر در همه ی محدوده ی q_1 به نوسان ادامه می دهند. دلیل این که شاخه ی بالای اپتیکی نامیده می شود این است که: اولاً فرکانس این شاخه تقریباً از رابطه ی $\left(\frac{2\alpha}{M}\right)^{1/2}$ داده می شود که با استفاده از مقادیر نوعی α و M دارای یک مقدار

۱- شبکه دو اتمی را ممکن است به صورت آرایه ای از مولکول های دو اتمی در نظر گرفت.

نوعی در حدود $S^{-1} \times 10^{13} \cong \left(\frac{2 \times 5 \times 10^7}{10^{-23}} \right)^{1/2}$ می باشد. علاوه بر آن اگر اتم ها (یون ها) بار داشته باشند (هم چنان که در NaCl چنین است) وقتی که شبکه در مد اپتیکی نوسان می کند، یاخته یک گشتاور دو قطبی الکتریکی قوی حمل می کند و همان طور که در بخش (۱۲-۳) خواهیم دید نتیجه ی آن یک بازتاب و جذب قوی در ناحیه ی فرو سرخ توسط شبکه می باشد. بالاخره باید توجه کرد که منحنی جابه جایی برای شبکه دو اتمی همان خواص تقارنی در فضای q را ارضا می کند که قبلاً در ارتباط با شبکه ی یک بعدی بحث شد. مثلاً موج پاشنده یک موج تناوبی با دوره ی تناوب $\frac{\pi}{2a}$ است و یک تقارن بازتابی حول $q = 0$ دارد. توجه کنید که این جا اولین منطقه بریلیون در محدوده ی $-\frac{\pi}{2a} < q < \frac{\pi}{2a}$ قرار می گیرد چرا که دوره ی تناوب واقعی شبکه ی $2a$ است و نه a . نکات مربوط به تقارن را می توان یا با مراجعه به رابطه ی (۶۱-۲) یا به شکل (۲۳-۳) ملاحظه کرد. همین طور با استفاده از شرایط مرزی تناوبی می توان نشان داد که تعداد مقادیر q مجاز داخل منطقه ی اول مساوی N است و در نتیجه تعداد کلی مدهای داخل منطقه مساوی $2N$ است زیرا که دو مد یکی آکوستیکی و دیگری اپتیکی متناظر با هر q وجود دارد بنابراین تعداد کل مدهای داخل منطقه ی اول مساوی تعداد درجات آزادی شبکه است. این پیشنهاد می کند: هم چنان که در مورد شبکه ی یک اتمی اعمال کردیم می توانیم خود را تنها به اولین منطقه بریلیون محدود کنیم.



شکل ۲۳-۳ الف) جابه جایی های اتمی در مد آکوستیکی در طول موج متناهی ($q = 0$). ب) جابه جایی های اتمی در مد اپتیکی در طول موج متناهی

شبکه‌ی سه بعدی

حال بحثمان را به شبکه سه بعدی تعمیم می‌دهیم. به منظور اجتناب از تفصیل ریاضی در این جا یک بحث اساساً کیفی ارائه می‌دهیم ولی نتایج به طور منطقی و روان از حالت یک بعدی که قبلاً بررسی کرده ایم پیروی می‌کنند.

ابتدا شبکه‌ی یک اتمی برآوه را بررسی می‌کنیم که هر یاخته واحد یک اتم منفرد دارد معادله‌ی حرکت هر اتم را می‌توان به صورتی مشابه با معادله‌ی (۳-۴۴) نوشت. در این جا اتم‌ها به خاطر اندرکنشهای داخلی خود با هم جفت شده‌اند. برای یافتن یک حل مد بهنجار می‌نویسیم:

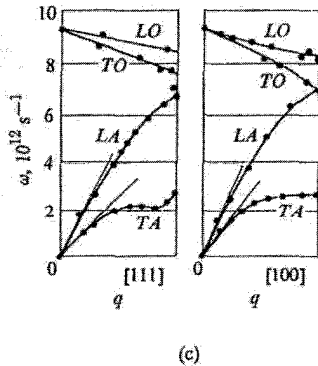
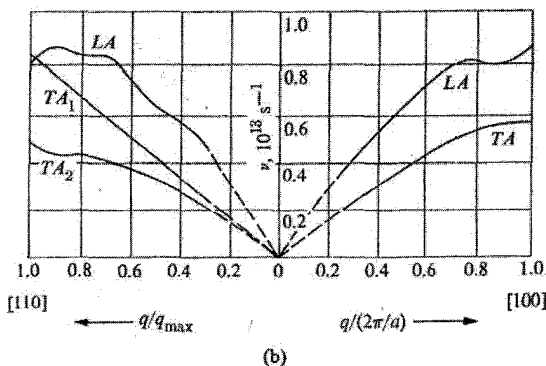
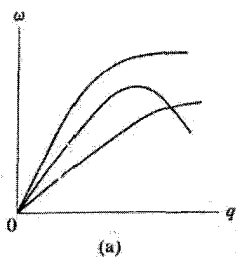
$$u_n = Ae^{i(q \cdot r - \omega t)} \quad (3-64)$$

که بردار موج q هم طول موج و هم جهت انتشار را معین می‌کند. در اینجا نیاز به بردار داریم زیرا انتشار در سه بعد صورت می‌گیرد. این بردار قطبش موج را معین می‌کند یعنی مشخص می‌کند که آیا طولی است (a موازی با q) یا عرضی (a عمود بر q). (در حالت کلی موج در شبکه نه طولی خالص و نه عرضی خالص است بلکه مخلوطی از هر دو است)

وقتی معادله‌ی (۳-۶۴) را در معادله‌ی حرکت جای‌گزین می‌کنیم، سه معادله‌ی هم‌زمان بدست می‌آوریم که شامل مولفه‌های A_x ، A_y و A_z می‌باشد. این معادلات با یکدیگر جفت شده‌اند و معادل یک معادله‌ی ماتریس 3×3 هستند. با نوشتن معادله‌ی پایه‌ی این ماتریس به یک معادله‌ی دترمینانی 3×3 می‌رسیم که مانند معادله‌ی (۳-۶۰) است. ریشه‌های این معادله همان گونه که در شکل (۲۵-۳ الف) نشان داده شده است، به سه رابطه‌ی پاشندگی یا سه منحنی پاشندگی متفاوت منجر می‌شود. هر سه شاخه منحنی از مبدأ می‌گذرند یعنی در این شبکه تمام شاخه‌ها آکوستیکی هستند. البته این را می‌توان تعمیم داد زیرا فعلاً ما درباره‌ی یک شبکه‌ی یک اتمی بحث می‌کنیم.

توجه کنید که در حالت سه بعدی، روابط پاشندگی الزاماً در فضای q همگن نیستند و منحنی پاشندگی شکل (۲۵-۳) تنها پروفایل پاشندگی در یک جهت معین q را نشان می‌دهد. اگر روابط پاشندگی در جهت دیگری رسم شوند، پروفایل جدیدی بدست می‌آید که ممکن است با قبلی کاملاً متفاوت باشد. بنابراین در حالت سه بعدی تبیین کاملی از روابط پاشندگی لازم است، تا فرکانس‌های مربوط به نقاط در فضای سه بعدی q معین گردند. این کار توسط رسم پربندهای فرکانس در این فضا انجام می‌گردد.

سه شاخه شکل (۲۵-۳) در قطبش هایشان باهم متفاوتند. اگر q در امتداد جهت های با تقارن بالا مثلاً جهت های $[100]$ یا $[110]$ قرار گیرد، این امواج را می توان به صورت امواج طولی خالص یا امواج عرضی خالص طبقه بندی کرد. در آن حالت دو تا از شاخه ها عرضی و یکی طولی است! معمولاً این امواج را به ترتیب TA و LA می نامیم.



شکل ۲۵-۳ الف) سه شاخه ی آکوستیکی در یک شبکه براوه ی سه بعدی (ب. منحنی های پاشندگی برای AL در جهت $[100]$ (قسمت راست) و در جهت $[111]$ (قسمت چپ). شاخه ی TA در جهت $[100]$ در واقع نمایان گر دو شاخه ی منطبق است (زیرا هر شاخه به طور انفرادی نسبت به مبدأ متقارن است، فقط نصف هر شاخه رسم شده است)

در امتداد جهت های نامتقارن ممکن نیست امواج، طولی خالص یا عرضی خالص باشند. بلکه مخلوطی از این دو هستند. باز هم می توان با توجه به جهت های قطبش آن ها در امتداد های با تقارن بالا، آن ها را TA یا LA نامید. شکل (۲۵-۳) منحنی های پاشندگی را برای AL در

- ۱- معمولاً شاخه ی طولی بلندتر از شاخه ی عرض است زیرا نیروهای باز دارنده ی متناظر با نوسان های طولی بزرگتر هستند.
2. transverse acoustic
3. longitudinal acoustic

جهت‌های $[100]$ و $[111]$ نشان می‌دهد. در جهت‌های با تقارن بالا نظیر جهت‌های $[100]$ در AL، دو شاخه‌ی عرضی برهم منطبق‌اند. می‌گوییم این شاخه‌ها تبه‌گن هستند.

همان‌گونه که دیده‌ایم قطبش منحنی‌های پراکندگی به تقارن بلور (نسبت به جهت انتشار) بستگی دارد. می‌توان این موضوع را با استفاده از متد زیبای ریاضی تئوری گروه به طور عمقی‌تر بررسی کرد. ولی این بررسی فراتر از محدوده‌ی این کتاب است.

حال توجه خود را به شبکه‌ی سه بعدی غیر براوه معطوف می‌کنیم. در اینجا یاخته‌ی واحد شامل دو یا بیشتر اتم است. اگر r اتم بر یاخته وجود داشته باشد، بر مبنای تجربیات قبلی نتیجه می‌گیریم که $3r$ منحنی پاشندگی وجود دارد. از این تعداد سه شاخه آکوستیکی و $(3-3r)$ شاخه‌ی باقی مانده اپتیکی هستند. توجه ریاضی آن به قرار زیر است. معادله‌ی حرکت را برای هر اتم در یاخته می‌نویسیم که r معادله نتیجه می‌شود. از آن جا که این معادلات برداری هستند، معادل $3r$ معادله‌ی اسکالر یا یک معادله‌ی ماتریسی از مرتبه‌ی $3r \times 3r$ هستند. بنابراین معادله‌ی مشخص از درجه‌ی $3r$ از ω^2 است و سه ریشه دارد که منجر به سه شاخه می‌شود. می‌توان نشان داد که سه تا از این ریشه‌ها همیشه در $q=0$ صفر می‌شوند. که نتیجه آن سه شاخه‌ی آکوستیکی می‌شود. بنابراین باقی مانده $(3-3r)$ ریشه همان‌گونه که در بالا گفته شد متعلق به شاخه‌های اپتیکی است. شاخه‌های آکوستیکی را مانند قبل می‌توان بر حسب قطبش آن‌ها TA_1 و TA_2 طبقه‌بندی کرد. وقتی q در امتداد یک جهت با تقارن بالا قرار گیرد شاخه‌های اپتیکی را نیز می‌توان با عنوان طولی و عرضی طبقه‌بندی کرد. که به شاخه‌های LO و TO موسوم‌اند. هم چون حالت یک بعدی می‌توان نشان داد که برای یک شاخه‌ی اپتیکی، اتم‌ها در یاخته واحد در فاز مخالف نسبت به یک دیگر ارتعاش می‌کنند. به عنوان مثالی از یک شبکه‌ی غیر براوه، منحنی‌های پاشندگی برای Ge در شکل (۲۵-۳) رسم شده‌اند. از آن جا که در هر یاخته واحد ژرمانیم دو اتم موجود هست شش شاخه وجود دارد. سه شاخه آکوستیکی و سه شاخه اپتیکی. هم چنان که قبلاً بیان شد دو شاخه‌ی عرضی در جهت $[100]$ همگن شده‌اند.

همان‌گونه که در بخش (۱۰-۳) خواهیم دید منحنی‌های پاشندگی شبکه توسط روش‌های پراکندگی پرتوهای ایکس و نوترون اندازه‌گیری می‌شوند. این منحنی‌ها را هم چنین می‌توان با روشی مشابه با آن چه برای حالت یک بعدی استفاده شد، محاسبه کرد. ثابت‌های نیرو را متناظر با

اندرکنش اتم با همسایگان گوناگونش در نظر می‌گیریم. جای‌گزینی آن‌ها در معادلات حرکت به حل معادلات مشخصه مربوط به منحنی‌های پاشندگی منجر می‌شود. سپس آن‌ها را با آن‌چه که به طریق تجربی اندازه‌گیری شده مقایسه می‌کنیم و ثابت‌های نیرو را چنان انتخاب می‌کنیم که یک سازگاری بین نتایج تجربی و تئوری حاصل آید. (de Launey 1956)

تقارن در فضای q : اولین منطقه ی بریلیون (سه بعدی)

رابطه‌ی پاشندگی در حالت شبکه سه بعدی به شکل زیر است:

$$\omega = \omega_j(q) \quad (3-65)$$

که اندیس j شاخه ی مورد نظر را مشخص می‌کند. شبه آن‌چه که در ارتباط با شبکه‌ی یک بعدی بحث شد رابطه‌ی پاشندگی برای هر شاخه‌ی منفرد خواص تقارنی را ارضا می‌کند. بنابراین در بحث زیر، تفصیل ریاضی را حذف می‌کنیم زیرا کاملاً مشابه با حالت یک بعدی است. ابتدا $\omega_j(q)$ خاصیت تناوبی را ارضا می‌کند.

$$\omega_j(q+G) = \omega_j(q) \quad (3-66)$$

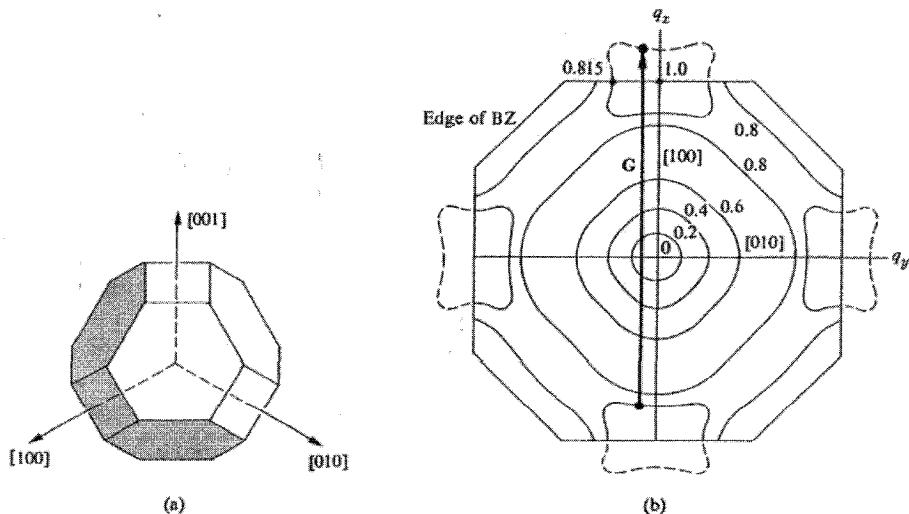
که G یک بردار شبکه‌ی وارون می‌باشد. این بدین معنی است که ما می‌توانیم توجه خود را فقط به FBZ (اولین منطقه‌ی بریلیون) محدود کنیم. همین‌طور تقارن بازتابی برقرار می‌باشد.

$$\omega_j(-q) = \omega_j(q) \quad (3-67)$$

بار دیگر متذکر می‌شویم که این تقارن‌ها که مستقیماً از تقارن انتقالی شبکه‌ی حقیقی پیروی می‌کند، بدون توجه به جامد مورد مطالعه همیشه برقرار می‌باشند. علاوه بر این رابطه‌ی پاشندگی تمام تقارن‌های شبکه‌ی حقیقی را نشان می‌دهد. مثلاً در یک بلور مکعبی رابطه‌ی پراکندگی $\omega_j(q)$ نشان دهنده‌ی تقارن مکعبی است.

تقارن‌های گوناگونی که به آنها اشاره شد در شکل (۳-۲۶) نمایش داده شده‌اند. شکل (۳-۲۶ الف)، BZ را برای AI که یک شبکه‌ی fcc دارد نشان می‌دهد و در شکل (۳-۲۶ ب) پریندهای فرکانس در این منطقه رسم شده‌اند. به سادگی از این شکل دیده می‌شود که تقارن‌های دورانی، وارونی و تناوبی همگی برآورده می‌شوند. این تقارن‌ها علاوه بر مقدار جالبشان به لحاظ

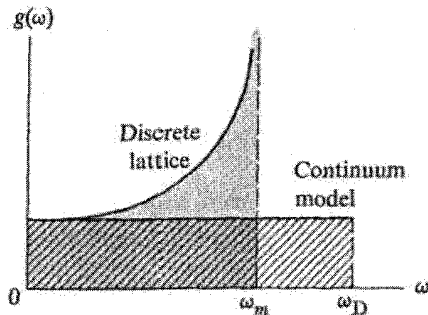
عملی هم مهم هستند. معمولاً لازم است که منحنی پاشندگی فقط در یک ناحیه‌ی کوچکی از BZ تعیین گردد و بقیه منطقه را می‌توان با استفاده از تقارن کامل کرد. بنابراین در یک بلور مکعبی، منحنی پاشندگی را تنها در $\frac{1}{48}$ ام BZ لازم است تعیین کنیم (گروه دروانی مکعب ۴۸ عنصر دارد). سرانجام توجه کنید که تقارن‌هایی که قبلاً ذکر شد به طور انفرادی به هر شاخه‌ی پاشندگی اعمال می‌گردد. آن‌ها شاخه‌های مختلف را به یکدیگر مربوط نمی‌کنند.



شکل ۳-۲۶ الف) اولین BZ برای Al یک چهار وجهی که در امتداد محورهای مکعبی قطع شده اند (ب) پریندها برای شاخه LA در Al (اعداد برحسب واحد $10^{13} \times 2\pi$ می باشند). فقط سطح مقطع در صفحه $q_y q_x$ نشان داده شده است.

۳-۷ چگالی حالت های یک شبکه

چگالی حالت های $g(\omega)$ مانند قبل به گونه‌ای تعریف می‌شود که $g(\omega)d(\omega)$ تعداد مدها در محدوده‌ی فرکانس $(\omega, \omega + d\omega)$ را بدهد. این تابع نقش مهمی در تمام پدیده‌های مرتبط با ارتعاشات شبکه به خصوص گرمای ویژه، ایفا می‌کند. این تابع را قبلاً برای جامدات پیوسته محاسبه (بخش ۳-۳) و از آن در ارتباط با مدل گرمای ویژه دیبی استفاده کرده‌ایم. در این جا تابع مناسبی برای شبکه‌ی گسسته استخراج خواهیم کرد و سپس از نتیجه‌ی آن در بخش بعد استفاده می‌کنیم و تئوری دقیقی در گرمای ویژه ارائه خواهیم کرد.



شکل ۳-۲۷ چگالی حالت‌ها برای یک شبکه‌ی یک اتمی، چگالی حالت‌ها برای یک مدل پیوسته نیز برای مقایسه نشان داده شده است.

ابتدا حالت یک بعدی را در نظر می‌گیریم، فرمول کلی چگالی حالت‌ها را قبلاً در معادله‌ی (۳-۱۳) استنتاج کردیم که چنین است:

$$g(\omega) = \frac{L}{\pi} \frac{1}{d\omega/dq} \quad (3-68)$$

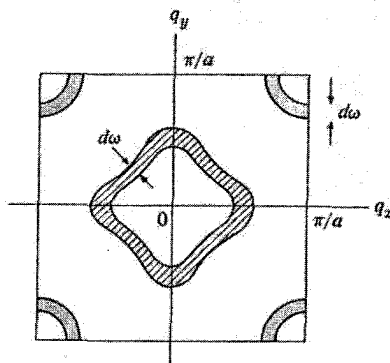
ملاحظه می‌شود که $g(\omega)$ با استفاده از رابطه‌ی پاشندگی محاسبه شده است. بنابراین برای خط پیوسته رابطه‌ی پاشندگی $\omega_s = v_s q$ به $g(\omega) = \frac{L}{\pi v_s}$ منجر می‌شود در حالی که رابطه پاشندگی شبکه (رابطه‌ی ۳-۴۶) به رابطی زیر منجر می‌شود:

$$g(\omega) = \frac{2L}{\pi a \omega_m} \left[\cos\left(\frac{qa}{2}\right) \right]^{-1} \quad (3-69)$$

در شکل (۳-۲۷) این معادله فوق بر حسب ω رسم شده است. منحنی از یک مقدار متناهی در $\omega = 0$ آغاز می‌شود و با افزایش ω افزایش می‌یابد و به ازای $\omega = \omega_m$ به سمت بی نهایت میل می‌کند. برای $\omega > \omega_m$ چگالی $g(\omega)$ صفر می‌شود زیرا این متناظر با ناحیه‌ی خارج از BZ است.

سطح زیر منحنی، ناحیه نقطه چین، مساوی تعداد کل مدها است که برابر N می‌باشد. این را می‌توان با انتگرال گیری $g(\omega)$ در رابطه‌ی (۳-۶۹) نشان داد. (بخش مسائل را در انتهای این فصل ملاحظه کنید) این شکل هم چنین نشان می‌دهد که چگالی حالت‌ها برای خط پیوسته‌ای که

فرکانس بالایی آن ω_D ، فرکانس دبی است؛ یعنی ناحیه هاشور خورده مساوی N می‌باشد. به ساختار $g(\omega)$ در شبکه به خصوص به تکنیکی آن در ω_m توجه کنید. این امر مربوط به این واقعیت است که در $\omega = \omega_m$ منحنی پاشندگی شکل (۳-۱۷)، مسطح است و در نتیجه یک بازه‌ی فرکانسی بسیار کوچک شامل تعداد بسیاری از مقادیر q (مدها) می‌باشد.

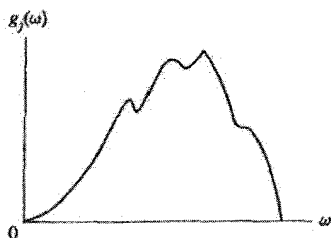


شکل ۲۸-۳ شمارش تعداد مدها، ناحیه هاشور خورده، لایه ای را که کاملاً داخل BZ است نشان می‌دهد. ناحیه ی سایه دار وضعیتی را نشان می‌دهد که فرکانس آنقدر بزرگ است که پربندهای فرکانس مرزهای BZ را قطع می‌کند.

برای یافتن $g(\omega)$ برای شبکه‌ی سه بعدی از روش کلی‌ای که در بخش (۳-۳) استفاده کردیم پیروی می‌کنیم. شاخه‌ی z ام را بررسی می‌کنیم. همان گونه که در شکل (۳-۲۸) نشان داده شده است پربندهای فرکانسی $\omega_z(q) = \omega$ و $\omega_z(q) = \omega + d\omega$ را رسم می‌کنیم و سپس تعداد مدهای محصور بین این سطوح را می‌شماریم. این تعداد مساوی $g_j(\omega)d\omega$ است. در این حالت $g_j(\omega)$ تعیین می‌گردد.

شکل (۳-۲۹) شکل کلی $g_j(\omega)$ را نشان می‌دهد در فرکانس‌های $g_j(\omega)$ با ω^2 افزایش می‌یابد زیرا مدهای مشمول این ناحیه مدهای آکوستیکی با طول موج بلند هستند. به هر جهت چون ω افزایش بیشتری یابد $g_j(\omega)$ ساختارهایی را نشان می‌دهد که توسط رابطه‌ی پاشندگی واقعی تعیین می‌گردند، و به نوبه ی خود شکل لایه را در منحنی شکل (۳-۲۸) معین می‌کند. (البته رابطه‌ی پاشندگی توسط ثابت‌های نیروی بین اتمی تعیین می‌گردد و بنابراین به بلور مورد نظر بستگی دارد). در یک فرکانس چگالی $g_j(\omega)$ سریعاً شروع به کاهش می‌کند و سرانجام همان گونه که در شکل نشان داده شده است به صفر می‌رسد. این را می‌توان با مراجعه به شکل (۳-۲۸) فهمید.

در یک فرکانسی لایه شروع می‌کند به قطع کردن مرزهای BZ و وقتی که چنین شد، تعداد مدهای داخل لایه کاهش می‌یابد (مدهای خارج BZ شمرده نمی‌شوند). چنان چه شعاع لایه به اندازه کافی بزرگ باشد به طوری که کاملاً در خارج منطقه بریلیون قرار گیرد، چگالی حالت های $g_j(\omega)$ کاملاً صفر می‌شود.

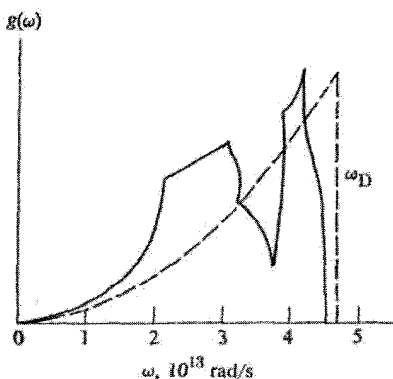


شکل ۲۹-۳ یک منحنی نوعی چگالی حالت ها

برای پیدا کردن چگالی کل حالت‌ها باید چگالی‌های تمام شاخه‌ها را با هم جمع کرد که چنین می‌شود.

$$g(\omega) = \sum g_j(\omega) \quad (3-70)$$

چگالی کل $g(\omega)$ رفتاری مشابه با شکل (۳-۲۹) نشان می‌دهد به جز آن که به دلیل تداخل بین شاخه‌های مختلف، ساختار پیچیده‌تر است. برای مثال چگالی حالت‌ها برای مس در شکل (۳-۳۰) نشان داده شده است.



شکل ۳۰-۳ چگالی حالت‌های کل برای Cu از داده‌های مربوط به پراکندگی نوترون بدست آمده است. منحنی خط چین تقریب دبی است که سطح زیر منحنی آن با سطح زیر منحنی پیوسته برابر است.

۳-۸ گرمای ویژه: تئوری دقیق

در بخش (۳-۴) راجع به مدل دبی گرمای ویژه بحث شد. یادآوری می‌کنیم که در آن جا رابطه پاشندگی را با تقریب، خطی گرفتیم تا بتوانیم تمام مدهای ارتعاشی را توصیف نماییم. در بحث ارتعاشات شبکه فقط در نزدیکی مرکز BZ این تقریب قابل قبول است و در بقیه منطقه در نزدیکی لبه‌ها تقریب کاملاً شکسته می‌شود زیرا به خصوص در آن جا آثار پاشندگی وجود دارد.

همین طور بررسی مدهای اپتیکی کاملاً فراتر از مدل فوق است. زیرا فرکانس آن‌ها اساساً مستقل از q است. در واقع مدل انیشتین این مدها را مناسب تر توصیف می‌کند. حال می‌توانیم تعریف طول موج‌های بلند را برداریم و یک عبارت کلی برای گرمای ویژه بنویسیم که شامل چگالی حالت‌های واقعی شبکه باشد. عبارت کلی برای انرژی گرمایی شبکه با معادله ی (۳-۳۱) بیان می‌شود که چنین است:

$$E = \int \bar{\epsilon}(\omega) g(\omega) d\omega \quad (3-71)$$

و گرمای ویژه را می‌توان با دیفرانسیل گیری از این عبارت برحسب دما یافت. نتیجه چنین است:

$$c_v = k \int \left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2 e^{\hbar\omega/kT} (e^{\hbar\omega/kT} - 1)^{-2} g(\omega) d(\omega) \quad (3-72)$$

توجه کنید که فقط $\bar{\epsilon}(\omega)$ در رابطه ی (۳-۷۱) به T بستگی دارد.

حال برای محاسبه ی C_v بایستی تابع چگالی حالت‌های واقعی $g(\omega)$ را جایگزین کنیم. مثلاً؛ گرمای ویژه ی مس را می‌توان با جایگزینی $g(\omega)$ از شکل (۳-۳۰) و محاسبه عددی انتگرال (۳-۷۲) بدست آورد. توافقی که بدین طریق با نتایج تجربی بدست می‌آید بهتر از آنی است که از مدل دبی به خصوص در ناحیه ی دماهای میانی به دست می‌آید.

به سادگی می‌توان ثابت کرد که معادله (۳-۷۲) در محدوده ی دماهای مناسب به مقادیر صحیحی منجر می‌شود. در دماهای بالا تمام مدها تحریک شده اند و می‌توان نشان داد که $C_v \cong 3R$ حالی که در دماهای پایین فقط فوتون های طول موج کوتاه تحریک شده‌اند یعنی $g(\omega) \cong \omega^2$ که منجر به رفتار T^3 می‌شود که قبلاً درباره ی آن بحث شد. تئوری دقیق مدل دبی در محدوده دماهای بالا و پایین مقادیر یک سانی می‌دهند. جایی که دو تئوری از هم دور می‌شوند یعنی در دماهای میانی به تئوری دبی می‌توان به عنوان یک تقریب خوب و ساده نگاه کرد.

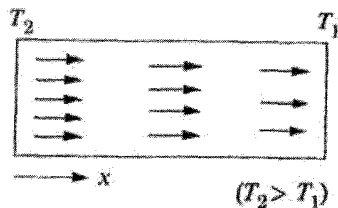
۹-۳ رسانایی حرارتی

هنگامی که دو انتهای یک نمونه از ماده‌ای را در دو دمای متفاوت T_1 و T_2 ($T_2 > T_1$) قرار دهیم. همان گونه که در شکل (۳-۳۱) نشان داده شده است گرما تحت گرادیان حرارتی از ناحیه‌ی گرم‌تر به ناحیه‌ی سردتر جریان می‌یابد. مشاهدات تجربی نشان می‌دهد که چگالی جریان گرمایی

Q (جریان بر واحد سطح) متناسب با واحد گرادیان دمایی $\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)$ است یعنی:

$$Q = -K \frac{\partial T}{\partial x} \quad (3-73)$$

ثابت تناسب K که رسانایی حرارتی نامیده می‌شود، ملاکی است از انتقال حرارت در طول میله (علامت منفی به این دلیل داده شده است که K یک کمیت مثبت است).



شکل ۳-۳۱ رسانایی حرارتی توسط امواج شبکه (فونون‌ها) بپیکان‌ها نمایان گر فونون‌ها هستند.

حرارت توسط چندین عامل مستقل ممکن است منتقل گردد. مثلاً در فلزات حرارت هم توسط الکترون‌ها و هم توسط امواج شبکه یا فونون‌ها منتقل می‌گردد. ولی سهم الکترون‌ها بسیار بزرگ‌تر است. از طرف دیگر از آن جا که در نارساها الکترون متحرک وجود ندارد انتقال حرارت در آن‌ها کاملاً توسط فونون‌ها صورت می‌گیرد. در این بخش تنها انتقال حرارت توسط فونون‌ها بررسی می‌شود (رسانایی حرارتی الکترون‌ها در بخش ۶-۴ بررسی می‌شود). وقتی راجع به انتقال حرارت توسط فونون‌ها بحث می‌کنیم. راحت‌تر است (همان گونه که در شکل ۳-۳۱ نشان داده شده است) از آن‌ها به عنوان گاز فونونی یاد کنیم. در هر ناحیه‌ای از فضا فونون‌هایی وجود دارند که به طور کاتوره‌ای در تمام جهات فضا، متناظر با q ‌ها در منطقه‌ی BZ و خیلی شبیه به مولکول‌ها در یک گاز معمولی حرکت می‌کنند^۱. مزیت استفاده از این مدل گازی این است

۱- به فرایند رسانایی می‌توان به صورت زیر نگریست: از آن جا که طرف چپ میله گرم‌تر است، اتم‌های آن پر جنب و جوش‌تر از اتم‌های طرف راست حرکت می‌کنند. بنابراین چگالی (غلظت) فونون‌ها در طرف چپ بزرگ‌تر است و از آن جا

که بسیاری از مفاهیم آشنای نظریه‌ی جنبشی گازها را در این جا می‌توان به کار برد. رسانایی گرمایی توسط رابطه‌ی زیر داده می‌شود:

$$K = \frac{1}{3} C_v v l \quad (3-74)$$

که C_v گرمای ویژه بر واحد حجم، v سرعت ذرات جسم و l پویش آزاد میانگین آن است. البته در مورد اخیر θ و l به ترتیب سرعت و پویش آزاد فونون‌ها می‌باشند، (صریح تر گفته باشیم v و l متوسط کمیت‌ها روی تمام مد‌های اشغال شده در منطقه بریلیون هستند) رسانایی گرمایی و پویش‌های آزاد میانگین برای چند ماده در جدول (۲-۳) آمده است. مقادیر l جدول ۱۴-۳ با جای‌گزینی مقادیر مشاهده شده K و v محاسبه شده‌اند.

جدول ۲-۳ رسانایی‌های حرارتی و پویش‌های آزاد میانگین فونون

$T = 20^\circ \text{K}$		$T = 273^\circ \text{K}$		
$l(\text{cm})$	$K (\text{watt/m.}^\circ \text{K})$	$l(\text{\AA})$	$K (\text{watt/m.}^\circ \text{K})$	
$7/5 \times 10^{-3}$	۶۷۰	۹۷	۱	SiO ₂ کوارتز
1×10^{-3}	۸۵	۷۲	۱۱	CaF ₂
$2/3 \times 10^{-4}$	۴۵	۶۷	۶/۴	NaCl
$4/1 \times 10^{-2}$	۴۲۰۰	۴۳۰	۱۵۰	Si
$4/5 \times 10^{-3}$	۱۳۰۰	۳۳۰	۷۰	Ge

حال بستگی رسانایی حرارتی به دما را بررسی می‌کنیم. این مطلب را می‌توان با امتحان کردن رابطه‌ی (۳-۴۷) درک کرد. بستگی C_v به دما به تفصیل مطالعه شده است. (بخش ۴-۳ را ملاحظه نمایید). سرعت v اساساً به دما بستگی ندارد. در حالی که پویش آزاد میانگین شدیداً به دما بستگی دارد. در قیاس با نظریه جنبشی یادآوری می‌کنیم که طول l مسافت متوسطی است که فونون بین دو برخورد متوالی طی می‌کند. بنابراین l توسط فرایندهای برخورد که در جامدات عمل می‌کنند تعیین می‌گردد. سه مکانیزم مهم را می‌توان از هم تمیز داد (الف) برخورد یک فونون با فوتون‌های دیگر (ب) برخورد فونون با ناکاملی‌های شبکه مانند ناخالصی‌ها و در رفتگی‌ها و (ج) برخورد یک فونون با مرزهای خارجی نمونه.

که گاز فوتونی ناهمگن است. فونون‌ها از چپ به راست جریان می‌یابند یعنی تحت گرا دیان دمائی پخش می‌شوند و انرژی حرارتی با خود حمل می‌کنند.

برخورد نوع (الف) را بررسی می‌کنیم: وقتی یک فونون، فونون دیگر را در بلور می‌بیند، به خاطر برهم کنش نا هماهنگ بین آن‌ها، دو فونون یک دیگر را پراکنده می‌کنند. تاکنون در بررسی هایمان فونون‌ها را مستقل از یک دیگر پنداشته‌ایم و این نتیجه‌ای است بر مبنای تقریب هماهنگ، که در بخش (۶-۳) بیان شده است. ولی هنگامی که جابه جایی‌های اتمی قابل ملاحظه باشد این تقریب نامناسب می‌شود. و این باعث جفت شدگی نا هماهنگ بین فونون‌ها و پراکندگی متقابل بین آن‌ها می‌شود. در نتیجه‌ی برخورد فونون‌ها، بویژه در دماهای بالا که جابه جایی‌های اتمی بزرگ هستند اهمیت پیدا می‌کند. در این ناحیه پویش آزاد میانگین مربوطه به طور معکوس با دما متناسب است. یعنی $\frac{1}{T} \sim I$ این نتیجه قابل قبول است، زیرا هرچه T بزرگ تر باشد فونون‌هایی که در برخورد وارد می‌شوند بیشتر می‌شود.

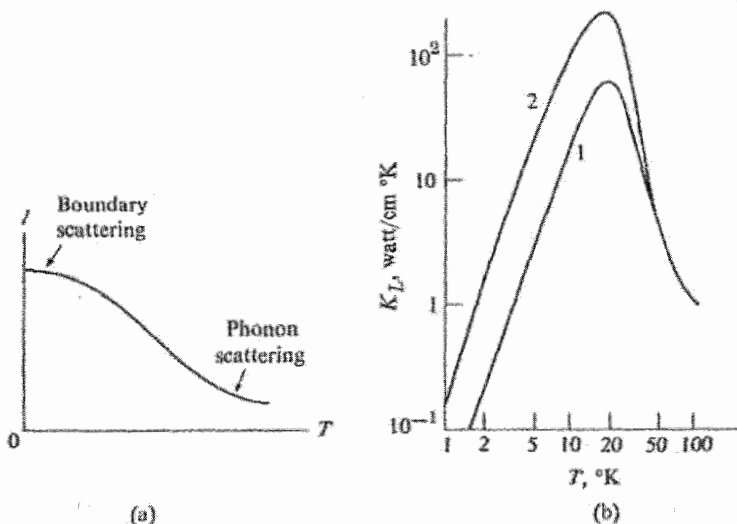
ناکاملی‌های بلور نظیر ناخالصی‌ها و نقایص بلوری نیز فونون‌ها را پراکنده می‌کنند زیرا آن‌ها تناوبی بودن کامل بلور را که برای انتشار آزاد امواج شبکه لازم است. به طور جزئی از بین می‌برند (بحثی که به دنبال معادله ۴۵-۳ آمده است را ملاحظه نمایید). برای مثال یک ناخالصی جای گزین شده نقطه‌ای که جرمی متفاوت با اتم میزبان دارد، در مکان ناخالصی، ایجاد پراکندگی در موج می‌کند. هرچه اختلاف جرم‌ها بیشتر و چگالی ناخالصی بیشتر باشد پراکندگی بیشتر و پویش آزاد میانگین کوتاه‌تر است.

در دماهای خیلی پایین (مثلاً پایین تر از 10°K) هم برخوردهای فونون - فونون و هم برخوردهای فونون - ناخالصی غیر موثر می‌شود زیرا در حالت اول فقط چندتایی فونون موجود است و در حالت بعدی معدود فونون‌هایی که در این دما وجود دارند طول موج بلند دارند. این فونون‌ها توسط چیزهایی نظیر ناخالصی‌ها که اندازه آن‌ها بسیار کوچک تر از طول موج است به طور موثر پراکنده نمی‌شوند.^۱ در ناحیه دماهای پایین مکانیزم اولیه پراکندگی مربوط به مرز خارجی نمونه است که منجر به اصطلاح اندازه یا آثار هندسی^۳ می‌شود. به این دلیل که در واقع طول موج‌های فونون‌های تحریک شده در مقایسه با اندازه نمونه خیلی بزرگ هستند این مکانیزم موثر واقع می‌شود. در این جا پویش آزاد میانگین $I \cong D$ که D تقریباً مساوی قطر نمونه و بنابراین مستقل از

۱- از فیزیک موج می‌دانیم که شدت پراکندگی یک موج توسط یک جسم با نسبت قطر جسم به طول موج بستگی دارد. هر چه این نسبت کوچک‌تر باشد یعنی طول موج بلند تر باشد، پراکندگی ضعیف‌تر است.

(a) است. رفتار کلی پویش آزاد میانگین متوسط به عنوان تابعی از دما در شکل (۳۲-الف) نشان داده شده است. در دماهای پایین، I ثابت و تقریباً مساوی D است، در حالتی که در دماهای بالا، I به صورت $\frac{1}{T}$ کاهش می‌یابد. مقادیر I در جدول (۲-۳) داده شده اند. از آن جا دیده می‌شود با افزایش T از 20°K تا مثلاً دمای اطاق، I تا چند مرتبه‌ی بزرگی کاهش می‌یابد.

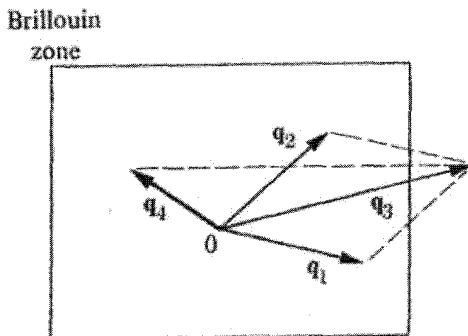
شکل (۳۲-ب) بستگی دمایی رسانای حرارتی K را نشان می‌دهد در دماهای پایین q_p بستگی کاملاً نتیجه‌ای از گرمای ویژه C_V است (۷۴-۳) را ملاحظه نمایید). در حالی که در دماهای بالا $K \sim \frac{1}{T}$ و حالا بستگی کاملاً به خاطر I است. این نتیجه‌گیری با نتایج تجربی شکل (۳۲-ب) سازگار است.



شکل ۳۲-الف) تغییرات پویش آزاد میانگین فوتون بر حسب دما. (ب) رسانایی حرارتی به صورت تابعی از دما برای LiF منحنی ۱ برای میله‌ای به سطح مقطع $1/23 \times 0.91 \text{ mm}$ و منحنی ۲ برای یک میله به سطح مقطع $7/55 \times 6/97 \text{ mm}$ است.

در بحث خود پیرامون برخورد فونون - فونون از یک نکته مهم ولی باریک گذشتیم. فرض کنیم که دو فونون با بردارهای q_1 و q_2 بهم برخورد کنند و فونون سومی با بردار q_p ایجاد نمایند. از آن جا که اندازه حرکت بایستی پایسته بماند نتیجه می‌شود که $q_p = q_1 + q_2$. گرچه هر دو بردار q_1 و q_2 داخل منطقه ی بریلیون جای می‌گیرند ولی ممکن است در مورد q_p این طور نباشد، اگر

هر سه بردار داخل منطقه بریلیون جای گیرند، اندازه حرکت سیستم قبل و بعد از برخورد یکسان است چنین فرایندی به هیچ وجه تاثیری بر مقاومت گرمایی ندارد و به طور کلی تأثیری بر جریان سیستم فونونی ندارد. این فرایند بهنجار نامیده می شود^۱.



شکل ۳-۳۳ فرایند واگرد

در مقابل اگر q_3 در خارج BZ جای گیرد، ضریب جالب جدیدی وارد می گردد شکل (۳-۳۳) از آن جا که چنین برداری معنی فیزیکی ندارد، معادل آن q_3 را داخل اولین منطقه ی بریلیون رسم می کنیم به طوری که $q_3 = q_4 + G$. (برداری G ، بردار شبکه ی وارون مربوطه می باشد) ملاحظه می شود که بردار فونون مؤثر q_4 که توسط برخورد تولید شده است در جهتی تقریباً مخالف با هر کدام از فونون های اصلی q_1 و q_2 حرکت می کند (اختلاف در اندازه حرکت به مرکز جرم شبکه منتقل شده است). این نوع فرایند در تغییر اندازه حرکت فونون بسیار مؤثر است و مسئول پویش آزاد میانگین فونون در دماهای بالا است. این فرایند به فرایند واگرد^۲ موسوم است. واضح است که فرایند واگرد تنها در دماهای بالا یعنی جایی که بسیاری از فونون ها نزدیک مرز های BZ تحریک شده اند مؤثر است.

۱- مقاومت حرارتی به سادگی عکس رسانایی حرارتی است. آن چه راجع به آن صحبت می کنیم یک فرایند به هنجار پاشندگی اندازه حرکت است و در نتیجه سهمی در مقاومت ندارد به بیان دیگر اگر فرایند به هنجار تنها فرایندی بود که انجام می شد، مقاومت بایستی صفر و رسانایی حرارتی بی نهایت می بود، بنابراین مقاومت کاملاً مربوط به فرایندهای دیگر برخورد است.

۲- Umklapp Process که معادل آلمانی Flipping over است.

۱۰-۳ پراکندگی پرتوهای ایکس، نوترون و نور توسط فوتون ها

منحنی های پاشندگی فونون در بلورها توسط پراکندگی ناکشسان پرتوهای ایکس یا نوترون ها توسط آن بلورها تعیین می گردد. راجع به این که چگونه از پراکندگی کشسان این تابش ها برای تعیین ساختار بلوری مواد استفاده می شود، قبلاً (فصل ۲) بحث کرده ایم. در آن جا گفته شد که به خاطر آرایه ی بلوری اتم ها در جامدات، چنان چه یک باریکه ی فرودی شرط پراش براگ را برآورده نماید، این آرایه ی اتم ها را می توان با اندازه گیری زاویه و شدت باریکه ی پراکنده بدست آورد. به همین قیاس، هنگامی که شبکه در مدار ارتعاشی است، باریکه ی فرودی ممکن است توسط این مد پراکنده گردد. مطالعه و بررسی باریکه ی پراکنده اطلاعاتی راجع به این مد بدست می دهد.

پراکندگی ناکشسان پرتو ایکس

نخست فرایند پراکندگی پرتو ایکس را در نظر می گیریم شکل (۳-۳۴) یک باریکه فرودی پراکنده شده از موج شبکه با بردار موج q را نشان می دهد. با نگاه کوانتوم مکانیکی به مسئله می توان نتیجه گرفت که فوتون فرودی یک فونون جذب می کند و در نتیجه در جهت جدیدی پراکنده می شود. قانون پایستگی اندازه حرکت ایجاب می کند که:

$$K = K_0 + q \quad (3-75)$$

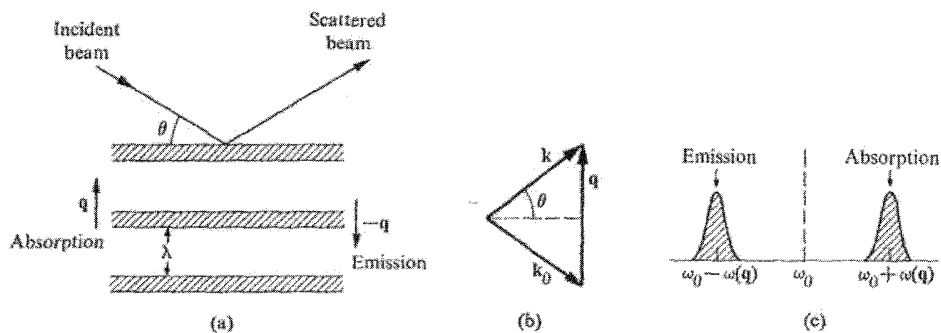
که K_0 و K به ترتیب بردارهای موج فوتون های فرودی و پراکنده می باشند. یعنی اندازه حرکتی که به فوتون منتقل می گردد مساوی اندازه حرکت فونون جذب شده است. چنان چه فوتون پرتو ایکس یک فونون با عدد موج q را گسیل کند، معادله ی مشابه ای بکار می رود. این را می توان آن چنان که در شکل (۳-۳۴) الف) نشان داده شده است توسط یک موج شبکه ای رونده که در خلاف جهت حرکت می کند نشان داد. پایستگی اندازه حرکت (رابطه ی ۳-۷۵)، در شکل (۳-۳۴) ب) نمایش داده شده است.

در فرایند پراکندگی انرژی نیز پایسته است. در نتیجه:

$$\omega = \omega_0 \pm \omega(q) \quad (3-76)$$

که ω_0 و ω به ترتیب فرکانس های فونون های فرودی و پراکنده می باشند و $\omega(q)$ فرکانس فونون مربوطه است. علامت مثبت در رابطه ی (۳-۷۶) مربوط به حالت جذب فونون و علامت

منفی به حالت گسیل فونون مربوط می شود (یادآوری می کنیم که $\omega(-q) = \omega(q)$ ، رابطه‌ی (۳-۶۷) را ملاحظه نمایید). وقتی طیف باریکه‌ی پراکنده در آشکار ساز تحلیل گردد، معلوم می شود که در آن دو خط وجود دارد که به اندازه‌ی فرکانس فونون مربوطه نسبت به فرکانس فرودی ω_0 جابه جا شده‌اند. خطی با فرکانس $\omega_0 + \omega(q)$ که جا به جایی مثبت یافته است، متناظر است با جذب فونون و خط $\omega_0 - \omega(q)$ به گسیل فونون مربوط می شود. دو خط انتقال یافته به طور متقارن در اطراف فرکانس انتقال نیافته ω_0 قرار گرفته‌اند. فرکانس فونون‌ها را می توان توسط تحلیل طیفی تعیین کرد.



شکل ۳-۳۴ پراکندگی پرتوهای ایکس توسط فونون‌ها (الف) شبکه‌ی مرتعش به عنوان مجموعه‌ای از صفحات که به فاصله‌ی مساوی λ از یک دیگرند عمل می کنند جذب یک فونون q و گسیل یک فونون $-q$ منجر به پایستگی اندازه حرکت می شود و بنابراین دو فرایند به طور هم زمان در آشکار ساز ظاهر می گردند، ولی فرکانس آن‌ها متفاوت است. (ب) پایستگی اندازه حرکت برای برخورد فونون - فوتون پرتو ایکس (ج) فرکانس انتقال یافته پرتو ایکس

بردار موج فونون q را می توان از شکل (۳-۳۴) تعیین کرد. بزرگی q توسط رابطه‌ی زیر داده می شود:

$$q = 2k_0 \sin \theta = 2n \frac{\omega_0}{c} \sin \theta \quad (3-77)$$

که n ضریب شکست محیط و θ نصف زاویه پراکندگی است. در استنتاج رابطه‌ی (۳-۷۷) فرض کرده ایم که $\omega(q) \ll \omega_0$ که یک تقریب عالی است، زیرا معمولاً $\hbar \omega_0 = 10^4 \text{ eV}$ در حالی که $\hbar \omega(q) = 0.3 \text{ eV}$ (معمولاً فرکانس ω_0 در ناحیه مرئی است در حالی که $\omega(q)$ در ناحیه‌ی

فروسرخ یا پایین تر است.^۱

بنابراین با اندازه گیری جابه‌جایی فرکانس و زاویه پراکندگی می‌توان هر دو q و $\omega(q)$ را تعیین کرد و این یک نقطه از منحنی پاشندگی را تعیین می‌کند. با چرخاندن آشکار ساز (با بلور) به فونون‌های مختلف اجازه داده می‌شود که به آشکار ساز وارد شوند و بدین ترتیب نقاط دیگری از منطقه بریلون مشخص می‌شود که با تکرار این روش به هر تعداد که لازم باشد می‌توان تمام منطقه را پوشش داد. تکنیک پرتوایکس یک روش استاندارد برای اندازه‌گیری منحنی‌های پاشندگی در جامدات است. به عنوان مثال منحنی پاشندگی برای Al، آن طور که از این روش به دست آمده در شکل (۲۶-۳) رسم شده است.

اشکال عمده تکنیک پرتوایکس در مطالعه ارتعاشات شبکه، تعیین دقیق جابه‌جایی فرکانس است. فرکانس فوتون ω_0 از فرکانس فونون خیلی بزرگ تر است، نوعاً $\omega_0 \cong 10^5 \omega(q)$ به طوری که تلاش زیادی برای رسیدن به تفکیک مورد نیاز لازم است. آن چنان که به زودی نشان خواهیم داد این مشکل با استفاده از تکنیک پراکندگی نوترون برطرف می‌شود.

تفصیل: پراکندگی پرتوهای ایکس توسط فونون‌ها را که در بالا از نقطه نظر کوانتومی بررسی کردیم ممکن است به عنوان یک فرآیند کلاسیکی نیز در نظر گرفت که در آن امواج الکترومغناطیسی توسط امواج آکوستیکی پراشیده می‌شوند. امواج شبکه در محیط، به منزله‌ی مجموعه‌ای از صفحات اتمی عمل می‌کنند که نواحی متراکم یا منبسط را ایجاد می‌کنند و پرتوهای ایکس را پراشیده می‌کنند. فاصله‌ی بین صفحات مساوی طول موج است. از این نقطه نظر، معادله‌ی اندازه حرکت (رابطه‌ی ۷۵-۳) به همان شرط براگ برای تداخل سازنده معادله‌ی (۹-۳) تبدیل می‌شود. معادله‌ی انرژی (۷۶-۳) از این واقعیت پیروی می‌کند که با توجه به رونده بودن موج، فرکانس باریکه‌ی پرتوایکس به اندازه‌ی فرکانس دوپلر جابه‌جا می‌شود. در حالت جذب فوتون، موج به سمت باریکه‌ی پرتوایکس می‌رود و جابه‌جایی مثبت است، در حالی که در فرآیند گسیل فوتون موج از باریکه دور می‌شود و جابه‌جایی منفی است. چنان چه جابه‌جایی دوپلر به طور کمی مورد بررسی قرار گیرد دقیقاً به رابطه‌ی (۷۶-۳) منجر می‌شود.

۱- فرکانس فرودی ω_0 در آشکار ساز ظاهر نمی‌شود زیرا زاویه‌ی θ معمولاً شرط براگ را برآورده نمی‌کند. و بنابراین تنها فرکانس‌های انتقال یافته مشاهده می‌شوند. این نوع پراکندگی پرتوایکس که شرط براگ را نقض می‌کند به پراکندگی پخش شده (diffused scattering) موسوم است. در زوایایی که شرط براگ ارضا می‌شود فرکانس فرودی $\omega_0 + \omega$ همراه با فرکانس‌های انتقال یافته ظاهر می‌گردد.

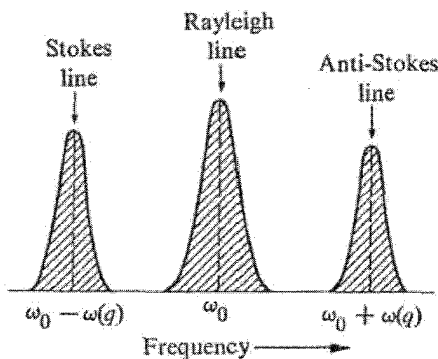
پراکندگی ناکشسان نوترون

پراکندگی ناکشسان نوترون توسط فونون را می‌توان به همان تریبی که در مورد پراکندگی پرتوهای ایکس بحث شد مورد مطالعه قرار داد که در این جا تفصیل آن را تکرار نمی‌کنیم. به ویژه این که شرایط پایستگی اندازه حرکت و انرژی روابط (۳-۷۵) و (۳-۷۶) در این جا نیز برقرار خواهد بود. در رابطه‌ی (۳-۷۶) فرکانس نوترون که اصطلاحاً فرکانس انیشتین نامیده می‌شود با E انرژی نوترون به صورت رابطه‌ی $\omega = \frac{E}{\hbar}$ بستگی دارد ($E = \frac{P^2}{2m}$) که P اندازه حرکت نوترون است). درست همان گونه که از پرتوهای ایکس استفاده می‌شود می‌توان از پراکندگی نوترون نیز برای تعیین منحنی‌های پاشندگی استفاده کرد. مزیت مهم تکنیک نوترون بر تکنیک پرتو ایکس این است که انرژی حرارتی نوترون فقط در حدود 0.108eV است (بخش ۱۱-۲ را ملاحظه نمایید)، و از همان مرتبه‌ی بزرگی فرکانس فونون است بنا بر این جایی نسبی فرکانس قابل ملاحظه است و می‌توان آن را با دقت زیاد تعیین کرد. بدین دلیل تکنیک نوترون بر تکنیک پرتو ایکس برتری دارد و هنگامی که چشمه‌ی مناسب نوترون در اختیار باشد از این تکنیک می‌توان استفاده کرد. منحنی پاشندگی برای Ge که در شکل (۲۵-۳ب) نشان داده شده است به این روش تعیین شده است.

پراکندگی نور، بریلیون و رامان

امواج نوری (یا فوتون‌های مرئی) نیز ممکن است توسط فونون‌ها پراکنده گردند و از آن‌ها می‌توان برای مطالعه‌ی منحنی‌های پاشندگی جامدات استفاده کرد. وقتی فونون مربوطه آکوستیکی است فرایند، پراکندگی بریلیون و وقتی که فونون اپتیکی است فرایند، پراکندگی رامان نامیده می‌شود.

ابتدا پراکندگی بریلیون را بررسی می‌کنیم. بر طبق قانون پایستگی انرژی (رابطه‌ی ۳-۷۶) همچون مورد پرتو ایکس، در طیف باریکه پراکنده دو خطی که نسبت به فرکانس فرودی به اندازه‌ی مقداری که مساوی فرکانس فونون است جابه‌جا شده‌اند به راحتی قابل تشخیص است. این دو خط که در شکل (۳۵-۳) نشان داده شده‌اند. به بال‌های بریلیون معروف‌اند. البته خط جابه‌جا نشده مرکزی توسط پراکندگی فونون ایجاد نمی‌شود، بلکه به وسیله‌ی پراکندگی رالی که توسط ناخالصی‌های استاتیک در نمونه ایجاد می‌شود و به نام خط رالی نامیده می‌شود ایجاد می‌گردد.



شکل ۳-۳۵ طیف رامان که خطوط ایجاد شده رالی و خطوط استوکس و پاد-استوکس را نشان می دهد.

بال پایینی بریلیون که از انتشار فوتون ناشی می شود، خط استوکس و بال بالایی که از جذب فوتون ناشی می شود، خط پاد-استوکس نامیده می شود.

حال جابه جایی بریلیون را بر حسب زاویه پراکندگی محاسبه می نماییم. با توجه به اینکه برخلاف فوتون های ایکس که برای آنها k بزرگ است، عدد موج k برای نوترون های مرئی خیلی کوچک است، بررسی این موضوع ساده تر می شود. برای ملاحظه ای این مطلب توجه داریم که $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ و برای مقادیر نوعی $\lambda = 5.000 \text{ \AA}$ و $k \cong 1.0^5 \text{ Cm}^{-1}$ این مقدار مقایسه شود با شعاع BZ که از مرتبه $\frac{\pi}{a}$ یعنی در حدود 10^8 cm^{-1} است. بنابراین k از شعاع BZ با ضریبی در حدود 10^{-3} کوچک تر است. از آن جا که q برای فوتون های مربوطه در پراکندگی از همان مرتبه بزرگی k است، با توجه به شکل (۳-۳۴) (ب) (که در این جا نیز باید به کار رود) نتیجه می شود که q نیز کوچک است و فقط فوتون های با طول موج بلند در پراکندگی شرکت می کنند. به بیان دیگر در این نوع پراکندگی بر خلاف پرتوهای ایکس یا نوترون که در تمام منطقه ای بریلیون اعمال می گردد، فقط نواحی بسیار نزدیک به مرکز منطقه را بررسی می کند. تقریب طول موج بلند $\omega(q) = v_s q$ در نزدیکی های مرکز BZ برقرار است با استفاده از این واقعیت و معادله ی (۳-۷۷) جابه جایی بریلیون به صورت زیر به دست می آید:

$$\Delta\omega = \pm 2\pi\omega_0 \left(\frac{v_s}{c}\right) \sin \theta \quad (3-78)$$

مقدار جابه جایی با زاویه θ افزایش می یابد. اندازه گیری ها اغلب در امتداد عمود بر باریکه‌ی فرودی صورت می گیرد. یعنی $\theta = \frac{\pi}{2}$ و این به منظور اجتناب از تداخل از این باریکه می باشد.

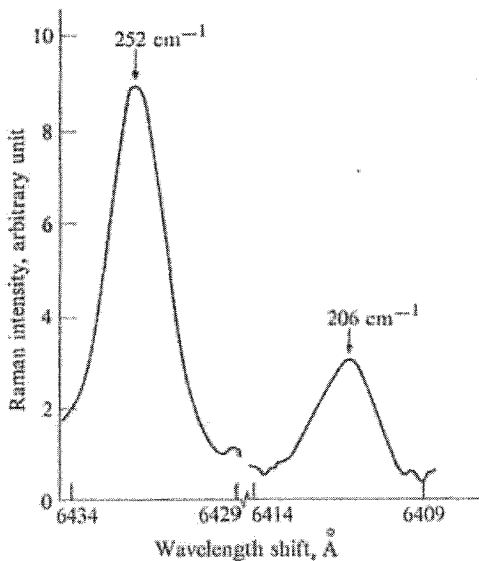
هم چنین از رابطه ی (۳-۷۸) معلوم می شود که $\frac{v_s}{c} \sim \frac{\Delta\omega}{\omega_0}$ که نسبت سرعت صوت به سرعت نور است. با بررسی پراکندگی بریلیون به منزله‌ی پراش براگ با جابه جایی دوپلر هم چنان که در ارتباط با پرتوهای ایکس قبلاً بیان شد به سادگی می توان این مطلب را دریافت. از آن جا که $\frac{v_s}{c} \cong 10^{-5}$ است در می یابیم که جابه جایی نسبی $\Delta\omega/\omega_0$ بسیار کوچک است (بنابراین $\Delta\omega \cong 10^{-5} \omega_0 \cong 10^{11} \text{ s}^{-1}$) و تکنیک‌های خاصی لازم است تا بتوان چنین اندازه گیری دقیقی را انجام داد. در این زمینه از امکانات چشمه های لیزر استفاده می شود که فرکانس آن‌ها را می توان خیلی دقیق کنترل کرد.

همین طور از رابطه ی (۳-۷۸) در می یابیم که سرعت صوت v_s را می توان توسط جابه جایی بریلیون تعیین کرد. توجه کنید که در این جا برخلاف اندازه گیری معمولی سرعت، امواج صوتی را لازم نیست توسط یک چشمه خارجی ایجاد کرد. زیرا این امواج به واسطه تحریک های حرارتی در جسم جامد وجود دارند!

بیش تر مطالبی که در بالا ذکر شد برای پراکندگی رامان که در آن فونون های اپتیکی وجود دارند نیز برقرار است. مجدداً خطوط استوکس و پاد استوکس مشاهده می شوند. ناحیه ی مورد بررسی محدود به ناحیه ی بسیار نزدیک به مرکز BZ است. به هر حال دو نکته وجود دارد که پراکندگی رامان متفاوت از پراکندگی بریلیون است. (۱) پراکندگی رامان به جابه جایی فرکانس خیلی بزرگ تری منجر می شود زیرا $\Delta\omega$ مساوی با فرکانس فونون اپتیکی است و از مرتبه ی بزرگی 10^{13} S^{-1} است (مقایسه شود با 10^{11} S^{-1} یا کم تر برای پراکندگی بریلیون). (۲) از آن جا که فرکانس فونون های اپتیکی اساساً مستقل از q است، جابه جایی رامان به هیچ وجه به زاویه پراکندگی بستگی ندارد.

۱- از پهنای خط بال برلیون می توان برای تعیین عمر فوتون استفاده کرد. بر طبق رابطه ی عدم قطعیت (بخش ۱-۸)،

پهنای خط $\Delta\omega$ و عمر τ با معادله $\Delta\omega\tau \cong 1$ به هم مربوطند بنابراین عمر فونون با رابطه $\tau \cong \frac{1}{\Delta\omega}$ بیان می گردد.



در شکل ۳-۳۶ جابه جایی های رامان در ZnSe نشان داده شده است. دو خط نشان داده شده متناظر است با LO و TO.

شکل ۳-۳۶ طیف رامان ZnSe نشان دهنده پراکندگی از فونون های اپتیکی طولی (252 cm^{-1}) و عرضی (206 cm^{-1}).

در سال های اخیر به ویژه پس از پیشرفت لیزر تحقیقات در زمینه پراکندگی رامان و بریلیون گسترش بسیاری یافته است. چنین چشمه های لیزری، باریکه های تک فام با شدت بسیار تولید می کنند. از آن جا که هر دو پراکندگی رامان و بریلیون اثرهای غیر خطی هستند و عموماً بسیار ضعیف اند، باریکه هایی با شدت بالا نیاز است تا بتوان یک سیگنال نسبتاً قوی مشاهده کرد. همین طور باریکه هایی بسیار تک فام لازم است تا بتوان سیگنال های پراکنده را به خوبی از هم تفکیک کرد. متقابلاً پدیده پراکندگی نور توسط صوت سهم مهمی در توسعه ی تکنولوژی لیزر داشته است. به طوری که پراکندگی بریلیون در انحراف باریکه ی نوری در سوئیچینگ Q که تکنیکی است برای تولید پالس های بلند لیزری کاربرد دارد. هم چنین می توان از آن به منظور تهیه چشمه های تابشی همدوس قابل تنظیم، استفاده کرد. اگر باریکه ی نوری همدوس باشد، که در

مورد یک لیزر چنین است، فونون های گسیل یافته در اختلاف فاز ثابتی نسبت به باریکه فرودی هستند. و در نتیجه تابش پراکنده استوکس نیز همدوس است، (فرض شده است دما به اندازه کافی پایین باشد که تابش پاش-استوکس که یک تابش غیر همدوس است خاموش شود. باریکه های فونونی که به این طریق تولید می شوند فرکانس هایی از 10^4 kHz تا چندین GHz دارند. در این حالت شبکه به منزله ی یک تقویت کننده ی پارامتری عمل می کند.

۱۱-۳ فراصوتی های مایکروموج

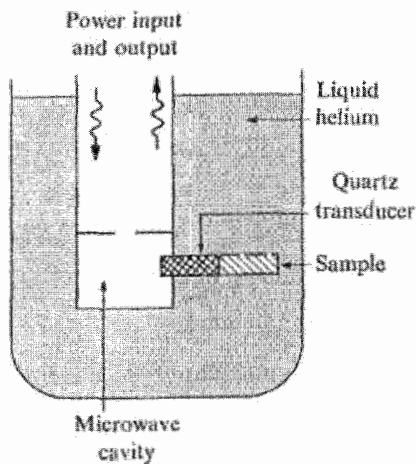
بعضی از پدیده های جالب مربوط به امواج شبکه در مطالعه ی آن دسته از امواج آکوستیکی ظاهر می شوند که در ناحیه ی مایکروموج ($\omega \cong 10^{11} \text{ s}^{-1}$) قرار دارند. این امواج، امواج فراصوتی نامیده می شوند. خواهیم دید که این پدیده باعث تهیه و تولید وسایل الکترونیکی فوق العاده مفید شده است. برای $\omega \cong 10^{11} \text{ s}^{-1}$ طول موج در حدود 10^{-5} cm^{-1} است که هنوز بسیار بزرگ تر از فواصل بین اتمی است. بنابراین در ناحیه ی فراصوت، تقریب پیوستگی را می توان بکار برد.

شکل (۳۷-۳) یک مد عمومی برای تولید امواج فراصوتی در یک نمونه را نشان می دهد. نمونه در یک بلور کوارتز به شکل یک میله متصل است که با یک کاواک مایکروموج الکترومغناطیسی جفت شده است. وقتی کاواک تحریک می شود میدان الکترومغناطیسی آن با انتهای میله به صورت اندرکنش پیزوالکتریک جفت می شود و باعث می شود انتهای میله نوسان کند. سپس این نوسان مانند یک موج کشسان در میله ی کوارتز انتشار می یابد، به انتهای آن می رسد در طول نمونه منتشر می گردد. در این پدیده قسمتی از انرژی امواج الکترومغناطیسی به انرژی کشسانی تبدیل می گردد. میله ی کوارتز واسطه مناسبی برای جفت شدگی میدان الکترومغناطیسی و نمونه است. اگر چنین نمی بود، جفت شدگی بین نمونه و میدان ضعف بود زیرا نمونه معمولاً پیزوالکتریک نیست^۱.

با افزایش فرکانس، بازده تبدیل به سرعت کاهش می یابد ولی نوعاً از مرتبه 10^{-4} است. بنابراین برای رسیدن به یک مقدار مناسب انرژی کشسانی، معمولاً کاواک در توان بالا که از مرتبه ی چندین وات و در یک دوره ی زمانی کوتاه که در حدود $1 \mu\text{s}$ است، پالس ایجاد می کند.

بدین ترتیب می توان باریکه‌ی فونون همدوس ایجاد کرد که از آن برای مطالعه‌ی فرایندهای فیزیکی در جامدات استفاده می گردد. چون می توان جهت، فرکانس و قطبش چنین باریکه‌ای را کنترل کرد، با این فونون ها می توان اندازه گیری دقیق تری نسبت به فونون های فراصوتی که به صورت حرارتی تحریک شده‌اند انجام داد. فونون های اخیر را نمی توان به راحتی کنترل کرد زیرا آنها در تمام جهات با تمام قطبش های ممکن در محدوده‌ی وسیع فرکانسی تحریک شده‌اند.

حجم اطلاعاتی که بدست می آید به سرعت با فرکانس باریکه‌ی فراصوتی افزایش می یابد. گرچه فرکانس های تا ۱۰۰ GHz نیز تولید و مطالعه گردیده‌اند، بیش تر کارها در محدوده‌ی ۱-۱۶ GHz انجام می پذیرد.



شکل ۳۷-۳ ترتیب قرار گرفتن وسایل آزمایشگاهی برای مطالعات فراصوتی

کمیت های فیزیکی که در یک نمونه اندازه گیری می شوند عبارت اند از: سرعت صوت و ضریب تضعیف. از این مقادیر اطلاعاتی راجع به ساختار داخلی جامدات بدست می آید. با اندازه گیری زمانی که یک تپ صوتی در نمونه به جلو و عقب گسیل می شود سرعت صوت تعیین می گردد. ضریب تضعیف از دامنه پژواک بازتاب یافته تعیین می شود. تضعیف اغلب بزرگ است و با فرکانس و دما به سرعت افزایش می یابد. برای پیشگیری از تضعیف بسیار زیاد اغلب اندازه گیری در دمای پایین (نزدیک دمای هلیوم مایع) انجام می شود.

یکی از کاربردهای امواج فراصوتی در الکترونیک، طراحی خطوط تأخیری مایکروموج آکوستیکی و تقویت کننده های خط تأخیری است. در چنین قطعاتی، یک سیگنال الکترومغناطیسی به یک انتهای نمونه اعمال و در آن جا به یک موج صوتی تبدیل می شود. این موج صوتی در نمونه انتشار می یابد، چنان چه لازم باشد تقویت می شود، و سپس در انتهای دیگر نمونه مجدداً به یک سیگنال الکترومغناطیسی تبدیل می شود. باید توجه داشت که این موج، از نوع امواج آکوستیکی است و با سرعت آهسته ی v_s در نمونه حرکت می کند. اگر سیگنال تبدیل نشده بود، با سرعتی بیشتر از سرعت صوت و نزدیک به سرعت نور c حرکت می کرد. از آن جایی که $\frac{v_s}{c} \cong 10^{-5}$ در واقع سیگنال به نحو قابل ملاحظه ای تأخیر داشته است. تاخیر نمونه را همان طور

که توسط روش کاملاً الکترومغناطیسی و با استفاده از کابلی به طول 10^5 برابر طول نمونه می توان اندازه گرفت، به روش آکوستیکی نیز قابل اندازه گیری است. مثلاً نمونه ای به طول 5cm معادل است با یک کابل به طول 5km . این کاهش اندازه بسیار چشم گیر است.

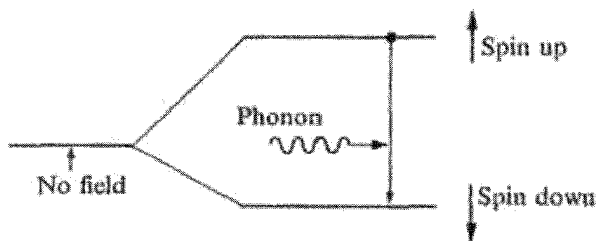
کاربردهای زیاد دیگری نیز وجود دارد. بسیاری از اعمالی که کاواک های مایکروموج انجام می دهند روزی با استفاده از قطعات فراصوتی انجام می پذیرد که این باعث کاهش بسیار زیاد اندازه و قیمت وسیله می شود.

حال راجع به فرایندهای فیزیکی ای صحبت می کنیم که در اثر عبور یک باریکه ی همدوس فونون ها در یک طول یک نمونه ی بلوری صورت می پذیرند. باریکه ی همدوس فونون ها توسط فونون های حرارتی و البته ناخالصی ها (همان گونه که در ارتباط با رسانایی حرارتی در بخش ۳-۳۹ بحث شد)، و همین طور در مورد فلزات توسط الکترون های رسانش پراکنده می شوند. با اندازه گیری آثار پراکندگی فونون های همدوس اطلاعاتی راجع به فونون های حرارتی و همین طور راجع به ناخالصی ها بدست می آید.

ان-اس- شیرن^۱ اندر کنش بین دو فونون همدوس را مطالعه کرده است. او دو موج با فرکانس های $16/45\text{GHz}$ و $1/5\text{GHz}$ ایجاد کرد که در یک نمونه MgO منتشر می شود. این دو موج توسط اندرکنش غیر خطی هماهنگ، جفت شده اند. شیرن دریافت که با پمپ کردن در فرکانس های بالاتر می توان شدت موج در فرکانس های پایین را افزایش دهد. در این جا شبکه به منزله یک تقویت کننده آکوستیکی پارامتری عمل می کند.

از یک باریکه‌ی همدوس فونون‌ها همچنین می‌توان برای مطالعه‌ی اندرکنش اسپین-فونون استفاده کرد. اگر نمونه شامل ناخالصی‌های پارامتری مثلاً Mn^{2+} در کوارتز یا Cr^{3+} در MgO باشد- همان گونه که در شکل (۳-۸۸) نشان داده شده است- سطح انرژی ناخالصی شکافته می‌شود.^۱

اگر فرکانس فونون به گونه‌ای باشد که $\hbar\omega$ مساوی شکافتگی انرژی بین سطوح اسپین باشد، فونون توسط سیستم اسپین شدیداً جذب می‌شود؛ به ازای هر کدام از فونون‌های جذب شده یک اتم اسپین خود را وارونه می‌کند. بنابراین با مطالعه فونون اطلاعاتی راجع به ساختار انرژی ناخالصی‌ها و قدرت جفت شوندگی آنها با فونون بدست می‌آید. (فرآیندی که در این جا بحث شد.) مانسته‌ی فرایند آشناتر تشدید اسپین الکترون است که در آن در اثر جذب فونون اسپین وارونه می‌شود. بخش (۹-۱۲) را ملاحظه کنید.

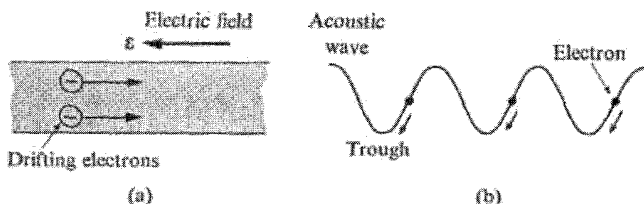


شکل ۳-۳۸ جذب یک فونون توسط یک ناخالصی مغناطیسی.

در مثال فوق باریکه‌ی فونونی تضعیف می‌شود. این وضعیت عادی است. ولی تحت شرایطی ممکن است، باریکه در حین حرکت در نمونه رشد کند که در این صورت نمونه به عنوان یک تقویت کننده فونونی عمل می‌کند. انواع بسیاری از چنین تقویت کننده‌هایی ساخته شده‌اند ولی آن که بیشترین توجه را به خود معطوف داشته است تقویت کننده‌ای است که شامل اثر آکوستو الکتریکی در نیمه رساناهای پیزوالکتریک است. اصول فیزیکی آن به قرار زیر است:

یک نیمه رسانا شامل تعداد زیادی الکترون آزاد است که تحت تاثیر یک میدان الکتریکی نسبتاً قوی در داخل نمونه با سرعت بالایی سوق می‌یابند (شکل ۳-۳۹-ب). حال فرض کنید یک موج آکوستیکی نیز در نمونه حرکت کند. این موج بالکترون‌های سوق یافته جفت می‌شود. جفت

شدگی در مواد پیزوالکتریک شدید است. می توان نشان داد که اگر سرعت موج v_s اندکی کم تر از سرعت سوق v باشد، انرژی از باریکه الکترونی به موج منتقل می شود و موج تقویت می شود^۱. با مراجعه به شکل (۳۹-۳ ب) می توان این فرایند فیزیکی را درک کرد. به دلیل وجود موج، الکترون ها تحت تاثیر یک پتانسیل تناوبی قرار می گیرند؛ به طوری که الکترون های پیش تری به سمت دره ی موج هدایت می شوند. بنابراین الکترون ها تمایل دارند به سمت پایین دره ی موج بروند و انرژی از دست رفته به انرژی کشسانی در موج تبدیل می شود. تقویت کننده های تأخیری که آکوستو الکتریکی با استفاده از CdS و ZnO برای فرکانس های تا ۱۴ GHz ساخته شده است. تقویت تا ۱۰۰ dB/cm برای فرکانس های ۱ تا ۲ GHz بدست آمده است.

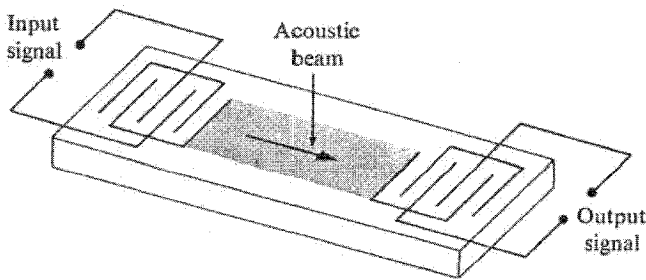


شکل ۳-۳۹ اصول تقویت کننده ی آکوستو الکتریک . (الف) در اثر اعمال یک میدان الکتریکی قوی الکترون ها با سرعت زیادی سوق می یابند (ب) الکترون ها به سمت دره موج سرازیر می شوند با آزاد کردن قسمتی از انرژی الکترون ها و تبدیل آن به موج عمل تقویت صورت می گیرد.

شاید جالب ترین قطعات فراصوتی میکروموج آن هایی باشند که از امواج شبکه ی سطحی استفاده می کنند. این امواج که امواج رالی نیز نامیده می شوند، فقط و فقط در سطح نمونه حرکت می کنند و دامنه ی آنها در فاصله ی تقریبی یک طول موج از سطح مستهلك می شود. سرعت امواج سطحی تقریباً مساوی سرعت امواج توده است. ولی امواج سطحی خیلی راحت تر با یک مدار خارجی در انتهای ورودی یا خروجی نمونه جفت می شوند. شکل (۴۵-۳) طرح اولیه یک خط تأخیری موج سطحی را نشان می دهد. کاربردهای امواج سطحی بدون شک نقش مهمی در تکنولوژی الکترونیک در ناحیه ی مایکرو موج در سال های آینده ایفا خواهد کرد^۲.

۱- یک مانسته ی آشنا و ورزش باد روی یک موج دریا است. اگر باد سریع تر از موج حرکت کند، در اثر انتقال انرژی از باد به موج تقویت می شود.

۲- برای ملاحظه ی یک بحث جالب در مورد این امواج و کاربردهای آنها در الکترونیک و اپتیک به مقاله ی زیر مراجعه نمایند. عکس های این مقاله عالی است.



شکل ۳-۴۰ طراحی پایه به یک خط تأخیری موج سطحی

۳-۱۲ خواص نوری شبکه در ناحیه‌ی فروسرخ

بلورهای یونی خواص اپتیکی جالبی در ارتباط با فونون‌های اپتیکی از خود نشان می‌دهند. فرکانس این فونون‌ها در ناحیه‌ی فروسرخ طیف قرار دارد همان گونه که در بخش (۳-۶) گفته شده در این ناحیه فونون‌های اپتیکی فعال هستند. مشخصه‌ی یک بلور یونی در ناحیه‌ی فروسرخ جذب و بازتاب شدید اپتیکی است. حال این مشاهدات را به ارتعاشات اپتیکی شبکه در بلورهای یونی ارتباط می‌دهیم.

از طریق تابع دی‌الکتریک محیط راحت‌تر می‌توانیم به این بحث برسیم. این کمیت با ϵ نمایش داده می‌شود و به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$D = \epsilon E = \epsilon_0 E + P \quad (۳-۷۹)$$

که D بردار جابجایی الکتریکی، E میدان الکتریکی و P قطبش محیط و ϵ ثابت دی‌الکتریک خلاء است به زودی از این رابطه برای ارزیابی ثابت دی‌الکتریک بلورهای یونی استفاده می‌کنیم. باید به این نکته اشاره کرد که در نوشتن رابطه‌ی (۳-۷۹) فرض کردیم که E و P در یک جهت‌اند در نتیجه D نیز در همان جهت می‌شود. به بیان دیگر برای بلور همسان‌گرد در نظر گرفته می‌شود و در نوشتن رابطه‌ی فوق علامت بردار را می‌توان حذف کرد.

همین که کمیت ϵ معلوم شد، می‌توان از آن برای مطالعه خواص اپتیکی محیط استفاده کرد. روش بدین طریق است:

تابع دی الکتریک نسبی ϵ_r را که به صورت $\epsilon_r = \frac{\epsilon}{\epsilon_0}$ تعریف می کنیم، می توان به صورت زیر نوشت:

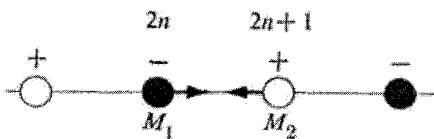
$$\epsilon_r = (n + ik)^2 \quad (3-80)$$

که n ضریب شکست اپتیکی و k ضریب خاموشی است. حال می توانیم از کمیت های n و k برای محاسبه ی بازتاب و جذب یک محیط به صورت نسبت های زیر استفاده نماییم^۱.

$$R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (3-81)$$

$$\alpha_{ab} = 2kq \quad (3-82)$$

که در این جا بازتاب R در امتداد عمود بر سطح محاسبه شده است α_{ab} ضریب جذب و q بردار موج است. حال می توانیم این شیوه را برای یک بلور یونی به کار ببریم.



شکل ۳-۴۱ یک شبکه ی دو اتمی یونی

شکل (۳-۴۱) یک بلور دو اتمی را نشان می دهد که در یاخته ی واحد دو اتم به جرم های M_1 و M_2 و بارهای الکتریکی e^* و $-e^*$ دارد. (کمیت e^* بار مؤثر نامیده می شود و کوچک تر از بار الکترون e است زیرا انتقال بار مثلاً در قلیایی های هالوژنه، از اتم قلیایی به اتم هالوژن کامل نیست، مثلاً در کلرور سدیم $e^* = 0.74e$). هنگامی که میدان الکتریکی متناوب \mathcal{E} به بلور اعمال گردد، معادله ی حرکت برای دو یون را می توان به صورت زیر نوشت:

$$M_1 \frac{\partial^2 u_{r_{2n+1}}}{\partial t^2} = -\alpha [2u_{r_{2n+1}} - u_{r_{2n}} - u_{r_{2n+2}}] + e^* \mathcal{E} \quad (3-83)$$

$$M_2 \frac{\partial^2 u_{r_{2n}}}{\partial t^2} = -\alpha [2u_{r_{2n}} - u_{r_{2n-1}} - u_{r_{2n+1}}] - e^* \mathcal{E} \quad (3-84)$$

۱- در این زمینه می توانید به هر کتاب درسی در سطح متوسط در اپتیک و الکترومغناطیس مراجعه نمایید مثلاً

در هر یک از این معادلات اولین جمله در طرف راست نمایان گر نیروی بازگرداننده ی کشسان کوتاه بردی است که به اندرکنش بین اتم ها مربوط می شود، و دومین جمله نمایان گر نیروی مربوط به میدان الکتریکی است. در مقایسه وضعیت کنونی با آن چه که در بخش (۳-۶) بیان شد باید توجه کنیم که در این جا راجع به ارتعاش واداشته شبکه بحث می کنیم در حالی که قبلا راجع به ارتعاشات آزاد بحث می شد.

برای حل معادله ی فوق میدان الکتریکی را عمود بر صفحه ی گسیل موج در نظر می گیریم:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 e^{i(qx - \omega t)} \quad (3-85)$$

برای سهولت فرض می کنیم طول موج در مقایسه با فواصل بین اتمی خیلی بزرگ باشد به طوری که بتوانیم طول موج را بی نهایت و q را صفر بگیریم. در آن صورت تمام اتم های مشابه جابه جایی ها یکسانی دارند مثلاً اتم های به جرم M_1 جابه جایی های u_+ و اتم های به جرم M_2 جابه جایی های u_- دارند. علامت های مثبت و منفی برای نشانه گذاری یون های مثبت و منفی به کار رفته اند. این جابه جایی ها در حالت های پایا، شکل های مشابهی با میدان در رابطه ی (۳-۸۵) را دارند:

$$u_+ = u_{0+} e^{-i\omega t}, u_- = u_{0-} e^{-i\omega t} \quad (3-86)$$

که u_{0+} و u_{0-} دامنه هستند و q را مساوی صفر قرار داده ایم. جای گزینی روابط (۳-۸۶) و (۳-۸۵) در معادلات حرکت (۳-۸۳) و (۳-۸۴) منجر به تعیین جابه جایی های یونی می شود:

$$u_{0+} = \frac{e^*}{M_1(\omega_1^2 - \omega^2)} \varepsilon_0 \quad (3-87)$$

$$u_{0-} = \frac{e^*}{M_2(\omega_1^2 - \omega^2)} \varepsilon_0 \quad (3-88)$$

که $\omega_1^2 = 2\alpha \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)$ با مراجعه به بخش (۳-۶) در می یابیم که ω_1 فرکانس فونون اپتیکی عرضی در $q = 0$ است.

قطبش یونی محیط P_i به صورت گشتاور دو قطبی بر واحد حجم تعریف می شود. بنابراین ممکن است به صورت زیر نوشته شود:

$$P_i = n_m e^* (u_{0+} - u_{0-}) \quad (3-89)$$

که n_m تعداد مولکول‌ها یا یاخته‌ها بر واحد حجم است. معادله ی (۳-۸۹) با توجه به این نوشته شده است که گشتاور دو قطبی بر مولکول $e^*(u_{0+} - u_{0-})$ است. علاوه بر قطبش یونی یک قطبش الکترونی وجود دارد که مربوط به این واقعیت است که الکترون‌ها در لایه‌های اتمی یون‌ها نیز قطبیده هستند و به میدان الکتریکی پاسخ می‌دهند. این قطبش به P_e نشان داده می‌شود.

قطبش یونی (۳-۸۹) را می‌توان با استفاده از روابط (۳-۸۷) و (۳-۸۸) محاسبه کرد. هنگامی که نتیجه در (۳-۷۹) جای‌گزین شود و فاکتور مشترک \mathcal{E} حذف گردد در می‌یابیم:

$$\epsilon_r(\omega) = 1 + \frac{P_e}{\epsilon_0 \mathcal{E}} + \frac{n_m e^* 2}{\epsilon_0 \omega_i^2 \mu} \frac{1}{1 - \omega^2 / \omega_i^2} \quad (3-90)$$

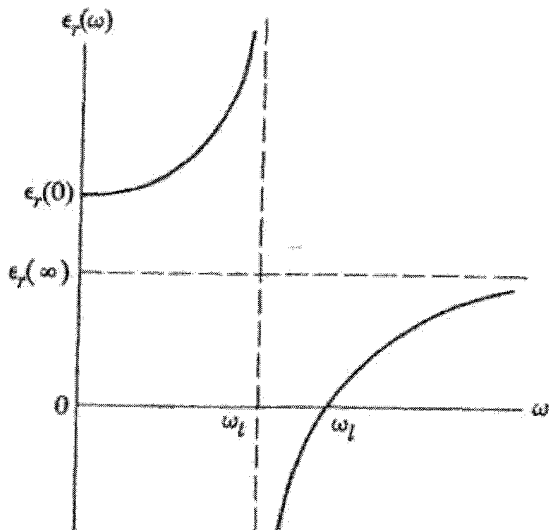
که $\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$ جرم کاهش یافته‌ی دو یون است. جمله‌ی دوم در طرف راست نمایان‌گر سهم الکترونی و جمله‌ی سوم سهم یونی است. برای $\omega \ll \omega_i$ هر دو جمله سهم‌اند که نتیجه‌ی آن تابع دی‌الکتریک $\epsilon_r(\omega)$ می‌شود در انتهای مقابل طیف جایی که $\omega \gg \omega_i$ ، از رابطه‌ی (۳-۹۰) ملاحظه می‌شود که سهم یونی صفر می‌شود. زیرا در آن جا فرکانس آن قدر زیاد است که یون‌ها نمی‌توانند ارتعاشات میدان را دنبال کنند. در این ناحیه ثابت دی‌الکتریک را با $\epsilon_r(\infty)$ نشان می‌دهند که فقط شامل سهم الکترونی است. رابطه‌ی (۳-۹۰) را می‌توان به شکل ساده‌تر زیر نوشت:

$$\epsilon_r(\omega) = \epsilon_r(\infty) + \frac{\epsilon_r(\omega) - \epsilon_r(\infty)}{1 - \omega^2 / \omega_i^2} \quad (3-91)$$

که جمله‌ی دوم سمت راست تماماً شامل سهم یونی است. در این حالت تابع دی‌الکتریک برحسب کمیت‌هایی که مستقیماً قابل اندازه‌گیری هستند یعنی $\epsilon_r(\omega)$ ، $\epsilon_r(\infty)$ یا ω_i به سهولت بیان می‌گردد.

در شکل ۳-۴۲ تابع دی‌الکتریک برحسب ω در تمام فرکانس‌ها رسم شده است. نکته‌ی مهم در این شکل این است که $\epsilon_r(\omega)$ در محدوده‌ی فرکانس $\omega_1 < \omega < \omega_i$ منفی است و همان‌گونه که نشان داده شده است ω_1 فرکانسی است که در آن $\epsilon_r(\omega)$ صفر می‌گردد. این فرکانس را می‌توان از عبارت (۳-۹۱) تعیین کرد و به سادگی معلوم می‌شود که مساوی است با:

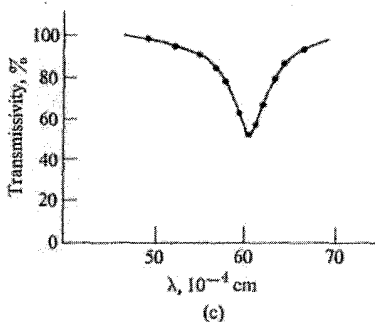
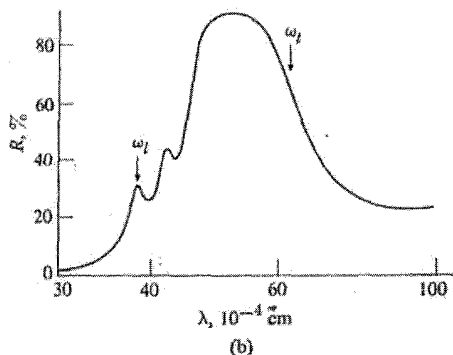
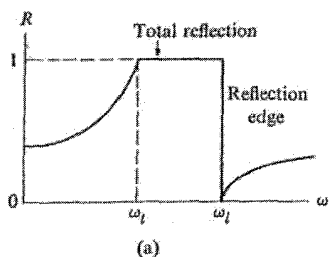
$$\omega_1 = \left[\frac{\epsilon_r(\omega)}{\epsilon_r(\infty)} \right]^{1/2} \omega_i \quad (3-92)$$



شکل ۳-۴۲ تابع دی الکتریک $\epsilon_r(\omega)$ برحسب فرکانس. تابع دو فرکانس عرضی ω_L تکیه و در فرکانس ω_T صفر می شود. شرط اول نمایان گر تشدید است.

ما به زودی اهمیت فیزیکی ω_L را توضیح می دهیم، ولی حالا بحثمان را راجع به تابع دی الکتریک ادامه می دهیم. از آن جا که $\epsilon_r(\omega)$ در محدوده ی فرکانسی $\omega_L < \omega < \omega_T$ منفی از رابطه ی (۳-۸۰) نتیجه می شود که $n = 0$ و $k \neq 0$ است که وقتی در رابطه ی (۳-۸۱) جای گزین شود بازتاب $R = 1$ بدست می آید. یعنی موج فرودی که فرکانس آن در محدوده ی بین $\omega_L < \omega < \omega_T$ قرار دارد بازتاب کامل دارد. در این محدوده ی فرکانسی موج در بلور منتشر نمی شود. و یک گاف ممنوع وجود دارد بستگی بازتاب به دما، آن گونه که توسط رابطه ی (۳-۸۱) بیان می گردد در شکل (۳-۴۳ الف) رسم شده است. مقایسه ی این منحنی تجربی برای NaCl در شکل (۳-۴۳ ب) داده شده است. توجه کنید که در منحنی تجربی لبه های تیز بازتاب گرد شده اند.

این را می توان تا حدودی بر حسب معادلات حرکت شبکه، روابط (۳-۸۳) و (۳-۸۴) توضیح داد. یک چنین میرایی ممکن است مربوط به هر مکانیسم برخورد فونون باشد که در بخش (۳-۹) مورد بحث قرار گرفت. مکانیسم غالب، برخورد فونون - فونون است که توضیح می دهد چرا شکل بازتاب تا حدودی به دما بستگی دارد.



شکل ۳-۴۳ (الف) بازتاب برحسب فرکانس برای یک بلور ایده آل. (ب) بازتاب فروسرخ برحسب طول موج برای NaCl در دمای اتاق. فرکانس های ω_1 و ω_2 به ترتیب متناظر با $\lambda = 61 \text{ cm}$ و $\lambda = 38 \times 10^{-4} \text{ cm}$ (ج) عبور موج فروسرخ برحسب طول موج برای یک لایه ی نازک NaCl (به ضخامت $0.17 \times 10^{-4} \text{ cm}$). گودی منحنی در فرکانس ω_1 است.

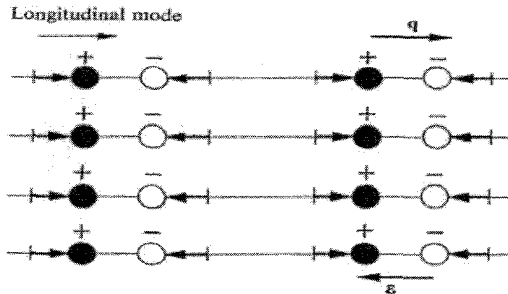
شکل ۳-۴۳ (الف) جذب مشاهده شده ی پرتوهای فروسرخ در یک لایه نازک NaCl را نشان می دهد. هم چنان که قبلاً بیان کردیم، ضریب جذب را می توان از رابطه ی (۳-۸۲) بدست آورد. دلیل استفاده از یک لایه ی نازک، بازتاب شدیدی است که در این ناحیه رخ می دهد. نقطه ی بیشینه ی جذب در فرکانس عرضی ω_1 است (یاد آوری می کنیم که در ω_1 تابع $\epsilon_r(\omega) \rightarrow \infty$ و بنابراین k و α بیشینه ی مقادیر خود را دارند).

پدیده ی جذب و بازتاب شدید فروسرخ توسط شبکه، *reststrahlen* نامیده می شود.^۱

اهمیت فیزیکی ω_1 این است که این فرکانس فونون اپتیکی طولی است و از ω_1 فرکانس فونون اپتیکی عرضی تمیز داده می شود دلیل تمایز بین این دو نوع ارتعاش در یک بلور یونی را می توان از بحث زیر دریافت. اگر از معادله ی ماکسول $\nabla \cdot D = 0$ استفاده کنیم، با توجه به این که بار خالصی وجود ندارد می توانیم بنویسیم:

$$\nabla \cdot \mathcal{E} = -\frac{1}{\epsilon_0} \nabla \cdot P \quad (3-93)$$

که میدان \mathcal{E} را بر حسب قطبش محیط P حل کرده ایم. برای موج عرضی، دیورژانس $\nabla \cdot P$ صفر می شود و با توجه به رابطه ی (۳-۹۳) نتیجه می شود که $\nabla \cdot \mathcal{E} = 0$. بنابراین میدان متناظر با این موج مقداری است ثابت که می توان آن را صفر گرفت. متقابلاً برای موج طولی $\nabla \cdot P \neq 0$ بدین معنی است که به چنین موجی یک میدان الکتریکی وابسته است. این نتیجه گیری از شکل (۳-۴۴) نیز معلوم می گردد. در آن جا، دسته بندی بارهای الکتریکی وابسته به مدل طولی، به ایجاد یک میدان الکتریکی منجر می شود. اثر این میدان، افزایش نیروی بازگرداننده است. به طوری که فراتر از اندرکنش کوتاه برد گسترش می یابد، و باعث می شود فرکانس طولی بیشتر از فرکانس عرضی شود.



شکل ۳-۴۴ دسته بندی بارها در مد طولی

ملاحظه کرده ایم که چرا فرکانس طولی بیشتر از فرکانس عرضی است ولی باید نشان دهیم که فرکانس طولی با ω_1 از معادله ی (۳-۹۲) بیان می شود. برای نشان دادن این مطلب، به معادله $\nabla \cdot D = 0$ بر می گردیم که به کمک رابطه ی (۳-۷۹) آن را به شکل زیر می نویسیم:

$$\epsilon_r \nabla \cdot \mathcal{E} = 0 \quad (3-94)$$

این شرط اعم از اینکه موج عرضی یا طولی است برقرار است. ولی راه رسیدن به آن برای دو حالت فوق کاملاً متفاوت است. در حالت عرضی $\nabla \cdot \mathcal{E} = 0$ و بنابراین شرط (۹۴-۳) ارضاء می‌گردد، ولی در حالت طولی، $\nabla \cdot \mathcal{E} \neq 0$ و تنها حالتی که (۹۴-۳) ممکن است ارضاء گردد، این است که $\epsilon_r(\omega) = 0$. به بیان دیگر فرکانس مد عرضی مساوی ریشه ثابت دی الکتریک است از آن جا که ω_1 با قرار دادن $\epsilon_r(\omega)$ مساوی صفر تعیین گردید، نتیجه می‌شود که ω_1 مساوی فرکانس مد طولی است. معادله‌ی (۹۱-۳) که ω_1 را به ω_2 ارتباط می‌دهد به نام رابطه‌ی LST^۱ شناخته می‌شود.

جدول (۳-۳) پارامترهای اپتیکی بعضی از بلورهای یونی معمول را نشان می‌دهد.

مقادیر $\epsilon_r(\omega)$ و $\epsilon_r(0)$ به طور تجربی تعیین گردیده‌اند. در حالی که مقادیر ω_1 از رابطه‌ی LST محاسبه شده است. نسبت بار مؤثر $\frac{e^*}{e}$ با مقایسه‌ی رابطه‌ی (۹۱-۳) و (۹۰-۳) تعیین می‌شود.

ملاحظات زیر در مورد تمایز بین مدهای عرضی و طولی می‌تواند مفید باشد. وقتی یک موج الکترومغناطیسی به صورت عمودی بر سطح یک بلور فرود می‌آید اگر فرکانس آن دقیقاً با فرکانس فونون‌ها جفت شود فونون‌های TO داخل بلور را تحریک می‌کند. دلیل این امر این است که هر دو موج عرضی هستند و در نتیجه با یک دیگر جفت می‌شوند. به بیان دیگر فونون‌های LO در این حالت تحریک نمی‌شوند. زیرا این فونون‌ها طولی بوده و با موج فرودی که عرضی است جفت نمی‌شوند. برای تحریک این فونون‌ها باید کار دیگری کرد. مثلاً اگر موج فرودی به طور مایل بر سطح فرود آید، یک میدان الکتریکی طولی در سطح وجود دارد که برای تحریک فونون‌های LO عمل می‌کند.

نکته‌ی دیگر این است که برای بلور غیر یونی، هم چنان که در شکل (۲۵-۳) برای ژرمانیوم دیده می‌شود فرکانس‌های ω_1 و ω_2 یکسان اند (در $q=0$). دلیل این امر این است که در چنین بلورهایی موجودات ارتعاش کننده، به لحاظ الکتریکی خنثی هستند و بنابراین قطبش یونی صفر است.

جدول ۳-۳ داده های شبکه ی فرسرخ برای بلورهای یونی

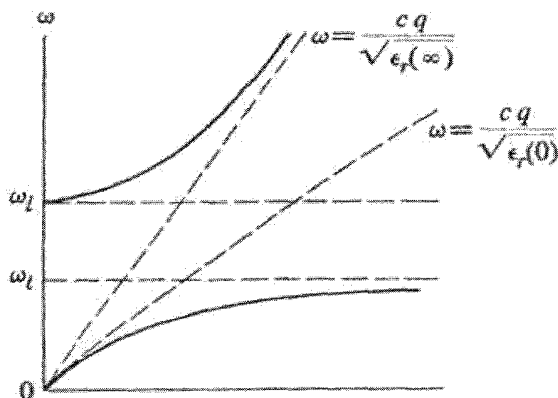
	$\epsilon_r (\infty)$	$\epsilon_r (0)$	$\omega_t \cdot 10^{13} \text{ rad/s}$	$\omega_l \cdot 10^{13} \text{ rad/s}$	$\frac{e^*}{e}$
LiF	۱/۹	۸/۹	۵/۸	۱۲	۰/۸۷
NaF	۱/۷۵	۵/۳	۴/۴	۷/۸	۰/۹۳
NaCl	۲/۲۵	۵/۶۲	۳/۰۸	۵	۰/۷۴
NaBr	۲/۶۲	۵/۹۹	۲/۵۵	۳/۹	۰/۶۹
KCl	۲/۱۳	۴/۶۸	۲/۷۱	۴	۰/۱۸
KBr	۲/۳۳	۴/۷۸	۲/۱۸	---	۰/۷۶
KI	۲/۶۹	۴/۹۴	۱/۹۱	۲/۶۴	۰/۶۹
RbCl	۲/۱۹	۵	۲/۲۴	---	۰/۸۴
RbBr	۲/۳۳	۵	۱/۹۶	---	۰/۸۲
AgCl	۴/۰۴	۱۲/۳	۱/۹۴	۳/۴	۰/۷۸
AgBr	۴/۶۲	۱۳/۱	۱/۵۱	۲/۵	۰/۷۳
CsCl	۲/۶	۷/۲	۱/۸۷	۳/۱	۰/۸۵
CsBr	۲/۸۷	۶/۵۱	۱/۳۹	---	۰/۷۸

پولاریتون

وقتی تأثیر فونون های نوری را روی یک موج الکترومغناطیسی عرضی که واقعاً در یک بلور گسیل می یابد دقیقاً بررسی کنیم، به پدیده ی جالبی بر می خوریم این تأثیر را می توان از طریق تابع دی الکتریک $\epsilon_r(\omega)$ محیط به حساب آورد. رابطه ی پاشندگی برای امواج الکترومغناطیسی که در خلاء به صورت $\omega = cq$ است، حالا تغییر شکل یافته و به صورت $\omega = cq/\sqrt{\epsilon_r(\omega)}$ در می آید که $\sqrt{\epsilon_r(\omega)}$ مساوی ضریب شکست است و تأثیر محیط روی سرعت موج در حالت عادی را نشان می دهد. با جای گزین کردن $\epsilon_r(\omega)$ از رابطه ی (۳-۹۰) در معادله فوق، مجذور کردن طرفین و مرتب کردن جملات رابطه ی پاشندگی به دست می آید:

$$\omega^2 \left[\epsilon_r(\infty) + \frac{\epsilon_r(0) - \epsilon_r(\infty)}{1 - \omega^2 / \omega_t^2} \right] = c^2 q^2 \quad (3-95)$$

معادله (۳-۹۵) نه تنها یک بلکه شامل دو رابطه‌ی پاشندگی مختلف است. این نکته را به صورت جبری با توجه به اینکه به ازاء هر q داده شده، معادله نسبت به ω^2 درجه دو است و دو ریشه (فرکانس) دارد، می‌توان دریافت. همان گونه که در شکل ۳-۴۵ نشان داده شده است. وقتی q را تغییر می‌دهیم دو ریشه‌ی معادله، دو رابطه‌ی پاشندگی جداگانه ایجاد خواهند کرد. این نتایج به ویژه از این لحاظ جالب است که منحنی‌ها پاشندگی که به دست می‌آیند، نه بر فوتون که $(\omega \sim q)$ و نه بر فوتون (که ω مستقل از q است) مطابقت ندارند. در واقع مدهایی که در این جا توصیف شدند نه فوتون خالص و نه فوتون خالص‌اند بلکه مخلوطی از فوتون - فوتون‌اند که پولاریتون نامیده می‌شوند (با اشاره بلورهای یونی یا قطبی). دلیل اختلاط فوتون - فوتون این است که در بلورهای یونی یک جفت شدگی قوی بین دو مد خالص وجود دارد و به دلیل این جفت شدگی، مد های خالص به مد های جدید جفت شده تغییر شکل می‌دهند. بنابراین با شروع هر q با یک مد فوتونی و یک مد فوتونی دو مد جدید پولاریتون بدست می‌آید.



شکل ۳-۴۵ منحنی‌های پاشندگی برای پولاریتون. منحنی‌های نقطه چین نمایان گر مد های آزاد هستند در حالی که منحنی‌های خط پر مد های اندرکنشی یا پولاریتون را توصیف می‌کنند.

یک مانسته‌ی آشنا برای جفت شدگی که در بالا توصیف شد وجود دارد. دو نوسان گر هماهنگ با فرکانس های ω_1 و ω_2 را در نظر بگیرید. نوسان گر ها بدون جفت شدگی متقابل بین آنها مستقلاً و هر یک با فرکانس خود ارتعاش می‌کنند. ولی اگر آن ها توسط یک فنر به هم ارتباط داشته باشند، دیگر مستقلاً ارتعاش نمی‌کنند. نوسان گر ها با هم ولی در دو مد متفاوت که

فرکانس‌هایشان دیگر مساوی ω_1 و ω_2 نیست ارتعاش می‌کنند. و این فرکانس‌ها را می‌توان بر حسب ω_1 و ω_2 قدرت جفت شدگی بیان کرد. در این قیاس فوتون و فونون خالص نمایان گر دو نوسان گر مستقل‌اند که در یک بلور یونی با هم جفت شده‌اند تا یک مد جدیدی که پولاریتون است ایجاد کنند.

از شکل ۳-۴۵ ملاحظه می‌کنیم که قوی‌ترین جفت شدگی در ناحیه‌ی $\omega_1 \cong \omega_2$ است، و فرکانس‌های مدهای خالص تقریباً مساوی نقاط تقاطع است (تقاطع خطوط خط چین نمایان گر مدهای خالص است). این را انتظار داشتیم، زیرا در نوسان گرهای فوق‌اگر فرکانس‌های ω_1 و ω_2 تقریباً مساوی باشند تاثیر جفت شدگی روی نوسان گرها بسیار قوی است. برعکس در ناحیه‌ای که از نقطه‌ی تقاطع دور است، دو مد ترکیب شده اساساً به یک مد خالص تبدیل می‌شوند. برای مثال منحنی پولاریتون پایین را در شکل ۳-۴۵ در نظر بگیرید؛ در $q \cong 0$ رابطه‌ی پاشندگی

مساوی $\omega = \left[\frac{c}{\sqrt{\epsilon_r(0)}} \right] q$ است و مد اساساً یک مد خالص فوتونی است. از آن جا که ω خیلی

پایین‌تر از مد شبکه‌ی ω_1 است، ارتعاشات شبکه به طور دینامیکی آشکار نیست و بلور صرفاً به صورت یک محیط صلب با ثابت دی‌الکتریک $\epsilon_r(0)$ عمل می‌کند. در محدوده‌ی مقابل جایی که q بزرگ است، $\omega \cong \omega_1$ و مستقل از q است. بنابراین مد پولاریتون پایینی تقریباً یک فونون عرضی خالص می‌شود. در این جا میدان الکتریکی مربوط به موج خیلی کوچک می‌شود و تقریباً تمام انرژی به صورت انرژی مکانیکی است. به هر جهت در ناحیه‌ی میانی q ، پولاریتون ترکیبی از هر دو میدان الکتریکی و مکانیکی است و دارای رفتار میانه‌ای است که در بالا توصیف شد. تفسیر مشابه‌ای می‌توان برای منحنی پولاریتون بالایی ارائه داد.

توجه کنید که هیچ مدی نمی‌تواند در بازه‌ی فرکانسی $\omega_1 < \omega < \omega_2$ گسیل شود و این گاف فرکانسی است که قبلاً ذکر شد.

دلیل مورد توجه قرار گرفتن پولاریتون از نقطه نظر بنیادی دو جنبه دارد. (الف) پولاریتون از جفت شدگی دو مد جمعی نتیجه می‌شود و (ب) پولاریتون یک مد جمعی است در سال‌های اخیر موضوع مدهای جمعی در جامدات توجه بسیاری را به خود معطوف کرده است. مثال‌های بسیار دیگری از چنین مدهایی اعم از آزاد یا جفت شده را در این کتاب می‌توان یافت.

خلاصه

این فصل متوجهی ارتعاشات شبکه و تأثیر آن‌ها بر خواص حرارتی، آکوستیکی و اپتیکی جامدات است.

مدل پیوسته

در محدوده‌ی طول موجهای بلند یک بلور را می‌توان به عنوان یک محیط پیوسته در نظر گرفت. زیرا طول موج خیلی بزرگ تر از ثابت شبکه است. رابطه‌ی پاشندگی خطی است.

$$\omega = v_s q$$

که v_s سرعت صوت است. بررسی شرایط مرزی نشان می‌دهد که مداهای نوسان یعنی امواج صوتی مقادیر گسسته‌ای از q و ω دارند. چگالی مدها برابر است با

$$g(\omega) = \frac{v}{(2\pi)^3 v_s^3}$$

گرمای ویژه

اتم‌ها در شبکه به منزله‌ی مجموعه‌ای از نوسان‌گرهای هماهنگ در نظر گرفته می‌شوند و انرژی گرمایی برابر انرژی میانگین این نوسان‌گر است. بر طبق تئوری کلاسیک، میانگین انرژی برای یک نوسان‌گر یک بعدی برابر است با

$$\bar{\epsilon} = kT$$

بنابراین انرژی گرمایی بر هر مدل برابر است با $\bar{E} = 3N_A kT$ که N_A عدد آووگادرو است و گرمای ویژه‌ی مولی $C_v = \frac{\partial E}{\partial T}$ به صورت زیر بیان می‌شود.

$$C_v = 3R$$

که $R = N_A k$ ثابت جهانی گازها است. این نتیجه به عنوان قانون دولون - پتی نامیده می‌شود و بیان می‌دارد که C_v یک مقدار ثابت و مستقل از دما است. معلوم شده است که این قانون فقط در دماهای بالا اعتبار دارد. در دماهای پایین گرمای ویژه کاهش می‌یابد و سپس در $T \rightarrow 0^\circ K$ صفر می‌شود.

انیشتین این تناقض را توسط بررسی کوانتوم مکانیکی نوسان گر بر طرف کرد. انرژی گرمایی متوسط برای نوسان گر به صورت زیر داده می شود

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/KT} - 1}$$

که فقط در دماهای بالا به مقدار کلاسیکی kT میل می کند. در دماهای پایین کوانتوم انرژی به دلیل انجماد حرکت خیلی سریع کاهش می یابد. انیشتین با بررسی اتم ها به شکل نوسان گر مستقل که با یک فرکانس مشترک ارتعاش می کنند گرمای ویژه را به صورت زیر بدست آورد:

$$C_v = 3R \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 \frac{e^{\theta_E/T}}{(e^{\theta_E/T} - 1)^2}$$

که θ_E دمای انیشتین است. در دماهای بالا، گرمای ویژه به مقدار کلاسیکی $3R$ می رسد و در $T=0^0K$ صفر می شود. هر دوی این واقعیات با تجربه سازگاری دارد.

اندازه گیری های دقیق نشان می دهد که کاهش C_v در نزدیکی صفر مطلق آهسته تر از آن چیزی است که توسط انیشتین پیش بینی شده است.

دبی این مطلب را این گونه توضیح داد که اتم ها را نباید به صورت نوسان گرهای مستقل در نظر گرفت، بلکه باید آن ها را به صورت نوسان گرهای جفت شده ای در نظر گرفت که جمعاً مانند امواج صوتی ارتعاش می کنند. دبی با در نظر گرفتن تقریب طول موج بلند دریافت که گرمای ویژه توسط رابطه ی زیر داده می شود:

$$C_v = 9R \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^3 e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$

که θ_D دمای دبی است. این عبارت برای C_v در دماهای بالا به مقدار کلاسیکی $3R$ می رسد، ولی در دماهای پایین $C_v \sim T^3$. این نتیجه ی اخیر به نام قانون T^3 دبی موسوم است و با مشاهدات تجربی سازگاری دارد.

سازگاری مدل دبی با تجربه در تمام محدوده های دمایی خوب است. با کنار گذاشتن تقریب طول موج بلند و در نظر گرفتن بلور به عنوان یک شبکه ی گسسته به سازگاری بهتری می توان دست یافت.

فونون

انرژی کشسانی امواج صوتی در جامدات کوانتیده است و واحد کوانتوم آن فونون است. فونون انرژی: $\varepsilon = \hbar\omega$ و اندازه حرکت $P = \hbar q$ با خود حمل می کند که q و ω به ترتیب بردار و فرکانس موج است.

ارتعاشات شبکه

رابطه‌ی پاشندگی برای یک شبکه‌ی تک اتمی یک بعدی که با نزدیک ترین همسایگانش اندرکنش دارد به صورت زیر است:

$$\omega = \omega_m \sin\left(\frac{aq}{2}\right)$$

که $\omega_m = \left(\frac{4\alpha}{M}\right)^{1/2}$ فرکانس قطع است. کمیت های M و α به ترتیب ثابت نیروی بین اتمی و جرم اتمی است. منحنی پاشندگی در نزدیکی $q = 0$ خطی است و در مقادیر بزرگ q اشباع می شود. شبکه به عنوان یک صافی پایین گذر عمل می کند. تنها موج هایی که فرکانس آن ها پایین تر از ω_m است عبور می کنند. مدهای با فرکانس بیش از ω_m شدیداً تضعیف می شوند.

منحنی های پاشندگی برای یک شبکه ی دو اتمی یک بعدی شامل دو شاخه است، شاخه ی پایینی آکوستیکی و شاخه ی بالایی اپتیکی است. مشخصه ی شاخه ی آکوستیکی مشابه حالت تک اتمی است ولی شاخه ی اپتیکی اساساً در فضای q مسطح است. بین دو شاخه یک گاف فرکانس وجود دارد و شبکه به عنوان یک صافی باند گذر عمل می کند.

رابطه ی پاشندگی در شبکه ی سه بعدی تعمیمی از حالت یک بعدی است. بردار موج q حالا یک بردار سه بعدی است و فرکانس هم تابعی از بزرگی و هم تابعی از جهت q است. بنابراین پاشندگی فرم زیر را دارد.

$$\omega = \omega_j(q)$$

اندیس j ، اندیس شاخه است. یک شبکه ی براوه سه شاخه ی آکوستیکی: یکی طولی و دو تا عرضی دارد. یک شبکه ی غیر براوه با 2 اتم بر یاخته ی واحد، 3^2 شاخه دارد، سه تا از آن ها آکوستیکی و بقیه اپتیکی اند.

منحنی پاشندگی در فضای q خواص تقارنی از خود بروز می‌دهد. تقارن انتقالی $\omega_j(q+G) = \omega_j(q)$ ، ما را قادر می‌سازد که بررسی را فقط محدود به اولین منطقه Y بریلین کنیم، در حالی که تقارن وارونی $\omega_j(-q) = \omega_j(q)$ و تقارن چرخشی، رابطه‌ای بین نواحی مختلف منطقه بریلین برقرار می‌کند. با استفاده از رابطه‌ی پاشندگی برای هر شاخه و شمردن تعداد مدها در آن شاخه، چگالی را در محاسبات مربوط به گرمای ویژه وارد می‌کنیم و سازگاری خوبی با تجربه بدست می‌آید.

رسانایی حرارتی

رسانش گرما در نارساها توسط امواج شبکه یا فونون‌ها صورت می‌گیرد. با در نظر گرفتن فونون‌ها به عنوان یک گاز و با استفاده از نتایج نظریه‌ی جنبشی گازها، در خواهیم یافت که رسانایی حرارتی با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود:

$$k = \frac{1}{3} C_v v_s l$$

که l پویش آزاد میانگین فونون است.

پویش آزاد میانگین به وسیله‌ی پراکندگی یک فونون توسط فونون‌های دیگر یا توسط ناراستی‌های درون حجم جامد تعیین می‌گردد. در دماهای پایین پراکندگی به وسیله مرزهای نمونه است، $l \cong D$ که D قطر نمونه می‌باشد. پراکندگی در دماهای بالا به واسطه‌ی برهم کنش ناهماهنگ بین یک فونون و فونون‌های دیگر در جامد است و پویش آزاد میانگین به طور معکوس با دما تغییر می‌کند، یعنی $l \cong 1/T$ است. ناخالصی‌ها در شبکه نیز در پراکندگی سهیم‌اند.

پراکندگی تابش توسط فونون‌ها

تابش‌های پرتو ایکس، نوترون و نور ممکن است توسط فونون‌ها پراکنده شوند و می‌توان از پراکندگی برای اندازه‌گیری منحنی‌های پاشندگی در شبکه استفاده کرد. قانون پایستگی اندازه حرکت ایجاب می‌کند که

$$K = K_0 + q$$

که k و K_0 بردارهای موج ذرات فرودی و پراکنده اند و q بردار موج فونون مربوطه در فرآیند پراکندگی است. قانون پایستگی انرژی ایجاب می کند که

$$\omega = \omega_0 \pm \omega(q)$$

که ω و ω_0 به ترتیب فرکانس های باریکه های فرودی و پراکنده هستند و $\omega(q)$ فرکانس فونون است. علامت مثبت مربوط به جذب فونون و علامت منفی مربوط به فرآیند گسیل فونون است.

بنابراین فرکانس باریکه ی پراکنده نسبت به فرکانس فرودی جابه جا می شود. با اندازه گیری این جابه جایی بر حسب بردار موج q می توان منحنی پاشندگی شبکه را تعیین کرد. از پرتوهای ایکس و فونون ها که طول موج های کوتاهی دارند می توان برای تعیین منحنی جابه جایی در منطقه ی بریلیون استفاده کرد. از طرف دیگر از امواج نوری که طول موج های خیلی بلندتری دارند فقط در ناحیه ی نزدیک به مرکز BZ می توان استفاده کرد.

امواج فراصوتی

امواج فراصوتی در پژوهش های فیزیک حالت جامد مهم هستند و دارای کاربردهای وسیعی هستند. با به کار بردن فونون های همدوس فراصوتی که فرکانس و قطبش آن ها به دقت کنترل می شود می توان چندین خاصیت مهم جامدات نظیر برهم کنش ناهماهنگ و برهم کنش اسپین - فونون را اندازه گیری کرد. یک کاربرد مهم آن تقویت کننده ی آکوستو-اپتیکی است که در آن امواج آکوستیکی توسط جذب انرژی از الکترون های سریع تقویت می شوند. چنین تقویت کننده ای به ویژه در طراحی خطوط تأخیر آکوستیکی^۱ مفید هستند.

خواص اپتیکی فروسرخ

فونون های اپتیکی در بلورهای یونی شدیداً با نور برهم کنش می کنند که منجر به بازتاب و جذب شدید در ناحیه ی فروسرخ می شود. بازتاب و جذب را می توان بر حسب تابع دی الکتریک بیان کرد. این تابع به صورت زیر به فرکانس بستگی دارد:

$$\epsilon_r(\omega) = \epsilon_r(\infty) + \frac{\epsilon_r(0) - \epsilon_r(\infty)}{1 - (\omega/\omega_t)^2}$$

که $\epsilon_r(\omega)$ ثابت دی الکتریک استاتیکی و $\epsilon_r(\infty)$ ثابت دی الکتریک فرکانس بالا است. $\epsilon_r(\omega) = n^2$ ، که n ضریب شکست اپتیکی می باشد. کمیت ω_t فرکانس فونون عرضی است. اگر ω افزایش یابد و از ω_t بیش تر شود، تابع $\epsilon_r(\omega)$ کاهش می یابد و از $\epsilon_r(\infty)$ به $\epsilon_r(\omega)$ کاهش می یابد و یون ها دیگر قادر به پیروی از میدان نیستند. در نتیجه ارتعاشات فونون های اپتیکی سرکوب می شوند. به دلیل تجمع بارهای متناظر با نوسان های طولی، در یک بلور، فونون های طولی فرکانس بیش از فونون های عرضی دارند. فرکانس فونون طولی با رابطه ی زیر داده می شود:

$$\omega_t = \left[\frac{\epsilon_r(\infty)}{\epsilon_r(\omega)} \right]^{1/2} \omega_t$$

یک بلور در محدوده ی فرکانسی ω_t تا ω_1 بازتاب کامل از خود نشان می دهد. بنابراین در این ناحیه به دلیل وجود یک گاف فرکانسی، نور نمی تواند از بلور عبور کند.

References

Specific heat

H. M. Rosenberg, 1963, *Low Temperature Solid State Physics*, Oxford: Oxford University Press

Lattice vibrations (also optical properties and scattering of radiation)

T. A. Bak, editor, 1964, *Phonons and Phonon Interaction*, New York: Benjamin

M. Born and K. Huang, 1954, *Dynamical Theory of Crystal Lattices*, Oxford: Oxford University press.

L. Brillouin 1953, *Wave Propagation in Periodic Structure.*, New York: Dover Press.

A. A. Maradudin, *et al.*, 1963, "*Theory of Lattice Dynamic in the Harmonic Approximation*", Supplement 3 of Solid State Physics.

R. W. H. Stevenson, editor, 1966, *Phonons*, London: Oliver and Boyd

Thermal conductivity

P. G. Klemen, 1985, *Thermal conductivity and lattice Vibration mode*, Solid State Physics, 1

H. M. Rosenberg, *listed above under Specific Heat.*

J. M. Ziman, 1960, *Electrons and Phonons*, Oxford: Oxford University Press

پرسش‌ها

۱- معادله‌ی (۱۱-۳) مقادیر مجاز q در یک خط پیوسته تحت شرایط مرزی را بدست می‌دهد. تعدادی از طول موج‌های مربوط را رسم کنید و با نتایج حاصل از فزیک پایه مثلاً برای یک فنر مرتعش مقایسه کنید.

۲- چگالی حالت‌ها برای یک محیط پیوسته دو بعدی را با استفاده از شرایط مرزی تناوبی تعیین کنید.

۳- در مدل انیشتین اتم‌ها به عنوان نوسان گرهای مستقل در نظر گرفته می‌شوند، از طرف دیگر مدل دبی اتم‌ها را به عنوان نوسان گرهای جفت شده‌ای در نظر می‌گیرد که دسته جمعی ارتعاش می‌کنند. ولی مدهای جمعی در اینجا مستقل در نظر گرفته می‌شوند. معنی این استقلال را توضیح دهید و اختلاف آن را با مدل انیشتین بیان کنید.

۴- آیا انتظار دارید که امواج صوتی را در مولکول‌های کوچک بیابید؟ اگر نه، چگونه گسیل صوت را در یک ماده‌ی گازی توجیه می‌کنید؟

۵- به طور کمی توضیح دهید که چرا ثابت نیروی بین اتمی سریعاً با فاصله کاهش می‌یابد.

۶- نشان دهید که تعداد کل مدهای مجاز در اولین BZ از یک شبکه دو اتمی یک بعدی مساوی $2N$ ، یعنی تعداد کل درجات آزادی می‌باشند.

۷- فرض کنید مجاز باشیم دو جرم M_1 و M_2 را در یک شبکه‌ی دو اتمی یک بعدی مساوی بگیریم. برای گاف فرکانس چه اتفاقی خواهد افتاد؟ آیا انتظار این جواب را دارید؟ نتایج را با آن چه از شبکه‌ی یک اتمی دارید مقایسه کنید.

۸- رابطه‌ای برای گرمای ویژه‌ی یک شبکه‌ی دو اتمی یک بعدی استنتاج کنید. تقریب دبی را برای شاخه‌ی آکوستیکی در نظر بگیرید و شاخه‌ی اپتیکی را مسطح فرض کنید.

۹- شکل (۲۵-۳ ب) نشان می‌دهد که شاخه‌های TA و شاخه‌های TO در Ge در امتداد [۱۱۱] تبهگن می‌شود. این مطلب را به طور کیفی بر مبنای تقارن توضیح دهید.

۱۰- تحقیق کنید که منطقه‌ی بریلیون یک شبکه‌ی fcc شکلی نظیر آن چه در شکل (۲۶-۳ ب) نشان داده شده است، دارد.

۱۱- یک استدلال فیزیکی ارائه دهید که از قابل قبول بودن رابطه ی (۳-۷۴) برای رسانایی حرارتی پشتیبانی کند.

۱۲- بستگی رسانایی حرارتی به دما آن چنان که در شکل (۳-۳۲) ب) ظاهر شده است را توضیح دهید.

۱۳- در مولد مایکروموج یک نیمه رسانای کوچک، در تبدیل توان dc و ac مقدار قابل ملاحظه‌ای گرمای ناخواسته تولید می شود. توضیح دهید چرا الماس به طور فزاینده‌ای به عنوان چاهک گرما برای خارج کردن گرما از قطعه استفاده می شود.

۱۴- راجع به دو تکنیک تجربی برای اندازه گیری پویس آزاد میانگین فونون ها در جامدات بحث کنید.

۱۵- رابطه ی (۳-۹۱) را تحقیق کنید.

۱۶- رابطه ی (۳-۹۲) را تحقیق کنید.

۱۷- شکلی برای یک نوسان عرضی در یک بلور یونی رسم کنید و نشان دهید که بر خلاف حالت نوسان های طولی هیچ گونه تجمع باری صورت نمی گیرد.

مسائل

۱- سرعت های طولی و عرضی صوت در امتداد جهت [۱۰۰] در الماس و یک بلور مکعبی، به ترتیب $1.06 \times 10^6 \text{ cm/s}$ و $1.76 \times 10^6 \text{ cm/s}$ است. سرعت طولی در امتداد جهت [۱۱۱] در الماس $1.06 \times 10^6 \text{ cm/s}$ است. با استفاده از این داده ها و این واقعیت که چگالی الماس 3.52 g/cm^3 است، ثابت های کشسانی C_{11} ، C_{12} ، C_{44} را برای الماس محاسبه نمایید.

۲- در استنتاج رابطه ی (۲۰-۳) برای چگالی حالت های یک محیط پیوسته، فرض شود که سرعت های طولی و عرضی v_1 و v_2 مساوی اند. چگالی حالت ها را برای موردی که این فرض درست نباشد، بدست آورید.

۳- اندازه گیری گرمای ویژه در فشار ثابت C_p از گرمای ویژه در حجم ثابت، C_v ، عملاً ساده تر است. ولی برای تحلیل های تئوری مناسب تر است.

الف) با استفاده از یک بحث ترمودینامیکی نشان دهید که دو گرمای ویژه توسط رابطه ی زیر به هم مربوط اند:

$$C_p - C_v = \alpha^2 TV / K$$

که α ضریب حجمی انبساط حرارتی و K ضریب تراکم پذیری است.

ب) نشان دهید که برای یک گاز کامل $C_p - C_v = R$ است.

ج) نشان دهید که برای یک جامد در دمای اتاق $C_p \cong C_v$ (برای یافتن پارامترهای مورد نیاز به کتاب های مرجع مناسب مثلاً Hnabokk of Chemistry and Physics مراجعه نمایید)

۴- با استفاده از توزیع ماکسول - بولتزمان نشان دهید که انرژی میانگین یک نوسان گر یک بعدی در تعادل حرارتی $\bar{\epsilon} = kT$ است.

۵- نتیجه ی (۲۶-۳) را برای انرژی میانگین یک نوسان گر کوانتومی اثبات کنید.

۶- الف) اگر تئوری کلاسیک گرمای ویژه معتبر بود انرژی حرارت یک مول Cu در دمای $T = \theta_D$ چقدر بود؟ دمای ذبی برای Cu مساوی 340°K است.

ب) انرژی حرارتی واقعی را بر طبق مدل دبی محاسبه نمایید (از شکل ۱۳-۳ استفاده کنید) و با مقدار کلاسیکی که در بالا بدست آوردید مقایسه کنید.

ج) مرتبه ی بزرگی بیشینه ی جابه جایی یک اتم مس در دمای دبی چقدر است؟ این جابه جایی را با فاصله ی بین اتمی مقایسه کنید.

۷- در متن درس بیان شد که دمای دبی θ_D متناسب با $(Y/M)^{1/2}$ است که Y مدول یانگ و M جرم اتمی است. پارامتر Y برای جامداتی که مشخصه های شیمیایی و ساختاری مشابه دارند تقریباً مساوی است و بنابراین $\theta_D \cong \frac{1}{M^{1/2}}$ برای فلزات قلیایی (Cs, Rb, K, Na, Li) و فلزات نجیب مساوی (Au, Ag, Cu) بلورهای کوبالان (Sn, Ge, Si, C) θ_D را بر حسب $M^{-1/2}$ رسم کنید و بحث کنید که چگونه این پیش بینی برآورده می شود.

۸- ارتباط ریاضی بین روابط (۳-۳۶) و (۳-۳۸) را تحقیق کنید.

۹- الف) رابطه ای برای گرمای ویژه یک زنجیر پیوسته خطی بر طبق تئوری دبی بدست آورید و در محدوده ی دماهای بالا و پایین بحث کنید.

ب) قسمت الف) را برای یک صفحه ی پیوسته تکرار کنید.

۱۰- سرعت های فاز و گروه را برای یک شبکه ی تک اتمی تعیین کنید. نتیجه را بر حسب بردار موج q رسم کنید و بحث مختصری راجع به قدر و اهمیت آن ارائه دهید.

۱۱- وقتی فرکانس یک موج در یک شبکه ی یک بعدی بزرگ تر از فرکانس قطع ω_m است، شدیداً تضعیف می شود. با فرض اینکه هنوز هم حل به شکل رابطه ی (۳-۵۵) ولی با q ای که به صورت عدد موهومی است، بیان می گردد؛ ضریب تضعیف یعنی ضریبی که ناظر بر کاهش شدت است را محاسبه نمایید. (راهنمایی: از فرمول $\cos iy = \cosh y$ استفاده کنید)

۱۲- روابط (۳-۶۲) و (۳-۶۳) را تحقیق کنید.

۱۳- با استفاده از فرکانس مد اپتیکی برای $NaCl$ (جدول ۳-۳)، ثابت نیروی بین اتمی و مدول یانگ را برای این ماده محاسبه نمایید. با استفاده از این داده ها و چگالی $2/18 \text{ g/cm}^3$ سرعت صوت در $NaCl$ را محاسبه نمایید.

۱۴- کمینه‌ی طول موج برای یک موج رونده در جهت $[100]$ در یک ساختار fcc چقدر است؟ در جهت $[111]$ چقدر است؟ از شکل (۲۶-۳ الف) استفاده کنید و فرض کنید که ضلع مکعب یاخته‌ی واحد واقعی $a = 5 \text{ \AA}$ است.

۱۵- با استفاده از چگالی حالت های (۶۹-۳) برای یک بلور یک بعدی، نشان دهید که تعداد کل حالت های مساوی N است.

۱۶- با استفاده از داده های رسانایی حرارتی سرعت صوت در NaCl را در $T = 20^\circ \text{K}$ و $T = 300^\circ \text{K}$ محاسبه نمایید. جواب خود را با جواب مسأله ۱۳ مقایسه نمایید.

۱۷- در بحث پویش آزاد میانگین فونون ها، فرآیندهای برخورد گوناگونی را به طور جداگانه در نظر گرفتیم. ولی در اغلب وضعیت ها چند تا از این فرآیندها به طور هم زمان عمل می کنند تا

فونون را پراکنده کنند. نشان دهید که پویش مؤثر در این حالت با $\frac{1}{I} = \sum_i \frac{1}{I_i}$ داده می شود که I_i

پویش های آزاد میانگین مکانیسم های برخورد انفرادی است (راهنمایی: می توانید از یک استدلال احتمالاتی استفاده کنید. روش مشابهی در بخش ۵-۴ در ارتباط با پراکندگی الکترون ها در فلزات به کار رفته است).

۱۸- در متن درس بیان شد که معادلات پایستگی اندازه حرکت و انرژی برای پراکندگی یک فوتون توسط یک فوتون یعنی معادلات (۷۵-۳) و (۷۶-۳) را هم چنین می توان با بررسی فرآیند پراکندگی به عنوان بازتاب براگ که تحت جابه جایی دوپلر جابه جا شده است در نظر گرفت. این مطلب را اثبات کنید.

۱۹- پراکندگی بریلیون یک باریکه‌ی نوری تکفام، $\lambda_0 = 6328 \text{ \AA}$ از آب در دمای اتاق منجر به یک نوار جانبی بریلیون می شود که جابه جایی آن از خط مرکزی در زاویه‌ی پراکندگی 90° درجه مساوی $\Delta v = 4/3 \times 10^9 \text{ Hz}$ است. با دانستن این که ضریب شکست آب که $1/33$ است سرعت صوت در آب در دمای اتاق چقدر است؟

۲۰- جاهای خالی سمت چپ جدول ۳-۳ را پر کنید.

۲۱- از رابطه‌ی (۸۶-۳)، روابط پاشندگی برای دو پولاریتون را حل کنید و نشان دهید که منحنی های پاشندگی آن چنان است که در شکل (۴۵-۳) نشان داده شده است.

فصل چهارم

فلزات I: مدل الکترون آزاد

- ۴-۱ مقدمه
- ۴-۲ الکترون های رسانش
- ۴-۳ گاز الکترون آزاد
- ۴-۴ رسانای الکتریکی
- ۴-۵ مقاومت الکتریکی بر حسب دما
- ۴-۶ ظرفیت گرمایی الکترون های رسانش
- ۴-۷ سطح فرمی
- ۴-۸ رسانائی الکتریکی؛ آثار سطح فرمی
- ۴-۹ رسانائی حرارتی در فلزات
- ۴-۱۰ حرکت در میدان مغناطیسی: شدید سیکلوترونی و اثر هال
- ۴-۱۱ رسانائی AC و خواص اپتیکی
- ۴-۱۲ گسیل گرمایونی
- ۴-۱۳ شکست مدل الکترون آزاد

فلزات اهمیت زیادی در زندگی روزانه ی ما دارند. استفاده از آهن در صنعت اتوموبیل سازی، مس در سیم های رابط الکتریکی، نقره و طلا به عنوان جواهرات تزئینی و چندین مثال دیگر نمونه هایی از کاربرد فلزات در زندگی ما است. این فلزات و فلزات دیگر نقش مهم و فزاینده ای در رشد تکنولوژی و صنعت در گذشته های دور تا به حال ایفا کرده اند و در آینده نیز این نقش را ادامه خواهند داد.

بیشتر خواص فیزیکی فلزات مشترک است. این خواص عبارتند از: مقاومت فیزیکی زیاد، چگالی زیاد، رسانائی خوب الکتریکی و حرارتی و بازتاب زیاد اپتیکی که باعث درخشندگی ظاهری آن ها می شود. توجه این خواص هم برای فیزیک دانان که علاقه به درک ساختار میکروسکوپی مواد دارند و هم برای مهندسين و متالورژیست ها که می خواهند از فلزات برای مقاصد علمی استفاده نمایند بسیار مهم است.

در این فصل خواهیم دید که این خواص به هم مربوط اند. تمام این خواص را می توان با فرض این که فلزات شامل تعداد زیادی الکترون های اساساً آزاد هستند که می توانند آزادانه در داخل بلور حرکت نمایند، درک کرد. در این بخش مقدماتی ما مفهوم الکترون آزاد را بسط می دهیم و توضیح می دهیم چگونه الکترون ها می توانند در حضور میدان الکتریکی، یک جریان الکتریکی را حمل نمایند. بعد از آن گرمای ویژه الکترون ها را محاسبه می کنیم و نشان می دهیم که سازگاری با تجربه تنها در صورتی حاصل می شود که الکترون ها از اصل طرد پائولی پیروی کنند. بدین ترتیب مفاهیم مهم تراز فرمی^۱ و سطح فرمی^۲ را معرفی می کنیم که بعداً از آن برای توصیف دقیق تر رسانائی الکتریکی و حرارتی در فلزات استفاده می شود.

تاثیر میدان مغناطیسی روی حرکت الکترون های آزاد نیز مورد بحث قرار می گیرد. اشاره خواهیم کرد که چگونه از تشدید سیکلوترونی و به کمک اندازه گیری های اثر هال می توان اطلاعات بسیاری راجع به فلزات به دست آورد.

وقتی فلزات در محدوده فرکانس های اپتیکی مورد مطالعه قرار گیرند، خواص بسیار جالبی از خود بروز می دهند. راجع به این موضوع به تفصیل بحث می کنیم و نشان می دهیم که مدل

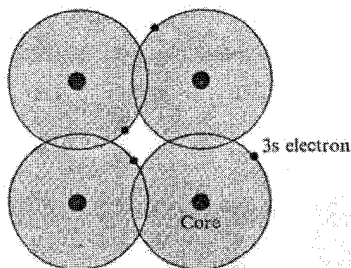
الکترون آزاد قادر به توجیه اکثر خواص مشاهده شده می باشد. هم چنین راجع به گسیل گرما یونی الکترون ها از فلزات بحث می کنیم. نهایتاً مدل الکترون آزاد را نقد می کنیم و راجع به محدودیت های آن بحث می نمایم.

۲-۴ الکترون های رسانش

الکترون های رسانش کدام اند؟ جواب این سؤال را با یک مثال در مورد یکی از ساده ترین فلزات یعنی Na می دهیم. ابتدا Na گازی که مجموعه ای است از اتم های آزاد سدیم و هر اتم دارای ۱۱ الکترون که هسته را احاطه کرده را در نظر می گیریم. در شیمی این الکترون ها به دو دسته تقسیم می شوند، ۱۰ الکترون داخلی که اولین و دومین لایه (مدارهای بوهر) را پر می کنند و ساختار پایداری را تشکیل می دهند و یک الکترون ظرفیت که قید ضعیفی به بقیه سیستم دارد. این الکترون ظرفیت که سومین لایه اتمی را اشغال می کند مسئول اکثر خواص شیمیایی Na است. در واکنش های شیمیایی، معمولاً اتم Na این الکترون ظرفیت را که قید ضعیفی دارد از دست می دهد و یون Na^+ ایجاد می شود. این همان چیزی است که در NaCl اتفاق می افتد که در آن الکترون از اتم Na به اتم Cl منتقل می شود. شعاع لایه سوم در Na مساوی 1.9 \AA است.

حال اتم های Na را گرد هم می آوریم تا یک فلز تشکیل دهند. Na در حالت فلزی یک ساختار bcc دارد (بخش ۷-۱) و فاصله بین نزدیک ترین همسایه ها 3.7 \AA است. در شکل (۱-۴) ملاحظه می کنیم که در حالت جامد دو اتم Na کمی همپوشانی^۱ دارند. از این مشاهده نتیجه می شود که یک الکترون ظرفیت دیگر به یون خاصی مقید نیست، بلکه به طور هم زمان متعلق به دو یون همسایه است. این ایده را می توان یک مرحله جلوتر برد؛ در حقیقت الکترون ظرفیت متعلق به تمام بلور است. زیرا می تواند به سادگی از یک یون به یون همسایه و سپس به همسایه بعدی و ... حرکت کند. این الکترون متحرک که در اتم آزاد سدیم، الکترون ظرفیت نامیده می شود، در جسم جامد الکترون رسانش می شود. البته هر اتم الکترون رسانش خود را سهم می کند و هریک از این الکترون ها متعلق به همه ی بلور است. این ها الکترون های رسانش نامیده می شوند، زیرا می توانند تحت تأثیر میدان الکتریکی یک جریان الکتریکی حمل نمایند. عمل رسانش به این دلیل ممکن می گردد که هر الکترون رسانش به جای این که به یک اتم خاصی

مقید باشد، در تمام جامد پخش شده و جای گزیده نشده است.^۱ برعکس؛ الکترون هائی که به خوبی جای گزیده شده اند جریان الکتریکی را حمل نمی کنند. برای مثال الکترون های داخلی در سدیم فلزی یعنی الکترون هائی که اطراف هسته در جایگاه های شبکه قرار دارند، سهمی در جریان الکتریکی ندارند. حالت های این الکترون ها در جامد کمی با حالت های الکترون های اتم های آزاد اختلاف دارند.



شکل ۱-۴: همپوشی اوربیتال های 3S در سدیم جامد

به طور خلاصه؛ وقتی اتم های آزاد، گرد هم می آیند و باعث شکل گیری یک فلز می شوند الکترون های ظرفیت اتم ها تبدیل به الکترون های رسانش می شوند و حالت های آنها کاملاً تغییر می کنند. در حالی که الکترون های داخلی جای گزیده باقی می ماند و مشخصه ی آن ها اساساً بدون تغییر می ماند. درست همان گونه که الکترون های ظرفیت مسئول خواص شیمیایی هستند الکترون های رسانش نیز مسئول اکثر خواص فلزات هستند.

تعداد الکترون های رسانش را می توان با توجه به ظرفیت و چگالی فلز محاسبه کرد. بنابراین در Na تعداد الکترون های رسانش با تعداد اتم ها برابر است. این مطلب برای K و فلزات نجیب مانند: Cu, Ag و Al که همگی یک ظرفیتی هستند نیز درست است. در فلزات دو ظرفیتی مانند Be, Mg, Zn و Cd تعداد الکترون های رسانش دو برابر تعداد اتم هاست. اگر چگالی ماده ρ_m باشد چگالی اتمی مساوی $(\rho_m / M) N_A$ است، که M' وزن اتمی و N_A عدد آووگادرو است. ظرفیت اتمی را با Z_V نمایش می دهیم و چگالی الکترونی^۳ به صورت زیر به دست می آید:

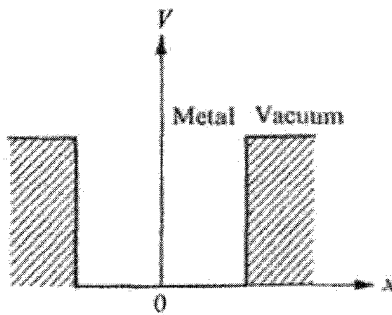
1. delocalized
2. concentration

۳- در این فصل علامت N را برای چگالی الکترونی به کار می بریم و علامت n را برای ضریب شکست اپتیکی که در بخش ۱-۴ بحث خواهد شد نگاه می داریم.

$$N = Z_v \frac{\rho_m N_A}{M'} \quad (۴-۱)$$

۳-۴ گاز الکترون آزاد

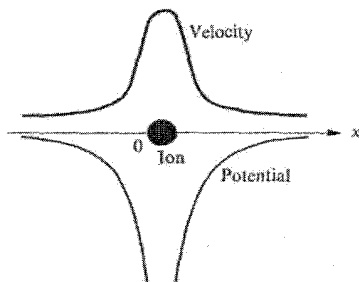
در مدل الکترون آزاد که مبنای این فصل است فرض می شود که الکترون های رسانش کاملاً آزاد هستند و فقط یک پتانسیل در سطح نمونه بر آن ها اعمال می گردد شکل (۲-۴). در نتیجه ی اعمال این پتانسیل، الکترون ها در داخل نمونه محبوس می شوند. برطبق این مدل به جز بازتاب های اندکی که الکترون ها از سطح نمونه می کنند الکترون های رسانش، بدون هیچ برخوردی، در داخل نمونه حرکت می کنند و این رفتار خیلی شبیه به رفتار یک گاز ایده آل است. به همین دلیل ما صحبت از گاز الکترون آزاد می کنیم.



شکل ۲-۴ پتانسیل در مدل الکترون آزاد.

حال کمی دقیق تر به این مدل نگاه می کنیم. به طور کلی تعجب برانگیز است که این مدل معتبر است، زیرا در نگاه اول انتظار می رود که الکترون ها با یون های زمینه و همین طور با هم دیگر بر هم کنش داشته باشند. از آن جا که این برهم کنش ها قوی هستند، باید الکترون ها برخوردهای متعددی داشته باشند و این تصویری از یک گاز کاملاً غیر ایده آل در ذهن ما مجسم می کند. پس چرا مدل الکترون آزاد جواب می دهد؟ جواب این سؤال اساسی برای کسانی که این مدل را برای اولین بار ارائه دادند معلوم نبود ولی حالا جواب آن را می دانیم. از آن جا که توجیه آن به مکانیک کوانتومی نیاز داریم، بحث راجع به آن را به فصل ۵ موکول می کنیم و تنها یک بیان کیفی مختصر را در این جا ارائه می دهیم.

دلیل این که چرا فرض بر هم کنش بین یون ها جواب می دهد بدین قرار است که اگر چه یک الکترون با یون برهم کنش کولنی دارد ولی آثار کوانتومی، یک پتانسیل دفعی اضافه معرفی می کند که تمایل به حذف برهم کنش جذبی دارد. این پتانسیل خالص که شبه پتانسیل^۱ نامیده می شود، به ویژه در مورد فلزات قلیائی به خوبی عمل می کند. راه دیگر برای رسیدن به این مطلب این است که توجه داشته باشیم وقتی یک الکترون از کنار یک یون عبور می کند، به واسطه کاهش پتانسیل، سرعت آن در مجاورت یون به سرعت افزایش می یابد. به همین خاطر الکترون فقط کسر کوچکی از وقت خود را در نزدیکی یون که پتانسیل در آن جا قوی است می گذراند. اغلب اوقات، الکترون در نواحی دور از یون، یعنی جایی که پتانسیل ضعیف است می باشد و به این دلیل است که با تقریب خوبی الکترون مثل یک ذره آزاد می باشد. مجدداً راجع به برهم کنش الکترون - یون در بخش (۳-۵) و راجع به شبه پتانسیل در بخش (۹-۵) صحبت خواهیم کرد.



شکل ۳-۴ تغییر کردن سرعت الکترون ها در فضا.

حال به برهم کنش بین خود الکترون های رسانش و ضعیف بودن این برهم کنش می پردازیم. در واقع دو دلیل برای ضعیف بودن این برهم کنش وجود دارد: اول این که بر طبق اصل طرد پائولی الکترون های با اسپین موازی تمایل دارند که از یک دیگر دور بمانند. دوم اینکه حتی اگر اسپین ها مخالف باشند، به منظور کمینه کردن انرژی سیستم، الکترون ها تمایل دارند از یک دیگر دور باشند. اگر دو الکترون خیلی به یک دیگر نزدیک شوند، انرژی پتانسیل به طور فزاینده ای بزرگ شود که این بر خلاف تمایل سیستم الکترونی به داشتن کم ترین انرژی ممکن است. وقتی این دو

1. pseudopotential

۲- توجه کنید که وقتی فاصله بین الکترون و یون زیاد است برهم کنش بین آن ها خیلی ضعیف است زیرا یون ها توسط الکترون های دیگر حفاظت می شوند، یعنی این برهم کنش به جای این که یک پتانسیل کولنی بلند برد خالص باشد یک پتانسیل کولنی محافظت شده ی کوتاه برد است.

مطلب را به طور ریاضی بررسی کنیم وضعیت زیر نتیجه می‌شود. هر الکترون توسط ناحیه‌ای (کروی) که از الکترون‌های دیگر خالی است احاطه شده است. این ناحیه که حفره نامیده می‌شود شعاعی در حدود 1 \AA دارد (مقدار دقیق آن به چگالی الکترونی بستگی دارد) هنگامی که یک الکترون حرکت می‌کند حفره آن که گاهی حفره ی فرمی نامیده می‌شود با آن حرکت می‌کند. حال ملاحظه می‌کنیم که چرا برهم کنش بین الکترون‌ها ضعیف است. اگر برهم کنش بین دو الکترون خاص را مشاهده کنیم در می‌یابیم که الکترون‌های دیگر خود را به گونه‌ای توزیع می‌کنند که این دو الکترون خود را از یک دیگر محافظت نمایند و در نتیجه برهم کنش خیلی کوچک بین آن‌ها وجود دارد.

گاز الکترون آزاد در فلزات از جنبه‌های مهمی با گاز معمولی تفاوت دارد. اول این که گاز الکترون آزاد باردار است (در گازهای معمولی مولکول‌ها اغلب خنثی هستند) بنابراین گاز الکترون آزاد در واقع مشابه پلازما است. دوم چگالی الکترون‌ها در فلزات زیاد است ($m^3 / \text{الکترون} = 10^{29}$) و چگالی گاز معمولی: $m^3 / \text{مولکول} = 10^{25}$ است. بنابراین می‌توان گفت: گاز الکترون آزاد یک پلاسمای چگال است.

در این مدل الکترونی که گاهی مدل ژله ای^۱ نامیده می‌شود یون‌های مثبت فلزی به طور یک نواخت در درون نمونه در نظر گرفته شده‌اند. بدین ترتیب یک زمینه ی مثبت وجود دارد که لازم است به لحاظ الکتریکی خنثی باقی بماند ولی به دلیل توزیع یک نواخت آن‌ها، میدان الکتریکی اعمال شده بر الکترون‌ها صفر است؛ یون‌ها یک ژله یک نواختی را تشکیل می‌دهند که الکترون‌ها درون آن حرکت می‌کنند.

۴-۴ رسانای الکتریکی

قانون رسانائی الکتریکی در فلزات (قانون اهم) به صورت زیر است.

$$I = \frac{V}{R} \quad (4-2)$$

که I جریان و V اختلاف پتانسیل و R مقاومت سیستم است. می‌خواهیم این قانون را به شکلی بیان کنیم که مستقل از طول و سطح مقطع سیم باشد، زیرا این فاکتورها به منبای فیزیکی رسانش مرتبط نیستند. فرض کنیم که L و R به ترتیب طول و سطح مقطع سیم باشند:

$$J = \frac{I}{A}, \quad \varepsilon = \frac{V}{L}, \quad R = \rho \frac{L}{A} \quad (۴-۳)$$

که J چگالی جریان (جریان برواحد سطح) و ε میدان الکتریکی و ρ مقاومت ویژه الکتریکی است. معکوس مقاومت ویژه رسانائی نامیده می شود که با σ نمایش داده می شود.

$$\sigma = \frac{1}{\rho} \quad (۴-۴)$$

وقتی روابط (۴-۳) و (۴-۴) را در رابطه ی (۴-۲) جای گزین کنیم خواهیم داشت:

$$J = \sigma \varepsilon \quad (۴-۵)$$

این شکلی از قانون اهم است که آن را به کار خواهیم برد. از آن جا که بعد ρ ، اهم - متر و بعد σ ، $\text{ohm}^{-1} - \text{m}^{-1}$ است، می خواهیم σ را برحسب خواص میکروسکوپی مربوط به الکترون های رسانش بیان کنیم.

جریان الکتریکی در اثر حرکت الکترون های رسانش تحت تأثیر یک میدان الکتریکی، به وجود می آید به دلیل این که این ذرات باردارند، حرکت آن ها منجر به ایجاد یک جریان الکتریکی می شود. حرکت ذرات خنثی منجر به ایجاد میدان الکتریکی نمی شود. این الکترون های رسانش هستند که مسئول جریان الکتریکی اند زیرا یون ها به یک دیگر متصل و مقیدند و بنابراین نمی توانند سهمی در جریان الکتریکی داشته باشند.

حال حرکت الکترون های رسانش را در یک میدان الکتریکی بررسی می کنیم.

یک الکترون نوعی را در نظر می گیریم. از طرف میدان الکتریکی، نیروی $e\varepsilon$ - بر الکترون اعمال می شود. هم چنین یک نیروی اصطکاک وجود دارد که مربوط به برخورد الکترون با بقیه ی محیط است. فرض می کنیم که این نیروی اصطکاک به شکل $\tau \cdot v - m^* v^1$ باشد که v سرعت الکترون و τ مقدار ثابتی است که زمان برخورد نامیده می شود. با استفاده از قانون دوم نیوتن داریم:

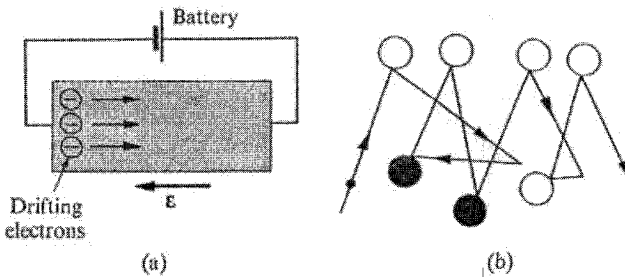
$$m^* \frac{dv}{dt} = -e\varepsilon - m^* \frac{v}{\tau} \quad (۴-۶)$$

۱- جرم موثر الکترون در یک فلز که به m^* نمایش داده می شود در حالت کلی با جرم الکترون آزاد که معمولاً به m یا m_0 نشان داده می شود متفاوت است. هم چنان که در بخش ۱۵-۵ خواهیم دید این اختلاف به برهم کنش الکترون با شبکه مربوط می شود جرم موثر در فلزات مختلف در جدول ۴-۱ آمده است.

که m^* جرم موثر الکترون است. ملاحظه می شود که برخورد نیز مانند نیروهای اصطکاک یا چسبناکی منجر به کاهش سرعت ذره به صفر می شود. ما علاقه مند به حل حالت پایا^۱ هستیم یعنی جایی که $dv/dt = 0$. حل مناسب (۴-۶) در این حالت چنین است:

$$v = -\frac{e\tau}{m^*} \mathcal{E} \quad (4-7)$$

این سرعت حالت پایای الکترون است (که در بحث اصطکاک معمولاً سرعت حد نامیده می شود). این سرعت در خلاف جهت \mathcal{E} است زیرا بار الکترون منفی است.



شکل ۴-۴ (الف) یک میدان الکتریکی به یک سیم فلزی اعمال شده است (ب) حرکت کاتوره ای و حرکت رانشی الکترونها دایره ها نمایان گر مراکز پراکندهگی هستند.

باید تمایزی بین دو سرعت مربوط به الکترون قائل شویم. سرعتی که در رابطه ی (۴-۷) ظاهر می گردد سرعت رانش یا سرعت سوق نامیده می شود. این سرعت با سرعت بزرگ تری که سرعت کاتوره ای نام دارد و مربوط به حرکت کاتوره ای الکترون است برهم نهاده می شود. درست مانند یک گاز معمولی، الکترون ها حتی در غیاب میدان، حرکت کاتوره ای دارند. این مربوط به این واقعیت است که الکترون ها حرکت می کنند، گاهی پراکنده شده و تغییر جهت می دهند. حرکت کاتوره ای در میدان الکتریکی سهم نیست، و در غیاب میدان الکتریکی نیز وجود دارد. ولی در این صورت هم چنان که در رابطه ی (۴-۷) بیان شد یک سرعت خالص در خلاف جهت میدان وجود دارد. تمایز بین حرکت های کاتوره ای و رانشی در شکل (۴-۴) نشان داده شده است. این سرعت ها را با v_r و v_d نشان می دهیم و بعداً نشان خواهیم داد: $v_d \ll v_r$.

چگالی جریان J را می توان از رابطه ی (۴-۷) محاسبه کرد. از آن جا که یک بار الکتریکی (Ne) بر واحد حجم وجود دارد و هر الکترون یک سرعت سوق دارد که با رابطه ی (۴-۷) بیان می شود؛ در نتیجه مقدار باری که از واحد سطح در واحد زمان می گذرد برابر است با:

$$J = (-Ne)v_d = (-Ne)\left(-\frac{e\tau}{m^*}\varepsilon\right) = \frac{Ne^2\tau}{m^*}\varepsilon \quad (۴-۸)$$

جریان الکتریکی موازی میدان است. با مقایسه ی رابطه ی (۴-۸) با قانون اهم (رابطه ی ۴-۵) عبارت زیر برای رسانائی به دست می آید:

$$\sigma = \frac{Ne^2\tau}{m^*} \quad (۴-۹)$$

همان عبارتی است که به دنبال آن بودیم. ملاحظه می کنیم که با افزایش N ، σ نیز افزایش می یابد. این نکته قابل قبول است؛ زیرا چنان چه N (یا چگالی) افزایش یابد حامل های بار بیشتری وجود دارند. رسانائی σ نسبت عکس با m^* دارد که این هم قابل انتظار است، زیرا هرچه m^* بزرگ تر باشد، ذرات کند ترند و برای آن ها حرکت مشکل تر است. متناسب بودن σ با τ به این دلیل است که τ در واقع زمان بین دو برخورد متوالی یعنی عمر آزاد متوسط است بنابراین هرچه τ بزرگ تر باشد، الکترون زمان بیش تری برای شتاب گرفتن تحت تاثیر میدان دارد و بنابراین سرعت سوق (رابطه ی ۴-۷) بیش تر و σ بزرگ تر می شود.

اگر کمیت های طرف راست رابطه ی (۴-۷) را بدانیم. می توانیم رسانائی σ را محاسبه نمائیم. m^* را مساوی با جرم الکترون آزاد $m = 9/1 \times 10^{-31} \text{ kg}$ می گیریم. می توانیم N را آن چنان که در بخش (۴-۲) بحث شد محاسبه می نمائیم. باقی می ماند زمان برخورد τ . محاسبه این کمیت به کمک اصول اولیه مشکل است. بنابراین محاسبه ی آن را تا بخش (۴-۵) به تعویق می اندازیم. فعلاً می توانیم مقدار σ را اندازه گیری نمائیم و با استفاده از رابطه ی (۴-۸) مقدار τ را محاسبه کنیم. مقدار σ در حدود $5 \times 10^6 (\text{ohm} - \text{m})^{-1}$ است. مقدار τ در حدود 10^{-14} s است. این زمان در مقایسه با زمان های معمولی فوق العاده کوچک است. بعداً خواهیم دید که می توان نتایج مهمی از این مطلب استنتاج کرد.

زمان τ زمان واهلش^۱ نیز نامیده می‌شود. برای این که دلیل این امر را بدانیم، فرض می‌کنیم که یک میدان الکتریکی اعمال گردد و آن قدر ادامه یابد تا یک سرعت سوق اولیه $v_{d,0}$ برقرار گردد. حال در لحظه‌ی معینی میدان را قطع می‌کنیم. سرعت سوق بعد از این لحظه از رابطه‌ی زیر پیروی می‌کند:

$$m^* \frac{dv}{dt} = -m^* \frac{v}{\tau}$$

که این از رابطه‌ی (۴-۶) به ازای $\varepsilon = 0$ نتیجه می‌شود. حل مناسب رابطه‌ی فوق با توجه به شرایط اولیه چنین است.

$$v_d(t) = v_{d,0} e^{-t/\tau} \quad (4-10)$$

که نشان می‌دهد X_T به طور نمائی با ثابت زمانی τ به صفر می‌رسد. این پدیده فرایند واهلش نامیده می‌شود. از آن جا که τ خیلی کوچک است، $v_d(t)$ خیلی سریع به صفر می‌رسد. حال رابطه‌ی (۴-۹) را به گونه‌ای بازنویسی می‌کنیم که بعضی از ملاحظات فیزیکی واضح تر گردد، از آن جا که τ زمان بین دو برخورد متوالی است آن را می‌توان به صورت زیر بیان کرد:

$$\tau = \frac{l}{v_r} \quad (4-11)$$

که l فاصله‌ی بین دو برخورد متوالی و v_r سرعت کاتوره‌ی آن است. برحسب این کمیت‌ها σ به صورت زیر در می‌آید:

$$\sigma = \frac{Ne^2 l}{m^* v_r} \quad (4-12)$$

مقادیر ذکر شده برای فلزات در دمای اتاق می‌باشند. چگالی‌ها با استفاده از ظرفیت‌های شیمیائی متعارف به دست آمده‌اند. سرعت فرمی v_F و E_F ، با فرض $m^* = m_0$ و معادلات مناسب بخش ۴-۶ محاسبه شده‌اند. انرژی E_F (مشاهده شده) همان گونه که در فصل ۶ بحث خواهد شد به طور تجربی معین می‌شود. جرم موثر m^* با استفاده از مقدار تجربی (مشاهده شده) E_F و معادله (۴-۳۶) یعنی: $E_F = \left(\frac{\hbar^2}{2m^*}\right)(3\pi^2 N)^{2/3}$ تعیین می‌گردد.

حال نتایج به کارگیری این فرمول را برای فلزات و نیمه رساناها مقایسه می کنیم. برای فلزات همان گونه که ملاحظه شد $\sigma = 5 \times 10^7 (\text{ohm.m})^{-1}$ در حالی که برای نیمه رساناها $\sigma = 1 (\text{ohm.m})^{-1}$ این اختلاف را می توان با استفاده از رابطه ی (۴-۱۲) محاسبه کرد. اولاً: در نیمه رساناها $N = 10^{20} \text{ m}^{-3}$ در حالی که در فلزات $N = 10^{28} \text{ m}^{-3}$. این باعث می شود که σ در نیمه رساناها با یک ضریب 10^9 کمتر از σ در فلزات باشد. ثانیاً: v_r در فلزات از مرتبه سرعت فرمی است. بخش (۴-۷) و حدود 10^6 m/s است در حالی که برای نیمه رساناها فقط 10^4 m/s است. اگر مقادیر N و v_r را اثر دهیم مرتبه ی بزرگی رسانائی در نیمه رساناها، به دست می آید.

حال بزرگی های v_d و v_r را باهم مقایسه می کنیم. v_d مقداری در حدود 10^4 m/s دارد. از طرف دیگر v_d را می توان از رابطه ی (۴-۷) محاسبه کرد، اگر مقادیر $e \cong 10^{-19} \text{ coul}$ ، $\tau = 10^{-14} \text{ s}$ ، $m^* = 10^{-30} \text{ kg}$ و $\mathcal{E} = 10 \text{ V/m}$ را در رابطه ی (۴-۷) جای گزین نمائیم مقدار $\frac{v_d}{v_r} = 10^{-8}$ به دست می آید. بنابراین $v_d \cong 10^{-2} \text{ m/s}$ که مقدار خیلی کوچکی است.

هم چنین می توانیم عبارت میکروسکوپی برای گرمای ژول به دست آوریم. توان تلف شده توسط گرمای ژول مساوی توان جذب شده توسط سیستم الکترونی از میدان است. از فیزیک مقدماتی یادآوری می کنیم که توان جذب شده توسط یک ذره که تحت تاثیر نیروی F قرار دارد مساوی Fv است که v سرعت ذره است. ملاحظه می کنیم که توان جذب شده بر واحد حجم توسط سیستم الکترونی برابر است با:

$$P = NFv_d = N(-e\mathcal{E})\left(-\frac{e\tau\mathcal{E}}{m^*}\right) = \frac{Ne^2\tau}{m^*}\mathcal{E}^2 \quad (۴-۱۳)$$

۱- در نیمه رساناها به خاطر حرکت حرارتی با عبارت معمول $v_r = (3KT/m^*)^{1/2}$ بیان می شود. اگر مقادیر $T = 300^\circ K$ و $m^* = m/5$ را جای گزین نماییم که مقادیر نوعی برای نیمه رساناهاست در می یابیم که $v_r = 10^4 \text{ m/s}$

جدول ۴-۱: رسانائی الکتریکی و دیگر پارامترهای ترابری برای فلزات.

عنصر	σ ohm ⁻¹	N m ⁻³	τ s	v_F m/s	I Å	E_F eV	$E_F^{(ob)}$ eV	m^*/m_0
Li	$1/0.7 \times 10^7$	$1/6 \times 10^{28}$	0.9×10^{-14}	$1/3 \times 10^6$	110	4/7	3/7	1/2
Na	2/11	2/5	3/1	1/1	350	3/1	2/5	1/2
K	1/39	1/3	4/3	0.185	370	1/2	1/9	1/1
Rb	0.18	1/1	2/75	0.18	220	1/8	---	---
Cs	0.5	0.185	---	0.175	160	1/5	---	---
Cu	5/88	8/45	2/7	1/6	420	7	7	1
Ag	6/21	5/85	1/4	1/4	570	5/5	---	---
Au	4/55	5/9	2/9	1/4	410	5/5	---	---
Zn	1/69	13/10	---	1/82	---	9/4	11	0.185
Cd	1/38	9/28	---	1/62	---	7/5	---	---
Hg	0.1	---	---	---	---	---	---	---
Al	3/65	18/0.6	---	2/0.2	---	11/6	11/8	---
Ga	0.67	15/3	---	1/91	---	10/3	---	---
In	1/14	11/5	---	1/74	---	8/6	---	---

منشأ زمان برخورد

τ را به عنوان زمان برخورد معرفی کردیم، اما راجع به منشأ آن بحث نکردیم. طبیعی ترین فرض این است که؛ نیروی اصطکاک توسط برخورد الکترون ها با یون ها ایجاد می شود. مطابق این مدل خاص، هم چنان که یک الکترون در شبکه حرکت می کند، با یون ها برخورد می کند که نتیجه ی آن کم شدن اندازه ی حرکت الکترون است. این مدل غیر قابل دفاع است؛ زیرا به نکاتی منجر می شود که با تجربه سازگار نیست. فقط به یکی از آن ها اشاره می کنیم: پویش آزاد میانگین l را می توان از رابطه ی (۹-۴) محاسبه کرد اگر مقادیر $\tau = 10^{-14}$ s و $v_s = 10^6$ m/s را جایگزین کنیم در می یابیم که $l = 10^{-8}$ m = 10^2 Å این مدل بدین معنی است که الکترون بین دو

برخورد، مسافتی را که بیش از ۲۰ برابر فاصله ی بین اتمی است طی می کند. اگر الکترون در حین عبور از درون یون واقعاً با یون برخورد کند، این مقدار خیلی بیش از آن است که انتظار می رود. به خصوص در ساختار تنگ پکیده که اتم ها کاملاً پکیده اند، مشکل است قبول کنیم که الکترون ها بتوانند بین دو برخورد چنین مسافتی را طی کنند.

این پارادوکس را تنها می توان بر مبنای مفاهیم کوانتومی توضیح داد. چکیده ی بحث به قرار زیر است: در بخش ۱۲-۲ ملاحظه شد که بر طبق نظریه ی مکانیک کوانتومی، الکترون یک مشخصه ی موجی دارد. طول موج الکترون در شبکه با رابطه ی دوبروی بیان می شود.

$$\lambda = \frac{h}{m * v_r} \quad (4-14)$$

از تئوری انتشار موج در ساختارهای گسسته می دانیم هنگامی که یک موج از شبکه ی تناوبی عبور می کند بدون پراکندگی به طور نامتناهی به انتشار خود ادامه می دهد. تاثیر اتم ها در شبکه این است که انرژی را از موج جذب می کنند و آن را مجدداً تابش می کنند، به طوری که نتیجه ی خالص آن چنین می شود که موج بدون تغییر در جهت و شدت به حرکت ادامه می یابد. ولی سرعت انتشار تغییر می کند. این آن چیزی است که در مورد یک موج الکترون در یک شبکه ی منظم اتفاق می افتد. به جز این که در این مورد، ما راجع به یک موج مادی صحبت می کنیم.

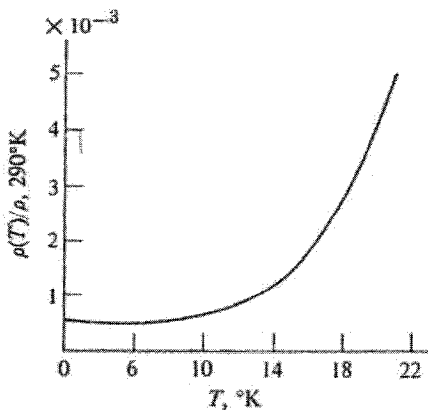
در فصل دوم، به طور ریاضی و نسبتاً مفصل دلیل این امر را که چرا یک شبکه ی منظم موج را پراکنده نمی کند بحث کردیم. در آن جا دیدیم که موج پرتو ایکس، نوترون یا الکترون پراکنده یا پراشیده نمی شوند مگر وقتی که شرط براگ برآورده گردد. به جز تحت این شرط خاص، الکترون های رسانش به هیچ وجه نباید توسط یک شبکه ی منظمی از یون ها پراکنده گردند.

در این زمینه مثال آشنائی در اپتیک هست: یک موج نوری که در یک بلور حرکت می کند به هیچ وجه پراکنده نمی شود. تنها اثری که بلور دارد این است که یک ضریب شکست (n) دارد. به طوری که سرعت موج در محیط مساوی c/n می باشد. بنابراین ملاحظه می کنیم که اگر یون ها یک شبکه ی کاملی را تشکیل دهند به هیچ وجه برخوردی وجود نخواهد داشت. یعنی $l = \infty$ و بنابراین $\tau = \infty$ که نتیجه ی آن رسانائی بینهایت می باشد. به هر جهت نشان داده شده است که

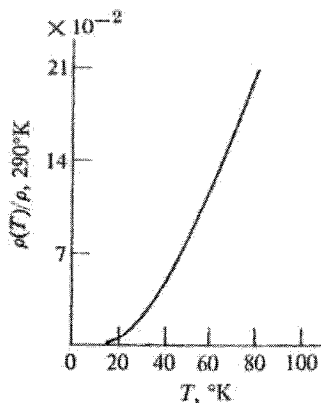
مقدار I مشاهده شده در حدود $10^2 A^\circ$ است. بنابراین متناهی بودن σ باید مربوط به انحراف شبکه از تناوبی بودن کامل باشد. هم چنان که در بخش بعد خواهیم دید این امر یا به واسطه ی ارتعاشات حرارتی یون ها اتفاق می افتد و یا به دلیل وجود ناکاملی ها و ناخالصی های خارجی.

۴-۵ مقاومت الکتریکی بر حسب دما

رسانائی الکتریکی یک فلز با دمای آن به صورت مشخصی تغییر می کند. این تغییرات معمولاً به صورت تغییرات مقاومت ویژه ی ρ بر حسب T مورد بحث قرار می گیرد. شکل ۴-۵ یک منحنی تجربی برای Na را نشان می دهد. در $T = 0^\circ K$ ، ρ یک مقدار کوچک ثابت دارد؛ در دماهای بالاتر ρ ابتدا کند و سپس به طور خطی بر حسب T افزایش می یابد. این رفتار خطی اساساً تا نقطه ی ذوب ادامه می یابد. اغلب فلزات (به جز آن ها که در زیر اشاره خواهد شد) از این قاعده پیروی می کنند و دمای اتاق نیز در ناحیه ی خطی منحنی قرار می گیرد. همان گونه که از فیزیک مقدماتی می دانیم، این رفتار خطی را به سادگی می توان تأیید تجربی کرد.



(a)



(b)

شکل ۴-۵ مقاومت ویژه ی هنجار شده $\frac{\rho(T)}{\rho(290^\circ K)}$ بر حسب T برای Na (الف) در ناحیه ی دماهای پائین

(ب) در دماهای بالا $\rho(290) = 2/10 \times 10^{-8} \Omega m$

حال می خواهیم این رفتار ρ را بر حسب فرمول هایی که در بخش (۴-۴) به دست آوردیم توضیح دهیم. با یادآوری اینکه $\rho = \sigma^{-1}$ و با استفاده از رابطه ی (۴-۹) داریم:

$$\rho = \frac{m^*}{Ne^{\tau}} \times \frac{1}{\tau} \quad (۴-۱۵)$$

از تفسیر τ در بخش قبل ملاحظه کردیم که τ / در واقع مساوی احتمال پراکندگی در واحد زمان الکترون است؛ بنابراین اگر $\tau = 10^{-14}$ s باشد، الکترون 10^{14} برخورد در واحد زمان انجام می‌دهد. ولی در بخش ۴-۴ دیدیم که الکترون تنها به این دلیل برخورد انجام می‌دهد که شبکه کاملاً منظم نیست.

انحراف‌های از یک شبکه ی کامل را به دو دسته تقسیم می‌کنیم:

(الف) ارتعاشات شبکه‌های یون‌ها فونون‌ها حول مکان تعادلشان که مربوط به تحریک حرارتی یون‌ها است.

(ب) تمام ناکاملی‌های استاتیک نظیر ناخالصی‌های خارجی یا ناراستی‌های بلور.

از گروه اخیر به عنوان مثال، ناخالصی‌های خارجی را در نظر می‌گیریم. احتمال این که الکترون توسط فوتون‌ها و توسط ناخالصی‌ها پراکنده شود باهم جمع می‌شود. زیرا فرض می‌شود که این دو مکانیسم مستقلاً عمل می‌کنند. بنابراین می‌توانیم بنویسیم:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{ph}} + \frac{1}{\tau_i} \quad (۴-۱۶)$$

اولین جمله‌ی سمت راست مربوط به فوتون‌ها و دومین جمله مربوط به ناخالصی‌ها است. انتظار می‌رود که اولین جمله به T بستگی داشته باشد و دومین جمله به ناخالصی‌ها (ولی نه به T). با جای‌گزینی رابطه‌ی (۴-۱۶) در رابطه‌ی (۴-۱۵) به سادگی در می‌یابیم:

$$\rho = \rho_i + \rho_{ph}(T) = \frac{m^*}{Ne^{\tau}} \frac{1}{\tau_i} + \frac{m^*}{Ne^{\tau}} \frac{1}{\tau_{ph}} \quad (۴-۱۷)$$

ملاحظه می‌شود که ω به دو جمله تقسیم می‌شود: یک جمله ρ_i که مربوط به پراکندگی توسط ناخالصی‌ها است (و مستقل از T است) و مقاومت ویژه باقی‌مانده نامیده می‌شود. جمله‌ی دیگر $\rho_{ph}(T)$ مربوط به پراکندگی توسط فونون‌ها است و به دما بستگی دارد و مقاومت ویژه‌ی ایده‌آل نامیده می‌شود. زیرا مقاومت ویژه‌ی یک نمونه‌ی خالص است.

در دماهای خیلی پائین پراکندگی توسط فونون‌ها قابل چشم‌پوشی است؛ زیرا دامنه‌های نوسان خیلی کوچک هستند. در آن ناحیه $\tau_{ph} \rightarrow \infty$ و $\rho_{ph} \rightarrow 0$ و بنابراین $\rho = \rho_i$ که یک مقدار ثابت

است. این مطلب با شکل (۴-۵) سازگاری دارد. با افزایش T پراکندگی توسط فونون ها مؤثرتر و $\rho_{ph}(T)$ افزایش می یابد و این دلیل افزایش ρ است. وقتی T به اندازه ی کافی بزرگ باشد، پراکندگی توسط فونون ها پدیده ی غالب می شود و $\rho \cong \rho_{ph}(T)$ در ناحیه ی دماهای بالا همان گونه که به زودی نشان خواهیم داد، $\rho_{ph}(T)$ به طور خطی با دما افزایش می یابد. مجدداً همان گونه که در شکل (۴-۵) نشان داده شده است، در این جا نیز سازگاری خوبی با تجربه وجود دارد. این بیان که ρ را می توان به دو قسمت تقسیم کرد که یکی مستقل از T است به نام قانون ماتیسن نامیده می شود. این قانون در رابطه ی (۴-۱۷) به کار رفته است. انتظار داریم که ρ_i با چگالی ناخالصی افزایش یابد و نشان داده می شود که برای چگالی های کم ρ_i با چگالی ناخالصی N_i متناسب است. هم چنین به جز در دماهای پائین، برای چگالی ناخالصی کوچک $\rho_{ph} \gg \rho_i$ است. حال با استفاده از تئوری جنبشی گازها، عبارت های تقریبی برای τ_i و τ_{ph} استنتاج می کنیم. برای سادگی فرض می کنیم که برخورد از نوع برخورد کره های سخت توپ بیلیارد باشد.

ابتدا برخورد الکترون با ناخالصی را بررسی می کنیم. با توجه به رابطه ی (۴-۱۱) می توان نوشت:

$$\tau_i = \frac{l_i}{v_r} \quad (4-18)$$

که l_i پویش آزاد میانگین برای برخورد با ناخالصی ها است. سطح مقطع پراکندگی یک ناخالصی را با σ_i نمایش می دهیم و آن سطح از یک اتم ناخالصی است که در مقابل الکترون فرودی قرار دارد. با استفاده از استدلال آشنائی از تئوری جنبشی گازها می توان نوشت:

$$l_i \sigma_i N_i = 1 \quad (4-19)$$

$$l_i = \frac{1}{N_i \sigma_i}$$

انتظار می رود که σ_i به همان بزرگی سطح هندسی اتم ناخالصی باشد یعنی $\sigma_i = 1 \text{ \AA}^2$ (برای محاسبه ی مقدار دقیق σ_i تئوری کوانتومی نیاز است). با جایگزینی روابط (۴-۱۸) و (۴-۱۹) در رابطه ی (۴-۱۷) می توان ρ_i را بدست آورد. ملاحظه می شود که ρ_i با چگالی ناخالصی ها N_i متناسب است.

محاسبه ی τ_{ph} مشکل تر است ولی معادلاتی مشابه با (۴-۱۸) و (۴-۱۹) هنوز برقرارند. به ویژه می توان نوشت:

$$l_{ph} = \frac{1}{N_{ion} \sigma_{ion}} \quad (۴-۲۰)$$

که N_{ion} چگالی یون های فلزی در شبکه σ_{ion} سطح مقطع پراکندگی بر یون است. در این جا باید توجه کرد که σ_{ion} هیچ رابطه ای با سطح مقطع هندسی یون ندارد، بلکه سطحی است که توسط یون های در افت و خیز حرارتی در مقابل الکترون های عبوری ظاهر می گردد. فرض کنید که میزان انحراف از حالت تعادل x باشد در این صورت میانگین سطح مقطع پراکندگی در حدود زیر می باشد:

$$\sigma_{ion} \cong \pi \langle x^2 \rangle \quad (۴-۲۱)$$

که $\langle x^2 \rangle$ میانگین x^2 است. مقدار $\langle x^2 \rangle$ را می توان به روش زیر تخمین زد. از آن جا که یون ها را به منزله ی نوسانگر هماهنگ در نظر می گیریم (بخش ۳.۴) میانگین انرژی پتانسیل مساوی نصف میانگین انرژی کل است. بنابراین:

$$\frac{1}{2} a \langle x^2 \rangle = \langle E \rangle = \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / kT} - 1} \quad (۴-۲۲)$$

که از فرمول یک نوسان گر کوانتومی (بخش ۴-۳) استفاده کرده ایم. فرکانس ω یا فرکانس انیشتین است یا فرکانس دبی. زیرا در این استدلال تقریبی می توانیم از اختلاف بین این دو صرف نظر کنیم. دمای دبی θ را به گونه ای معرفی می کنیم که $\hbar \omega = k\theta$ ، وقتی این ها را در رابطه ی (۴-۱۷) قرار دهیم در خواهیم یافت که $\rho_{ph}(T)$ را می توان به صورت زیر نوشت:

$$\rho_{ph}(T) \propto \left(\frac{\pi \hbar^2}{k \theta M} \right) \frac{1}{e^{\theta/T} - 1} \quad (۴-۲۳)$$

که M جرم یون است در محدوده ی $\theta \gg T$ رابطه ی فوق را می توان به صورت زیر نوشت:

$$\rho_{ph} \cong \frac{\pi \hbar^2}{K \theta M} \frac{T}{\theta} \quad (۴-۲۴)$$

که بر حسب T خطی است و با تجربه نیز سازگاری دارد.

در محدوده ی دماهای پائین، معادله ی (۴-۲۳) پیش بینی می کند که $\rho_{ph}(T)$ به طور نمائی و به صورت $e^{-\theta/T}$ کاهش می یابد. ولی کاهش مشاهده شده به صورت T^5 است. دلیل این اختلاف این است که ما از مدل انیشتین استفاده کردیم که در آن حرکت یون های همسایه مستقل از هم در

نظر گرفته شده است. هنگامی که ارتباط متقابل بین حرکات یونی منظور شود، آن چنان که در تئوری دبی ارتعاشات شبکه عمل می شود، رفتار T^5 بدست می آید.

اغلب انحراف هایی از قاعده ی ماتیسن مشاهده می شود، شناخته شده ترین آنها اثر کندو^۱ است هنگامی که ناخالصی هائی مثلاً Fe در Cu حل شود، ρ در دماهای پائین مانند شکل (۵-۴) رفتار نمی کند. بلکه ρ یک مقدار کمینه ای در دمای پائین دارد. این رفتار غیر عادی مربوط به پراکندگی اضافی الکترون ها توسط گشتاورهای مغناطیسی در مرکز ناخالصی می باشد. هم چنین انحراف هایی از قاعده ی ماتیسن که بتوان به پیچیدگی های ساختار نواری الکترون های رسانش نسبت داد؛ گزارش شده است. از این دو مثال ملاحظه می شود که رفتار ρ بر حسب T در دماهای خیلی پائین ممکن است خیلی پیچیده تر از آنی باشد که با عبارت ساده ی قاعده ی ماتیسن بیان شد.

۶-۴ ظرفیت گرمائی الکترون های رسانش

در مدل الکترون آزاد، الکترون های رسانش به عنوان ذراتی که از قوانین کلاسیک الکترومغناطیس و مکانیک آماری پیروی می کنند در نظر گرفته می شوند. مشکلات بررسی برخوردها در این مدل را یاد آوری کردیم و اشاره کردیم که چگونه باید به مفاهیم کوانتومی مراجعه کرد تا بتوان از این مدل استفاده نمود. مشکل دیگر در ارتباط با ظرفیت گرمائی الکترون های آزاد بروز می کند.

حال ظرفیت گرمائی بر مول را برای الکترون های آزاد بر مبنای مدل درود - لورنتس^۲ محاسبه می کنیم. از تئوری جنبشی گازها می دانیم که یک ذره ی آزاد در تعادل دمائی T یک انرژی متوسط $\frac{3}{2}kT$ دارد. بنابراین میانگین انرژی بر مول برابر است با:

$$\langle \bar{E} \rangle = N_A \left(\frac{3}{2} kT \right) = \frac{3}{2} RT \quad (۴-۲۵)$$

که N_A عدد آووگادرو و $R = N_A K$ می باشد ظرفیت گرمائی الکترون برابر است با:

$$C_e = \partial \langle \bar{E} \rangle / \partial T$$

بنابراین:

$$C_e = \frac{3}{2} R \cong 3 \text{ cal / mole } ^\circ K \quad (4-26)$$

بدین ترتیب ظرفیت گرمایی کل فلزات از جمله فونون ها باید برابر باشد با:

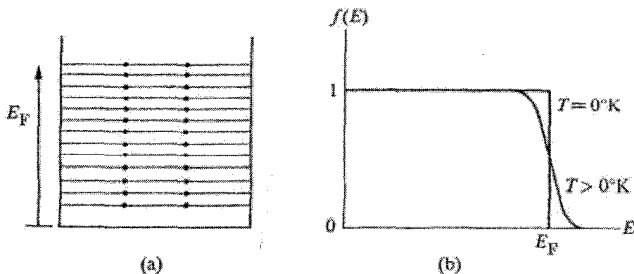
$$C = C_{ph} + C_e \quad (4-27)$$

که در دماهای بالا مقدار زیر را دارد:

$$C = 3R + \frac{3}{2} R = \frac{9}{2} R \cong 9 \text{ cal / mole } ^\circ K \quad (4-28)$$

آزمایشات روی ظرفیت گرمایی نشان می دهد که در فلزات نیز مانند نارساها، گرمای ویژه در دماهای بالا خیلی نزدیک به $3R$ است. اندزه گیری های دقیق که سهم الکترون ها در گرمای ویژه ی کل را جدا کرده اند، نشان می دهند که C_e با یک ضریب در حدود 10^{-2} کم تر از مقدار کلاسیکی $\frac{3}{2}R$ است. برای توضیح این ناسازگاری باید مجدداً به مفاهیم کوانتومی برگردیم.

بر طبق مکانیک کوانتومی انرژی الکترون در یک فلز کوانتیده است. شکل (۶-۴ الف) ترازهای انرژی کوانتومی را نشان می دهد. الکترون های فلز این ترازها را اشغال می کنند و برای این کار از یک اصل خیلی مهم کوانتومی یعنی اصل طرد پائولی پیروی می کنند. بر طبق این اصل هر تراز انرژی حداکثر می تواند توسط دو الکترون یکی با اسپین بالا و دیگری با اسپین پائین اشغال شود. بنابراین در پر کردن ترازهای انرژی، اولین دو الکترون پائین ترین تراز را اشغال می کنند، دو الکترون دیگر تراز بعدی و به همین ترتیب تا همچون شکل (۶-۴ الف) تمام الکترون ها جای گزیده گردند. انرژی بالاترین تراز اشغال شده انرژی تراز فرمی یا به بیان ساده تراز فرمی نامیده می شود. تراز فرمی را در بخش ۷-۴ مطالعه خواهیم کرد. مقدار نوعی انرژی فرمی در فلزات در حدود 5 eV است.



شکل ۶-۴ (الف) اشغال ترازهای انرژی بر طبق اصل طرد پائولی (ب) تابع توزیع $f(E)$ بر حسب E در

$$T > 0^\circ K, T = 0^\circ K$$

وضعیتی که توصیف شد در دمای $T = 0^\circ K$ در فلزات به دست می آید. حتی در پائین ترین دمای ممکن به دلیل اصل طرد پائولی سیستم الکترونی مقدار قابل ملاحظه ای انرژی دارد. اگر به خاطر این اصل نبود، تمام الکترون ها در پائین ترین تراز انرژی قرار می گرفتند و انرژی کل سیستم قابل اغماض بود. این مطلب معادل این عبارت در فیزیک کلاسیک است که اگر $T \rightarrow 0^\circ K$ تمام حرکت ها متوقف می گردند و انرژی صفر می شود. واضح است که این بیان برای الکترون های رسانش کاربردی ندارد.

توزیع الکترون ها در ترازها معمولاً با تابع توزیع $f(E)$ توصیف می شود که به صورت احتمال این که تراز انرژی E توسط یک الکترون اشغال گردد تعریف می شود. اگر تراز کاملاً خالی باشد $f(E) = 0$ است و اگر کاملاً پر باشد $f(E) = 1$ می باشد. به طور کلی $f(E)$ مقدار بین صفر و یک دارد.

از بحث گذشته نتیجه می شود که تابع توزیع برای الکترون ها در $T = 0^\circ K$ به شکل زیر است:

$$f(E) = \begin{cases} 1 & E < E_F \\ 0 & E > E_F \end{cases} \quad (4-29)$$

یعنی تمام ترازهای پائین تر از E_F کاملاً خالی هستند. این تابع در شکل (۶-۴) که گسستگی در انرژی فرمی را نشان می دهد، رسم شده است. تاکنون بررسی مان را به دمای صفر مطلق محدود کرده ایم. اگر سیستم حرارت بیند $T > 0^\circ K$ ، انرژی حرارتی الکترون ها را تحریک می کند. ولی این انرژی شبیه آنچه در فیزیک کلاسیک وجود دارد به طور مساوی بین الکترون ها تقسیم نمی شود. الکترون هایی که کاملاً پائین تر از تراز فرمی قرار دارند نمی توانند انرژی جذب نمایند. زیرا اگر این الکترون ها انرژی جذب نمایند، به تراز بالاتری می روند که اشغال است و اصل طرد نقض می گردد. در این جا یادآوری می نمائیم که انرژی ای که یک الکترون ممکن است به صورت انرژی حرارتی جذب کند از مرتبه kT (در دمای اتاق مساوی با $0.025 eV$) است که از E_F که در حدود $5 eV$ است خیلی کوچک تر می باشد. بنابراین تنها الکترون های نزدیک سطح فرمی می توانند تحریک شوند. زیرا ترازهای بالای E_F خالی است. و بنابراین وقتی این الکترون ها به تراز بالاتری انتقال می یابند اصل طرد نقض نمی گردد. پس تنها این الکترون ها که کسر کوچکی از تعداد کل الکترون ها هستند قادرند که به طور حرارتی تحریک شوند. و این پائین بودن گرمای ویژه ی الکترونی (یا ظرفیت گرمایی) را توضیح می دهد.

تابع توزیع $f(E)$ در دمای $T \neq 0^\circ K$ با رابطه‌ی زیر بیان می‌گردد:

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_f)/KT} + 1} \quad (۴-۳۰)$$

که این به نام توزیع فرمی دیراک موسوم است.^۱ این تابع نیز در شکل (۶-۴ ب) رسم شده است و اساساً شبیه توزیع در $T = 0^\circ K$ است. به جز در نواحی خیلی نزدیک به تراز فرمی که بعضی از الکترون‌ها از پائین E_F به بالای آن تحریک شده‌اند. البته این بر مبنای آن چه در بالا بحث شد قابل انتظار است.^۲

از تابع توزیع ۳-۳۰ می‌توان برای ارزیابی انرژی حرارتی و بنابراین ظرفیت گرمایی الکترون‌ها استفاده کرد، ولی این روش خسته کننده است. بنابراین تلاش می‌کنیم که با حداقل روابط ریاضی به یک تقریب خوبی برسیم. از آن جا که فقط الکترون‌ها در محدوده‌ی kT از تراز فرمی تحریک شده‌اند نتیجه می‌گیریم که فقط کسر kT/E_F از الکترون‌ها تحریک شده‌اند. بنابراین تعداد الکترون‌های تحریک شده بر مول در حدود $N_A(kT/E_F)$ است و از آن جا که هر الکترون به طور متوسط انرژی kT را جذب می‌کند، نتیجه می‌شود که انرژی حرارتی بر مول تقریباً با رابطه‌ی زیر بیان می‌گردد:

$$\bar{E} = \frac{N_A(kT)^2}{E_F}$$

و گرمای ویژه $C_e = \frac{\partial \bar{E}}{\partial t}$ برابر است با:

$$C_e = 2R \frac{kT}{E_F} \quad (۴-۳۱)$$

۱- برای ملاحظه استنتاج این رابطه به مرجع زیر مراجعه نمایید:

M. Alson and E.J. Finn 1968, Fundamental University Physics Volume II Reading Mass Addison - Wesley

۲- در محدوده‌ی انرژی که خیلی بالاتر از انرژی فرمی است، $(E - E_f)/KT \gg 1$ ، و بنابراین تابع توزیع فرمی

- دیراک به شکل زیر است $e^{-E/KT}$ (مقدار ثابت) $f(E) = e^{-E/KT} e^{E_f/KT}$

ماکسول - بولتزمن است. بنابراین در محدوده‌ی انرژی‌های بالا یعنی در کناره‌ی توزیع فرمی - دیراک الکترون‌ها را می‌توان توسط مکانیک آماری کلاسیک بررسی کرد.

ملاحظه می‌کنیم که گرمای ویژه ی الکترون ها از مقدار کلاسیکی خود که از مرتبه ی R است با ضریب kT/E_F کاهش می‌یابد. برای $E_F = 5\text{eV}$ و $T = 300^\circ\text{K}$ این ضریب مساوی $\frac{1}{200}$ است همان طور که قبلاً اشاره شد این کاهش زیاد با تجربه سازگار است.

دمای فرمی T_F که گاهی در این متن درسی بکار می‌رود به صورت $E_F = kT_F$ تعریف می‌شود. حالا گرمای ویژه را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$C_e = 2R \frac{T}{T_F}$$

مقدار نوعی T_F متناظر با $E_F = 5\text{eV}$ مساوی 60000°K است. برای این که گرمای ویژه ی الکترون ها در یک جسم جامد به مقدار کلاسیکی خود برسد، باید تا دمائی که قابل مقایسه با T_F است گرم شود. ولی البته این امر ممکن نیست چرا که جسم جامد خیلی قبل از آن ذوب و تبخیر می‌شود. بنابراین در تمام دماهای عملی گرمای ویژه ی الکترون ها بسیار پائین تر از مقدار کلاسیکی است.

نتیجه‌ی مهم دیگر از رابطه ی ۳۱-۴ این است که گرمای ویژه C_e الکترون ها یک تابع خطی از دما است. این برخلاف ظرفیت گرمائی شبکه است که در دماهای بالا ثابت است و در دماهای پائین با T^3 متناسب است.

با ارزیابی دقیق ظرفیت گرمائی الکترونی، مقدار زیر به دست می‌آید:

$$C_e = \frac{\pi^2}{2} R \frac{kT}{E_F} \quad (4-32)$$

که به طور واضح از همان مرتبه ی بزرگی عبارت تقریبی رابطه ی ۳۱-۴ می‌باشد.

۷-۴ سطح فرمی

الکترون ها در فلزات به طور پیوسته و کاتوره ای در حرکت اند. از آن جا که این الکترون ها به عنوان ذرات آزاد در نظر گرفته می‌شوند، انرژی آن ها کاملاً جنبشی:

$$E = \frac{1}{2} m^* v^2$$

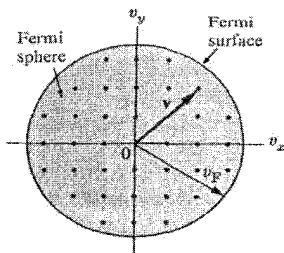
که v سرعت ذره است. حال مفهوم فضای سرعت را معرفی می‌کنیم که محورهای آن v_x, v_y و

v_z می باشد. هر نقطه در این فضا نمایان گر یک تک سرعت است که هم بزرگی و هم جهت آن را مشخص می کند.

الکترون های رسانش را در این فضای سرعت در نظر می گیریم. این الکترون ها سرعت های گوناگونی دارند و از آن جا که این سرعت ها کاتوره ای هستند، همان گونه که در شکل ۴-۷ نشان داده شده است نقاطی که مبین سرعت ها هستند به طور یکنواخت فضا را پر می کنند. ولی کره ای وجود دارد که تمام نقاط آن خالی است. شعاع این کره، سرعت فرمی v_F نامیده می شود. که با رابطه ی زیر به انرژی فرمی ارتباط دارد:

$$E_F = \frac{1}{2} m * v_F^2 \quad (4-33)$$

دلیل این که تمام نقاط خارج این کره خالی هستند این است که این نقاط متناظر با انرژی های بزرگ تر از E_F هستند در $T = 0^\circ K$ این انرژی ها اشغال نشده اند (بخش ۴-۶) تمام نقاط داخل کره کاملاً پر هستند. این کره به نام کره فرمی موسوم است و سطح آن سطح فرمی نامیده می شود.



شکل ۴-۷ سطح فرمی و کره فرمی.

سطح فرمی FS که در بسیاری از پدیده های حالت جامد مانند خواص ترابری مهم است، به طور قابل ملاحظه ای متأثر از دما نیست. وقتی دما افزایش یابد تنها مقدار نسبتاً اندکی از الکترون ها از نقاط داخل به خارج سطح فرمی تحریک می شوند و همان طور که دیده ایم این ها اثر بسیار کمی دارند. بنابراین FS هویت دائمی مستقل دارد و باید به عنوان مشخصه ی واقعی فیزیک فلز در نظر گرفته شود.

سرعت v_F خیلی بزرگ است. اگر مقدار $E_F = 5eV$ را در رابطه ی (۴-۳۳) جای گزین و v_F را محاسبه نمائیم در می یابیم:

$$v_F = \left(\frac{2E_F}{m^*} \right)^{1/2} \cong \left(\frac{2 \times 5 \times 10^{-19}}{9 \times 10^{-31}} \right)^{1/2} \cong 1.06 \text{ m.s}^{-1}$$

که در حدود یک صدم سرعت نور است. بنابراین الکترون ها در FS خیلی سریع حرکت می کنند. علاوه بر آن سرعت فرمی مانند سطح فرمی مستقل از دما است.

مقدار انرژی فرمی توسط چگالی الکترون ها تعیین می گردد. هرچه چگالی بزرگ تر باشد، تراز انرژی بالائی بزرگ تری لازم است تا همه ی الکترون ها را جای دهد (به شکل ۶-۴ الف مراجعه نمائید) و E_F بزرگ تر خواهد بود. در بخش ۱۲-۵ نشان داده می شود که E_F با رابطه ی زیر بیان می گردد:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\pi^2 N)^{2/3} \quad (4-34)$$

اگر مقدار نوعی $N = 1.0^{28} \text{ m}^{-3}$ را جای گزین نمائیم در می یابیم $E_F \cong 5 \text{ eV}$ که در سازگاری با عبارت های قبلی است. جدول ۱-۴ لیستی از انرژی های فرمی برای فلزات گوناگون را ارائه می دهد.

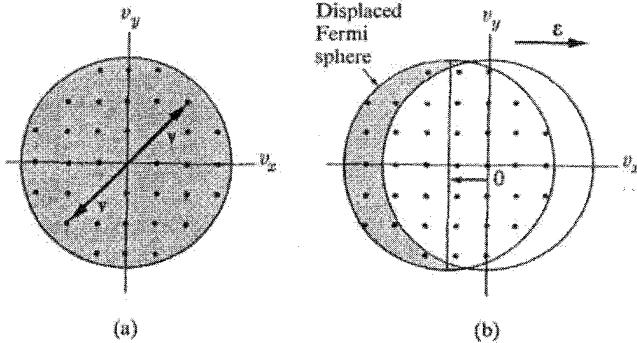
سطح فرمی در بخش (۱۲-۵) که بر هم کنش الکترون ها با شبکه ی مورد نظر قرار می گیرد، با تفصیل بیشتری مورد بحث قرار می گیرد. در آن جا خواهیم دید که FS ممکن است از شکل کروی ساده که در این جا بررسی می شود تغییر شکل یابد. این تغییر شکل توسط بر هم کنش الکترون - شبکه ایجاد می گردد. فعلاً مدل الکترون آزاد و سطح فرمی منظور ما را برآورده می کند.

۸-۴ رسانائی الکتریکی؛ آثار سطح فرمی

رسانائی الکتریکی را در بخش ۳-۴ مورد بحث قرار دادیم. در آن جا الکترون ها را به طور کلاسیکی در نظر گرفتیم. چنان چه سطح فرمی را در محاسبات منظور کنیم، نتایج چگونه تغییر خواهد کرد؟

حال به شکل ۸-۴ مراجعه می نمایم در غیاب میدان الکتریکی، مرکز سطح فرمی در مبدأ شکل (۸-۴) الف قرار دارد. الکترون های مختلف که بعضی سرعت های خیلی بالایی دارند، همه در حال حرکت اند و جریان های الکتریکی را حمل می کنند. ولی جریان کل سیستم صفر است. زیرا

به ازای هر الکترون که با سرعت v حرکت می کند، الکترون دیگری وجود دارد که با سرعت $-v$ حرکت می کند و مجموع دو جریان صفر می شود. بدین ترتیب به دلیل حذف شدن دوی دوی جریان های الکترونی، جریان الکتریکی کل صفر می شود.



شکل (۴-۸) (الف) کره ی فرمی در تعادل (ب) جابه جایی کره ی فرمی به دلیل اعمال یک میدان الکتریکی.

وقتی میدان الکتریکی اعمال گردد وضعیت تغییر می کند. اگر میدان در جهت x های مثبت باشد هر الکترون آن چنان که در رابطه ی $v = 4-7$ بیان شد سرعت سوئی مساوی $v_d = -(e\tau / m^*)\epsilon$ کسب می کند. بنابراین همان گونه که در شکل (۴-۸) نشان داده شده است. تمام کره ی فرمی به سمت چپ جابه جا می شود. گرچه این جابه جایی کوچک است و هنوز قسمت اعظم الکترون ها دویه دو یک دیگر را خنثی می کنند، ولی بعضی از الکترون ها که در ناحیه ی سایه دار شکل قرار دارند حذف نشده باقی می مانند. این الکترون ها هستند که جریان الکتریکی مشاهده شده را تولید می کنند.

حال چگالی جریان را تخمین می زنیم: کسری از الکترون ها که حذف نشده باقی می مانند تقریباً مساوی v_d / v_F است. چگالی این الکترون ها $N(v_d / v_F)$ است و از آن جا که هر الکترون سرعتی تقریباً مساوی $-v_F$ دارد، چگالی جریان با رابطه ی زیر بیان می شود.

$$J \cong -eN(v_d / v_F)(-v_F) = Ne v_d$$

که با جایگزینی $v_d = -(e\tau / m^*)\epsilon$ به دست می آید:

$$J = \frac{Ne^2 \tau_F \epsilon}{m^*}$$

که τ_F زمان برخورد یک الکترون در FS است. بنابراین رسانائی الکتریکی برآیند برابر است با:

$$\sigma = \frac{Ne^2 \tau_F}{m^*} \quad (۴-۳۵)$$

این دقیقاً شبیه نتیجه‌ای است که به طریق کلاسیکی به دست می‌آید، به جز این که τ با τ_F جای‌گزین شده است. عبارت ۴-۳۵ که تنها یک استنتاج تقریبی است را می‌توان توسط یک تحلیل آماری دقیق و مفصل تر تأیید کرد.

تصویر واقعی رسانش الکتریکی با مدل کلاسیکی آن در بخش ۴-۴ کاملاً متفاوت است. در آن جا فرض کردیم جریان به طور مساوی توسط تمام الکترون‌ها که هر یک با سرعت خیلی کوچک v_d حرکت می‌کند حمل می‌شود. ولی در واقع جریان فقط توسط تعداد اندکی از الکترون‌های حمل می‌شود که همگی با سرعت خیلی بالا حرکت می‌کنند. هر دو مدل به نتیجه‌ی یکسانی منتهی می‌شوند، ولی دومی دقیق‌تر است. این مطلب را می‌توان از این واقعیت دریافت که در رابطه‌ی (۴-۳۵) برای σ فقط زمان برخورد الکترون‌ها در سطح فرمی یعنی τ_F ظاهر می‌گردد.

با جای‌گزینی $v_F = l_F / \tau_F$ در رابطه‌ی (۴-۳۵) نتیجه می‌گیریم:

$$\sigma = \frac{Ne^2 l_F}{m^* v_F}$$

از کمیت‌های طرف راست پویش آزاد میانگین l_F بستگی به دما دارد از آن جا که در دماهای بالا همان گونه که در بخش (۴-۵) ملاحظه شد $l_F \sim \sqrt{T}$ است، نتیجه می‌شود که $\sigma \sim \sqrt{T}$ یا $\rho \sim T$ ، که با بحث قبلی مان راجع به مقاومت ویژه‌ی الکتریکی سازگاری دارد.

اهمیت سطح فرمی در پدیده‌های ترابری اکنون روشن می‌گردد. از آن جا که جریان توسط الکترون‌های که نزدیک به سطح فرمی قرار دارند حمل می‌شود، این پدیده‌ها به شکل و خواص سطح فرمی خیلی حساس‌اند. الکترون‌های داخلی در فرایندهای رسانائی نقش ندارند.

این واقعیت که تئوری کلاسیک و تئوری مکانیک کوانتومی نتیجه‌ی یکسانی می‌دهد ما را وادار می‌دارد که از روش ساده‌تر کلاسیکی استفاده نمائیم. از این روش در بخش‌های آینده نیز هر جا که مناسب باشد استفاده خواهیم کرد.

۹-۴ رسانائی حرارتی در فلزات

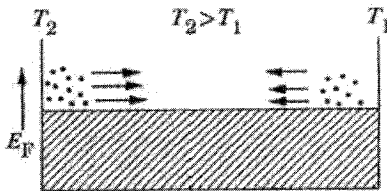
اگر دو انتهای یک سیم فلزی را در دماهای متفاوتی قرار دهیم، گرما از طرف گرمتر به طرف سردتر جریان می یابد (بخش ۹-۳ در مورد رسانائی حرارتی در نارساناها را ملاحظه نمایید) مبنای آزمایش چنین است که جریان حرارتی Q برابر است با مقدار انرژی حرارتی موجود در واحد زمان و متناسب است با گرادیان دمائی:

$$Q = -K \frac{dT}{dx}$$

که K رسانائی حرارتی اس. در نارساناها گرما تماماً توسط فونون ها انتقال می یابد ولی در فلزات هم فونون ها و هم الکترون ها گرما را انتقال می دهند. بنابراین رسانائی K مساوی مجموع دو سهم الکترون و فوتون است؛

$$K = K_e + K_{ph}$$

که K_e و K_{ph} به ترتیب مربوط به الکترون و فوتون می باشند. در اغلب فلزات به دلیل این که چگالی الکترونی زیاد است سهم رسانائی الکترونی از رسانائی فوتونی بیشتر است و نوعاً $K_{ph} \cong 10^{-2} K_e$ بدین ترتیب می توان در این بخش از رسانائی فونون ها صرف نظر کرد.



شکل ۹-۴ اساس فیزیکی رسانائی حرارتی. الکترون ها پر انرژی از سمت چپ به سمت راست حرکت می کنند و با خود انرژی حمل می کنند.

فرآیند فیزیکی که تحت آن رسانائی حرارتی توسط الکترون ها صورت می گیرد در شکل ۹-۴ نشان داده شده است. الکترون های انتهای گرم نمونه (در سمت چپ) در تمام جهات حرکت می کند ولی کسر معینی از آن ها به سمت راست حرکت می کنند و حامل انرژی هستند که آن را به سمت انتهای سرد نمونه منتقل می کنند. به طور مشابه کسر معینی از الکترون ها از انتهای سرد (در سمت راست) به سمت چپ حرکت می کنند و مقداری انرژی به انتهای گرم نمونه حمل

می‌کنند. الکترون هائی که در دو جهت مخالف حرکت می‌کنند به لحاظ تعداد برابرند ولی چون الکترون هائی که از انتهای گرم نمونه می‌آیند به طور متوسط، انرژی بیش تری نسبت به الکترون هائی که از انتهای سرد نمونه می‌آیند دارند، انرژی خالصی به طرف راست منتقل می‌گردد و نتیجه‌ی آن انتقال گرما است.

تقریباً تمام گرما توسط الکترون هائی انتقال می‌یابد که نزدیک سطح فرمی اند. زیرا آن هائی که انرژی شان خیلی پائین تر از این سطح است سهم یکدیگر را خنثی می‌کنند. یک بار دیگر ملاحظه می‌شود که الکترون ها در سطح فرمی نقش اول را در پدیده های ترابری ایفا می‌کنند.

برای محاسبه کمی رسانائی K فرمول $K = \frac{1}{3} C_v \nu l$ را که در بخش ۹-۳ در بررسی انتقال گرما در نارساها استفاده شد به کار می‌بریم. یادآوری می‌کنیم که C_v گرمای ویژه بر واحد حجم ν سرعت و l پویش آزاد میانگین ذرات مربوطه می‌باشد. در حالت اخیر که ذرات مربوط الکترون هستند، C_v گرمای ویژه ی الکترونی است که باید از رابطه‌ی (۳۲-۴) جایگزین گردد. هم چنین از آن جا که در این جا با واحد حجم به جای یک مول سروکار داریم، R باید با Nk جایگزین گردد. علاوه بر آن ν و l باید با ν_F و l_F جایگزین گردند. زیرا فقط الکترون‌های در سطح فرمی موثر هستند بنابراین:

$$K = \frac{1}{3} \left(\frac{\pi^2 Nk^2 T}{2E_F} \right) \nu_F l_F$$

باتوجه به این که:

$$E_F = \frac{1}{2} m^* \nu_F^2$$

و این که $\nu_F = l_F / \tau_F$ ، می‌توان رابطه را برای K ساده کرد:

$$K = \frac{\pi^2 Nk^2 T \tau_F}{3m^*} \quad (۳۶-۴)$$

که رسانائی حرارتی را بر حسب خواص الکترونی فلز بیان می‌دارد. با جایگزینی مقادیر معمولی پارامترهای الکترونی، در می‌یابیم که $K \cong 5.0 \text{ cal/m}^2 \text{K} \cdot \text{s}$. جدول ۲-۴ مقادیر اندازه گیری شده‌ی K را برای بعضی از فلزات نشان می‌دهد و نشان می‌دهد که تئوری، در توافق اصولی با تجربه است.

جدول ۲-۴: رسانائی های حرارتی و اعداد لورنتس (در دمای اتاق)

عنصر	Na	Cu	Ag	Au	Al	Cd	Ni	Fe
K, cal/m ⁰ k.s	۳۳	۹۴	۱۰۰	۷۱	۵۰	۲۴	۱۴	۱۶
L : cal.ohm / s ⁰ K	۵/۲×۱۰ ^{-۹}	۵/۴	۵/۶	۵/۹	۴/۷	۶/۳	۳/۷	۵/۵

بسیاری از پارامترهایی که در عبارت مربوط به K ظاهر می شوند در عبارت مربوط به رسانائی σ نیز وجود دارند. با یادآوری این که $\sigma = Ne^2\tau_F / m^*$ نسبت $K / \sigma T$ را به صورت زیر برقرار می کنیم:

$$L = \frac{1}{3} \left(\frac{\pi k}{e} \right)^2 \quad (۴-۳۷)$$

L عدد لورنتس نامیده می شود و به دلیل این که فقط به ثابت های جهانی k و e بستگی دارد باید برای تمام فلزات مقدار یکسانی داشته باشد. مقدار عددی آن $5/8 \times 10^{-9} \text{ cal-ohm/s}^2$ است. این نتیجه پیشنهاد می کند که رسانائی های الکتریکی و حرارتی همان گونه که انتظار می رود باهم رابطه ی نزدیکی دارند، زیرا جریان های حرارتی و الکتریکی هر دو توسط یک عامل یعنی الکترون ها حمل می شوند.

عدد لورنتس برای فلزات گوناگون در جدول (۲-۴) لیست شده است. ملاحظه می شود مقادیر تجربی به مقادیر پیش بینی شده نزدیک اند. این که این سازگاری دقیق نیست ناشی از موارد زیر است:

الف) استفاده از مدل نسبتاً ساده الکترون آزاد

ب) ساده سازی در محاسبه ی ضرایب ترابری σ و k

یک بررسی دقیق تر نشان می دهد که در واقع L به فلز مورد بحث بستگی دارد.

۱۰-۴ حرکت در میدان مغناطیسی، تشدید سیکلوترونی و اثر هال

در اثر اعمال میدان مغناطیسی بر یک فلز پدیده های جالبی ایجاد می شود که ناشی از الکترون های رسانش اند. تشدید سیکلوترونی و اثر هال دو پدیده ای هستند که از آن ها برای بررسی خواص الکترون های ظرفیت استفاده می گردد.

تشدید سیکلو ترونی

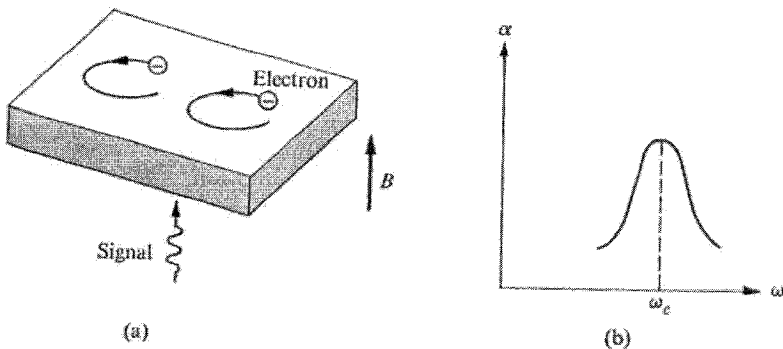
شکل (۱۰-۴) پدیده تشدید سیکلو ترونی را نشان می دهد. میدان مغناطیسی در یک بره ی مغناطیسی اعمال می گردد و الکترون ها را وادار می کند که در جهت پاد ساعت گرد در صفحه ای عمود بر میدان حرکت کنند. فرکانس این حرکت که به نام فرکانس سیکلو ترونی نامیده می شود با رابطه ی زیر بیان می گردد:

$$\omega_c = \frac{eB}{m^*} \quad (۴-۳۸)$$

اگر مقدار جرم الکترون آزاد را جایگزین کنیم خواهیم داشت:

$$\nu_c = \frac{\omega_c}{2\pi} = 2/8BGHz$$

که در آن B بر حسب کیلو گاوس است. برای $B = 1KG$ فرکانس سیکلو ترونی $\nu_c = 2/8GHZ$ است که در ناحیه ی میکرو موج است.



شکل ۱۰-۴ (الف) حرکت سیکلو ترونی، (ب) ضریب جذب α بر حسب ω

حال فرض می کنیم که یک سیگنال الکترومغناطیسی، همان طور که در شکل نشان داده شده است، در جهتی موازی با B از بره بگذرد. میدان الکتریکی سیگنال روی الکترون ها عمل می کند و مقداری از انرژی سیگنال جذب می گردد. آهنگ جذب وقتی بیشترین مقدار است که فرکانس سیگنال دقیقاً مساوی فرکانس سیکلو ترون باشد یعنی:

$$\omega = \omega_c \quad (۴-۳۹)$$

دلیل این امر این است که وقتی شرط فوق برقرار شد، هر الکترون در طول حلقه‌ی مسیر به طور هم زمان با موج حرکت می‌کند. بنابراین جذب انرژی در تمام مدتی که الکترون حلقه را دور می‌زند ادامه می‌یابد. پس معادله‌ی (۴-۳۹) شرط تشدید سیکلوترونی است. از طرف دیگر هنگامی که معادله‌ی (۴-۳۹) ارضاء نمی‌شود، الکترون تنها در یک جزئی از سیکل با موج هم فاز است و فقط در خلال این مدت الکترون از موج انرژی جذب می‌کند. در باقی مانده‌ی سیکل، الکترون با موج در فاز مخالف است و انرژی را به موج بر می‌گرداند. منحنی جذب به صورت تابعی از فرکانس در شکل (۱۰-۴ب) نشان داده شده است.^۱

تشدید سیکلوترونی عموماً برای اندازه‌گیری جرم الکترون در فلزات و نیمه رساناها استفاده می‌گردد. فرکانس سیکلوترونی از منحنی جذب تعیین می‌گردد و سپس این مقدار در رابطه‌ی ۳۸-۴ جای‌گزین می‌گردد تا جرم موثر محاسبه شود. دقت تعیین m^* به دقت اندازه‌گیری ω_c و B بستگی دارد. فرکانس سیکلوترونی ω_c را می‌توان خیلی دقیق تعیین کرد، به ویژه اگر از باریکه‌ی لیزر استفاده گردد. بنابراین دقت اندازه‌گیری m^* فقط محدود به دقت اندازه‌گیری میدان مغناطیسی و یک نواخت بودن در داخل نمونه می‌باشد.

اثر هال

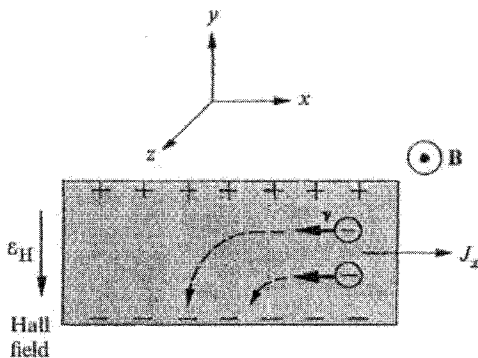
فرایند فیزیکی مربوط به اثر هال در شکل (۱۱-۴) نشان داده شده است. فرض کنید جریان الکتریکی J_x در سیمی در جهت محور x ها جریان یابد و میدان مغناطیسی B_z عمود بر سیم و در جهت محور z ها اعمال گردد. نشان خواهیم داد که این امر منجر به یک میدان الکتریکی اضافی، عمود بر هر دوی J_x و B_z می‌شود که در امتداد محور y ها است.

ابتدا موقعیت قبل از اعمال میدان مغناطیسی را بررسی می‌کنیم. یک جریان الکتریکی در امتداد مثبت محور x ها جریان می‌یابد که بدین معنی است که الکترونها با سرعت U در جهت

۱- اگر پیک منحنی جذب به وضوح قابل تشخیص باشد و فرکانس سیکلوترونی واقعاً تعیین گردد، شرط $1 \gg \omega_c \tau$ باید ارضاء گردد. این بدین معنی است که الکترون در فاصله‌ی زمانی بین دو برخورد متوالی چندین سیکل، سیکلوترونی انجام می‌دهد. اگر این شرط برقرار نباشد منحنی زمان برخورد آن چنان پهن خواهد بود که هیچ فرکانس یگانه‌ی ω_c قابل تشخیص نخواهد بود.

برای این که کمیت $\omega_c \tau$ تا حد ممکن بزرگ شود، باید با استفاده از یک میدان مغناطیسی قوی در حدود 50 KG فرکانس ω_c را افزایش داد. همین طور با سرد کردن نمونه تا حدود 10° K زمان برخورد را افزایش داد.

منفی محور x ها حرکت می کنند هنگامی که میدان مغناطیسی اعمال گردد، نیروی لورنتس $F = e(v \times B)$ سبب می شود، مسیر الکترون ها هم چنان که در شکل نشان داده شده است، به سمت پائین خم شود و در آن جا یک بار خالص منفی تولید گردد. به طور هم زمان یک بار خالص مثبت در سطح بالایی ظاهر می گردد. زیرا در آن جا کمبود الکترون وجود دارد. این ترکیب بارهای مثبت و منفی سطحی یک میدان الکتریکی به سمت پائین ایجاد می کند که میدان هال نامیده می شود.



شکل ۱۱-۴ منشأ میدان و اثر هال.

حال این میدان هال را محاسبه می کنیم نیروی لورنتس که سبب انباشت بار می شود در جهت محور y ها است و مقدار زیر را دارد:

$$F_L = ev_x B$$

که مطابق شکل علامت F_L منفی است. (یادآوری می کنیم که v_x به طرف چپ و منفی است). میدانی که توسط بارهای سطحی ایجاد می شود، نیروئی اعمال می کنند که با نیروی لورنتس مخالفت می کند. فرآیند انباشت بار تا آن جا ادامه می یابد که نیروی هال کاملاً نیروی لورنتس را خنثی کند. بنابراین در حالت پایا، $F_H = F_L$.

$$-e\varepsilon_H = -ev_x B \quad \text{یا} \quad \varepsilon_H = v_x B$$

که ε_H میدان هال است. مناسب تر است میدان هال بر حسب کمیت های قابل اندازه گیری بیان گردد. بدین منظور سرعت v_x بر حسب چگالی جریانی $J_x = N(-e)v_x$ بیان می شود. بدین ترتیب خواهیم داشت:

$$\varepsilon_H = -\frac{1}{Ne} J_x B \quad (۴-۴۰)$$

بنابراین میدان هال هم با جریان و هم با میدان مغناطیسی متناسب است. ضریب تناسب که مساوی عبارت $\frac{\varepsilon_H}{J_x B}$ می باشد به نام ثابت هال خوانده می شود و معمولاً با R_H بیان می شود. بدین ترتیب

$$R_H = -\frac{1}{Ne} \quad (۴-۴۱)$$

نتیجه (۴-۴۱) در عمل بسیار مفید است. از آن جا که R_H به طور معکوس با چگالی الکترونی N متناسب است، می توان با اندازه گیری میدان هال، N را تعیین کرد. در واقع این روش، تکنیک استاندارد برای تعیین چگالی الکترونی است. این تکنیک به ویژه بدین لحاظ ارزشمند است که R_H به غیر از N به تنها کمیتی که وابسته است، e - بار الکترون است که یک ثابت فیزیکی بنیادی است و مقدار آن با دقت زیاد معلوم است. ثابت های هال برای چند فاز متعارف در جدول ۳-۴ بیان گردیده است.

یک نکته ی مفید دیگر در مورد ثابت هال این است که علامت آن به علامت بار حامل های جریان بستگی دارد. پس ثابت هال برای الکترون ها که بار منفی دارند، منفی است. متقابلاً همان گونه که در فصل ۵-۴ ملاحظه خواهد شد، ضریب هال مربوط به رسانایی توسط حفره ها (که بار مثبت دارند) مثبت است^۱. بنابراین علامت R_H مبین علامت بارهای مربوطه است که به ویژه در نیمه رساناها حاوی اطلاعات بسیار با ارزشی است. مثلاً ثابت هال برای Cd و Zn مثبت است (جدول ۳-۴ را ملاحظه نمائید) و حاکی از این است که جریان در این مواد عمدتاً توسط حفره ها حمل می گردد.

جدول ۳-۴: ثابت های هال (بر حسب $Volt.m^3 / amp.weber$ در دمای اتاق)

Li	Na	Cu	Ag	Au	Zn	Cd	Al
$-1/7 \times 10^{-10}$	-۲/۵	-۰/۵۵	-۰/۸۴	-۰/۷۲	+۰/۳	+۰/۶	-۰/۳

۱- این حفره ها با حفره های فرمی که در بخش ۳-۴ ذکر شد متفاوتند. آن ها را در بخش ۱۷-۵ معرفی خواهیم کرد و در فصل ۶ در مبحث نیمه رساناها به تفصیل مورد بحث قرار می دهیم.

تحلیل فوق جنبه‌ی دیگری از فرایندهای ترابری در حضور میدان مغناطیسی را نشان می‌دهد. خود جریان الکتریکی در امتداد محور x ها جریان می‌یابد و تحت تأثیر میدان قرار نمی‌گیرد. بنابراین مقاومت الکتریکی مستقل از میدان مغناطیسی است. این نتیجه گرچه یک نتیجه منفی است، از این لحاظ که غیر منتظره است، جالب است. نیروی لورنتس که می‌خواهد بر Jx تأثیر گذارد، با نیروی هال خنثی می‌شود، به طوری که الکترون‌ها در نمونه در امتداد افقی جریان می‌یابند و از میدان متأثر نمی‌شوند.

۱۱-۴ رسانائی AC و خواص اپتیکی

در بخش ۴-۴ رسانائی الکتریکی استاتیک را مورد بحث قرار دادیم. حال رسانائی الکتریکی را در حضور یک جریان متناوب بررسی می‌کنیم. هم چنان که به زودی خواهیم دید در مرحله‌ی اول به خواص اپتیکی مربوط می‌شود. عبارت اپتیکی در اینجا تمام محدوده‌های فرکانسی را می‌پوشاند و فقط مربوط به محدوده‌ی نور مرئی نیست.

یک موج الکترومغناطیسی عرضی را در نظر بگیرید که در امتداد محور x ها انتشار می‌یابد و در امتداد محور y ها قطبیده است. میدان الکتریکی آن را می‌توان به صورت زیر بیان کرد:

$$\varepsilon_y = \varepsilon_0 e^{i(qx - \omega t)} \quad (4-42)$$

معادله‌ی حرکت یک الکترون رسانش در حضور این میدان ac شبیه معادله‌ی (۶-۴) است که از حل حالت پایا به دست آمد:

$$v_y = -\frac{e\tau}{m^*} \frac{1}{1 - i\omega\tau} \varepsilon \quad (4-43)$$

چگالی جریان $J_y = N(-e)v_y$ است که با توجه به معادله‌ی (۴-۴۳) به رسانائی ac منجر می‌گردد:

$$\tilde{\sigma} = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau} \quad (4-44)$$

که $\sigma_0 = Ne^2\tau/m^*$ همان رسانائی استاتیک است. حالا رسانائی یک کمیت مختلف است $\tilde{\sigma} = \sigma' + i\sigma''$ که جزء حقیقی و جزء موهومی آن عبارت است از:

$$\sigma' = \frac{\sigma_0}{1 + \omega^2 \tau^2} \quad \sigma'' = \frac{\sigma_0 \omega \tau}{1 + \omega^2 \tau^2} \quad (4-45)$$

جزء حقیقی σ' نمایان گر جریان هم فاز است که گرمای ژول مقاومتی را تولید می کند. در حالی که σ'' نمایان گر جریان القائی با اختلاف فاز $\pi/2$ است. اندازه گیری از σ' و σ'' به صورت تابعی از فرکانس نشان می دهد که در ناحیه ی فرکانس های پائین $1 \ll \omega\tau$ و $\sigma' \ll \sigma''$ یعنی الکترون ها اساساً یک مشخصه ی مقاومتی از خود بروز می دهند. از آن جا که $\tau \approx 10^{-14} s$ ، این فرکانس تمام محدوده ی فرکانسی تا انتهای ناحیه ی فرسرخ را می پوشاند. در ناحیه فرکانس های بالا ($1 \ll \omega\tau$) که متناظر با نواحی نور مرئی و فرابنفش است، $\sigma' \ll \sigma''$ و الکترون های اساساً مشخصه ی القائی از خود بروز می دهند. در این ناحیه هیچ گونه انرژی ای از میدان جذب نمی شود و هیچ گرمای ژولی ظاهر نمی گردد.

حال به واکنش ها از یک دیدگاه دیگر می پردازیم. از معادله ی ماکسول داریم که:

$$\nabla \times H = \epsilon_L \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + J \quad (4-46)$$

که اولین جمله در طرف راست نمایان گر جریان القائی متناظر با قطبش مغزهای یونی است (زیر نویس L برای شبکه است). جمله دوم J جریان همرفت الکترون های رسانش می باشد. می توانیم این دو جریان را با هم دیگر تلفیق کنیم؛ با نوشتن:

$$J = \tilde{\sigma} \mathcal{E} = (\tilde{\sigma} - i\omega) \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t}$$

برای یک میدان ac معادله ی (4-46) را به صورت زیر بازنویسی می کنیم:

$$\nabla \times H = \tilde{\epsilon} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} \quad (4-47)$$

که $\tilde{\epsilon}$ ثابت دی الکتریک کل است؛

$$\tilde{\epsilon} = \epsilon_L + i \frac{\tilde{\sigma}}{\omega} \quad (4-48)$$

حال به الکترون های رسانش به عنوان جزئی از محیط دی الکتریک می نگریم که امری غیر واقعی نیست. این الکترون ها اطراف مکان های تعادل خود بدون یک حرکت انتقالی خالص نوسان می کنند. با جای گزینی $\tilde{\sigma}$ از رابطه ی (4-45) در رابطه ی (4-48) برای ثابت دی الکتریک نسبی

$$\tilde{\epsilon}_r = \frac{\tilde{\epsilon}}{\epsilon_0}$$

خواهیم داشت:

$$\tilde{\epsilon}_r = \epsilon'_r + i \epsilon''_r = \left(\epsilon_{L,r} - \frac{\sigma_0 \tau}{\epsilon_0 (1 + \omega^2 \tau^2)} \right) + i \frac{\sigma_0}{\epsilon_0 \omega (1 + \omega^2 \tau^2)} \quad (۴-۴۹)$$

ضریب شکست مختلط محیط \hat{n} به صورت زیر تعریف می شود:

$$\hat{n} = \tilde{\epsilon}_r^{1/2} = n + ik \quad (۴-۵۰)$$

که n ضریب شکست معمولی و k ضریب خاموشی^۱ است. در آزمایش های اپتیکی، معمولاً n و k را مستقیماً اندازه نمی گیریم، بلکه بازتاب R و ضریب جدی α را اندازه گیری می کنیم. می توان نشان داد^۲ که این کمیت ها به n و k به شکل عبارت های زیر بستگی دارند:

$$R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (۴-۵۱)$$

$$\alpha = \frac{2\omega}{c} K \quad (۴-۵۲)$$

که c سرعت نور در خلاء است. معادلات (۴-۴۹) تا (۴-۵۲) رفتار الکترون ها در محدوده ی کامل فرکانس ها را توصیف می کنند ولی مفاهیم فیزیکی آن ها را توسط مطالعه ی رفتار خاص آن ها در محدوده ی گوناگون فرکانسی بهتر می توان درک کرد.

الف) ناحیه ی فرکانس های کوتاه $\omega\tau \ll 1$. معادلات فوق نشان می دهند که در این ناحیه ϵ_r به مقدار موهومی $\epsilon_r \cong i$ تبدیل می شود و بنابراین:

$$|n| \cong |k| = \left(\frac{\epsilon''_r}{2} \right)^{1/2} = \left(\frac{\sigma_0}{2\epsilon_0 \omega} \right)^{1/2} \quad (۴-۵۳)$$

عکس ضریب جذب، $\alpha = 1/\delta$ عمق پوست^۳ نامیده می شود. [یادآوری می کنیم که باریکه ی نوری در یک محیط قبل از اینکه ناپدید گردد را می توان توسط شدت $I = I_0 e^{-\alpha x}$ و عمق نفوذ $1/\alpha$ اندازه گیری کرد]. حال δ را محاسبه می کنیم:

$$\delta = \left(\frac{\epsilon_0 c^2}{2\sigma_0 \omega} \right)^{1/2} \quad (۴-۵۴)$$

1. extinction coefficient

۲- به هر کتاب درستی اپتیک می توانید مراجعه کنید. هم چنین توجه کنید که معادله ی (۵-۵۲) بازتاب در تابش عمودی را بیان می کند.

3. skin depth

عملاً δ خیلی کوچک است (برای Cu در $\omega = 10^9 \text{ s}^{-1}$, $\delta = 10^{-10} \mu$), و بنابراین یک باریکه‌ی نوری که به یک نمونه‌ی فلزی برخورد می‌کند فقط به اندازه‌ی فاصله‌ی کوتاهی در زیر سطح نفوذ می‌کند.

(ب) ناحیه‌ی فرکانس‌های بلند $\omega \tau \gg 1$. این ناحیه نور مرئی و فرابنفش را می‌پوشاند. معادله‌ی (۴-۴۹) نشان می‌دهد که $\hat{\epsilon}_r$ به یک مقدار حقیقی تحویل می‌گردد؛

$$\epsilon_r = \epsilon_{L,r} \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right) \quad (4-55)$$

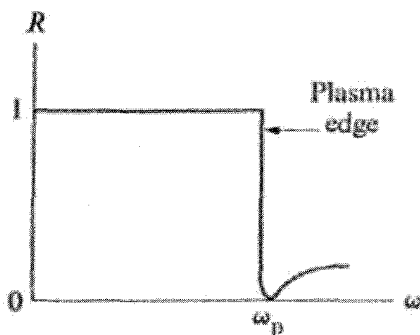
که:

$$\omega_p^2 = \frac{Ne^2}{\epsilon_L m^*} \quad (4-56)$$

که از رابطه‌ی $\sigma_0 = ne^2 \tau / m^*$ استفاده کرده‌ایم. فرکانس ω_p فرکانس پلاسما نامیده می‌شود. موارد استفاده از آن به زودی بیان می‌گردد. از معادله‌ی (۴-۵۵) می‌توان ملاحظه نمود که ناحیه‌ی فرکانس‌های بالا حالا به دو ناحیه تقسیم می‌شوند:

(۱) ناحیه‌ی $\omega < \omega_p$, $\epsilon_r < 0$ است که با توجه به رابطه‌ی (۴-۵۰)، n مساوی صفر و با توجه به رابطه‌ی (۴-۵۱)، R مساوی یک می‌شود. یعنی فلز بازتاب کامل انجام می‌دهد.

(۲) ناحیه‌ی $\omega > \omega_p$, $\epsilon_r < 0$ است که به دلیل مشابه $k = 0$ می‌شود. بنابراین در این ناحیه $\alpha = 0$ و $0 < R < 1$ و محیط فلزی به منزله‌ی یک دی‌الکتریک شفاف غیر جذب کننده مثل شیشه عمل می‌کند.



شکل ۴-۱۲ لبه‌ی بازتاب پلاسما.

شکل (۴-۱۲) بستگی بازتاب به فرکانس را نشان می دهد و یک سقوط شدید و ناپیوسته در R در $\omega = \omega_p$ ملاحظه می شود که لبه ی بازتاب پلاسما نامیده می شود. فرکانس ω_p هم چنان که از رابطه ی (۴-۵۶) ملاحظه می شود متناسب با چگالی الکترونی N می باشد. در فلزات چگالی ها آن چنان اند که ω_p در ناحیه ی فرکانسی بلند مرئی یا ناحیه ی فرابنفش قرار می گیرد (جدول ۴-۴ را ملاحظه کنید)

جدول ۴-۴: لبه ی بازتاب (فرکانس ها پلاسما) و طول موج های مربوطه برای بعض از فلزات

	Li	Na	k	Rb
ω_p	$1/22 \times 10^{16} \text{ s}^{-1}$	$0/89$	$0/593$	$0/55$
λ_p	1550 \AA	2100 \AA	3150 \AA	3400 \AA

یک خاصیت مهم دیگر ω_p را می توان از معادلات ماکسول استخراج کرد.

$$\nabla \cdot D = \epsilon \nabla \cdot \epsilon = 0 \quad (4-57)$$

که $D = \epsilon \epsilon$ میدان جابه جایی الکتریکی است (از آن جا که الکترون های رسانش در بررسی رفتار دی الکتریک منظور شده اند، بار آزاد مساوی صفر در نظر گرفته شده است). این معادله حاکی از وجود یک مد طولی است، به طوری که $\nabla \cdot \epsilon \neq 0$ به شرطی که فقط؛

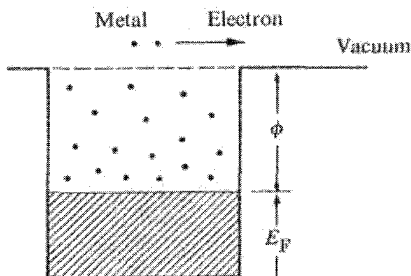
$$\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r = 0 \quad (4-58)$$

از رابطه ی (۴-۵۵) می توان ملاحظه کرد که ϵ_r تنها در $\omega = \omega_p$ صفر می شود. این مد که به نام مد پلاسما خوانده می شود در فلزات مشاهده شده است و در دهه های ۱۹۵۰ و ۱۹۶۰ میلادی توجه زیادی به خود معطوف داشته است.

از دو مولفه ی ثابت دی الکتریک، جز حقیقی ϵ_r' مسئول قطبش بارهای القا شده توسط میدان و ϵ_r'' مسئول جذب انرژی توسط سیستم است. می توانیم این را از معادلات (۴-۴۸) و (۴-۴۹) ملاحظه نمائیم، زیرا این معادلات دلالت بر این دارند که $\epsilon'' \sim \sigma'$ و هم چنان که قبلاً در این بخش اشاره شد کمیت اخیر به جذب انرژی مربوط می شود.

۱۲-۴ گسیل گرمایونی

وقتی فلزی را گرما دهیم الکترون ها از سطح آن گسیل می یابند. این پدیده به نام گسیل گرمایونی موسوم است. این خاصیت در لوله های خلاء به کار می رود. در این لوله معمولاً کاتد فلزی گرم می شود تا الکترون های مورد نیاز لوله ی خلاء تامین گردند.



شکل ۱۳-۴ گسیل گرمایونی.

شکل ۱۳-۴ تراز انرژی الکترون ها در فلزات را بر مبنای مدل الکترون آزاد نشان می دهد. در $T = 0^\circ \text{K}$ تمام ترازها تا تراز فرمی E_F پر هستند، و بالای آن تمام ترازها خالی هستند. به دلیل وجود یک سد انرژی در سطح، الکترون نمی تواند از فلز فرار کند. ارتفاع این سد انرژی با ϕ نشان داده می شود و تابع کار خوانده می شود. تابع کار از یک فلز به فلز دیگر تغییر می کند، ولی عموماً در ناحیه $5\text{ eV} - 1/5\text{ eV}$ قرار می گیرد.

در دمای $T = 0^\circ \text{K}$ هیچ الکترونی نمی تواند از فلز فرار کند، ولی با افزایش دما به دلیل انتقال الکترون ها از پائین E_F ، ترازهای بالای E_F شروع به اشغال شدن می کنند. حتی ترازهای بالای سد، که انرژی های بالاتر از $(E_F + \phi)$ دارند تا حدودی اشغال می شوند. الکترون های این ترازهای اخیر، حالا به اندازه ی کافی انرژی دارند که بر این سد غلبه کنند و این همان الکترون هائی هستند که از سطح فلز گسیل می شوند.

حال با فرض این که سطح فلز عمود بر محور x ها است چگالی جریان را برای الکترون های گسیل یافته محاسبه می کنیم. تعداد الکترون هائی را در نظر می گیریم که مؤلفه های سرعت آنها بین مقادیر (v_x, v_y, v_z) و $(v_x + dv_x, v_y + dv_y, v_z + dv_z)$ قرار می گیرند. چگالی این الکترون ها با رابطه ی زیر بیان می گردد:

$$d^r N = N \left(\frac{m^*}{2\pi kT} \right)^{r/2} e^{-m^*(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)/2kT} dv_x dv_y dv_z \quad (4-59)$$

از توزیع ماکسول - بولتزمن استفاده کرده‌ایم زیرا الکترون هائی که در فرآیند گسیل وارد می‌شوند، همگی آن قدر بالای تراز فرمی هستند که می‌توان با دقت خیلی زیادی آن‌ها را با توزیع ماکسول - بولتزمن توصیف کرد (بخش ۶-۴). چگالی جریان گسیل یافته مربوط به این الکترون‌ها با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود:

$$dJ_x = -e v_x d^r N \quad (4-60)$$

در نوشتن این رابطه از همان روشی پیروی شده است که در رابطه‌ی ۸-۴ به کار رفته است. برای یافتن چگالی جریان مربوط به همه‌ی الکترون‌ها باید عمل جمع را روی تمام سرعت‌های مربوط انجام دهیم. بنابراین:

$$J_x = \int dJ_x = -eN \left(\frac{m^*}{2\pi kT} \right)^{r/2} \iiint v_x e^{-m^*(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)/2kT} dv_x dv_y dv_z$$

وقتی این انتگرال را روی تمام سرعت‌ها انجام دهیم دامنه‌ی سرعت‌های v_y و v_z هر دو $(-\infty, +\infty)$ است، ولی دامنه‌ی v_x چنان است که $\frac{1}{2} m^* v_x^2 \geq E_F + \phi$. زیرا فقط این الکترون‌ها در جهت مربوطه به اندازه کافی سرعت دارند که بتوانند از سطح فرار کنند بنابراین داریم:

$$J_x = -eN \left(\frac{m^*}{2\pi kT} \right)^{r/2} \int v_x e^{-m^* v_x^2 / 2kT} dv_x$$

که $v_{x0} = [2(E_F + \phi)m^*]^{1/2}$. نتیجه‌ی انتگرال فوق به سادگی رابطه‌ی زیر منجر خواهد شد:

$$J_x = A T^r e^{-\phi/KT} \quad (4-61)$$

که $A = m^* e k^r / 2\pi^r \hbar^r$ مقدار عددی A مساوی $120 \text{ amp/cm}^2 \cdot \text{K}^r$ است. رابطه‌ی (۴-۶۱) به نام معادله‌ی ریچاردسون - داشمن^۱ معروف است و با تجربه سازگاری خوبی دارد. این رابطه نشان می‌دهد که چگالی جریان خیلی سریع با دما افزایش می‌یابد. از آن جا که برای محدوده‌ی

معمولی دما $kT \gg \phi$ است چگالی جریان اساساً به طور نمائی با دما افزایش می‌یابد. جدول (۴-۵) تابع کار را برای بعضی از فلزات آن گونه که توسط اندازه گیری های گسیل گرما یونی تعیین شده است بیان می‌دارد.

جدول ۴-۵: توابع کار بر حسب eV

w	Ta	Ni	Ag	Cs	Pt
۴/۵	۴/۲	۴/۶	۴/۸	۱/۸	۵/۳

۱۳-۴ شکست مدل الکترون آزاد

مدل الکترون آزاد را به تفصیل بررسی کردیم تا نشان دهیم که تا چه اندازه این مدل در توجیه خواص مشاهده‌ی فلزات ارزشمند است. ولی این مدل فقط یک مدل تقریبی است و دارای محدودیت‌هایی است. نارسائی‌های مدل الکترون آزاد به قرار زیرند:

الف) این مدل پیشنهاد می‌کند که اگر کمیت‌های دیگر مساوی باشند، رسانائی الکتریکی بر طبق رابطه‌ی (۴-۹) با چگالی الکترونی متناسب است. نتیجه گیری معینی از داده های جدول (۴-۱) نمی‌توان داشت، چرا که کمیت‌های دیگر فرمول که بر حسب σ تعیین می‌گردند را نمی‌دانیم. ولی موجب تعجب است که فلزات دو ظرفیتی (Zn, Cd, Be) و غیره) و حتی فلزات سه ظرفیتی (Al, In) به طور قابل ملاحظه‌ای از فلزات یک ظرفیتی (Au, Ag, Cu) رسانائی کمتری دارند و این به رغم این واقعیت است که فلزات دو یا سه ظرفیتی چگالی‌های الکترونی بیشتری دارند.

ب) ضربه‌ی کوبنده تر بر این مدل از این واقعیت ناشی می‌شود که ثابت هال بعضی از فلزات مانند Cd, Zn, De مثبت است (جدول ۳-۴ را ملاحظه نمائید). مدل الکترون آزاد همیشه یک ضریب هال منفی پیش بینی می‌کند.

ج) اندازه گیری‌های سطح فرمی دلالت بر این دارد که شکل این سطح اغلب غیر کروی است (بخش ۱۲-۵) این مطلب با مدل الکترون آزاد که یک سطح فرمی کروی را پیش بینی می‌کند در تناقض است.

این مشکلات و مشکلات دیگری که در این جا نیاز به ذکر آن‌ها نیست را می‌توان توسط یک تئوری جامع‌تر که بر هم کنش الکترون‌ها با شبکه را نیز به حساب می‌آورد بر طرف کرد. ما بررسی این موضوع را به فصل بعد وا می‌گذاریم.

خلاصه

الکترون های رسانش

هنگامی که اتم ها در کنار هم قرار می گیرند تا یک فلز را تشکیل بدهند، الکترون های ظرفیت از اتم های خود جدا می شوند و در میان بلور حرکت می کنند. این الکترون های جای گزین شده الکترون های ظرفیت هستند. چگالی آن ها توسط رابطه ی زیر بیان می شوند:

$$N = Z_v \frac{\rho_m N_A}{M_{\text{mol}}}$$

که Z_v ظرفیت اتمی است و نمادهای دیگر معنی معمولی خود را دارند.

رسانائی الکتریکی

رسانائی الکتریکی الکترون های رسانش که به عنوان ذرات آزاد با یک زمان برخورد τ در نظر گرفته می شوند برابر است با:

$$\sigma = \frac{Ne^2\tau}{m^*}$$

مقایسه ی این نتیجه با مقادیر تجربی نشان می دهد که زمان برخورد فوق العاده کوتاه و در دمای اتاق از مرتبه ی 10^{-14} s است. وقتی زمان برخورد محاسبه شود معلوم می شود که یک شبکه ی کامل هیچ گونه پراکندگی ایجاد نمی کند. فقط ارتعاشات شبکه یا ناکاملی ها ایجاد پراکندگی می کنند. با بررسی ارتعاشات شبکه و ناخالصی های استاتیکی در بلور به عنوان مکانیسم های مستقل برخورد در می یابیم که مقاومت ویژه ی ρ برابر است با:

$$\rho = \rho_{\text{ph}}(T) + \rho_i$$

که $\rho_{\text{ph}} \sim T$ مقاومت ویژه مربوط به برخوردها است که توسط ارتعاشات شبکه یا فونون ها ایجاد می شود و ρ_i مقاومت ویژه باقی مانده مربوط به برخورد الکترون ها با ناخالصی ها درون بلور.

رسانائی حرارتی

رسانائی حرارتی فلزات با عبارت زیر بیان می گردد.

$$K = LT\sigma$$

که L مقدار ثابتی است که عدد لورنتس نامیده می شود؛

$$L = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k}{e} \right)^2$$

ظرفیت گرمایی

آزمایش نشان می دهد که ظرفیت گرمایی الکترون های رسانش خیلی کمتر از مقداری است که توسط مکانیک آماری کلاسیک پیش بینی می شود. این نکته بر مبنای اصل طرد پائولی توضیح داده می شود. تمام ترازهای انرژی تا تراز فرمی اشغال می شوند و وقتی به سیستم گرما داده می شود تنها الکترون های نزدیک تراز فرمی تحریک می شوند. ظرفیت حرارتی الکترون بر مول برابر است با:

$$C_e = \frac{\pi^2}{2} R \frac{kT}{E_F}$$

انرژی فرمی

انرژی فرمی توسط چگالی الکترون ها تعیین می گردد و مقدار آن برابر است با:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\pi^2 N)^{2/3}$$

تشدید سیکلوترونی

وقتی یک میدان مغناطیسی به جسم جامدی اعمال گردد، الکترون ها حرکت سیکلوترونی دایروی انجام می دهند. فرکانس سیکلوترونی برابر است با:

$$\omega_c = \frac{eB}{m^*}$$

و با اندازه گیری آن می توان جرم موثر الکترون را اندازه گرفت. وقتی یک میدان مغناطیسی به یک سیم حامل جریان اعمال گردد، یک میدان الکتریکی که هم بر جریان و هم بر میدان عمود است ایجاد می گردد. این میدان الکتریکی یا میدان هال برابر است با:

$$\mathcal{E}_H = RBJ$$

که R_H ثابت هال برابر است با :

$$R_H = -\frac{1}{Ne}$$

با اندازه گیری R ، چگالی الکترونی N بدست می آید.

خواص اپتیکی

رسانائی مختلط الکترون های رسانش مساوی است با :

$$\tilde{\sigma} = \frac{\sigma_0}{1 + i\omega\tau}$$

که σ_0 رسانائی استاتیکی است. شکل $\tilde{\sigma}$ نمایان گر این است که رسانش الکترون ها دارای مشخصه ی مقاومتی - القائی (مخلوطی از آن) می باشد. در ناحیه ی فرکانس های کوتاه که $\omega < 1/\tau$ مشخصه ی مقاومتی غالب است، در حالی که در فرکانس های بلند که $\omega > 1/\tau$ است، مشخصه ی القائی غالب می باشد. چون τ خیلی کوچک است، ناحیه ی فرکانس های کوتاه شامل فرکانس های تا انتهای ناحیه ی میکرو موج نیز می باشد.

ثابت دی الکتریک برای کل بلور، که شامل هم شبکه و هم الکترون ها می باشد عبارت است از:

$$\tilde{\epsilon}(\omega) = \epsilon_l + \frac{i\tilde{\sigma}}{\omega}$$

وقتی ثابت دی الکتریک معلوم شد، می توان خواص جذبی و بازتابی بلور را تعیین کرد. نواحی فرکانس های زیر را می توان از هم تفکیک کرد.

الف) ناحیه ی فرکانس های پائین، $\omega \ll 1/\tau$ موج به ناحیه ی کوچکی از فلز نفوذ می کند که به نام عمق پوست معروف است، و مقدار آن چنین است:

$$\delta = \left(\frac{2\epsilon_0 c^2}{\sigma_0 \omega} \right)^{1/2}$$

باز تاب در این محدوده ی فرکانسی خیلی نزدیک به واحد است.

ب) ناحیه ی فرکانسی میانی $\tau < \omega < \omega_p$ موج در این ناحیه میرا است و فلز بازتاب کامل انجام می دهد.

ج) ناحیه‌ی فرکانس‌های بلند $\omega_p < \omega$ در این ناحیه فلز مانند یک دی‌الکتریک معمولی عمل می‌کند که موج از میان آن بدون تضعیف عبور می‌کند.

مد پلاسما

این مد مربوط به نوسان طولی سیسم الکترونی است. فرکانس آن مساوی فرکانس پلاسما

$$\omega_p = \left(\frac{Ne^2}{\epsilon_L m^*} \right)^{1/2} \text{ است.}$$

گسیل گرمایونی

وقتی به یک فلز گرما داده شود، تعدادی از الکترون‌ها که در انتهای توزیع فرمی قرار دارند انرژی کافی برای فرار از سطح فلز را کسب می‌کنند. چگالی جریان گرمایونی مساوی است با:

$$J = AT^2 e^{-\phi/KT}$$

که A یک مقدار ثابت و ϕ تابع کار فلز است.

References

Transport properties

There are a great many references which treat the transport properties of metals in considerable detail. Among these are the following.

- F. J. Blatt, 1968, *Physics of Electron Conduction in Solids*, New York: McGraw - Hill
- B. Donovan, 1967, *Elementary Theory of Metals*, New York: Pergamon Press
- N. F. Mott and H. Jones; 1958, *Theory of the Properties of Metals and alloys*, New York: Dover Press
- H. M. Rosenberg, 1963, *Low – Temperature Solid State Physics*, Oxford: Oxford University Press
- F. Seitz. 1940, *Modern Theory of Solids*, New York: Mc Graw-Hill
- J. M. Ziman, 1960, *Electrons and Phonons*, Oxford: Oxford University Press

Optical Properties

- B. Donovan, *op , cit*
- F. Stern," *Elemental Theory of Optical Properties' of Metals" Solid State Physics*, 15, 1963

- ۱- تفاوت بین الکترون‌های جای گزین شده و جای گزین نشده را در جامدات توضیح دهید. یک روش تجربی برای تعیین تفاوت بین این دو نوع الکترون را توصیف کنید.
- ۲- در متن درس گفته شد که الکترون‌های رسانش را بهتر از گازهای معمولی می‌توان به عنوان یک پلاسما در نظر گرفت. برچه مبنائی یک پلاسما با یک گاز تفاوت دارد؟
- ۳- مراحل را دنبال کنید که نشان می‌دهد جریان الکتریکی الکترون‌ها، در همان جهت میدان است، گرچه بار این ذرات منفی است.
- ۴- با فرض این که الکترون‌های رسانش در Cu یک گاز کلاسیک اند، مقدار rms سرعت الکترون‌ها را محاسبه نمائید و مقدار بدست آمده را با سرعت فرمی مقایسه نمائید. (مساله ۱ را ملاحظه کنید)
- ۵- توضیح دهید چرا الکترون‌ها در حالت رسانائی حرارتی یک انرژی خالص را حمل می‌کنند ولی یک بار خالص حمل نمی‌نمایند؟
- ۶- نشان دهید که اگر سرعت کاتوره ای الکترون‌ها مربوط به حرکت حرارتی یک گاز الکترون کلاسیک بود، مقاومت گرمائی باید با دما به صورت $T^{3/2}$ افزایش یابد.
- ۷- در آزمایش تشدید سیکلوترونی قسمتی از سیگنال توسط الکترون‌ها جذب می‌شود وقتی سیستم در وضعیت حالت پایا است، انرژی این الکترون‌ها چه می‌شود.
- ۸- به طور کیفی توضیح دهید که چرا ثابت هال R_H به طور معکوس با چگالی الکترونی N متناسب است؟
- ۹- به طور کیفی نشان دهید که ثابت هال R_H برای جریانی از بارهای مثبت، مثبت است؟
- ۱۰- معادله ی (۴-۵۴) نشان می‌دهد که عمق پوست σ در فرکانس صفر بی نهایت می‌شود این نتیجه را تفسیر کنید.
- ۱۱- تغییرات عمق پوست را با دما توصیف کنید.
- ۱۲- مطابق بحثی که در بخش ۱۱-۴ ارائه شد، الکترون‌های آزاد یک سهم منفی در ثابت دی الکتریک دارند، ولی الکترون‌های مقید یک سهم مثبت دارند. این تفاوت در رفتار الکترونی را توضیح دهید.

مسائل

۱- جرم حجمی مس $\rho_m = 8/95 \text{ g/cm}^3$ و مقاومت آن در دمای اتاق $\rho = 1/55 \times 10^{-8} \text{ ohm-m}$ است. با فرض اینکه جرم موثر الکترون $m^* = m_0$ باشد، کمیت‌های زیر را محاسبه نمایید:

الف) چگالی الکترون‌های رسانش

ب) عمر آزاد متوسط

ج) انرژی فرمی E_F

د) سرعت فرمی v_F

ه) پویش آزاد میانگین در تراز فرمی $15 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$

۲- معادله ی (۱۹-۴) را برای پویش آزاد میانگین به دست آورید.

۳) مقاومت ویژه ی باقی مانده برای یک درصد اتمی از ناخالصی‌های As در مس مساوی $\rho = 6/8 \times 10^{-8} \text{ ohm-m}$ است. سطح مقطع پراکندگی یک الکترون توسط یک اتم ناخالصی As در Cu را محاسبه نمایید.

۴- ضریب انبساط حجمی سدیم $15 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ است. درصد تغییر در انرژی فرمی E_F هنگامی که دما از $T = 0^\circ \text{K}$ به 300°K افزایش می‌یابد را محاسبه نمایید. راجع به بزرگی این تغییر بحث کنید.

۵- مسئله ۴ را برای نقره که ضریب انبساط حجمی آن $18/6 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ است را تکرار نمایید.

۶- دمای فرمی T_F را برای Na, Cu و Ag حساب کنید. هم چنین نسبت T/T_F در دمای $T = 300^\circ \text{K}$ را در هر مورد حساب کنید. جرم‌های موثر Na و Cu به ترتیب ۱ و ۱/۲ برابر m_0 است.

۷- تخمین بزنید که چه کسری از الکترون‌های Na و Cu در دمای اتاق در بالای تراز فرمی تحریک شده‌اند؟

۸- نسبت ظرفیت گرمایی الکترون به ظرفیت گرمایی شبکه را برای Cu در دماهای 4° ، 3° ، 20° ، 77° و 300°K محاسبه نمایید. ظرفیت گرمایی شبکه در مس در شکل ۱۰-۳ داده شده است.

۹- تابع فرمی دایرک $f(E)$ را بر حسب نسبت انرژی E/E_F در دمای اتاق $T = 300^\circ K$ رسم کنید. (فرض کنید که E_F از دما مستقل است). اگر $E_F = 5eV$ باشد، مقادیر انرژی را در $0/95$ و $0/9$ و $0/7$ و $0/5$ تعیین کنید.

۱۰- تشدید سیکلوترونی در Cu در فرکانس $24GHz$ مشاهده شده است. اگر جرم موثر Cu $m^* = m$ باشد، مقدار میدان مغناطیسی به کار رفته چه قدر است؟

۱۱- با استفاده از جدول ۴-۴ که ثابت هال را بیان می کند، چگالی های الکترونی در Cu, Na, Cd, Al, In, و Zn را محاسبه نمایید. این نتایج را با آن چه که در جدول ۴-۱ داده شده است مقایسه کنید.

۱۲- الف) با استفاده از مقادیر مناسب σ_0, ϵ_{LF} برای Ag در دمای اتاق، ضریب شرکت n و ضریب خاموشی k را برای Ag محاسبه نمایید و این مقادیر را بر حسب ω در یک مقیاس لگاریتمی رسم کنید.

ب) بازتاب اپتیکی را محاسبه نمایید و آن را بر حسب ω رسم نمایید. (داده های مربوط به Ag در جدول ۴-۱ هست). مقادیر ω را ممکن است به ناحیه ی $\omega < 10^{16} s^{-1}$ مقید کرد.

۱۳- عمق پوست را برای Cu در دمای اتاق محاسبه نمایید و نتایج را بر حسب فرکانس در یک مقیاس لگاریتمی رسم کنید. (داده های مربوط در جدول ۴-۱ هست). ω را می توان به مقادیر $\omega < 10^{13} s^{-1}$ محدود کرد.

۱۴- انتگرالی را که منجر به رابطه ی ۴-۶۱ می شود انجام دهید.

۱۵- چگالی جریان گسیل گرمایونی را برای Cs در دماهای $500^\circ K, 1000^\circ K, 1500^\circ K$ و $2000^\circ K$ محاسبه نمایید.

فصل پنجم

فلزات II: نوارهای انرژی در جامدات

- ۵-۱ مقدمه
- ۵-۲ طیف انرژی در اتم ها، مولکول و جامدات
- ۵-۳ نوارهای انرژی در جامدات؛ قضیه بلوخ
- ۵-۴ تقارن نواری در فضای k ؛ مناطق بریلیون
- ۵-۵ تعداد حالت ها در نوار
- ۵-۶ مدل الکترون تقریباً آزاد
- ۵-۷ گاف انرژی و بازتاب براگ
- ۵-۸ مدل بستگی قوی
- ۵-۹ محاسبه نوارهای انرژی
- ۵-۱۰ فلزات، عایق ها و نیمه رساناها
- ۵-۱۱ چگالی حالت ها
- ۵-۱۲ سطح فرمی
- ۵-۱۳ سرعت الکترون بلوخ
- ۵-۱۴ دینامیک الکترون در یک میدان الکتریکی
- ۵-۱۵ جرم موثر دینامیکی
- ۵-۱۶ اندازه حرکت، اندازه حرکت بلور، مبداء فیزیکی جرم مؤثر
- ۵-۱۷ حفره
- ۵-۱۸ رسانائی الکتریکی
- ۵-۱۹ دینامیک الکترون در یک میدان مغناطیسی: تشدید سیکلوترونی و اثر هال
- ۵-۲۰ روش های تجربی در تعیین ساختار نوار
- ۵-۲۱ محدودیت های نظریه ی نوار، گذار فلز- عایق

در فصل چهار با استفاده از مدل الکترون آزاد راجع به حرکت الکترون ها در جامدات صحبت کردیم. این مدل بیش از حد ساده شده است، چرا که پتانسیل بلور را نادیده انگاشتیم. اگر بخواهیم نتایج تجربی را به طور کمی توجیه کنیم، نمی توان از این پتانسیل کاملاً صرف نظر کرد. علاوه بر آن، هم چنان که در پایان فصل چهار اشاره شد بدون منظور کردن این پتانسیل بعضی از پدیده ها را کلاً نمی توان توجیه کرد. بنابراین در این فصل تأثیر پتانسیل بلور بر خواص الکترونی جامدات را بررسی می کنیم.

در اولین بخش این فصل طیف انرژی یک الکترون درون یک بلور را بررسی خواهیم کرد و خواهیم دید که این طیف از نوارهای پیوسته تشکیل یافته است و این بر خلاف حالت مربوط به اتم ها است که طیف آن ها مجموعه ای از ترازهای گسسته است. راجع به خواص و توابع موج این نوارها به تفصیل بحث خواهیم کرد و ملاکی برای تمایز بین فلزات و نارساناها در مدل نواری به دست خواهیم آورد. سپس به چگالی حالت ها و سطح فرمی می پردازیم که به عنوان شاخص های مفیدی در جامدات عمل می کنند.

الکترون ها درون یک بلور پیوسته در حالت حرکت اند. فرمول هایی برای محاسبه ی سرعت الکترون و جرم مؤثر آن به دست خواهیم آورد. تأثیر اعمال یک میدان الکتریکی روی حرکت الکترون را مطالعه خواهیم کرد و عبارتی برای رسانایی الکتریکی الکترون به دست خواهیم آورد. گرچه این عبارت به همان عبارتی که قبلاً در فصل ۴ و تحت شرایط تقریبی به دست آوردیم، تحویل می شود ولی روشی که در این جا بررسی می کنیم عمومی تر است و در آن عامل های فیزیکی واضح تری بر رسانایی الکتریکی اثر می گذارند.

فرکانس سیکلوترونی و اثر هال نیز مجدداً مورد توجه قرار می گیرند و نشان می دهیم چگونه می توان از این پدیده ها برای به دست آوردن اطلاعاتی در مورد یک جسم جامد استفاده کرد.

بخش آخر راجع به محدودیت های مدل نوار انرژی و گذار فلز - رسانا بحث می کند.

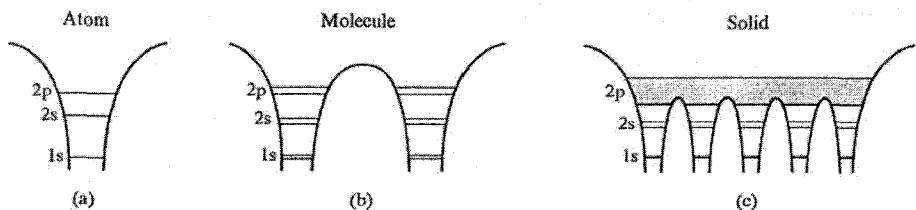
۲-۵ طیف انرژی در اتم ها، مولکول و جامدات

هدف اولیه ی این بخش توصیف کیفی طیف انرژی الکترونی است که درون یک جامد بلوری حرکت می کند. بهتر است بحث را با بررسی طیف یک اتم آزاد آغاز کنیم و بینیم هنگامی که

اتم‌ها به دور هم گرد می‌آیند تا یک جسم جامد را تشکیل دهند چگونه این طیف تدریجاً تغییر می‌کند.

به عنوان مثال لیتیوم را در نظر می‌گیریم. ابتدا یک اتم آزاد لیتیوم را بررسی می‌کنیم؛ همان طور که در شکل (۱-۵ الف) نشان داده شده است، الکترون در یک چاه پتانسیل حرکت می‌کند. وقتی معادله‌ی شرودینگر را حل کنیم، همان گونه که نشان داده شده است، مجموعه‌ای از ترازهای انرژی گسسته به دست می‌آید. هم چون حالت مربوط به اتم هیدروژن این ترازها را به $2p, 2s, 1s$ و غیره نمایش می‌دهیم. اتم لیتیوم شامل سه الکترون است، دو تای آن‌ها لایه‌ی $1s$ (کاملاً پر) را اشغال می‌کنند و الکترون سوم در زیر لایه‌ی $2s$ جای می‌گیرد.

موقعیتی را در نظر می‌گیریم که دو اتم لیتیوم گرد هم می‌آیند تا مولکول لیتیوم Li_2 را تشکیل دهند. هم چنان که در شکل (۱-۵ ب) نشان داده شده است، پتانسیلی که توسط الکترون دیده می‌شود دو برابر می‌شود. حالا طیف انرژی شامل مجموعه‌ای از طیف‌های دوگانه‌ی گسسته است. هر کدام از ترازهای اتمی که عبارتند از $2p, 2s, 1s$ و غیره به دو تراز نزدیک و جدای از هم شکافته می‌شوند. به دلیل رابطه‌ی نزدیک بین ترازهای اتمی و مولکولی، ترازهای انرژی مولکولی را نیز $2p, 2s, 1s$ و غیره می‌نامیم و توجه داریم که هر کدام از این ترازها در واقع از دو زیر تراز تشکیل یافته‌اند.



شکل ۱-۵ تغییرات تدریجی طیف انرژی Li از یک اتم (الف)، به یک مولکول (ب) و به یک جسم جامد (ج).

حال می‌توانیم با توجه به بررسی مولکول هیدروژن یونیده H^+ (بخش ۷-۱) ملاحظه کنیم که چرا تراز اتمی به دو و تنها دو زیر لایه شکافته می‌شود. دلیل آن اساساً به صورت زیر است: وقتی دو اتم Li دور از یکدیگرند، تأثیر یک اتم بر الکترون اتم دیگر بسیار کم و توان آن را به صورت یک پریشیدگی در نظر گرفت. در این تقریب ترازهای پریشیده نشده $2s, 1s$ و غیره هر کدام تبه‌گن دوگانه‌اند زیرا یک الکترون در تراز مثلاً $1s$ ممکن است آن تراز را در هر کدام

از اتم‌ها اشغال کند؛ و از آن جا که دو اتم وجود دارد، انرژی، تبهگن دوگانه خواهد شد. این تبهگنی در صورتی برقرار خواهد بود که برهم کنش بین اتم‌ها کاملاً قابل چشم پوشی باشد. اگر این برهم کنش منظور گردد، تبهگنی دوگانه برطرف خواهد شد و هر تراز به دو زیر تراز خود شکافته می‌شود. هم چون حالت مربوط به H^+ (بخش ۷-۸) اوربیتال‌های مولکولی متناظر با این زیر ترازها معمولاً به عنوان ترکیبات متقارن و پاد متقارن اوربیتال‌های اتمی متناظر در نظر گرفته می‌شود.

بر طبق اصل طرد پائولی در هر تراز حداکثر دو الکترون با اسپین‌های مخالف جای می‌گیرند. مولکول Li_2 شش الکترون دارد، چهار تای آن‌ها تراز دوگانه ی مولکولی $1s$ و دوتای دیگر تراز پایین تر $2s$ دوگانه را اشغال می‌کنند.

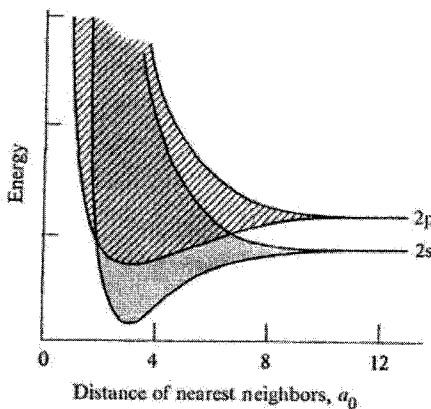
مطابق بحث فوق، مقدار شکافتگی شدیداً به فواصل بین هسته ای دو اتم در مولکول بستگی دارد. هر چه هسته‌ها به هم نزدیک تر باشند پربشیدگی شدیدتر و شکافتگی بزرگ تر خواهد بود. هم چنین شکافتگی به اوربیتال‌های اتمی بستگی دارد. شکافتگی تراز $2p$ بزرگتر از تراز $2s$ است که آن هم به نوبه ی خود از شکافتگی تراز $1s$ بزرگ تر است. دلیل آن این است که شعاع اوربیتال $1s$ خیلی کوچک است و این اوربیتال خیلی محکم مقید به هسته خود است. این اوربیتال معمولاً از پربشیدگی متأثر نمی‌شود. این مطلب در مورد اوربیتال‌های $2s, 2p$ که شعاع بزرگ تری دارند و خیلی ضعیف به هسته‌های خود مقیدند درست نیست. با یک بیان کلی بررسی فوق را می‌توان به یک مولکول چند اتمی Li_n که شامل چندین اتم است تعمیم داد. بنابراین در یک مولکول سه اتمی هر تراز اتمی به سه تراز و در یک مولکول چهار اتمی هر تراز به چهار تراز شکافته می‌شود. لیتیوم جامد را می‌توان به عنوان لیتیوم گازی در نظر گرفت که تعداد اتم‌های آن بسیار زیاد و به صورت یک مولکول لیتیوم بسیار عظیم درآمده است.

شکل طیف انرژی چگونه می‌شود؟ می‌توانیم به این سؤال بر مبنای بحث فوق پاسخ دهیم: هر کدام از ترازهای اتمی به N زیر تراز نزدیک به هم شکافته می‌شود؛ که N تعداد اتم‌های موجود در جامد است. از آن جا که N خیلی بزرگ و در حدود 10^{23} است، زیر لایه‌ها آن چنان به هم نزدیک اند که به هم می‌پیوندند و یک نوار انرژی را تشکیل می‌دهند. بدین ترتیب همان گونه که در شکل (۱-۵) نشان داده شده است ترازهای $1s, 2s, 2p$ به ترتیب به نوارهای $1s, 2s, 2p$ تبدیل می‌شوند.

برای نشان دادن این که زیر لایه ها در یک نوار چقدر به هم نزدیک اند، مثال عددی زیر را در نظر می گیریم: فرض کنید پهنای نوار مقدار نوعی 5eV باشد. بازه ی انرژی بین دو تراز مجاور از مرتبه ی $5 \times 10^{-23} \text{eV} = \frac{5}{1.23}$ است. از آن جا که این مقدار بی نهایت کوچک است، زیرا لایه ها از یک دیگر قابل تشخیص نیستند و می توانیم توزیع آن ها را به صورت نوارهای انرژی پیوسته در نظر بگیریم.

با مرور مطالب فوق می توان گفت: طیف یک جسم جامد، ترکیبی از نوارهای انرژی است. نواحی میانی که این نوارها را از هم جدا می کنند، گاف های انرژی، یا نواحی ممنوعه ی انرژی هستند که الکترون ها نمی توانند آن ها را اشغال کنند. برعکس چنین وضعیتی، حالت مربوط به یک اتم یا یک مولکول آزاد است که انرژی های مجاز، مجموعه ای از تراز های گسسته را تشکیل می دهند. قرار گرفتن این تراز های گسسته در نوارهای انرژی، یکی از مهم ترین خواص اساسی یک جسم جامد است و در این کتاب اغلب از آن استفاده خواهد شد.

پهنای این نوارها متغیر است ولی در حالت کلی هرچه انرژی نوار بیش تر باشد، پهنای آن نیز بیش تر است. زیرا هم چنان که در مورد یک مولکول بیان شد، یک حالت انرژی زیاد متناظر با یک شعاع اتمی زیاد و بنابراین پریشیدگی زیاد است، که منجر به پهن شدن تراز انرژی می گردد. متقابلاً حالت های انرژی پایین متناظر با مدارهای قویاً مقید می باشند که از پریشیدگی، خیلی کم متأثر می گردند.



شکل ۲-۵ پهن شدگی ترازهای ۲s و ۲p درون نوارهای انرژی در یک بلور لیتیوم (a. شعاع بوهر یعنی 0.53 \AA است).

شکل (۲-۵) نوارهای $2s$ و $2p$ را برای لیتیوم فلزی نشان می دهد که به صورت تابعی از ثابت شبکه ای a رسم شده اند. آن چنان که انتظار می رود با کاهش a ، پهنای نوار افزایش می یابد زیرا هرچه فواصل بین اتمی کوچک تر باشد پخشیدگی بیشتر است. هم چنین توجه کنید که برای $a < 6a_0$ نوارهای $2p$ و $2s$ پهن شده و شروع به هم پوشی یک دیگر می کنند و گاف بین آن ها کاملاً از بین می رود.

بر خلاف اوربیتال های اتمی که در اطراف اتم خاصی جای گزیده و با دور شدن از اتم ها به طور نمایی کاهش می یابند، اوربیتال های بلوری (یعنی توابع موجی که حالت های الکترونی در نوارها را توصیف می کنند) در تمام جامد گسترش دارند. براین اساس ما از توابع موج جامدات به عنوان اوربیتال های جای گزیده نشده یاد می کنیم. به زودی خواهیم دید که این اوربیتال ها در واقع امواج الکترونی رونده در جامدات را توصیف می کنند. مفهوم جای گزیده نشدن^۱ یک مفهوم اساسی است. این مفهوم، مسئول تمام پدیده های ترابری الکترونی در جامدات، مثلاً رسانایی الکتریکی است.

تاکنون بسیاری از مفاهیم مرتبط با حالت های الکترونی در یک جامد بلوری را ارائه کردیم، در بخش بعد این مفاهیم را با بیان ریاضی و با نوشتن معادله ی شرودینگر و بحث پیرامون نتایج حل این معادله پی می گیریم. این امر منجر به مفاهیم جالب و نادری می شود که در ادامه راجع به آن ها بحث خواهیم کرد.

۳-۵ نوارهای انرژی در جامدات؛ قضیه ی بلوخ

تابع بلوخ

رفتار یک الکترون در یک جامد بلوری توسط معادله ی شرودینگر مطالعه می شود. این معادله را می توان به صورت زیر نوشت (بخش ۲-A):

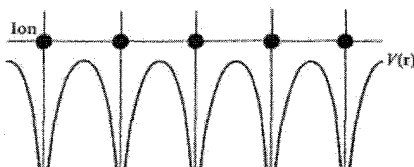
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(r) = E \psi(r) \quad (5-1)$$

$V(r)$ پتانسیل بلور است که توسط الکترون «دیده» می شود. ψ و E به ترتیب تابع حالت و انرژی این الکترون اند. پتانسیل $V(r)$ شامل بر هم کنش الکترون با تمام اتم ها در جسم جامد و

همین طور برهم کنش الکترون های دیگر است (بعد به این مطلب بر می گردیم). در این مرحله ملاحظه می کنیم که پتانسیل $V(r)$ تناوبی است. این پتانسیل همان تقارن انتقالی بلور را دارد یعنی:

$$V(r+R) = V(r) \quad (5-2)$$

که R بردار شبکه است. چنین پتانسیلی به طور شماتیک در شکل (5-3) نشان داده شده است.



شکل 5-3 پتانسیل بلور که توسط الکترون دیده می شود.

بر طبق قضیه بلوخ، حل معادله ی (5-1) برای یک پتانسیل تناوبی $V(r)$ به صورت زیر است:

$$\psi_k(r) = e^{ik \cdot r} u_k(r) \quad (5-3)$$

که تابع $u_k(r)$ همان تقارن انتقالی شبکه را دارد یعنی:

$$u_k(r+R) = u_k(r) \quad (5-4)$$

بردار k همان گونه که خواهیم دید، کمیتی مرتبط با اندازه حرکت ذره است.

اینک اثبات فیزیکی قضیه ی بلوخ را ارائه می دهیم. خواننده علاقه مند به بررسی دقیق تر می تواند به مراجعی که در کتابشناسی آمده است [مثلاً Seitz(1940)] مراجعه نماید. اثباتی که در این جا ارائه می گردد بدین منظور انتخاب شده است که مفاهیم فیزیکی را با حداقل تفصیل ریاضی بیان نماید. با مراجعه به معادله ی (5-1)، در می یابیم، همیشه می توان حل آن را به صورت زیر نوشت:

$$\psi(r) = f(r)u(r)$$

که $u(r)$ مانند رابطه ی (5-4) تناوبی است. $F(r)$ تابعی است که باید تعیین گردد. از آن جا که پتانسیل $V(r)$ تناوبی است، لازم می آید که تمام کمیت های مشاهده پذیر مربوط به الکترون نیز تناوبی باشند. به ویژه کمیت $|\psi(r)|^2$ ، که احتمال وجود الکترون را می دهد باید تناوبی باشد.

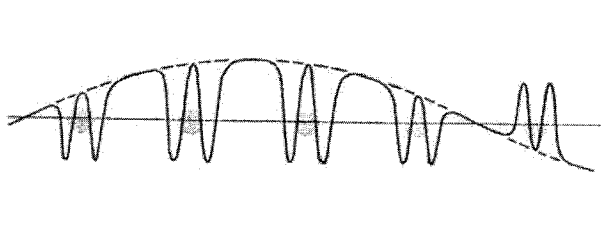
۱- از مکانیک کوانتومی به خوبی می دانیم که $|\psi(r)|^2$ چگالی احتمال است و چنین تابعی از نظر فیزیکی قابل اندازه گیری است. ولی تابع موج ψ_r خودش به لحاظ فیزیکی قابل اندازه گیری نیست.

این نکته شرط زیر را بر $f(\mathbf{r})$ اعمال می کند:

$$|f(\mathbf{r} + \mathbf{R})|^2 = |f(\mathbf{r})|^2$$

تنها تابعی که به ازای تمام مقادیر \mathbf{R} شرط فوق را ارضاء می کند، یک تابع نمایی به صورت $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ است. این نشان می دهد که حل معادله ی شرودینگر باید به شکل بلوخ، رابطه ی (۳-۵) باشد.

تابع حالت ψ_k در رابطه ی (۳-۵) که به نام تابع بلوخ معروف است چندین خاصیت جالب دارد. الف) همان طور که ضریب $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ نشان می دهد، این تابع به شکل یک موج تخت رونده است و این نکته دلالت بر این دارد که الکترون در بلور مانند یک ذره ی آزاد منتشر می شود. اثر تابع $u_k(\mathbf{r})$ مدوله کردن این موج است و هم چنان که در شکل (۴-۵) نشان داده شده است، دامنه از یاخته ای به یاخته ی دیگر به طور تناوبی نوسان می کند ولی این بر مشخصه بنیادی تابع موج که یک موج رونده است اثری ندارد.



شکل ۴-۵ موج با تابع بلوخ. منحنی صاف نشان دهنده ی تابع $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ است که توسط تابع شبه اتمی $u_k(\mathbf{r})$ مدوله شده است.

اگر الکترون برآستی کاملاً آزاد بود تابع حالت ψ_k با رابطه ی $(\frac{1}{\sqrt{V}})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ بیان می شد، یعنی تابع $u_k(\mathbf{r})$ ثابت می بود. ولی الکترون آزاد نیست و با شبکه اندرکنش دارد و این اندرکنش مشخصه ی ویژه تابع تناوبی u_k را معین می کند.

ب) چون الکترون مانند یک موج با بردار \mathbf{k} رفتار می کند، طول موج دو بروی $\lambda = \frac{2\pi}{K}$ را دارد و بنابراین اندازه حرکت آن

$$P = \hbar k \quad (5-5)$$

است. راجع به بردار اندازه حرکت بلوری الکترون و خواص آن در بخش های بعد بحث می کنیم.

ج) تابع ψ_k بلوخ یک اوربیتال بلوری است و در اطراف اتم خاصی جای گزیده نشده است، بنابراین الکترون متعلق به همه بلور است. البته این مطلب با خاصیت (الف) که الکترون را به صورت یک موج رونده توصیف کردیم سازگار است. توجه کنید که تابع ψ_k به گونه ای انتخاب شده است که تابع توزیع الکترون $|\psi_k|^2$ در بلور تناوبی باشد.

در بحث فوق بر مقایسه ی بین الکترون بلوری و الکترون آزاد تأکید کردیم و این به درک خواص الکترون در بلور کمک می کند. ولی نباید نتیجه گرفت که این دو الکترون، رفتار کاملاً یکسانی دارند. تابع بلوخ الکترون خواص بسیار جالبی دارد که با الکترون مشترک نیستند. این خواص از اندرکنش الکترون با شبکه نتیجه می شود.

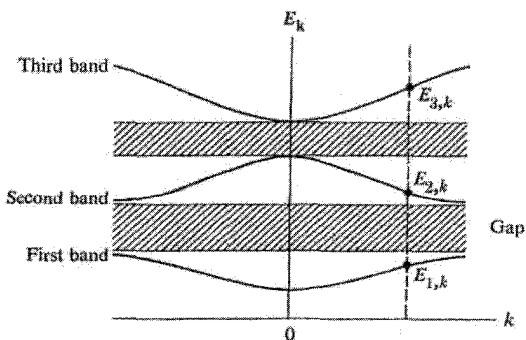
نوارهای انرژی

تاکنون راجع به تابع حالت بحث شد و در مورد انرژی چیزی گفته نشد. حال به طیف انرژی می پردازیم که از حل معادله ی شرودینگر (معادله ی ۵-۱) نتیجه می شود. در این راستا، معادله ی شرودینگر را به شکل متفاوتی بازنویسی می کنیم. با جایگزینی ψ_k از تابع بلوخ که به شکل رابطه ی (۵-۳) است و حذف ضریب $e^{ik \cdot r}$ و پس از انجام عملیات لازم، به رابطه ی زیر می رسیم:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla + ik)^2 + V(r)\right]u_k(r) = E_k u_k(r) \quad (5-6)$$

که در واقع معادله ی موج برای تابع $u_k(r)$ است. این یک معادله ی ویژه مقدار، شبیه معادله ی شرودینگر است. بنابراین می توان آن را به روش مشابه حل کرد. توجه کنید که عملگر داخل پرانتز، تابع صریحی از u_k است. بنابراین هم ویژه تابع و هم ویژه مقدار به k بستگی دارند، به همین دلیل آن ها را با اندیس برداری k مشخص کردیم. یک تابع ویژه مقدار نه به یک حل بلکه به چندین حل منجر می شود. برای هر مقدار k چندین حل به دست می آید که مجموعه ای از انرژی های گسسته $E_{1,k}, E_{2,k}, \dots$ را تشکیل می دهند شکل (۵-۵)'. از آن جا که این انرژی ها به k بستگی دارند، با تغییر k در بازه ی مقادیر خود انرژی، به صورت پیوسته تغییر می کنند. هم چنان که در شکل نشان داده شده است هر تراز به یک نوار انرژی، منجر می شود. بنابراین انرژی ویژه مقدار را به صورت $E_n(k)$ می نویسیم، که اندیس n ضریب نواری^۲ نامیده می شود.

۱- به بیان دیگر انرژی تابع چند مقاره ای از k است



شکل ۵-۵ گاف ها و نوارهای انرژی، ناحیه هاشور زده نمایانگر گاف های انرژی است.

تعداد نوارها زیاد (معمولاً بی نهایت) است، ولی فقط پایین ترین نوارها توسط الکترون ها اشغال می شوند. هر نوار یک ناحیه ی انرژی معینی را می پوشاند که چون در فضای k رسم شود از پایین ترین تا بالاترین مقادیر گسترش دارد. بازه هایی از انرژی که نوارهای انرژی را از هم جدا کرده اند، گاف های انرژی اند که نواحی انرژی ممنوعه ای هستند که الکترون ها نمی توانند این نواحی را اشغال کنند.

از آن جا که k یک کمیت برداری است، دیگرام شکل (۵-۵) ترسیمی از نوارهای انرژی، در فقط یک جهت به خصوص از فضای k است. اگر این نوارها در جهت های گوناگون k رسم شوند، در حالت کلی شکل آن ها تغییر خواهد کرد. بنابراین برای نمایش کامل نوارها لازم است مقادیر انرژی را در فضا k تعیین نماییم. اغلب می توان این کار را با رسم پربندهای انرژی در فضای k برای نوارهای مختلف انجام داد. ما در بخش بعد این کار را خواهیم کرد. و نشان خواهیم داد نوارها روابط تقارنی مهمی را ارضاء می کنند و این امکان را فراهم می کنند که بررسی خود را به نواحی نسبتاً کوچکی در فضای k محدود کنیم.

نوارهای انرژی که از این تجزیه و تحلیل نتیجه می شوند نظیر نوارهایی هستند که در بخش قبل مورد بحث قرار گرفتند و در واقع می توانیم یک تناظر یک به یک بین نوارهای انرژی و ترازهای اتمی ای که از آن ها ناشی می شوند برقرار کنیم. مزیت ویژه ی نتایج حاضر این است که می توانیم حالت های الکترونی را بر طبق اندازه ی حرکت هایشان که بر حسب k داده می شوند طبقه بندی کنیم. این مطلب فوق العاده مفید است و نظیر آن در بخش قبل وجود نداشت.

پتانسیل بلور

حال به پتانسیل بلور $V(r)$ می پردازیم که بر الکترون اعمال می شود. این پتانسیل ترکیبی از دو جزء است؛ برهم کنش الکترون با مغزهای یونی که شبکه را تشکیل می دهند، و برهم کنش الکترون با الکترون های بلوخ که داخل شبکه حرکت می کنند. مثلاً در سدیم فلزی یک الکترون در نوار $3s$ با یون های Na^+ برهم کنش می کند و ساختار bcc را تشکیل می دهد. این الکترون با الکترون های دیگر این نوار نیز بر هم کنش دارد. بنابراین می توانیم $V(r)$ را به صورت مجموع دو جمله بنویسیم:

$$V(r) = V_i(r) + V_e(r) \quad (5-7)$$

که جمله ی اول سمت راست نمایان گر برهم کنش یا مغزهای یونی و جمله ی دوم نمایان گر برهم کنش با الکترون ها است.

قسمت یونی را می توان به صورت زیر نوشت:

$$V_i(r) = \sum_j v_i(r - R_j) \quad (5-8)$$

همان گونه که در شکل (۵-۶ الف) نشان داده شده است، $v_i(r - R_j)$ پتانسیل یک یون است که در نقطه ای به بردار شبکه ی R_j جای گزیده شده است؛ و جمع روی تمام یون ها است. واضح است که پتانسیل $v_i(r)$ همان خاصیت تناوبی شبکه را دارد.

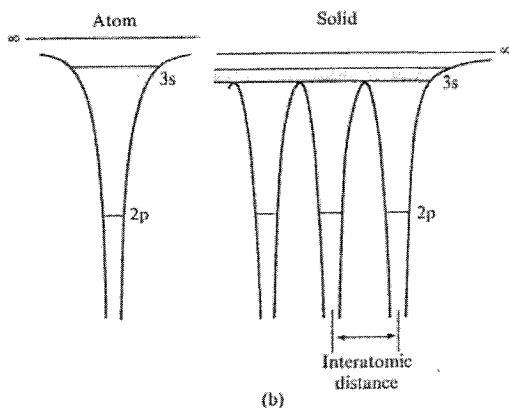
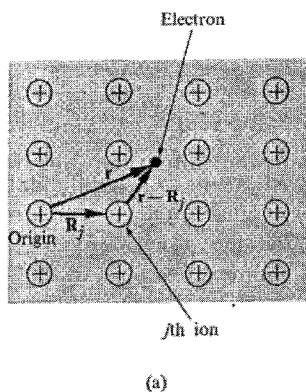
پتانسیل الکترونی $V_e(r)$ که اصطلاحاً اندرکنش الکترون - الکترون نیز نامیده می شود، خصوصیتی دارد که بررسی آن را بسیار مشکل می کند. نخست این که ما تنها در صورتی می توانیم این جمله را محاسبه نماییم که حالت های الکترون های دیگر را بدانیم. ولی این حالت ها از ابتدا معلوم نیستند. در واقع حالت های بسیاری هستند که می خواهیم آن ها را به دست آوریم. دوم آن که پتانسیل $V_e(r)$ کاملاً تناوبی نیست. زیرا الکترون ها در درون شبکه مداوم در حال حرکت هستند. سوم آن که همان گونه که در بالا انجام شد، در یک بررسی کامل باید دینامیک همه ی الکترون ها به طور هم زمان (و نه یک الکترون در یک لحظه) در نظر گرفته شود. این یک نمونه ای از مسائل بس ذره ای است که اغلب در فیزیک حالت جامد بررسی می شود.

در مواجهه با این مشکلات، خوشبختانه بنابر دلایلی که در بخش ۳-۴ گفته شد برهم کنش الکترون - الکترون، کاملاً ضعیف است. و به خاطر این واقعیت، مشکلات فوق به اندازه ای که در ابتدا جلوه می کرد جدی نیستند. نتیجه ی مهم این برهم کنش این است که الکترون ها به گونه ای توزیع می شود که عمدتاً در اطراف یون ها قرار گیرند و این یون ها را از الکترون های دیگر محافظت می کنند. این یک اثر اضافه ای دارد که بر هم کنش الکترون - یون راحتی در بلند برد ضعیف می سازد که یک شرط مناسب دیگر است.

بنابراین می توان یک عبارت تقریبی برای پتانسیل به صورت زیر نوشت:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_j v_s(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \quad (5-9)$$

که $v_s(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ پتانسیل یون حفاظت شده است که در مکان شبکه ای \mathbf{R}_j قرار گرفته است. دقیقاً به خاطر اینکه این پتانسیل تناوبی است، شرط قضیه ی بلوخ را برآورده می کند. شکل (۶-۵) (ب) پتانسیل بلور را برای Na نشان می دهد.



شکل ۶-۵ (الف) بر هم کنش یک الکترون با مغزهای یونی. نقاط کوچک نمایان گر الکترون ها هستند. توزیع الکترون ها به طور صحیح نشان داده نشده است. در واقع الکترون ها تمایل دارند که اطراف یون ها جمع شوند. (ب) طیف یک اتم سدیم (سمت چپ)، و یک سدیم جامد (سمت راست) [J. C. Slater, Physics Today 21,43(1963)] به پهن شدگی تراز ۳S و تبدیل آن به نوار ۳S در جامد، و این که این نوار تقریباً به طور کامل بالای سدهای پتانسیل اتم ها قرار دارد توجه کنید. این امر به سبب جای گزیده نشدن الکترون در این نوار می باشد. برعکس، سدهای پتانسیل، الکترون های نوار یا تراز ۲P را وادار می کنند که جای گزیده شوند.

در بحث پیرامون پتانسیل بلور، به طور ضمنی فرض کردیم که اتم‌ها در جای گاه‌های شبکه‌ای خود ساکن اند ولی در واقع این طور نیست. همان گونه که در فصل ۳ بحث شد، الکترون‌ها در نتیجه‌ی برانگیختگی حرارتی خود پیوسته در حالت نوسانی هستند. بنابراین واضح است که فرض ما از شبکه‌ی ساکن یک فرض تقریبی است و حالا سؤال این است که چقدر این تقریب برقرار است؟ می‌توان به این سؤال با اشاره به این نکته پاسخ گفت که ساختارهای نواری که بر مبنای شبکه‌ی ساکن محاسبه می‌شوند، به جز در دماهای نزدیک به نقطه‌ی ذوب جسم جامد، معمولاً با تجربه سازگاری خوبی دارند. دلیل این که تقریب شبکه‌ی ساکن این چنین خوب برقرار است این است که در تمام دماها حتی تا نقطه ذوب، دامنه‌ی ارتعاشات شبکه خیلی کوچک تر از فاصله‌ی بین اتمی است^۱. بنابراین هم چنان که در مورد الکترون نیز دیده شد، تغییر شکل شبکه قابل ملاحظه نیست.

۴-۵ تقارن نواری در فضای k : مناطق بریلیون

ویژه مقدار انرژی $E_n(k)$ برای نوارها (هنگامی که این نوارها در فضای k رسم شوند). خواص تقارنی بسیار مفیدی دارند. قبل از پرداختن به این موضوع، چند کلمه‌ای راجع به مناطق بریلیون بیان می‌کنیم.

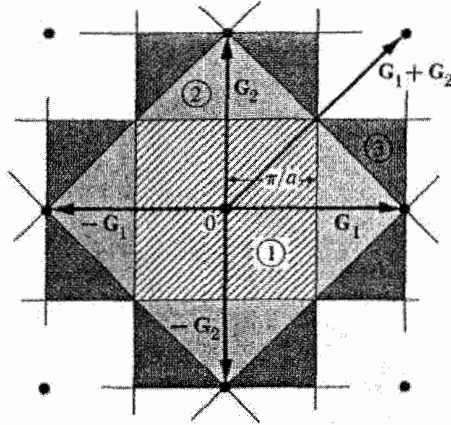
مناطق بریلیون

راجع به مناطق بریلیون ابتدا در بخش (۶-۲) مربوط به پراش براگ صحبت کردیم. هنگامی که صفحات عمود منصف بردارهای شبکه‌ی وارون را رسم کنیم، نواحی محصور بین این صفحات مناطق مختلف بریلیون را تشکیل می‌دهند.

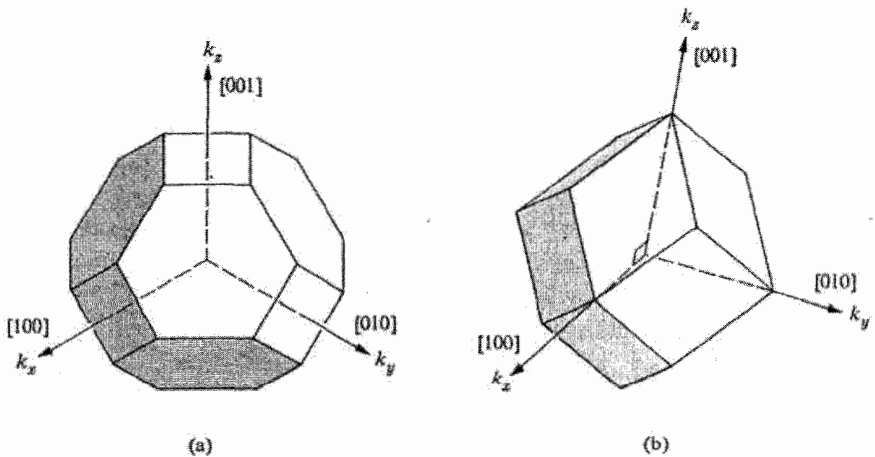
شبکه‌ی مربعی که شبکه‌ی وارون آن نیز یک شبکه‌ی مربعی به ضلع $\frac{2\pi}{a}$ است را در نظر می‌گیریم شکل (۷-۵) بردارهای وارون آن‌ها، $G_1, G_2, -G_2, -G_1$ و هم چنین عمود منصف‌های آن‌ها در این شکل نشان داده شده است. کوچک‌ترین ناحیه‌ی اطراف مبدأ (سطح هاشور زده)، اولین منطقه‌ی بریلیون است. سطح سایه دار (مرکب از چهار قطعه، به شکل نیم لوزی، محصور بین عمود منصف‌های G_1, G_2 و $G_1 + G_2$ غیره...) منطقه‌ی دوم بریلیون را تشکیل می‌دهند.

۱- میانگین دامنه ارتعاشات اتمی مربوط به برانگیختن حرارتی در نقطه‌ی ذوب حدود ۵٪ فواصل بین اتمی است.

مشابه سطح تیره رنگ در شکل (هشت قسمت) منطقه ی سوم را تشکیل می دهد. چنان چه مرتبه های بالاتر عمود منصف ها منظور شوند، مناطق بالاتر بریلین ایجاد می شوند، که ممکن است شکل های کاملاً پیچیده ای داشته باشند.



شکل ۵-۷ اولین منطقه ی بریلین مربوط به شبکه ی مربعی. اولین منطقه (ناحیه ی هاشور زده) دومین منطقه (ناحیه ی سایه دار) و سومین منطقه (ناحیه تیره). اعداد نمایان گر اندیس مناطق بریلین هستند.



شکل ۵-۸ اولین منطقه ی بریلین برای (الف) یک شبکه fcc و (ب) یک شبکه bcc

به هر جهت بدون توجه به پیچیدگی مناطق، تمام مناطق بریلیون مساحت های یک سانی دارند. می توان در شکل ملاحظه کرد که منطقه ی دوم همان مساحت منطقه ی اول یعنی $(\frac{\sqrt{2}\pi}{a})^2$ را دارد و برای منطقه سوم نیز همین طور است. و می توان نشان داد که مساحت تمام مناطق یک سان است و این منحصر به شبکه ی مربعی نیست.

در سه بعد، مناطق بریلیون حجم های سه بعدی هستند، شکل (۸-۵) اولین منطقه را برای شبکه های fcc و bcc نشان می دهد مناطق بالاتر در این شبکه ها شکل های پیچیده ای دارند که تجسم آن ها مشکل است و در این جا به آن ها نمی پردازیم.

حال راجع به رابطه ی بین مناطق بریلیون و ساختار نواری بحث می کنیم.

خواص تقارنی

می توان نشان داد که هر نوار انرژی $E_n(k)$ خواص تقارنی زیر را برآورده می کند.

$$E_n(k + G) = E_n(k) \quad (5-10) \quad (i)$$

$$E_n(-k) = E_n(k) \quad (5-11) \quad (ii)$$

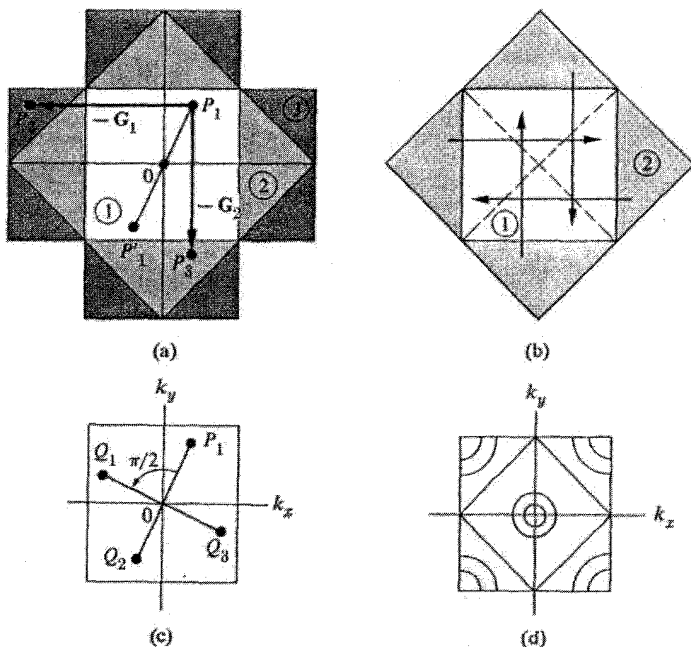
(iii) $E_n(k)$ همان تقارن دورانی شبکه ی مستقیم را دارد.

هم چنان که بعداً در این بخش بحث خواهد شد، این خواص مشابه خواصی هستند که از روابط پاشندگی ارتعاشات شبکه (بخش ۶-۳) پیروی می کنند و می توان آن ها را به روش مشابه یعنی به کمک خواص تقارنی شبکه مستقیم اثبات کرد.

خاصیت (i) دلالت می کند که $E_n(k)$ تناوبی است، و دوره ی تناوب آن مساوی دوره ی تناوب بردار شبکه ی وارون است. به بیان دیگر هر دو نقطه ای که در فضا k با یک جابه جایی که مساوی یک بردار شبکه ی وارون است به هم مربوط اند و انرژی یکسانی دارند. برای مثال در شکل (۹-۵) الف) در نقاط P_1, P_2, P_3 انرژی یک سانی دارند. زیرا P_2 با انتقالی مساوی $G_2 - P_1$ به P_1 مربوط است، P_3 با انتقال $G_1 - P_1$ به P_1 مربوط است و هر دو $G_1 - G_2$ بردارهای شبکه ی وارون اند.

شکل (۹-۵) ب) نشان می دهد که چگونه می توان با استفاده از این تقارن انتقالی، قطعات مختلف منطقه دوم را توسط بردارهای شبکه ی وارون دقیقاً به منطقه ی اول انتقال داد. هر دو سطحی که با

پیکان به هم مرتبط شده‌اند معادل اند. اولین و دومین منطقه معادل اند. همین طور مناطق مرتبه های بالاتر را می توان به طور مناسب به منطقه ی اول انتقال داد. از آن جا که منطقه ی اول بریلین حاوی کلیه اطلاعات لازم است، می توانیم توجه خود را فقط معطوف و محدود به منطقه ی اول نماییم.



شکل ۹-۵ (الف) تقارن انتقالی انرژی $E(k)$ در فضای k برای یک شبکه ی مربعی. (ب) نگاشت منطقه ی دوم در داخل منطقه ی اول (ج) تقارن دورانی $E(k)$ در فضای k برای یک شبکه ی مربعی. (د) پربندهای انرژی در اولین منطقه.

خاصیت وارونی (ii) نشان می دهد که نوار نسبت به وارونی حول مبدأ $k = 0$ متقارن است. بنابراین در شکل (۹-۵الف) انرژی در نقطه ی P_1' مساوی انرژی در نقطه P_1 است.

خاصیت (ii) بیان می کند که نوار همان تقارن شبکه ی مستقیم را دارد. مثلاً در یک شبکه ی مربعی انرژی نیز باید تقارن دورانی مربع را داشته باشد. از آن جا که این شبکه نسبت به دوران $\pi/2$ (و مضاربی از آن) متقارن است، نتیجه می شود که در شکل (۹-۵ج) انرژی ها در نقاط Q_1 و Q_2 و Q_3 مساوی انرژی در نقطه ی P_1 زیرا این نقاط را توسط تقارن های دورانی می توان از

P_k به دست آورد [توجه کنید که Q_k مشابه P_k در شکل (۹-۵ الف) است؛ این برای یک شبکه‌ی مربعی است ولی برای شبکه‌های دیگر برقرار نیست].

در شکل (۹-۵د) پربندهای انرژی یک نوار در منطقه‌ی اول بریلیون برای یک شبکه‌ی مربعی رسم شده است. این شکل خواص تقارنی مختلفی را که در بالا توصیف شد برآورده می‌کند.

خواص تقارنی بسیار مهم هستند زیرا می‌توان از آن‌ها برای تسهیل در تعیین نوارهای انرژی استفاده کرد. مثلاً، با وجود تقارن وارونی فقط لازم است نوار انرژی را در نیمی از منطقه بدانیم و تقارن دورانی معمولاً این امکان را فراهم می‌کند که کاهش منطقه حتی بیشتر هم گردد. مثلاً در مورد یک شبکه‌ی مربعی فقط لازم است یک هشتم منطقه مشخص گردد و باقی مانده را می‌توان با استفاده از خواص تقارنی کامل کرد.

صرفه‌جویی در محاسبه در سه بعد حتی بیشتری شود. مثلاً در مورد یک شبکه مکعبی تنها لازم است نوار انرژی را در $\frac{1}{48}$ اولین منطقه بریلیون به طور مستقل تعیین کرد.

توجه کنید خواص تقارنی که در بالا بحث شد مربوط به یک نوار است. این خواص برای هر نواری برقرار است ولی یک نوار را به نوار دیگر مربوط نمی‌کند.

حال به اثبات خواص بالا می‌پردازیم. در این جا تنها به خطوط کلی اثبات‌ها می‌پردازیم خواننده‌ی علاقه‌مند می‌تواند برای بررسی تفصیلی آن به مراجع پیشرفته‌ای که در آخر این فصل آمده است مراجعه نماید. ابتدا خاصیت انتقالی (i) را بررسی می‌کنیم. تابع بلوخ در نقطه‌ی $K + G$ را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\psi_{k+G} = e^{i(k+G).r} u_{k+G} = e^{ik.r} (e^{iG.r} u_{k+G}) \quad (۵-۱۲)$$

ضریب داخل پرانتز عبارت آخر را به $U(r)$ نشان می‌دهیم که در فضای Γ یک تابع تناوبی با دوره‌ی تناوبی مساوی بردار شبکه است؛ یعنی

$$U(r + R) = e^{iG.(r+R)} u_{k+G}(r + R) = e^{iG.r} u_{k+G}(r) = U(r)$$

این مطلب از این واقعیت ناشی می‌شود که u_{k+G} تناوبی است و $e^{iG.R} = 1$ زیرا $G.R = n2\pi$ که n یک عدد صحیح است. عبارت داخل پرانتز در رابطه‌ی (۵-۱۲) رفتاری مانند $u_k(\Gamma)$ در معادله‌ی (۵-۳) دارد. بنابراین نشان داده ایم که تابع حالت ψ_{k+G} همان شکل ψ_k را دارد و در

نتیجه دو تابع انرژی یکسانی دارند، زیرا مبنای فیزیکی برای تمایز و تشخیص بین آن ها وجود ندارد.

خاصیت (ii) را می توان با توجه به این که معادله ی شرودینگر (۵-۶) متناظر با نقطه ی $-k$ ، مشابه معادله ای است که با نوشتن معادله ی مزدوج (۵-۶) به دست می آید، برقرار کرد. این بدین معنی است که ویژه مقادیر متناظر مساوی هستند. یعنی $E_n(-k) = E_n^*(k)$ از آن جا که انرژی $E_n(k)$ یک عدد حقیقی است نتیجه می شود که $E_n(-k) = E_n(k)$ که خاصیت (ii) است.

خاصیت (iii) با توجه به این که اگر شبکه ی مستقیم با یک عملیات تقارنی دوران کند، پتانسیل $V(r)$ بدون تغییر می ماند، نتیجه می شود. بنابراین تابع حالت بدست آمده باید انرژی ای مشابه با تابع حالت اصلی داشته باشد. می توان نشان داد که این حالت های جدید با دوران های در فضای k متناظراند و این منجر به خاصیتی می شود که توصیف شد.

۵-۵ تعداد حالت ها در نوار

تابع بلوخ را با $\psi_{n,k}$ نشان دادیم و دلالت بر این دارد که هر مقدار اندیس n و بردار k مبین یک حالت الکترونی یا اوربیتال است. حال نشان می دهیم که تعداد اوربیتال ها در یک نوار داخل منطقه ی اول مساوی تعداد یاخته های واحد بلور است. این خیلی شبیه عبارت مربوط به تعداد مدهای ارتعاشی شبکه است بخش (۳-۳) و به روشی کاملاً مشابه و با اعمال شرایط مرزی اثبات می شود.

ابتدا حالت یک بعدی را در نظر می گیریم که در آن تابع بلوخ به شکل زیر است:

$$\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x) \quad (۵-۱۳)$$

اگر شرایط مرزی تناوبی را به این تابع اعمال کنیم نتیجه می شود که تنها مقادیری از k مجازند که با عبارت زیر داده می شوند.

$$k = n \frac{2\pi}{L} \quad (۵-۱۴)$$

که $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ [توجه کنید که $u_k(x)$ به طور ذاتی تناوبی است. بنابراین شرط $u_k(x+L) = u_k(x)$ به طور اتوماتیک برقرار است]. همانند بخش (۳-۳) مقادیر مجاز k

شبکه‌ی منظمی تشکیل می‌دهند که طول هر ضلع آن $\frac{2\pi}{L}$ است. بنابراین تعداد حالت‌های داخل اولین منطقه‌ی بریلیون به طول $\frac{2\pi}{a}$ برابر است با:

$$\left(\frac{2\pi}{a}\right) / \left(\frac{2\pi}{L}\right) = \frac{L}{a} = N$$

که N تعداد یاخته‌های واحد است و این با آن چه قبلاً به دست آمده سازگاری دارد. بحث مشابه‌ای برای اعتبار عبارت فوق برای شبکه‌ی دو یا سه بعدی می‌توان ارائه کرد.

دیدیم که هر نوار N حالت در داخل منطقه‌ی اول دارد. از آن جا مطابق اصل طرد پائولی در هر کدام از این حالت‌ها حداکثر دو الکترون با اسپین‌های مخالف می‌توانند جای گیرنده نتیجه می‌شود که تعداد الکترون‌هایی که یک نوار منفرد را اشغال می‌کنند $2N$ است. این نتیجه‌ی جالبی است که بعداً از آن استفاده می‌شود تا پیش بینی شود که آیا یک جسم جامد هم چون یک فلز یا مانند یک عایق رفتار می‌کند.

۶-۵ مدل الکترون تقریباً آزاد^۱

در بخش (۳-۵) و (۴-۵)، خواص عمومی توابع حالت و همین‌طور انرژی‌های یک الکترون که درون یک جسم جامد بلوری حرکت می‌کند را مطالعه کردیم. برای به دست آوردن نتیجه‌ی صریح باید معادله‌ی شرودینگر (۱-۵) را برای پتانسیل واقعی $V(r)$ در جسم جامد مورد نظر حل کنیم. ولی حل معادله‌ی شرودینگر به جز برای ساده‌ترین پتانسیل‌ها، کاری مشکل، وقت‌گیر و توأم با تفصیل ریاضی است. گرچه اساساً باید نتایج بدست آمده با تجربه مقایسه شود، در این جا ترجیح می‌دهیم بحث را با حل معادله برای حالتی که پتانسیل‌های ساده شده‌ای حاکم است شروع کنیم. مزیت این کار این است که می‌توانیم معادله‌ی شرودینگر را با اعمال ریاضی کمتری حل کنیم و توجه خود را به مفاهیم فیزیکی نوینی معطوف کنیم که در این موضوع وارد می‌شوند.

در این بخش مدل الکترون تقریباً آزاد (NFE) را بررسی می‌کنیم که در این مدل فرض شده پتانسیل بلور آن چنان ضعیف است که الکترون‌ها اساساً هم چون یک ذره‌ی آزاد عمل می‌کنند. سپس آثار این پتانسیل را با استفاده از روش پربیشیدگی منظور می‌کنیم. این روش در صورتی

معتبر است که پتانسیل ضعیف باشد. این مدل به عنوان یک تقریب برای نوار رفیت در فلزات ساده مانند Al, K, Na و غیره به کار می رود.

در بخش بعد، مدل بستگی قوی^۱ را بررسی می کنیم که در آن به جز یک برهم کنش ضعیف با اتم‌های همسایه که بعداً می توان آن را به صورت یک پریشیدگی در نظر گرفت؛ پتانسیل‌های اتمی آن قدر قوی اند که اساساً الکترون، اطراف یک اتم منفرد گردش می کند. و به عنوان یک مدل تقریبی برای نوارهای داخلی باریک جامدات، مثلاً نوار $3d$ در فلزات واسطه عمل می کند.

مدل شبکه‌ی خالی

نقطه‌ی آغاز مدل NFE، حل معادله‌ی شرودینگر برای حالتی است که پتانسیل دقیقاً صفر است یعنی الکترون کاملاً آزاد است. به هر جهت لازم است که در حل معادله، خواص تقارنی بخش $(4-5)$ که توسط تقارن انتقالی شبکه‌ی مستقیم اعمال می گردند منظور شوند. این شرط منجر به مدل شبکه‌ی خالی می شوند.

در یک شبکه‌ی یک بعدی، توابع حالت و انرژی برای مدل شبکه‌ی خالی به صورت زیرند.

$$\psi_k^{(0)} = \frac{1}{L^{1/2}} e^{ikx} \quad (5-15)$$

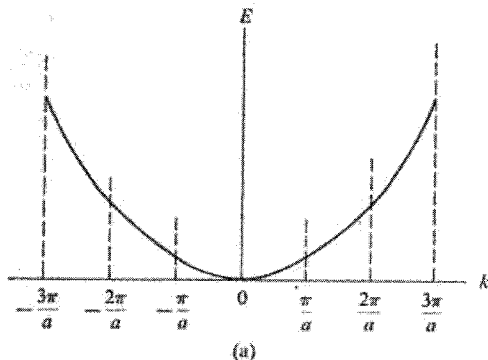
$$E_{(k)}^{(0)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (5-16)$$

که شاخص بالای (0) نشان می دهد که حل‌ها مربوط به حالت پریشیده نشده هستند (بخش ۷-۷). منحنی نمایش انرژی $E_{(k)}^{(0)}$ برحسب k که در شکل $(10-5)$ الف) رسم شده همان شکل آشنای هذلولی است. شکل $(10-5)$ الف) نتیجه‌ی اعمال خاصیت تقارنی (i) بخش $(4-5)$ را نشان می دهد. اجزاء هذلولی شکل $(10-5)$ الف) در لبه‌های مناطق گوناگون قطع شده و به اندازه‌های

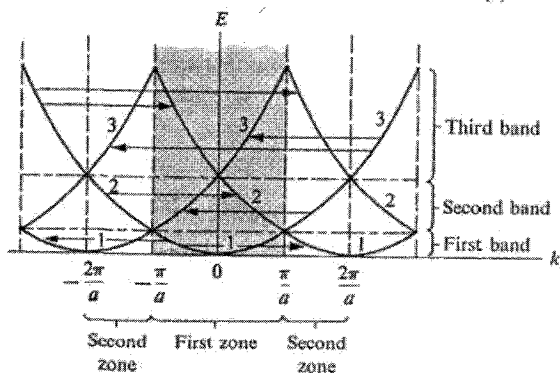
مضربری از $G = \frac{2\pi}{a}$ انتقال یافته اند تا مطمئن شویم انرژی در هر دو نقطه‌ی معادل یکسان است.

طیف انرژی هنگامی که بررسی ما فقط محدود به اولین منطقه‌ی بریلیون باشیم در شکل $(10-5)$ ج) نشان داده شده است. [متقابلاً به شکل $(10-5)$ ب) می توان به عنوان نتیجه‌ی ای از شکل $(10-5)$ ج)

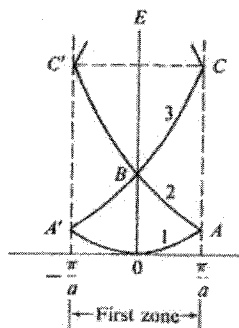
هنگامی که به اندازه‌ی مضربری از G انتقال یافته است نگریست.]



(a)



(b)



(c)

شکل ۱۰-۵ (الف) هذلولی آشنا که منحنی پاشندگی برای یک ذره آزاد با انرژی $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$ را نشان می‌دهد. (ب) منحنی های پاشندگی برای همان ذره در مدل شبکه ی خالی که تقارن انتقالی و نوارهای مختلف را نشان می دهد. (ج) منحنی های پاشندگی برای مدل شبکه ی خالی (فقط در اولین منطقه)

نحوه ی ارائه ای که برای نمایش شکل (۱۰-۵ ج) به کار رفته به نمایش منطقه ی تحویل یافته^۱ موسوم است از آن جا که این نمایش تمام اطلاعات مورد نیاز را مشخص می کند راحت ترین است. نمایش شکل (۱۰-۵ الف) نمایش منطقه ی گسترش یافته^۲ نام دارد و وقتی مناسب است که بخواهیم ارتباط نزدیک بین یک الکترون آزاد و یک الکترون بلوری برقرار کنیم. شکل (۱۰-۵ الف) دلالت بر نمایش منطقه ی تناوبی^۳ دارد و گاهی که بررسی توپولوژیکی در فضای k

1. Reduced Zone Scheme
 2. Periodic Zone Scheme
 3. Periodic Zone Scheme

مورد نظر باشد مفید است. تمام این نمایش ها کاملاً معادل اند. استفاده از یک نمایش بخصوص به خاطر سهولت آن است که و نه به خاطر برتری ذاتی آن بر روش های دیگر.

مدل الکترون تقریباً آزاد

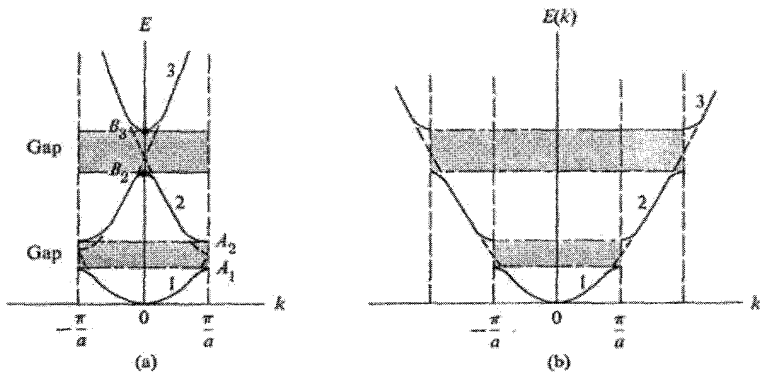
هنگامی که پتانسیل بلور منظور شود، طیف انرژی (۱۰-۵ج) چگونه تغییر خواهد کرد؟. شکل (۱۱-۵ الف) این مطلب را نشان می دهد. اولین و دومین نوار که قبلاً در نقطه ی A و A' در شکل (۱۰-۵ج) تماس داشتند حالا شکافته می شوند. به طوری که یک گاف انرژی در مرز منطقه ی بریلیون ایجاد می شود. یک گاف مشابهی در مرکز منطقه، جایی که نوارهای ۲ و ۳ قبلاً هم دیگر را قطع کرده بودند (نقطه ی B در شکل ۱۰-۵ج) و هم چنین در نقطه ی C که نوارهای ۳ و ۴ قبلاً یک دیگر را قطع کرده بودند ایجاد می شود. بنابراین در مدل شبکه ی خالی، در حالت کلی گاف های انرژی در فضای k جایی که نوارها یک دیگر را قطع می کنند ایجاد می شود. این تقاطع یا در مرکز و یا در مرزهای BZ رخ می دهد. در این نقاط شکل طیف شدیداً با پتانسیل بلور (که ممکن است ضعیف باشد)، تغییر می کند. در واقع آن چه پتانسیل بلور انجام می دهد. هموار کردن شکل گوشه هایی است که در ساختار نواری شبکه ی خالی وجود دارند.

در باقی مانده منطقه، شکل طیف از پتانسیل بلور تاثیر خیلی کمی می پذیرد. زیرا فرض شده این پتانسیل ضعیف است. در این ناحیه از فضای k ، نوارها اساساً شکل هذلولی را که از مدل شبکه ی خالی (شکل ۱۰-۵ج) به دست می آورند حفظ می کنند و الکترون در آن جا اساساً مثل یک الکترون آزاد عمل می کند.

از مقایسه شکل های (۱۰-۵ج) و (۱۰-۵ الف)، متوجه می شویم که تقریباً می توان ساختار نوار را در مدل شبکه ی خالی تعیین کرد، به جز این که در آن جا گاف ها ناپدید می شوند. زیرا نوارها در مرزهای منطقه یک دیگر را قطع می کنند. البته این ناپدید شدگی قابل پیش بینی است، زیرا در طیف انرژی الکترون آزاد انتظار ظهور گاف انرژی نمی رود. نکته این جاست که حتی یک پتانسیل ضعیف هم منجر به ایجاد گاف هایی می شود که با نتایج بخش های (۲-۵) و (۳-۵) سازگار است.

شکل (۱۰-۵ ب) ساختار نواری را برای مدل NFE نشان می دهد. این شکل منطقه ی گسترش یافته را نشان می ده که می توان آن را با شکل (۱۰-۵ الف) مقایسه کرد. توجه کنید که به جز در

مرزهای منطقه که گاف‌ها ایجاد می‌شوند، منحنی‌های پاشندگی اساساً همان منحنی‌های الکترون آزاد هستند.



شکل ۱۱-۵ (الف) منحنی‌های پاشندگی در مدل الکترون آزاد در منطقه‌ی تحویل یافته (ب) همان منحنی‌ها در منطقه‌ی گسترش یافته .

مطلب فوق را بدون اثبات بیان کردیم. حال اثبات آن را بر مبنای روش پرتابگری (بخش ۷-۸) ارائه می‌کنیم.

فرض کنید به دنبال یافتن تاثیر پتانسیل بلور بر اولین نوار در شکل (۱۰-۵) هستیم. هنگامی که پتانسیل $V(x)$ را به عنوان یک پرتابگری در نظر می‌گیریم. انرژی پرتاب شده $E_1(k)$ تا مرتبه‌ی دوم پتانسیل با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود:

$$E_1(k) = E_1^{(0)}(k) + \langle \psi_{1,k}^{(0)} | V | \psi_{1,k}^{(0)} \rangle + \sum_{k,n} \frac{|\langle n, k' | V | 1, k \rangle|^2}{E_1^{(0)}(k) - E_n^{(0)}(k')} \quad (5-17)$$

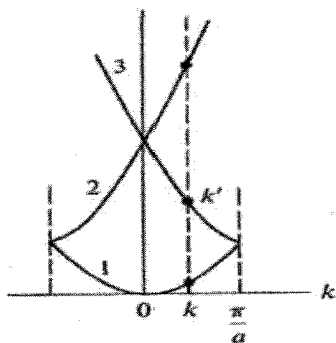
در این جا اندیس ۱ مربوط به نوار اول است که بیشتر مورد توجه ما است و شاخص بالای (۰) مربوط به مدل شبکه‌ی خالی (معادلات ۱۵-۵ و ۱۶-۵) می‌باشد. جمله‌ی دوم در طرف راست رابطه‌ی (۱۷-۵) که تصحیح مرتبه‌ی اول است، مقدار میانگین پتانسیل است. جمله‌ی سوم تصحیح مرتبه‌ی دوم است که شامل جمع روی تمام حالت‌های n, k است به جز هنگامی که این اندیس‌ها مساوی حالت $1, k$ است.

ابتدا توجه می‌کنیم که تصحیح مرتبه‌ی اول مساوی است با :

$$\langle \psi_{1,k}^{(0)} | V | \psi_{1,k}^{(0)} \rangle = \frac{1}{L} \int e^{-ikx} V(x) e^{ikx} dx = \frac{1}{L} \int V(x) dx$$

که برابر با میانگین مقدار پتانسیل تمام شبکه است. این رابطه مستقل از k است بنابراین مقداری است ثابت. اثر آن روی طیف شکل (۵-۱۰ ج) فقط جابه جایی آن به میزان ثابتی است، بدون این که هیچ گونه تغییری در شکل و انرژی طیف ایجاد کند. از آن جا که این جمله به هیچ نکته ای که در اینجا مورد نظر ما است منجر نمی شود، آن را مساوی صفر می گیریم که می تواند با جابه جایی تراز صفر انرژی انجام شود.

بنابراین باید تصحیح مرتبه ی دوم در معادله ی (۵-۱۷) را بررسی کنیم. ابتدا بیان می کنیم که کمیت $\langle n, k' | V | 1, k \rangle$ به جز برای حالت $k' = k$ مساوی صفر است (از بین می رود)، که k' و k هر دو محدود به منطقه ی اول می باشند. همان گونه که در شکل (۵-۱۲) نشان داده شده است، تنها حالت هایی که توسط پریشیدگی با حالت $1, k$ جفت شده اند، آن هایی هستند که مستقیماً بالای این حالت قرار دارند.



شکل ۵-۱۲ فقط حالت هایی که در فضای مستقیماً بالای حالت $\psi_{1,k}^{(0)}$ قرار دارند، توسط پریشیدگی با آن جفت می شوند.

مطلب فوق بستگی به تقارن انتقالی پتانسیل بلور $V(x)$ دارد. از آن جا که اختلاف انرژی در مخرج جمله ی سوم رابطه ی (۵-۱۷) به سرعت با افزایش n افزایش می یابد، تأثیر عمده بر نوار ۱ از شدگی آن با نوار ۲ ناشی می شود. بنابراین می توان نوشت:

$$E_1(k) \cong E_1^{(0)}(k) + \frac{|V_{-\gamma\pi/a}|^2}{E_1^{(0)}(k) - E_2^{(0)}(k)} \quad (5-18)$$

که $V_{-\gamma\pi/a}$ مؤلفه فوریه پتانسیل است. یعنی

$$V_{-\gamma\pi/a} = \frac{1}{L} \int V(x) e^{+i(\gamma\pi/a)x} dx$$

با جای گزینی مقادیری برای $E_1^{(0)}(k)$ و $E_2^{(0)}(k)$ یعنی $E_1^{(0)}(k) = \hbar^2 k^2 / 2m_0$ و می توان $E_2^{(0)}(k) = \hbar^2 (k - 2\pi/a)^2 / 2m$ یک عبارت صریح برای $E_1(k)$ به دست آورد. توجه کنید همان گونه که در شکل (۵-۱۰) ملاحظه می شود اگر $0 < k < \pi/2$ باشد با انتقال آن قسمتی از منحنی الکترون آزاد که در بازه $-\pi/a < k < -\pi/2$ قرار دارد نوار دوم به دست می آید. بنابراین عبارت فوق برای $E_1^{(0)}(k)$ است ولی این واقعاً ضروری نیست. زیرا اگر پتانسیل ضعیف باشد، $|V_{-\gamma\pi/a}|^2$ خیلی کوچک و جمله ی دوم رابطه ی (۵-۱۸) در مقایسه با جمله ی اول آن کوچک و قابل صرف نظر کردن است. به بیان دیگر $E_1(k) \cong E_1^{(0)}(k)$ و اثر پتانسیل شبکه قابل چشم پوشی است.

یک نقطه در فضای k وجود دارد که نتیجه گیری فوق را نقض می کند: نقطه ی $k = \pi/a$ در لبه ی منطقه ی بریلون. در این نقطه انرژی های $E_1^{(0)}(k)$ و $E_2^{(0)}(k)$ مساوی اند [یادآوری می کنیم که در آن جا نوارهای ۱ و ۲ بر یکدیگر مماس اند. شکل (۵-۱۰) ج را ملاحظه کنید]، مخرج جمله ی پریشیدگی در رابطه ی (۵-۱۸) صفر می شود و بنابراین تصحیح پریشیدگی بسیار بزرگ

$$V(x) = \sum_G V_G e^{iGx}$$

که عمل جمع روی تمام مقادیر مجاز k انجام شده است. ضرب فوریه V_k با رابطه ی زیر بیان می شود:

$$V_k = \left(\frac{1}{L}\right) \int_b^t V(x) e^{-ikx} dx$$

ولی اگر $V(x)$ تناوبی باشد (مانند حالت مربوط به یک بلور)، فقط مقادیر $K=G$ در جمع فوق سهم اند. یعنی برای

$K \neq G$ داریم $V_K = 0$ یک پتانسیل تناوبی را می توان به صورت زیر بسط داد:

$$V(x) = \sum_G V_G e^{iGx}$$

می توان نشان داد که پراونتز مخرج کسر رابطه ی (۵-۱۷) ضرب فوریه $V_{k-k=G}$ است و این پراونتز به جز در $k-k=G$ در بقیه حالات صفر می شود.

می شود. از آن جا که تئوری پریشیدگی فرض شده است که تصحیح کوچک باشد، نتیجه می گیریم که این تئوری در همسایگی لبه های منطقه ی بریلیون نمی تواند درست باشد. در عوض باید در این نواحی از تئوری پریشیدگی تبهگن^۱ استفاده کرد که در آن هر دو نوار ۱ و ۲ به طور هم زمان و در موقعیت مساوی بررسی می شوند. مقادیر انرژی به دست آمده به صورت زیر است (Ziman ۱۹۶۳):

$$E_{\pm}(k) = \frac{1}{2} \left\{ E_1^{(0)} + E_2^{(0)}(k) \pm \left[(E_2^{(0)}(k) - E_1^{(0)}(k))^2 + 4|V_{-\gamma\pi/a}|^2 \right]^{1/2} \right\} \quad (5-19)$$

علامت مثبت مربوط به تغییر شکل نوار بالایی (نوار ۲) نزدیک لبه ی منطقه ی بریلیون است و علامت منفی مربوط به تغییر شکل نوار پایینی یعنی نوار ۱ باشد.

حال مقادیر $E_1^{(0)}(k)$ و $E_2^{(0)}(k)$ را در رابطه ی (۵-۱۹) جای گزین می کنیم و $E_+(k)$ و $E_-(k)$ را در نزدیکی لبه های منطقه بریلیون رسم می کنیم. بدین ترتیب طیفی که در شکل (۵-۱۱) الف) نشان داده شده است به دست می آید و در حالت خاص گاف انرژی E_g در نقطه ی $k = \pi/a$ مساوی اختلاف $E_+(k) - E_-(k)$ محاسبه می شود. با استفاده از رابطه ی (۵-۱۹) به سادگی در می یابیم که

$$E_g = 2|V_{-\gamma\pi/a}| \quad (5-20)$$

یعنی گاف های انرژی دو برابر مولفه ی فوریه پتانسیل بلوری است. در نتیجه نوار ۱ را به اندازه ی مقدار $|V_{-\gamma\pi/a}|$ پایین می آید و نوار ۲، به اندازه ی همان مقدار افزایش می یابد و این منجر به یک گاف انرژی می شود که در رابطه (۵-۲۰) بیان شده است.

فرمول (۵-۱۹) را هم چنین می توان برای یافتن گاف انرژی که از مرکز منطقه ی بریلیون، در محل برخورد نوارهای ۲ و ۳ ایجاد می شود استفاده کرد، به جز این که $E_2^{(0)}(k)$ و $E_3^{(0)}(k)$ به ترتیب به جای $E_1^{(0)}(k)$ و $E_2^{(0)}(k)$ جای گزین شده اند. هم چنین $V_{-\gamma\pi/a}$ به جای جمله پتانسیل قرار گیرد. این کار همان طور که در شکل (۵-۱۱) الف) نشان داده شده است، منجر به شکافتگی نوارهای ۲ و ۳ با یک گاف انرژی $2|V_{-\gamma\pi/a}|$ می شود. واضح است که از این روش می توان هم برای یافتن شکافتگی نوارها و هم گاف های متناظر در همه ی نقاط مناسب استفاده کرد.

علاوه بر نتایج فوق دو نتیجه کیفی از تحلیل فوق به دست می آید. اول آن که هرچه نوار بالاتر باشد عرض آن بیش تر است. این نکته با مراجعه به مدل شبکه خالی در شکل (۱۵-۵ الف) نتیجه می شود. زیرا در آن جا انرژی با k^2 افزایش می یابد. دوم آن که هر چه انرژی بالاتر باشد، گاف باریک تر می شود. این نکته از این واقعیت نتیجه می شود که گاف متناسب با مؤلفه ی فرویه ی پتانسیل بلور است. ولی توجه کنید که با افزایش انرژی (در بحث فوق از $V_{-\pi/a}$ به $V_{-\pi/a}$) مرتبه ی مؤلفه ی فرویه نیز افزایش می یابد. از آن جا که فرض شده است پتانسیل خوش رفتار باشد، با افزایش مرتبه، مؤلفه ها به سرعت کاهش می یابند و این منجر به کاهش در گاف انرژی می شود. بنابراین نتیجه می شود، هرچه مقیاس انرژی را بالا ببریم، نوارها عریض تر و گاف ها باریک تر می شوند. یعنی الکترون بیش تر و بیش تر شبیه یک ذره ی آزاد رفتار می کند. این با تصویر کیفی که در بخش (۲-۵) ارائه شد سازگار است.

از آن جا که بیش ترین اثر پتانسیل بلور در نزدیکی نقاطی در فضای k اعمال می گردد که دو نوار با هم تماس پیدا می کنند، این رفتار را دقیق تر بررسی می کنیم. اگر فرمول پرشیدگی تبهگن (۱۷-۵) را بر شکافتگی نوارهای ۲ و ۳ در مرکز منطقه اعمال کنیم در می یابیم که برای k کوچک $(k \ll \pi/a)$ ؛

$$E_r(k) = E_B + |V_{-\pi/a}| + \frac{\hbar^2}{2m_0} \alpha k^2 \quad (5-21)$$

$$E_r(k) = E_B - |V_{-\pi/a}| - \frac{\hbar^2}{2m_0} \alpha k^2 \quad (5-22)$$

که پارامتر α با رابطه زیر بیان می شود:

$$\alpha = 1 + \frac{4E_B}{E_g} \quad (5-23)$$

و $E_B = \hbar^2 (2\pi/\alpha)^2 / 2m_0$ انرژی نقطه ی B در شکل (۱۰-۵ ج) است. این نتایج به چندین دلیل خیلی جالب هستند.

الف) معادله ی (۲۱-۵) نشان می دهد که برای یک الکترون در نزدیکی انتهای نوار سوم، $E \sim k^2$ است (از اولین دو جمله ی طرف راست صرف نظر می کنیم زیرا مقادیر ثابتی هستند) این مشابه رابطه ی پاشندگی یک الکترون آزاد است. به بیان دیگر در آن جا الکترون هم چون

یک الکترون آزاد با جرم مؤثر m^* رفتار می کند. جرم مؤثر توسط رابطه ی زیر بیان می شود و با جرم الکترون آزاد متفاوت است.

$$m^* = m_0 / \alpha$$

با مراجعه به رابطه ی (۲۳-۵) ملاحظه می شود که با افزایش گاف انرژی E_g ، جرم مؤثر افزایش می یابد. چنین رابطه ای بین m^* و E_g در مطالعه نیمه رساناها، رابطه ای آشنا است.

ب) معادله ی (۲۲-۵) نشان می دهد که برای یک الکترون در نزدیکی بالای نوار دوم $E \sim -k^2$ است، که شبیه یک الکترون آزاد است، به جز این که بنابر واقعیت تعجب برانگیز جرم مؤثر منفی است. چنین رفتاری بسیار متفاوت با رفتار یک الکترون آزاد است و البته دلیل آن در پتانسیل بلور نهفته است. هم چنانکه بعداً (در فصل ۶) خواهیم دید، پدیده جرم مؤثر منفی در نزدیکی بالای نوار مکرراً در جامدات به خصوص در نیمه رساناها اتفاق می افتد.

تاکنون ما خود را محدود به بررسی شبکه یک بعدی کرده ایم، ولی می توان با یک شیوه سراسر این بررسی را به شبکه های دو یا سه بعدی تعمیم داد. همان گونه که انتظار داریم مجدداً در می یابیم که شروع با مدل شبکه ی خالی و منظور کردن پتانسیل بلور منجر به ایجاد گاف های انرژی می شود. علاوه بر این، گاف های انرژی در مرزها منطقه ی بریلون ایجاد می شوند.

۷-۵ گاف انرژی و بازتاب براگ

در بحث مدل الکترون تقریباً آزاد، توجه خود را معطوف به مقادیر انرژی کردیم. ولی پریشیدگی نیز تابع را تغییر می دهد، حال این تغییر را مطالعه می کنیم. اگر تئوری پریشیدگی را بر شبکه ی خالی یک بعدی اعمال کنیم، در خواهیم یافت که تابع حالت اولین نوار در شکل (۱۱-۵ الف) با رابطه ی زیر بیان می شود.

$$\Psi_{1,k} = \Psi_{1,k}^{(0)} + \frac{V_{-r\pi/a}}{E_1^{(0)}(k) - E_r^{(0)}(k)} \Psi_{r,k}^{(0)} \quad (5-24)$$

که مجدداً به خاطر شکل پتانسیل و همین طور اختلاف انرژی در مخرج، عبارت جمع پرشیدگی به فقط یک جمله کاهش می یابد که شامل تابع حالت نوار دوم $\Psi_{r,k}^{(0)}$ می باشد.

توابع $\psi_{1,k}^{(0)}$ و $\psi_{r,k}^{(0)}$ مربوط به یک الکترون آزاد است. $\psi_{r,k}^{(0)} \sim e^{ikx}$ نمایان گر یک موج رونده به راست و $\psi_{r,k}^{(0)} \sim e^{i(k-\pi/a)x}$ نمایان گر یک موج رونده به چپ است (توجه کنید که $|k| < \pi/a$). بنابراین اثر پتانسیل شبکه، معرفی یک موج رونده علاوه بر موج الکترون فرودی است. این موج جدید به وسیله پراکندگی الکترون توسط پتانسیل بلور ایجاد می شود. اگر k نزدیک به لبه ی منطقه ی بریلیون نباشد، ضریب $\psi_{r,k}^{(0)}$ در رابطه ی (۵-۲۴) قابل چشم پوشی است یعنی:

$$\psi_{1,k} \cong \psi_{1,k}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \quad (5-25)$$

و الکترون مانند یک الکترون آزاد رفتار می کند و آثار پتانسیل قابل چشم پوشی است. و این با نتیجه ای که در بخش (۵-۶) به آن رسیدیم سازگار است.

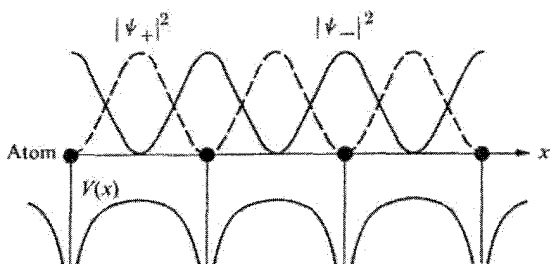
در نزدیکی لبه منطقه ی بریلیون، مخرج کسر در جمله ی مربوط به تصحیح رابطه ی (۵-۲۴) خیلی کوچک می شود، جمله ی پرشیدگی بزرگ می شود و معنی آن این است که شکل رابطه ی (۵-۲۴) بی اعتبار می شود. همان گونه که در بخش (۵-۶) بیان شد حال باید از تئوری پرشیدگی تبهگن استفاده کرد که در آن توابع حالت $\psi_{1,k}^{(0)}$ و $\psi_{r,k}^{(0)}$ در موقعیت مساوی بررسی می شوند. در می یابیم که در لبه ی منطقه ی بریلیون

$$\psi_{\pm}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{1,\pi/a}^{(0)}(x) \pm \psi_{r,\pi/a}^{(0)}(x)] = \frac{1}{\sqrt{2L}} (e^{i(\pi/a)x} \pm e^{-i(\pi/a)x}) \quad (5-26)$$

تابع $\psi_{+}(x) \sim \cos(\pi/a)x$ است و بنابراین تابع احتمال متناسب است با $|\psi_{+}(x)|^2 \sim \cos^2(\pi/a)x$. این تابع الکترون را به گونه ای توزیع می کند که عمدتاً روی هسته قرار گیرد (یادآوری می کنیم که مبدأ، $x=0$ در مرکز یون در نظر گرفته شده است. شکل (۵-۱۳) را ملاحظه نمایید) و از آن جا که در آن جا پتانسیل بیشترین مقدار خود را دارد، انرژی این توزیع کم است. علاوه بر آن تابع $\psi_{+}(x)$ متناظر با انرژی در بالای نوار ۱ یعنی نقطه ی A در شکل (۵-۱۱) الف است.

در مقابل تابع $\psi_{-}(x) \sim \sin \frac{\pi}{ax}$ الکترون خود را (همان گونه که شکل ۱۳-۵ نشان می دهد) اغلب بین یون ها قرار می دهد. این ناحیه متناظر است با انتهای نوار ۲ در شکل (۵-۱۱) الف یعنی

نقطه ی A_+ . بنابراین به دلیل وجود دو توزیع مختلف برای یک مقدار $k = \frac{\pi}{a}$ و این که توزیع‌ها انرژی‌های مختلفی دارند، گاف انرژی ایجاد می‌شود.



شکل ۱۳-۵ توزیع‌های خاص الکترون‌هایی که توسط توابع ψ_+ و ψ_- توصیف می‌شوند.

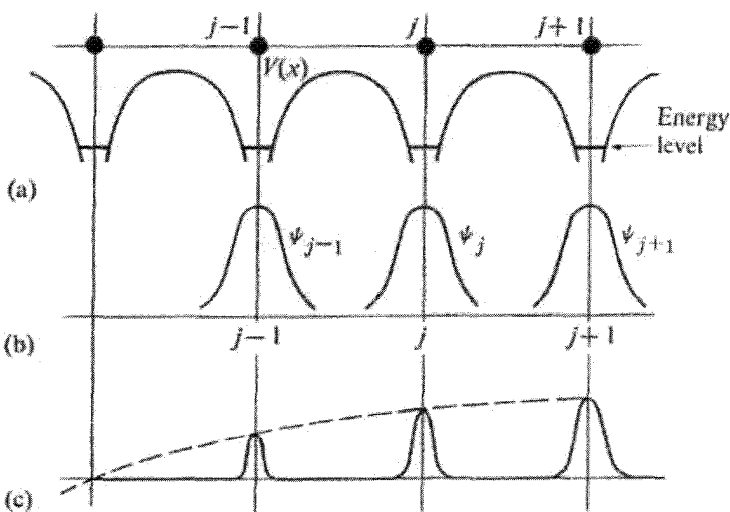
اگر رابطه ی (۲۶-۵) را از نقطه نظر پراکندگی دقیقاً بررسی کنیم، در می‌یابیم که در لبه‌ی منطقه‌ی بریلیون $k = \frac{\pi}{a}$ پراکندگی آن قدر قوی است که موج بازتابی همان دامنه‌ی موج فرودی را دارد. هم‌چنان که در بالا دیدیم، الکترونی که توسط موج ایستاده $\cos \pi / ax$ یا $\sin \pi / ax$ نمایش داده می‌شود اصلاً شبیه یک ذره‌ی آزاد نیست. نتیجه‌ی جالب این است که سرعت الکترون به عنوان یک موج ایستاده در $k = \frac{\pi}{a}$ صفر است. این یک نتیجه‌ی عمومی است که در تمام مرزهای منطقه معتبر است و نتیجه‌ی آن است که اغلب در بخش‌های بعدی منطقه منظور می‌گردد.

ملاحظه کرده‌ایم که پتانسیل تناوبی پراکندگی شدیدی در $k = \frac{\pi}{a}$ ایجاد می‌کند. از بخش (۳-۶)، (ارتعاشات شبکه) یادآوری می‌کنیم که این پراکندگی شدید در نتیجه‌ی پراش براگ در لبه‌ی منطقه‌ی بریلیون ناشی می‌شود. در موقعیت حاضر، موج پراکنده، موج الکترونی است که طول موج آن $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ است.

در شبکه‌های دو یا سه بعدی، همان‌گونه که در بخش (۲-۶) بحث شد، شرط براگ در امتداد تمام مرزهای منطقه‌ی بریلیون ارضاء می‌شود و نتیجه‌ی آن ایجاد گاف‌های انرژی در امتداد این مرزها است و این با نتیجه‌گیری‌های بخش قبل سازگار است.

۸-۵ مدل بستگی قوی

در مدل بستگی قوی فرض شده است که پتانسیل بلور قوی باشد، که مثل این است بگوییم پتانسیل‌های یونی قوی هستند. از این فرض نتیجه می‌شود که وقتی یک الکترون در خلال حرکتش در درون شبکه توسط یک یون به دام می‌افتد، قبل از آن که به یون دیگری تونل بزند مدت زیادی در اطراف یون اول باقی می‌ماند [شکل (۱۴-۵ الف)] را ملاحظه نمایید که نشان می‌دهد انرژی الکترون به طور قابل ملاحظه‌ای کمتر از بالای سد پتانسیل است [در خلال مدت زمانی که الکترون در دام یک یون است، عمدتاً در اطراف آن یون منفرد دور می‌زند. یعنی تابع حالت آن اساساً مربوط به یک اوربیتال اتمی است و از اتم‌های دیگر متأثر نیست. اغلب اوقات الکترون قویاً مقید به اتم خودش است. تحلیل ریاضی این مدل باید این واقعیت مهم را بازتاب دهد.



شکل ۵-۱۴ مدل بستگی قوی (الف) پتانسیل بلور، (ب) تابع موج اتمی، (ج) تابع بلوخ مربوطه.

هم چنان که در بخش (۶-۵) گفته شد مدل بستگی قوی (TB) در درجه‌ی نخست برای توصیف نوارهای باریک و پایین که برای آنها شعاع لایه اتمی خیلی کمتر از ثابت شبکه است مناسب می‌باشد. در این جا اوربیتال‌های اتمی فقط اندکی به واسطه‌ی اتم‌های دیگر جامد تغییر می‌یابند. یک مثال نوار d است که در فلزات واسطه بسیار مهم است.

با یک اوربیتال اتمی $\phi_v(x)$ آغاز می‌کنیم که انرژی آن در یک اتم آزاد E_v است. می‌خواهیم آثار حضور اتم‌های دیگر جسم جامد را روی آن مطالعه کنیم. اندیس v اوربیتال اتمی را مشخص می‌کند.

ابتدا حالت یک بعدی: لازم است که یک تابع بلوخ مناسب انتخاب کنیم، و از آن جا که این انتخاب یگانه نیست، رابطه‌ی زیر شکل قابل قبولی را ارائه می‌دهد.

$$\psi_k(x) = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{j=1}^N e^{ikx_j} \phi_v(x - X_j) \quad (5-27)$$

که جمع روی تمام اتم‌های شبکه گسترش دارد. مختصه‌ی X_j ، موقعیت زامین اتم را معین می‌کند. در شبکه‌ی یک بعدی $X_j = ja$ ثابت شبکه است. تابع $\phi_v(x - X_j)$ اوربیتال اتمی است که در اطراف زامین اتم است. این تابع در همسایگی X_j بزرگ است ولی همان گونه که شکل (۱۴-۵) نشان می‌دهد با دور شدن از نقطه‌ی X_j ، تابع به سرعت کاهش می‌یابد.

هنگامی که به جایگاه همسایه‌ی X_{j+1} یا X_{j-1} برسیم، تابع $\phi_v(x - X_j)$ آن قدر کوچک شده که تقریباً قابل نظر کردن است. به بیان دیگر تنها یک هم پوشی کوچک بین اوربیتال‌های اتمی همسایه وجود دارد. این فرضیه‌ی اساسی مدل بستگی قوی است. ضریب $N^{1/2}$ که در رابطه‌ی (۲۷-۵) وجود دارد برای اطمینان از این است که تابع ψ_k به یک هنجار شده است (اگر اوربیتال اتمی ϕ_v نیز هنجار باشد).

حال به خواص تابع $\psi_k(x)$ همان گونه که در رابطه‌ی (۲۷-۵) تعریف شد بر می‌گردیم. ابتدا لازم است بررسی کنیم که آیا این تابع، تابع بلوخ است، یعنی آیا می‌توان آن را به شکل رابطه‌ی (۳-۵) نوشت. بدین منظور رابطه‌ی (۲۷-۵) را به صورت زیر بازنویسی می‌کنیم.

$$\psi_k(x) = \frac{1}{N^{1/2}} e^{ikx} \sum_{j=1}^N e^{-ik(x-X_j)} \phi_v(x - X_j)$$

حال به راحتی در می‌یابیم که ضریبی که توسط جمع فوق تعریف می‌شود تناوبی، با دروهی تناوبی مساوی ثابت شبکه، a است. بنابراین تابع $\psi_k(x)$ به راستی شکل بلوخ را دارد. یعنی همان گونه که شکل (۱۴-۵) نشان می‌دهد این تابع یک موج الکترون منتشر شونده را توصیف می‌کند.

توجه کنید که در نزدیکی مرکز یون زام، تابع $\psi_k(x)$ به صورت زیر تحویل می‌یابد.

$$\psi_k(x) \sim e^{ikx_j} \phi_v(x - X_j) \sim \phi_v(x - X_j) \quad (5-28)$$

یعنی تابع بلوخ متناسب با اوربیتال اتمی است. بنابراین در همسایگی یون زام، اوربیتال های بلور بیشتر شبیه یک اوربیتال اتمی رفتار می کند که این با فرضیه بنیادی فیزیکی مدل بستگی قوی سازگاری دارد.

بنابراین تابع $\psi_k(x)$ هم در بایست ریاضی قضیه ی بلوخ و هم فرضیه ی بنیادی مدل بستگی قوی را برآورده می کند، و چنین تابعی یک اوربیتال مناسب است. حال از این تابع برای محاسبه انرژی نوار استفاده می کنیم.

بر طبق مکانیک کوانتومی، انرژی الکترونی که با تابع ψ_k توصیف می شود به صورت رابطه ی زیر بیان می شود.

$$E(k) = \langle \psi_k | H | \psi_k \rangle \quad (5-29)$$

که H همیلتونی الکترون^۱ است. با جایگزینی ψ_k از رابطه ی (۵-۲۷) خواهیم داشت:

$$E_k = \frac{1}{N} \sum_{j,j'} e^{ik(X_j - X_{j'})} \langle \phi_v(x - X_{j'}) | H | \phi_v(x - X_j) \rangle \quad (5-30)$$

که جمع دو گانه ی j و j' و روی تمام اتم های شبکه گسترش دارد. توجه کنید که هر جمله در جمع تابعی است از اختلاف $X_j - X_{j'}$ ، نه افراداً X_j یا $X_{j'}$. بنابراین به ازای هر انتخاب خاصی از j جمع روی نتیجه ی مشابهی می دهد و از آن جا که j می تواند N مقدار متفاوت اختیار کند، جمله مساوی می آید که به رابطه ی زیر منجر می شود.

$$E(k) = \sum_{j=N/2}^{(N-1)/2} e^{ikX_j} \langle \phi_v(x) | H | \phi_v(x - X_j) \rangle \quad (5-31)$$

که در رابطه ی (۵-۳۰) به طور اختیاری $X_{j'}$ را مساوی صفر اختیار کرده ایم. با جدا کردن جمله ی $j=0$ از بقیه، می توان عبارت فوق را به صورت زیر نوشت:

۱- همیلتونی H یک عملگر کوانتومی است که نمایان گر انرژی کل ذره به صورت است. اولین جمله ی طرف راست نشان دهنده انرژی جنبشی و جمله دوم انرژی پتانسیل را نشان می دهد. عبارت (۵-۲۹) برای انرژی موجه به نظر می رسد زیرا جمله طرف راست مقدار میانگین انرژی در مکانیک کوانتومی است.

$$E(k) = \langle \phi_v(x) | H | \phi_v(x) \rangle + \sum_j e^{ikX_j} \langle \phi_v(x) | H | \phi_v(x - X_j) \rangle \quad (5-32)$$

اولین جمله، انرژی است که الکترون باید داشته باشد تا کاملاً اطراف اتم $j = 0$ جای گزیده گردد، در حالی که جمله ی مربوط به آثار الکترونی است که به اتم های دیگر تونل می زند. انتظار می رود که جملات جمع فوق تنها برای نزدیک ترین همسایه ها قابل ملاحظه باشند. یعنی $j = 1$ و $j = -1$ زیرا اگر فراتر از این نقطه افزایش یابد، هم پوشی بین توابع مربوطه و تابع حالت در مبدأ قابل چشم پوشی است شکل (۱۴-۵). هم چنین توجه کنید از آن جا که جمله ی دوم (۵-۳۲) شامل خاصیت جای گزیده نشدن الکترون است، این جمله مسئول ساختار نواری است و در این جا مورد توجه ما است.

به منظور ارزیابی $E(k)$ ، بر طبق رابطه ی (۵-۳۲) لازم است هامیلتونی H با دقت بیشتری بررسی شود. عبارت این کمیت به صورت زیر بیان می شود.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (5-33)$$

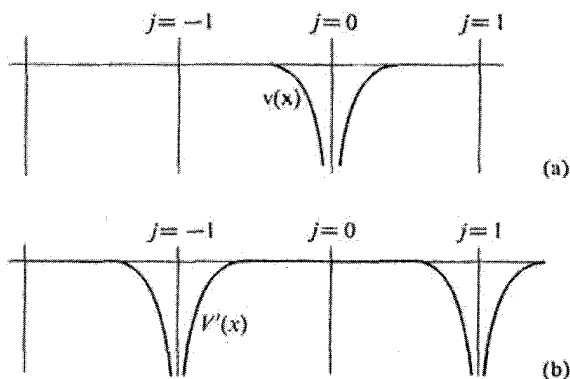
که $V(x)$ پتانسیل بلور است. با نوشتن این پتانسیل به صورت جمع پتانسیل های اتمی خواهیم داشت:

$$V(x) = \sum v(x - X_j) \quad (5-34)$$

در استفاده از این رابطه برای ارزیابی اولین جمله ی رابطه ی (۵-۳۲) در می یابیم که ساده تر است $V(x)$ را به صورت جمع دو جمله بشکافیم

$$V(x) = v(x) + V'(x) \quad (5-35)$$

که $v(x)$ پتانسیل اتمی مربوط به اتم در مبدأ $V'(x)$ پتانسیل اتمی مربوط به تمام اتم های دیگر می باشد. این پتانسیل به ترتیب در شکل های (۱۵-۵ الف و ب) رسم شده اند. توجه کنید



شکل ۵-۱۵ شکافتگی پتانسیل بلور به (الف) یک پتانسیل اتمی و (ب) باقیمانده ی پتانسیل بلور.

که $V'(x)$ در همسایگی مبدأ کوچک است. حال می توان اولین جمله ی (۵-۳۲) را به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$\langle \phi_v(x) | H | \phi_v(x) \rangle = \langle \phi_v(x) | \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + v(x) \right] | \phi_v(x) \rangle \quad (5-36)$$

$$+ \langle \phi_v(x) | V'(x) | \phi_v(x) \rangle$$

اولین جمله در طرف راست مساوی E_v انرژی اتمی است؛ زیرا عملگر مربوطه، همیلتونی یک ذره آزاد است. جمله دوم، انتگرالی است که می توان مقدار آن را محاسبه کرد. در می یابیم که این انتگرال مقدار ثابتی است که آن را به $-\beta$ نمایش می دهیم.

$$\beta = - \int \phi_v^*(x) V'(x) \phi_v(x) dx \quad (5-37)$$

علامت منفی به این دلیل منظور شده است که β یک عدد مثبت باشد از آن جا که مقدار تابع $\phi_v(x)$ تنها در نزدیکی مبدأ قابل ملاحظه است و $V'(x)$ در آن جا کوچک است، β یک کمیت کوچک می باشد. با جمع دو جمله ی فوق خواهیم داشت:

$$\langle \phi_v(x) | H | \phi_v(x) \rangle = E_v - \beta \quad (5-38)$$

حال به جمله مربوط به برهم کنش، یعنی سیکما در رابطه ی (۵-۳) بر می گردیم. جمله ای که شامل بر هم کنش با نزدیک ترین همسایه در $X_1 = a$ است، شامل یک انتگرال است که می توان آن را به صورت زیر نوشت:

$$\langle \phi_v(x) | H | \phi_v(x-a) \rangle = \langle \phi_v(x) | -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + v(x-a) | \phi_v(x-a) \rangle \quad (5-39)$$

$$+ \langle \phi_v(x) | V'(x-a) | \phi_v(x-a) \rangle$$

اولین جمله طرف راست مساوی $E_v \langle \phi_v(x) | \phi_v(x-a) \rangle$ است، که یک کمیت قابل چشم پوشی است زیرا دو تابع $\phi_v(x)$ و $\phi_v(x-a)$ در اطراف دو اتم مختلف متمرکز شده اند و هم پوشی قابل ملاحظه ای ندارند. جمله ی دوم اطراف راست رابطه ی (۵-۳۹) مقداری است ثابت که آن را به γ نشان می دهیم.

$$\gamma = - \int \phi_v^*(x) V'(x-a) \phi_v(x-a) dx \quad (5-40)$$

γ گرچه کوچک است ولی هنوز صفر نیست، زیرا $V'(x-a)$ در نزدیکی مبدا ($x=0$) قابل ملاحظه است. (البته در $x=a$ این طور نیست). پارامتر γ انتگرال هم پوشی نامیده می شود زیرا به هم پوشی بین اوربیتال های i که در اطراف دو اتم همسایه متمرکز شده اند، بستگی دارد. انتگرالی که از جمله ی $-1 = z$ در جمع رابطه ی (۵-۳۲) ناشی می شود و مربوط به اتم طرف چپ مبدا است، جوابی شبیه (۵-۳۹) دارد زیرا توابع اتمی متقارن هستند.

با جای گزینی نتایج فوق در (۵-۳۲) و محدود کردن جمع فقط به نزدیک ترین همسایه ها در می یابیم که:

$$E(k) = E_v - \beta - \gamma \sum_{j=1}^z e^{ikX_j} \quad (5-41)$$

که می توان آن را به صورت زیر نوشت

$$E(k) = E_v - \beta - 2\gamma \cos ka \quad (5-42)$$

این همان رابطه ای است که به دنبال آن بودیم. این رابطه نوار انرژی را به صورت تابعی از k بر حسب پارامترهای خوش تعریف به دست می دهد که می توانیم آن ها را از اطلاعات مان از انرژی اتمی و اوربیتال های اتمی محاسبه نماییم.

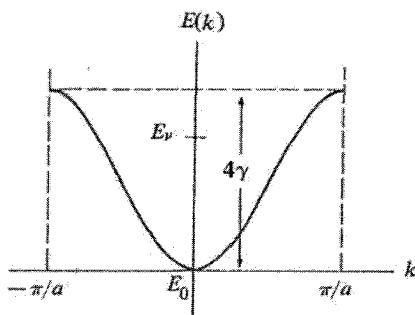
معادله ی (۵-۴۲) را می توان به شکل مناسب تری نوشت:

$$E(k) = E_0 + 4\gamma \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) \quad (5-43)$$

که E_0 برابر است با

$$E_0 = E_v - \beta - 2\gamma \quad (5-44)$$

انرژی $E(k)$ برحسب k در شکل (۵-۱۶) رسم شده است، که k محدود به اولین منطقه ی بریلیون است. [گرچه $E(k)$ برحسب k تناوبی است و این با خاصیت (i) در بخش (۵-۴) سازگاری دارد.] ملاحظه می شود: همان گونه که انتظار می رفت، تراز اتمی اصلی E_v پهن شده و به نوار انرژی تبدیل می شود. انتهای نوار که در $k=0$ قرار دارد مساوی E_0 است و پهنای آن مساوی 4γ است.



شکل ۵-۱۶- منحنی پاشندگی در مدل بستگی قوی.

همان گونه که انتظار می رود انتهای نوار E_0 پایین تر از E_v است، زیرا یکی از آثار حضور اتم های دیگر خاموش کردن پتانسیل در درون سیستم است. (به شکل ۱۴-۵ مراجعه نمایید). الکترون علاوه بر E_0 ، یک مقدار انرژی دارد که با جمله ی دوم معادله ی (۵-۴۳) بیان می شود. این انرژی از نوع انرژی جنبشی است و از این واقعیت ناشی می شود که اینک الکترون قادر است درون بلور حرکت کند.

عرض نوار، 4γ و متناسب با انتگرال هم پوشی است. این امر قابل قبول است زیرا همان گونه که در بخش ۲-۵ ملاحظه شد، هرچه هم پوشی بزرگ تر باشد، برهم کنش قوی تر و در نتیجه نوار عریض تر خواهد بود.

وقتی الکترون در نزدیکی انتهای نوار یعنی جایی که k کوچک است قرار دارد، با در نظر گرفتن تقریب $\sin\left(\frac{ka}{\rho}\right) \sim \frac{ka}{\rho}$ می توان نوشت:

$$E(k) - E_0 = \gamma a^2 k^2 \quad (5-45)$$

که همان شکل رابطه ی پاشندگی یک الکترون آزاد است. الکترون در آن ناحیه از فضای k مانند یک الکترون آزاد که به جرم مؤثر m^* عمل می کند به طوری که:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2a^2 \gamma} \quad (5-46)$$

دیدیم جرم مؤثر با عکس انتگرال هم پوشی γ متناسب است. این امر قابل قبولی است، زیرا هر چه هم پوشی بیشتر باشد، الکترون ساده تر می تواند تا از یک اتم به اتم دیگر تونل بزند و بنابراین اینرسی (یا جرم) الکترون کوچک تر می شود. متقابلاً یک هم پوشی کوچک منجر به یک جرم بزرگ یعنی یک الکترون تنبل می شود. البته در مدل بستگی قوی، فرض شده است که هم پوشی کوچک باشد که دلالت بر یک جرم مؤثر بزرگ می کند.

الکترونی که نزدیک بالای نوار است، رفتار غیر معمول نشان می دهد اگر k' را به صورت $k' = \pi/2 - k$ تعریف کنیم، و انرژی $E(k)$ را نزدیک نقطه ی بیشینه بسط دهیم، با استفاده از رابطه ی (5-43) به رابطه ی زیر می رسم:

$$E(k') - E_{\max} = -\frac{a^2}{2} \gamma k'^2 \quad (5-47)$$

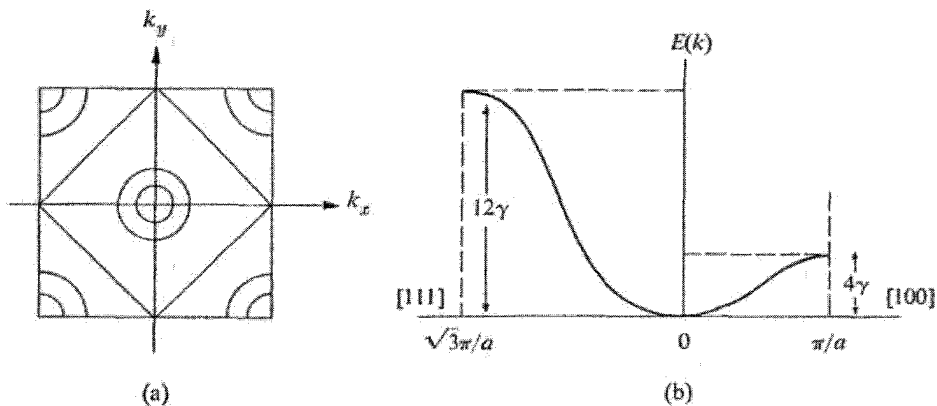
که نشان می دهد الکترون مانند یک ذره با جرم مؤثر منفی رفتار می کند.

$$m^* = -\frac{\hbar^2}{a^2 \gamma} \quad (5-48)$$

این با نتایج به دست آمده بر مبنای مدل الکترون تقریباً آزاد سازگاری دارد. بررسی فوق را می توان با یک روش سر راست به سه بعد تعمیم داد. بنابراین برای یک شبکه ی مکعبی ساده انرژی نوار با رابطه ی زیر بیان می شود.

$$E(k) = E'_0 + 4\gamma \left[\sin^2\left(\frac{k_x a}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{k_y a}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{k_z a}{2}\right) \right] \quad (5-49)$$

که E'_0 انرژی انتهایی نوار است. پربندهای انرژی برای این نوار در صفحه ی k_x و k_y در شکل (۱۷-۵ الف) و منحنی های پاشندگی در امتداد جهت های $[100]$ و $[111]$ در شکل (۱۷-۵ ب) نشان داده شده اند. انتهای نوار در مبدأ $k=0$ قرار دارد و الکترون در آن جا مانند یک ذره ی آزاد با جرم مؤثری است که با رابطه ی (۴۶-۵) بیان می شود. بالای نوار در گوشه ی منطقه ی بریلیون در امتداد جهت $[111]$ قرار دارد یعنی در $\left[\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right]$ الکترون در آن جا که جرم مؤثر منفی دارد که با رابطه ی (۴۸-۵) بیان می شود. عرض نوار مساوی 12γ است.



شکل ۱۷-۵ الف) پربندهای انرژی برای یک شبکه مکعبی ساده در مدل بستگی قوی. (ب) منحنی های پاشندگی در امتداد جهت های $[100]$ و $[111]$ برای یک شبکه ی مکعبی ساده در مدل بستگی قوی.

در این بررسی از مدل بستگی قوی ملاحظه کردیم چگونه در نتیجه ی برهم کنش بین اتم های درون جسم جامد تراز اتمی پهن شده و به نوار تبدیل می شوند. در این حالت هر تراز اتمی به نوار مربوطه ی خود منجر می شود و هر نوار بازتاب مشخصه ی تراز اتمی است که از آن ایجاد شده است.

به عنوان نتیجه ملاحظه می کنیم که هر دو مدل الکترون تقریباً آزاد و بستگی قوی اگر چه از نقطه نظرهای مختلفی شروع می شوند ولی منجر به نتایج کیفی مشابهی می شوند. نتایج اصلی هر دو مدل به صورت زیر است (الف) در مرزهای منطقه بریلیون گاف انرژی ایجاد می شود. (ب) یک

الکترون نزدیک انتهای نوار هم چون یک ذره ی آزاد با جرم مؤثر مثبت رفتار می کند (ج) یک الکترون در نزدیکی بالای نوار مانند یک ذره ی آزاد با جرم مؤثر منفی رفتار می کند.

۹-۵ محاسبات نوارهای انرژی

در چند بخش گذشته بعضی از روش های محاسبه ی نوارهای انرژی مورد بحث واقع شد، ولی این روش ها یعنی مدل های الکترون تقریباً آزاد و بستگی قوی بسیار خام تر از آن هستند که استفاده از آن ها برای نوارهای واقعی مفید باشد و به توان آن ها را با نتایج تجربی مقایسه کرد. بنابراین در این بخش بعضی از روش های کلی که برای محاسبه ی نوارهای واقعی بکار می رود را بررسی می کنیم. از آن جا که این یک موضوع پیشرفته است به یک زمینه ی قوی در مکانیک کوانتومی و دقت در عملیات مفصل ریاضی نیاز دارد. ولی بحث ما بیشتر کیفی، خلاصه و گاهی گذرا است با مراجعه به کتاب هایی که در بخش کتاب شناسی پایان این فصل آمده است موضوع را با تفصیل بیشتر مطالعه کند.

چندین روش مختلف برای محاسبه ی نوارهای انرژی استفاده شده است که هر کدام از آن ها را مورد بحث قرار می دهیم.

روش یاخته ای^۱

روش یاخته ای قدیمی ترین روشی است که برای محاسبات نواری مورد استفاده قرار گرفته است (Wigner and Seitz 1932). این روش به طور موفقیت آمیز برای فلزات قلیایی بویژه Na و k به کار می رود. ما در این جا Na را به عنوان مثال در نظر می گیریم.

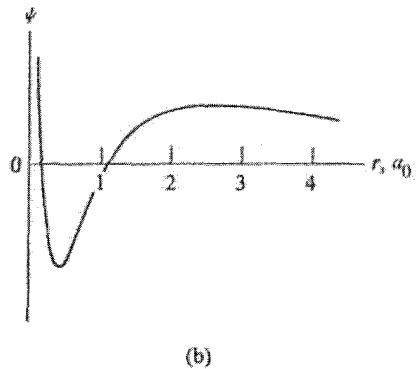
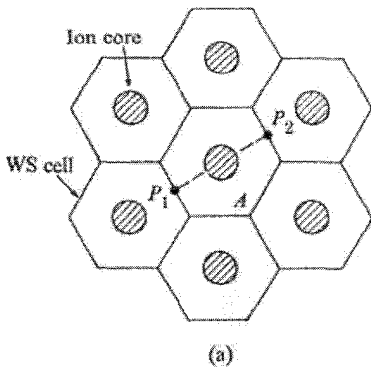
معادله ی شرودینگر که به دنبال حل آن هستیم به صورت زیر است:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\psi_{\mathbf{k}} = E(\mathbf{k})\psi_{\mathbf{k}} \quad (5-50)$$

که $V(\mathbf{r})$ پتانسیل بلور و $\psi_{\mathbf{k}}$ تابع بلوخ است. در این جا ما فقط به نوار $3s$ علاقه مندیم. این معادله را نمی توان به طور تحلیلی حل کرد و باید به روش تقریبی رو آوریم.

وقتی از روش یاخته ای استفاده می کنیم، بلور را به یاخته های واحد تقسیم می کنیم. همان گونه که در شکل (۵-۱۸) نشان داده شده است، هر اتم در وسط یاخته ی خودش قرار می گیرد. چنین یاخته ای که به نام یاخته ویگنر - سایتس (WS) موسوم است با رسم صفحات عمود منصف خطوطی که یک اتم (مثلاً اتم A) را به همسایگانش وصل می کند و در نظر گرفتن حجم محصور بین این صفحات ساخته می شود. (روشی که برای ساختن یاخته ی ویگنر - سایتس ذکر شد با روشی که برای ساختن منطقه ی بریلیون در فضای k به کار رفت قابل مقایسه است). برای سدیم که ساختار bcc دارد، یاخته ی WS شکل یک چند وجهی منظم دارد (مشابه شکل (۵-۸) ب) ولی در فضای مستقیم).

برای حل معادله ی (۵-۵۰)، فرض می کنیم، الکترون وقتی که در یک یاخته ی خاص (مثلاً یاخته ی A) است، فقط از پتانسیل یون داخل آن یاخته تأثیر می پذیرد و تأثیر یون های درون یاخته های دیگر بر الکترون درون یاخته ی A قابل چشم پوشی است. زیرا هر کدام از این یاخته ها به طور متوسط توسط الکترون های رسانش دیگر اشغال شده اند که این الکترون ها پوششی برای یون ها ایجاد می کنند و اثر پتانسیل آن ها را به شدت کاهش می دهند. برای اطمینان از این که تابع ψ_k شکل تابع بلوخ را ارضا می کند، لازم است که در $u_k = e^{ik \cdot r} u_k$ تناوبی و شامل نقاط مقابل یاخته یعنی نقاط P_1 و P_2 در شکل (۵-۱۸) الف) باشد.



شکل ۵-۱۸ الف) یاخته ی WS (ب) تابع موج ψ_0 در انتهای نوار ۳S برای سدیم به صورت تابعی از فواصل شعاعی و برحسب واحدهای شعاع بوهر.

اساساً روش کار واضح است: تلاش می‌کنیم معادله‌ی (۵-۵۰) را در یک یاخته‌ی منفرد حل کنیم، پتانسیل یک یون آزاد را برای $V(r)$ در نظر می‌گیریم که می‌توان آن را در فیزیک اتمی یافت. مثلاً در سدیم $V(r)$ پتانسیل مغزیون Na^+ است. به هر جهت هنوز خیلی مشکل است در بایست‌های تناوبی بودن تابع را بر شکل واقعی یاخته اعمال کنیم. برای غلبه بر این مانع ویگنر و سایتس، به ای یاخته، کره‌ی WS را با همان حجم یاخته‌ی واقعی جایگزین کردند. با استفاده از این فرض‌هایی که پتانسیل و شرایط تناوبی، را ساده می‌کنند، می‌توان معادله‌ی شرودینگر را به صورت عددی حل کرد. زیرا معمولاً یک حل تحلیلی برای آن نمی‌توان یافت. تابع موج ψ_0 در انتهای نوار، $k=0$ ، در شکل (۵-۱۸) نشان داده شده است. تابع موج در مقادیر دیگر k نزدیک انتهای نوار را می‌توان به طور تقریبی به صورت زیر نوشت:

$$\psi_k \cong \frac{1}{V^{1/2}} e^{ik \cdot r} \psi_0 \quad (5-51)$$

که شکل بلوخ را دارد.

این روش هم چنین قادر است انرژی $E(k)$ را به دست آورد. انرژی E_0 انتهای نوار را می‌توان از همان محاسبات که ψ_0 را می‌دهد به دست آورد. انرژی در هر نقطه‌ی دیگر k با استفاده از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$E(k) = \left\langle \psi_k \left| -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(r) \right| \psi_k \right\rangle \quad (5-52)$$

که تابع موج ψ_0 از رابطه‌ی (۵-۵۱) جایگزین شده است. ویگنر و سایتس از انرژی که بدین طریق به دست می‌آید، برای ارزیابی انرژی همدوستی استفاده کردند که نتایج به طور رضایت بخشی با تجربه سازگار است.

یک نکته‌ی قابل ذکر در این نتایج شکل تابع موج در شکل (۵-۱۸) است. تابع موج در مغزیون نوسان می‌کند، ولی به مجرد این که از مغزیون خارج شویم تابع اساساً مقدار ثابتی است. این ثابت بودن تابع موج تقریباً در ۹۰٪ حجم یافته برابر است. بنابراین همان گونه که از رابطه‌ی (۵-۵۱) ملاحظه می‌شود، تابع موج در اغلب قسمت‌های یاخته و بنابراین در اغلب قسمت‌های بلور مانند یک موج تخت رفتار می‌کند. با نگاه بر این تابع از دیدگاه پتانسیل، در می‌یابیم، جایی که این تابع یک موج تخت است، پتانسیل مقدار ثابتی است. بنابراین به جز در ناحیه‌ی ای در مغز

یون، پتانسیل مؤثر که بر الکترون اثر می‌کند، اساساً یک مقدار ثابت است. با مشاهده‌ی حرکت الکترون در تمام بلور نتیجه می‌گیریم که الکترون در ناحیه‌ای با پتانسیل ثابت در اغلب قسمت‌های بلور حرکت می‌کند؛ تنها در خود مغز یون‌ها، پتانسیل قابل ملاحظه‌ای بر الکترون اعمال می‌گردد. این نتیجه‌ی تعجب برانگیز توضیح می‌دهد چرا مثلاً الکترون‌های رسانش در Na را اساساً می‌توان به عنوان الکترون آزاد در نظر گرفت. از لحاظ ریاضی این نتیجه‌ای از اعمال شرایط تناوبی بر تابع موج در یاخته است و به خصوص این نکته وقتی واضح خواهد بود که بفهمیم تابع موج برای الکترون ψ در اتم آزاد سدیم، در خارج از مغز یونی خیلی متفاوت با ψ_0 است. بنابراین هموار بودن تابع ψ_0 مربوط به اعمال شرایط تناوبی است و مربوط به هیچ خاصیتی از پتانسیل یونی^۱ نیست. اثر شرط تناوبی حذف پتانسیل یونی در خارج از مغز یونی است و بنابراین پتانسیل را ثابت نگه می‌دارد. بعداً خواهیم دید که این نتیجه در توسعه‌ی روش‌های دیگر محاسبه‌ی نوار انرژی مفید است.

روش یاخته‌ای علی‌رغم مفید بودن آن بیش از حد ساده شده است و در حال حاضر خیلی از آن استفاده نمی‌شود. یکی از اشکالات عمده‌ی آن این است که وقتی یاخته‌ی WS را با یک کره جای‌گزین می‌کنیم ساختار بلور را تماماً نادیده انگاشتیم. مثلاً تمام آثار عدم تقارن کاملاً پوشیده می‌شود.

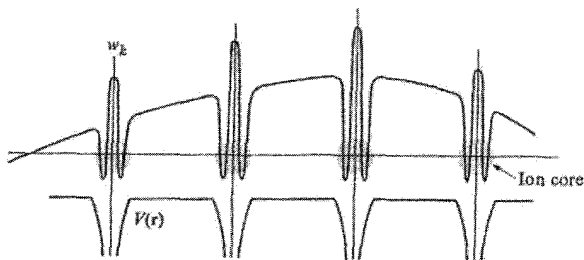
روش موج تخت گسترش یافته (HPW)^۲

روش موج تخت گسترش یافته (slater 1937) از نتایج روش یاخته‌ای استفاده می‌کند؛ ولی به گونه‌ای فرمول بندی شده است که از نارسایی‌های آن اجتناب شود. از آن جا که پتانسیل مؤثر بلور در اغلب فضای باز بین مغزهای یونی ثابت است، روش APW با فرض وجود چنین پتانسیلی شکل (۵-۱۹) آغاز می‌کند. چنین پتانسیلی، پتانسیل muffin-tin نامیده می‌شود. که پتانسیل یک یون آزاد در مغز یونی است. این پتانسیل، خارج از مغز یونی صفر است. تابع موج برای بردار موج k را می‌توان به صورت زیر در نظر گرفت:

۱- شرایط مرزی ایجاب می‌کند که مشتق تابع ψ_0 در سطح کره WS صفر شود (چرا؟). همان گونه که شکل (۱۸-۵) نشان می‌دهد، تابع در نزدیکی سطح این کره هموار است.

$$w_k = \begin{cases} \frac{1}{V^{1/2}} e^{ikr} & r > r_s \\ \text{atomic function} & r < r_s \end{cases} \quad (5-53)$$

که شعاع مغز یونی است. تابع در خارج از مغز یونی، یک موج تخت است زیرا در آن جا پتانسیل ثابت است.



شکل ۱۹-۵ پتانسیل و تابع موج در روش APW

داخل مغز یونی، تابع، یک تابع شبه اتمی است و از حل معادله ی شرودینگر برای اتم آزاد به دست می آید. هم چنین تابع اتمی (۵-۵۳) به گونه ای انتخاب می شود که در سطح کره ای که مغز یونی را تشکیل می دهد به طور پیوسته به موج تخت پیوندند. این شرط در این جا، یک شرط مرزی است.

تابع w_k شکل بلوخ را ندارد ولی می توان با ساختن یک ترکیب خطی کمبود آن را جبران کرد.

$$\psi_k = \sum_G a_{k+G} w_{k+G} \quad (5-54)$$

جمع روی تمام بردارهای شبکه ی وارونی است که شکل مناسبی دارند. ضریب a_{k+G} توسط این دریاست که ψ_k باید به گونه ای باشد که انرژی کمینه شود، تعیین می گردد. عملاً سری (۵-۵۴) خیلی سریع هم گرا می شود و تنها چهار یا پنج (و یا حتی کمتر) جمله کافی است تا به دقت لازم دست یافت.

روش APW یک روش کامل برای محاسبه ساختار نواری در فلزات است و در چند دهه گذشته به میزان زیادی مورد استفاده واقع گشته است. این روش نکات قابل توجه مسأله را به روشی کاملاً سراسر است به هم پیوند می دهد.

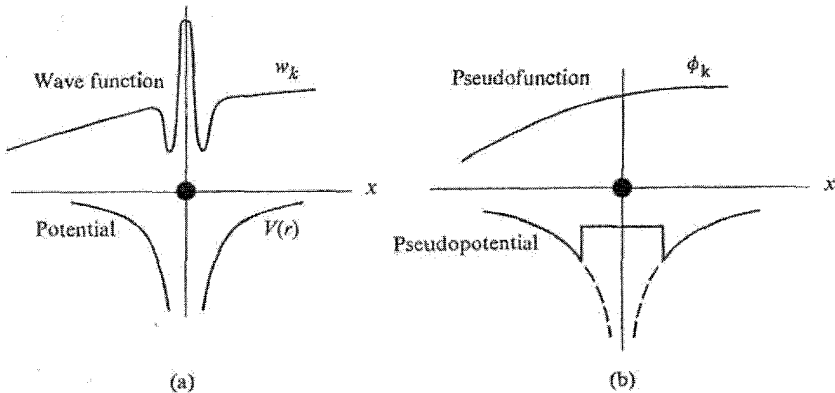
۱- بهترین ترکیب خطی رابطه ی (۵-۵۴) آن است که انرژی را تا آن جا که ممکن است کم کند

روش شبه پتانسیل

روش دیگری که برای محاسبه ساختار نواری در جامدات در بین فیزیک دان های حالت جامد مورد قبول و پسند است، روش شبه پتانسیل است. این روش بوسیله ی حالتی که تابع موج انتخاب می شود، انتخاب، و از روش های دیگر متمایز می شود. ما به دنبال تابعی هستیم که در داخل مغز یونی سریعاً نوسان کند، ولی در باقی مانده ی فضای ویگنر - سایتس مانند یک موج تخت حرکت کند. چنین تابعی در روش APW بر طبق رابطه ی (۵۳-۵) انتخاب شده است، ولی این تابع تنها انتخاب ممکن نیست. فرض کنید که w_k را چنین اختیار کنیم:

$$w_k = \phi_k - \sum_i a_i v_i \quad (5-55)$$

که ϕ_k یک موج تخت و v_i یک تابع اتمی است. جمع روی I روی همه ی لایه های اتمی که اشغال شده اند گسترش می یابد. مثلاً در Na جمع روی لایه های $1s, 2s, 2p$ گسترش دارد. ضرایب a_i چنان انتخاب شده اند که تابع w_k که نمایان گر یک الکترون $3s$ است بر تابع v_i عمود باشد. با اعمال این شرط تعامد، اطمینان حاصل می کنیم که الکترون $3s$ هنگامی که در مغز یونی است اوربیتال دیگری را که قبلاً اشغال شده، اشغال نمی کند. بنابراین از نقض اصل پائولی اجتناب کرده ایم.



شکل ۲۰-۵ مفهوم شبه پتانسیل (الف) پتانسیل واقعی و تابع موج مربوطه آن طور که توسط الکترون دیده می شود (ب) شبه پتانسیل و شبه تابع متناظر.

۱- در صورتی دو تابع ψ_1 و ψ_2 متعامدند که انتگرال $\int \psi_1^* \psi_2 d^3r = 0$ این مفهوم تعامد در مکانیک کوانتومی بسیار مفید است. توابع اتمی در لایه های گوناگون همگی متقابلاً متعامدند.

تابع w_k ، ترکیبی را دارد که به دنبال آن بودیم: توابع اتمی v_i در خارج از مغز یونی قابل چشم پوشی است و بنابراین $w_k \cong \phi_k$ ، یک موج تخت است. در مغز یونی، توابع اتمی قابل ملاحظه و به گونه ای عمل می کنند که مانند آن چه در شکل (۵-۲۰) نشان داده شده نوسانات سریعی داشته باشند.

حال اگر w_k را در معادله ی شرودینگر جای گزین نماییم خواهیم داشت:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V \right] w_k = E(k) w_k \quad (5-56)$$

با مرتب کردن جملات در می یابیم که معادله را می توان به شکل زیر نوشت:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V' \right] \phi_k = E(k) \phi_k \quad (5-57)$$

که

$$V' = V - \sum_i b_i \langle v_i | V | v_i \rangle \quad (5-58)$$

نتایج بسیار جالب اند: معادله ی (۵-۵۷) نشان می دهد که پتانسیل موثر با V بیان می شود، در حالی که رابطه ی (۵-۵۸) نشان می دهد که V' ضعیف تر از V است، زیرا جمله ی دوم طرف راست رابطه ی (۵-۵۸) تمایل به حذف جمله ی اول را دارد. این حذف پتانسیل بلور توسط توابع اتمی معمولاً قابل ملاحظه و اغلب منجر به پتانسیل خیلی ضعیف V' می شود. این پتانسیل شبه پتانسیل نامیده می شود. از آن جا که V' بسیار ضعیف است، تابع موج، همان گونه که از رابطه ی (۵-۵۷) ملاحظه می شود تقریباً موج تخت است که با ϕ_k بیان می شود و شبه تابع نامیده می شود.

شبه پتانسیل و شبه تابع در شکل (۵-۲۰) (ب) رسم شده اند. توجه کنید که پتانسیل کاملاً ضعیف است و تکنیکی در مغز یون تماماً برطرف شده ست. متناظراً تکان های سریع در تابع موج بر طرف شده به طوری که این تابع، شبیه یک تابع موج تخت هموار است.

حال می توانیم مسأله ای را که برای ما زحمت ایجاد کرده بود درک کنیم: چرا علی رغم این واقعیت که پتانسیل بلور در مغزهای یونی بسیار قوی است، الکترون های سدیم هم چون ذرات آزاد رفتار می کنند؟ ملاحظه می کنیم، وقتی اصل طرد کاملاً منظور شود، پتانسیل مؤثر خیلی

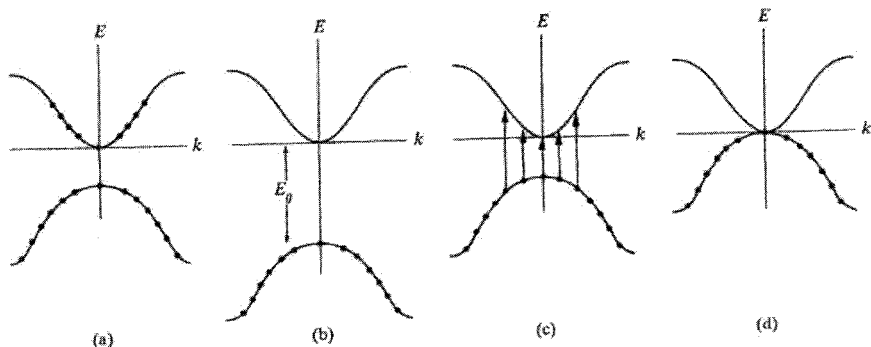
ضعیف است. رفتار ذرات آزاد، که برای مدتی یک واقعیت تجربی بود، حالا از محاسبات مکانیک کوانتومی استنتاج می شود. توضیح این پارادوکس بنیادی یکی از مهم ترین دستاوردهای روش شبه پتانسیل است. هم چنین استفاده از روش شبه پتانسیل برای محاسبه ی ساختار نواری در بسیاری از فلزات و نیمه رساناها (Be, Na, K, Ge, Si و ...) با موفقیت همراه بوده است.

روش های APW و شبه پتانسیل هم چون سیستم های مربوطه، به محاسبات عددی زیادی نیاز دراد که به سادگی می توان آن ها را با کامپیوترهای مدرن انجام داد. مدت نسبتاً زیادی برای توسعه برنامه کامپیوتری و اجراء محاسبات لازم برای یک ماده ی به خصوص طول می کشد.

۱۰-۵ فلزات، عایق ها و نیمه رساناها

جامدات به دو دسته ی عمده تقسیم می شوند فلزات و عایق ها، فلزات یا رساناها جامداتی هستند که در اثر اعمال یک میدان الکتریکی جریان الکتریکی در آن ها ایجاد می شود. برعکس، اعمال یک میدان الکتریکی هیچ جریان الکتریکی در عایق ها ایجاد نمی کند. یک ملاک ساده برای تمایز این دو دسته از جامدات، تئوری نواری انرژی می باشد. این ملاک بر اساس عبارت زیر است: یک نوار که کاملاً پر است حتی در حضور یک میدان الکتریکی، هیچ جریان الکتریکی را هدایت نمی کند. در نتیجه یک جسم جامد در صورتی مانند یک فلز رفتار می کند که بعضی از نوارها، به طور جزئی اشغال شده باشند. اثبات این عبارت را بعداً (بخش ۱۳-۵) ارائه خواهیم کرد ولی در این جا آن را به عنوان یک واقعیت موجود می پذیریم.

حال این مطلب را مثلاً برای Na به کار می بریم. از آن جا که نوارهای داخلی $2p, 2s, 1s$ تماماً اشغال شده اند، نمی توانند سهمی در جریان الکتریکی داشته باشند بنابراین باید توجه خود را فقط معطوف به بالاترین نوار اشغال شده یعنی نوار ظرفیت کنیم. در سدیم این نوار $3s$ است. هم چنان که در بخش (۵-۵) ملاحظه شد، این نوار می تواند تعداد $2N_c$ الکترون در خود جای دهد که N_c تعداد کل یاخته های واحد است. در Na که شبکه ی براوه bcc دارد، هر یاخته یک اتم دارد که یک الکترون ظرفیت (یا $3s$) دارد. بنابراین تعداد کل الکترون های ظرفیت N_c است و هم چنان که در شکل (۲۱-۵ ب) نشان داده شده است، هنگامی که این الکترون ها در نوار جای گیرند، تنها نیمی از نوار را پر می کنند. بنابراین سدیم هم چون یک فلز رفتار می کند زیرا نوار ظرفیت آن نیمه پر است.



شکل ۲۱-۵ توزیع الکترون ها در نوار در (الف) یک فلز، (ب) یک عایق، (ج) یک نیمه رسانا و (د) یک شبه فلز.

به روش مشابهی نتیجه می گیریم که کلیایی های دیگر مانند K, Li ... نیز فلزند زیرا نوارهای ظرفیت آن ها که به ترتیب $4s, 3s$ و... می باشد که تنها به طور جزئی پر شده اند. فلزات نجیب Au, Ag, Cu نیز به همان دلیل رسانا هستند. در Cu نوار ظرفیت (نوار $4s$) فقط تا نیمه پر است، زیرا هر یاخته در ساختار fcc خود تنها در یک الکترون ظرفیت سهیم است.

به عنوان مثال از یک عایق خوب، الماس (کربن) را ذکر می کنیم. در این جا، نوار بالا از هیبریداسیون های اتمی $2s$ و $4p$ ناشی می شود (بخش ۱۰-۸) و منجر به دو نوار می شود که با یک گاف انرژی از هم جدا شده اند. از آن جا که این نوارها از حالت های s و p ناشی شده اند و یاخته ی واحد در این جا شامل دو اتم است هر کدام از این نوارها می توانند $8Nc$ الکترون را در خود جای دهند. در الماس هر اتم در 4 الکترون سهیم است که در نتیجه در هر یاخته واحد، $8Nc$ الکترون ظرفیت وجود دارد. بنابراین در این جا نوار ظرفیت کاملاً پر است و همان گونه که در بالا بیان شد این ماده عایق است.^۱

۱- هیدروژن یک مورد جالب و خاص است. هیدروژن گرچه در فشار جو، گازی شکل است، در فشار زیاد جامد می شود. ولی هیدروژن جامد عایق است، و دو اتم بر یاخته ی واحد دارد که باعث پر شدن کامل نوار $1s$ می شود. تئوری پیش بینی می کند که در فشارهای خیلی زیاد (≈ 2 مگا بار) ساختار بلوری آن تغییر یافته و به حالت فلزی انتقال می یابد. آزمایش های بسیاری در دست اجرا است تا این انتقال را مشاهده کنند، و موفقیت هایی نیز گزارش شده است ولی تا زمان نوشتن این کتاب نتیجه ی قطعی هنوز بدست نیامده است. حتی گذار به حالت فلزی در فشارهای خیلی بالا ($\approx 1/5$ مگابار) برای الماس گزارش شده است. به طور هم زمان انتقال فاز به یک ساختار چهار گوش (تتراگونال) مرکز حجمی رخ می دهد. میزان کاهش در ثابت شبکه که توسط فشار ایجاد می شود در حدود 17% است.

موادی هستند که در موقعیتی بین فلزات و عایق‌ها جای می‌گیرند. اگر گاف بین نوار ظرفیت و نواری که بلافاصله بالای آن قرار دارد کوچک باشد، الکترون‌ها به سادگی تحریک حرارتی می‌شوند و از نوار ظرفیت به نوار بالای آن می‌روند. هر دو نوار نیمه پر هستند و هر دو در رسانایی الکتریکی سهیم‌اند. چنین مواردی نیمه رسانا نام دارند. Si و Ge مثال‌هایی از این موادند که به ترتیب دارای گاف‌هایی در حدود $0.7/0.1$ الکترون هستند. گاف انرژی الماس در حدود $7eV$ است. به طور اجمال می‌توان گفت یک ماده که گاف آن کمتر از $2eV$ باشد در دمای اتاق به صورت یک نیمه رسانا رفتار می‌کند.

رسانایی یک نیمه رسانای نوعی در مقایسه با رسانایی فلزات خیلی کم است، ولی هنوز چندین مرتبه‌ی بزرگی از رسانایی عایق بزرگ‌تر است. بنابراین بی‌مورد نیست که نیمه رساناها را به عنوان دسته‌ی جدیدی از مواد طبقه‌بندی کنیم، گرچه آن‌ها در دماهای خیلی پایین عایق هستند.

در بعضی از مواد گاف کاملاً از بین می‌رود و یا این‌که حتی دو نوار کمی هم پوشانی دارند. این مواد شبه فلز نامیده می‌شوند. (شکل ۲۱-۵۵) بهترین مثال شناخته شده Bi است ولی از مواد دیگر چون As, Sb و قلع سفید نیز می‌توان نام برد.

یک مسأله‌ی جالب در این مورد در عناصر دو ظرفیتی مانند Be, Mg, Zn و غیره ظاهر می‌گردد. مثلاً Be با یک اتم بریاخته، به ساختار hcp متبلور می‌شود. از آن جا که دو الکترون بریاخته وجود دارد نوار ۲s می‌بایست کاملاً پر باشد و نتیجه‌ی آن یک عایق است. در واقع Be یک فلز است ولی با رسانایی کم. دلیل ظاهر شدن این پارادوکس این است که نوارهای ۲s و ۲p در Be تا حدودی هم پوشانی دارند، به طوری که الکترون‌ها از نوار ۲s به ۲p انتقال می‌یابند و نتیجه‌اش این است که نوارها، کاملاً پر نمی‌شوند. بنابراین Be یک فلز است. شرایط مشابهی برای فلز بودن Zn, Mg, Cu و دیگر فلزات دو اتمی برقرار است.

ماده‌ای که تعداد الکترون‌های ظرفیت بریاخته‌ی واحد آن فرد است، الزاماً یک فلز است. زیرا تعداد زوجی الکترون لازم است تا یک نوار پر شود. ولی هنگامی که تعداد الکترون‌ها زوج باشد، ماده ممکن است یا عایق و یا فلز باشد و این بسته به آن است که آیا نوارها مختلف‌اند و یا هم پوشانی دارند.

۱۱-۵ چگالی حالت ها

چگالی حالت های الکترون در یک نوار برابر است با تعداد حالت های الکترون در یک بازه ی معین انرژی. این تابع در فرآیندهای الکترونی به ویژه در پدیده های ترابری بسیار مهم است. تابع چگالی حالت ها را با $g(E)$ نمایش می دهیم و با رابطه ی زیر تعریف می شود:

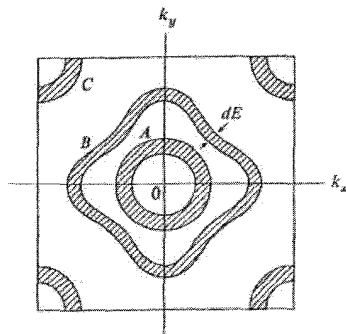
$$g(E)dE = \text{تعداد حالت های الکترونی بر واحد حجم}$$

$$(5-59) \quad \text{در بازه ی انرژی } (E, E+dE)$$

این تعریف $g(E)$ مانسته ی آن است که برای چگالی حالت های فونون $g(\omega)$ بیان شد. بنابراین بحث ما در این جا موازی و مشابه آنی است که در مورد $g(\omega)$ ارائه شد (بخش ۳-۳ و ۳-۷، به ویژه ۳-۷ را ملاحظه نمایید). برای محاسبه ی $g(E)$ ، تعریف (۵-۵۹) را به کار می بریم. لایه ای در فضای k رسم می کنیم که سطوح داخلی و خارجی آن همان گونه که در شکل (۵-۲۲) نشان داده شده است، به ترتیب پربندهای انرژی آن $E(k) = E + d$ و $E(k) = E$ باشند. اگر تعداد مقادیر مجاز k داخل این لایه بر ضخامت لایه dE ، تقسیم شود، تابع $g(E)$ مورد نظر به دست می آید.

$g(E)$ رابطه ی نزدیکی با شکل پربندهای انرژی و بنابراین ساختار نواری دارد. پیچیدگی این ساختار بازتابی است از شکل تابع $g(E)$ ، ابتدا $g(E)$ را برای حالتی که رابطه ی پاشندگی برای انرژی الکترون شکل استاندارد زیر را دارد محاسبه می کنیم.

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (5-60)$$



شکل ۵-۲۲ لایه های هم مرکز در فضای k که برای محاسبه چگالی حالت های $g(E)$ استفاده می شود.

همان گونه که قبلاً ملاحظه شد، چنین رابطه پاشندگی اغلب برای حالت هایی که نزدیک به انتهای نوار و نزدیک مبدا منطقه بریلیون واقعند، درست است. پربندهای انرژی متناظر بارابطه‌ی (۵-۶۰) کره های هم مرکزند که مبدا را در بر گرفته اند. چگالی حالت هایی که بدین طریق به دست می آید، همان گونه که در شکل (۵-۲۲) با لایه ی A مشخص شده است، شکل کروی دارد. حجم این لایه ی کروی $4\pi k^2 dk$ است که شعاع k و ضخامت لایه است. با یادآوری بخش ۳-۳ که تعداد مقادیر مجاز k بر واحد حجم در فضای k ، مساوی $\frac{1}{(2\pi)^3}$ است، نتیجه می شود که تعداد حالت های داخل لایه که انرژی آن ها در بازه ی $(E, E + dE)$ است برابر است با:

$$\text{تعداد حالت ها} = \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk \quad (5-61)$$

طرف راست رابطه ی فوق را با استفاده از رابطه ی (۵-۶۰) بر حسب E می نویسیم:

$$\text{تعداد حالت ها} = \frac{1}{4\pi^3} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{1/2} dE$$

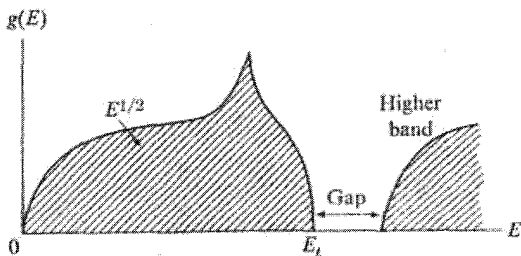
که از مقایسه ی آن را با رابطه ی (۵-۵۹) نتیجه می گیریم که:

$$g(E) = \frac{1}{4\pi^3} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{1/2} \quad (5-62)$$

با در نظر گرفتن تبهگنی اسپینی یعنی این واقعیت که هر حالت k می تواند دو الکترون با اسپین های مختلف را در خود جای دهد عبارت فوق را باید در ۲ ضرب کنیم.

$$g(E) = \frac{1}{2\pi^3} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{1/2} \quad (5-63)$$

این رابطه نشان می دهد که $g(E) \sim E^{1/2}$ ، یعنی منحنی $g(E)$ به شکل سهمی است؛ (شکل ۵-۳۲). همان گونه که در شکل (۵-۲۲) دیده می شود، تابع $g(E)$ با افزایش E ، افزایش می یابد، هرچه انرژی بیش تر باشد، شعاع نیز بزرگ تر، بنابراین حجم لایه بزرگ تر و در نتیجه تعداد حالت های درون آن بیش تر می شود. هم چنین توجه کنید که $g(E) \cong m^*$ ، یعنی هر چه جرم بیش تر باشد، چگالی حالت ها نیز بزرگ تر است.



شکل ۲۳-۵ چگالی حالت ها

نتیجه‌ی (۵-۶۳) خیلی مفید است و در بحث های بعدی مکرراً مورد استفاده قرار می گیرد. ولی باید توجه کرد که اعتبار آن محدود به ناحیه ای در فضای k است که رابطه ی استاندارد پاشندگی (۵-۶۰) ارضاء شود. با افزایش انرژی به نقطه ای می رسیم که پربندهای انرژی غیر کروی می شوند، مثل لایه ی B در شکل (۵-۲۲) که در آن معادله ی (۵-۶۳) دیگر برقرار نیست. در این حالت باید در پی فرمول پیچیده تری برای محاسبه ی $g(E)$ بود. در نتیجه شکل $g(E)$ همان گونه که در شکل (۵-۲۳) نشان داده شده است، در انرژی های پایین دیگر سهمی، نیست و شکل واقعی آن توسط رابطه ی پاشندگی نوار، $E = E(K)$ تعیین می گردد. هم چنین باید توجه کرد که در انرژی های به قدر کافی زیاد، لایه شروع می کند به قطع کردن مرزهای منطقه ی بریلیون، مثل لایه ی C در شکل (۵-۲۲) که در آن به همراه کاهش در تعداد حالت ها، حجم لایه شروع به منقبض شدن می کند. با افزایش انرژی، چگالی حالت ها سریعاً افت می کند و به کاهش خود ادامه می دهد تا این که لایه تماماً خارج از منطقه ی بریلیون جای گیرد، چگالی حالت ها کاملاً از بین می رود و صفر می شود. این نکته در شکل (۵-۲۳) نشان داده شده است. در جایی که $g(E)$ صفر می شود، انرژی به نوک نوار ظرفیت می رسد. برای بازه ی معینی از انرژی ها که بالاتراز این مقدار قرار دارد، چگالی حالت ها صفر باقی می ماند. این بازه یک گاف انرژی را تشکیل می دهد، تا این که نوار جدیدی با چگالی حالت های خاص خود ظاهر می گردد.

در فلزات ساده هم چون قلیایی ها و فلزات نجیب تا آن جا که پربندهای انرژی به نزدیکی مرزهای مناطق بریلیون می رسند، شکل استاندارد رابطه ی (۵-۶۰) برقرار باقی می ماند. در نتیجه برای این مواد، در قسمت اعظم نوار انرژی به جز نزدیکی بالای نوار، عبارت (۵-۶۳) را می توان به کار برد. گاهی اوقات آموزنده است که در انرژی های نزدیک به بالای نوار، چگالی حالت ها را با عبارتی خاص بیان کرد. چنان که در آن جا، نوار را بتوان برحسب جرم مؤثر منفی نشان داد، (که معمولاً

چنین است؛ بخش ۶-۳ را ملاحظه نمایید) این عبارت را به سادگی می توان استخراج کرد. با دنبال کردن روشی مانسته ی آن چه در به دست آوردن رابطه ی (۵-۶۳) انجام شد، نشان می دهیم که:

$$g(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2|m^*|}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E_t - E)^{1/2} \quad (5-64)$$

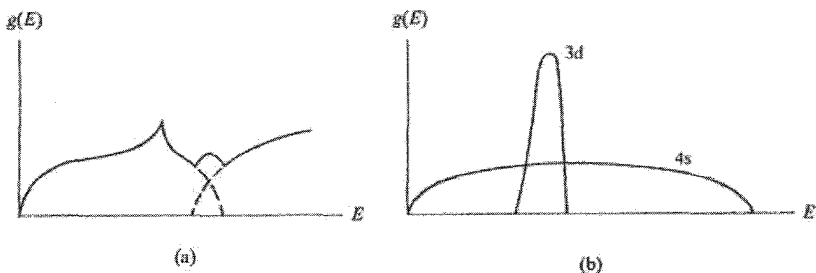
که E_t نوک نوار ظرفیت است (توجه کنید که $E < E_t$). بنابراین تابع چگالی $g(E)$ شکل یک سهمی وارونه را دارد که سهمی در بالای نوار است. شکل (۵-۲۳) را ملاحظه کنید.

شکل (۵-۲۴)، وضعیت هایی را نشان می دهد که در آن نوارها با یک دیگر هم پوشانی دارند. شکل (۵-۲۴ الف) نشان دهنده ی وضعیت فلزات دو اتمی است که در آن ها نوک نوار در انرژی بالاتری نسبت به انتهای نوار بعدی است. شکل (۵-۲۴ ب) هم پوشانی نوارهای $3d, 4s$ را در فلزات واسطه نشان می دهد. نوار $3d$ بلند و باریک است و در میان نوار عریض و تخت $4s$ قرار گرفته است.

مطابق تعریف کمیت $g(E)d(E)$ تعداد حالت هایی را می دهد که انرژی آن ها در بازه ی $(E, E + dE)$ قرار دارند. تعداد الکترون هایی که این بازه ی انرژی را اشغال می کنند، با رابطه ی زیر بیان می گردد.

$$dn(E) = f(E)g(E)dE, \quad (5-65)$$

که $f(E)$ تابع توزیع فرمی دیراک است، $f(E) = \left(1 + e^{(E-E_F)/k_B T}\right)^{-1}$ که در بخش (۴-۶) مورد بحث قرار گرفت. عبارت (۵-۶۵) مبین وجود احتمالی است که هریک از این حالت ها توسط یک الکترون اشغال شوند حاصل ضرب $f(E)g(E)dE$ تعداد الکترون های موجود در آن بازه ی انرژی را به دست می دهد.

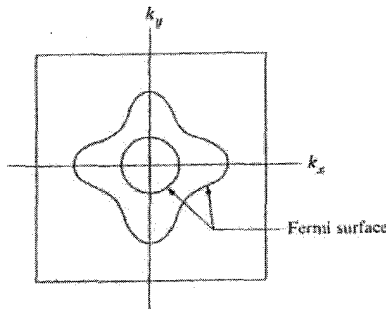


شکل ۵-۲۴ الف) شکل چگالی حالت ها هنگامی که دو نوار هم پوشی دارند، آن چنانکه مثلاً در فلزات دو اتمی اتفاق می افتد ب) هم پوشی نوارهای $3d, 4s$ در فلزات واسطه.

۱۲-۵ سطح فرمی

در بخش (۷-۴) راجع به سطح فرمی و ارتباط آن با مدل الکترون آزاد بحث کردیم. در آن جا دیدیم که اهمیت این سطح در فیزیک حالت جامد از این واقعیت ناشی می شود که تنها الکترونهایی که در نزدیکی این سطح قرار دارند در فرآیندهای تحریک حرارتی و تراسبری شرکت می کنند. در این جا مجدداً سطح فرمی را بررسی می کنیم و این بار اثرهای پتانسیل بلور را نیز منظور می نماییم. اهمیت سطح فرمی باقی می ماند، ولی شکل آن در مواردی ممکن است به طور قابل ملاحظه ای پیچیده تر از شکل کروی سطح فرمی در مدل الکترون آزاد باشد. حال اثرهای پتانسیل بلور را بر شکل سطح فرمی بررسی می کنیم و سپس در بخش بعد خواهیم دید که چگونه این تغییر می تواند خواص بلور را تحت تأثیر قرار دهد. تعیین تجربی سطح فرمی در بخش (۱۹-۵) مورد بحث قرار می گیرد.

یادآوری می کنیم سطح فرمی به عنوان سطحی در فضای k تعریف می شود که تمام حالت های داخل آن توسط الکترون های ظرفیت اشغال شده اند^۱ تمام حالت هایی که در خارج سطح قرار دارند، خالی اند. این تعریف فقط در صفر مطلق ($T = 0^\circ K$) کاملاً معتبر است، ولی هم چنان که در بخش (۶-۴) ملاحظه شده تأثیر دما بر سطح فرمی خیلی کم است و حتی در دمای اتاق و یا بالاتر نیز سطح فرمی تیز باقی می ماند. از آن جا که سطح فرمی خودش یک پریند انرژی است؛ $E(k) = E_F$ (انرژی فرمی است) شکل سطح فرمی توسط شکل هندسی پریندهای انرژی تعیین می گردد. (به همین دلیل، سطح فرمی بایستی همان تقارن های دورانی شبکه را نشان دهد).

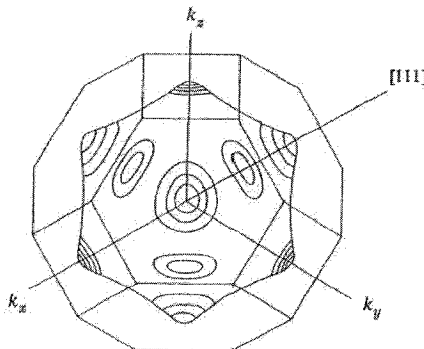


شکل ۲۵-۵ تغییر تدریجی شکل سطح فرمی، هنگامی که چگالی الکترون رسانش با ظرفیت افزایش می یابد.

۱- در بخش ۷-۴ سطح فرمی در فضای سرعت مورد بحث قرار گرفت. برای یک الکترون شبه آزاد سرعت با رابطه $v = \frac{\hbar k}{m^*}$ بیان می شود. k با v با هم متناسب اند. به شرطی که مقیاس مناسبی انتخاب گردد، یکی از بیان دو بردار برای مشخص کردن سطح فرمی در منطقه ی برلیون کافی است.

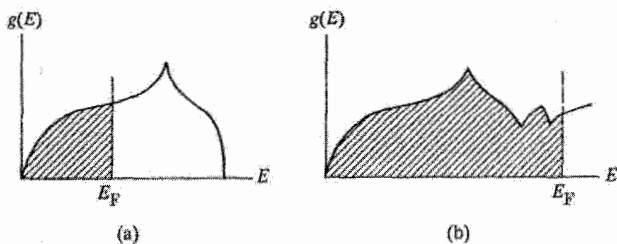
تغییر تدریجی شکل سطح فرمی که در اثر افزایش چگالی الکترون های ظرفیت صورت می گیرد، در شکل (۲۲-۵) نشان داده شده است. در n های کوچک، فقط حالت هایی که نزدیک به انتهای نوار و در مرکز منطقه ی بریلیون قرار دارند، پرمی شوند و حجم اشغال شده کره ای است در فضای k که محدود به یک سطح فرمی کروی است. با افزایش n حالت های بیشتری اشغال می شوند و حجم فرمی و همین طور سطح فرمی گسترش می یابد. این سطح در نزدیکی مبدا کروی است و همان گونه که در شکل (۲۵-۵) ملاحظه می شود (قبلاً نیز بحث شد) در پی تغییر شکل پربندها در انرژی های زیاد، با افزایش n تدریجاً شروع به تغییر شکل می کنند. به خصوص هنگامی که سطح فرمی به مرزهای منطقه ی بریلیون نزدیک می شود، تغییر در شکل سطح فرمی ممکن است کاملاً قابل ملاحظه باشد. همان گونه که بعداً در همین بخش بحث خواهد شد، هنگامی که سطح فرمی، مرزهای منطقه ی بریلیون را قطع می کند. تغییر شکل آن بیشتر خواهد بود.

فلزات قلیایی Li , Na و K به صورت ساختار bcc متبلور می شوند. منطقه ی بریلیون آن ها یک هشت وجهی است شکل (۹-۵ الف). همان طور که در بخش (۶-۵) ملاحظه شد، نوار ظرفیت تا نیمه پر است. سطح فرمی هنوز از مرزهای منطقه ی بریلیون دور است ولی از آن جا که منحنی استاندارد پاشندگی در اغلب نواحی منطقه ی بریلیون به خوبی صادق است، سطح فرمی در این گونه مواد اساساً کروی است. این مطلب را تجربه تأیید می کند و نشان می دهد که در Na و K میزان انحراف از کرویت در سطح فرمی از مرتبه ی 10^{-3} است.



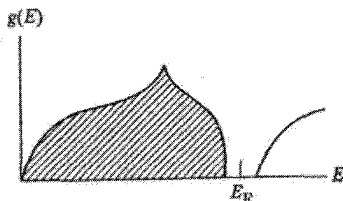
شکل ۲۶-۵ سطح فرمی در فلزات نجیب، در امتدادهای $[111]$ سطوح به سمت وجوه منطقه ی بریلیون کشیده می شوند.

فلزات Cu, Ag و Au به ساختار fcc متبلور می شوند. شکل منطقه ی بریلیون در اینجا نیز هشت وجهی است. شکل (۲۶-۵) در این جا نیز نوار ظرفیت فقط تا نیمه پر است و در نتیجه سطح فرمی که اساساً بایستی کروی باشد، شروع به دور شدن از مرزهای منطقه بریلیون می کند. این برای اغلب قسمتهای سطح فرمی درست است. در امتداد جهت $\langle 111 \rangle$ سطح فرمی به مرزهای منطقه ی بریلیون نزدیک می شود. این به خاطر شکل منطقه ی بریلیون است و این که سطح فرمی در آن ناحیه شدیداً تغییر شکل می یابد. همان طور که در شکل (۲۴-۵) ملاحظه می شود سطح فرمی در امتداد $\langle 111 \rangle$ طوری متورم می شود که با یک وجه منطقه ی بریلیون مماس می شود. به این سبب مرزهای منطقه ی بریلیون، سطح فرمی را بیرون کشیده که نتیجه آن شکلی می شود که در بالا نشان داده شده است، یعنی شکلی با هشت گردن که در امتداد $\langle 111 \rangle$ بیرون زده شده اند. بر این مبنا سطح فرمی در فلزات نجیب با آن چه که در مورد فلزات قلیایی بود کاملاً متفاوت است.



شکل ۲۷-۵ موقعیت انرژی فرمی در (الف) یک فلز یک ظرفیتی و (ب) یک فلز دو ظرفیتی.

موقعیت تراز فرمی E_F برای دسته های گوناگون فلزات در شکل (۲۷-۵) نمایش داده شده است. شکل (۲۷-۵ الف) چگالی حالت ها و موقعیت E_F را برای یک فلز یک ظرفیتی نشان می دهد، که فقط نیمی از نوار پر است و ماده به صورت یک رسانا عمل می کند. شکل (۲۵-۵ ب) یک فلز دو اتمی را نشان می دهد. در این جا نوارها تا حدودی هم پوشانی می کنند و تعداد الکترون های ظرفیت آن قدر زیاد است که سطح فرمی به نوارهای بالاتر سرایت می کند. شکل (۲۸-۵) یک رسانا را نشان می دهد که در آن نوار ظرفیت کاملاً پر است و تراز فرمی در ناحیه ای از گاف انرژی قرار گرفته است.



شکل ۲۸-۵ موقعیت انرژی فرمی در یک عایق.

حال انرژی فرمی E_F را برای حالتی که فرم استاندارد (۶۰-۵) برقرار است، تعیین می‌کنیم. همان طور که در بالا دیده شد، این فرم استاندارد برای فلزات قلیایی (و با تقریب بیش تری برای فلزات نجیب) به کار می‌رود. بر مبنای تعریف آن انرژی فرمی (در دمای $(T = 0^\circ K)$) در رابطه‌ی زیر صدق می‌کند:

$$\int_0^{E_F} g(E) d(E) = n \quad (5-66)$$

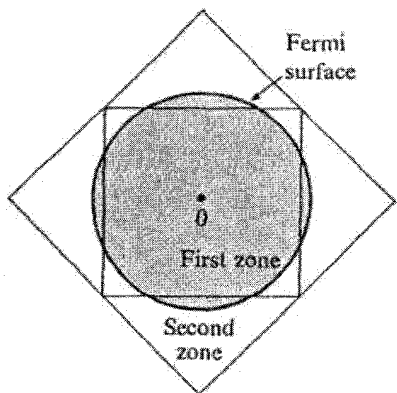
زیرا انتگرال در طرف چپ، تعداد حالت‌ها از پایین نوار، تا $E = 0$ تا سطح فرمی را می‌دهد. این تعداد باید مساوی تعداد الکترون‌ها باشد که همان عبارت (۶۶-۵) می‌باشد. اگر $g(E)$ را از رابطه‌ی (۶۳-۵) جای‌گزین کنیم و انتگرال‌گیری لازم را انجام دهیم (که به سادگی قابل اجرا است) و رابطه را بر حسب E_F حل کنیم، در می‌یابیم که:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\pi^2 n)^{2/3} \quad (5-67)$$

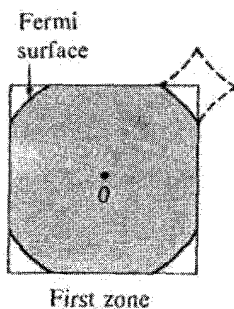
که همان نتیجه‌ی ای است که قبلاً در مورد مدل الکترون آزاد بخش (۷-۴) بیان شد. برای مشاهده‌ی لیستی از ترازهای فرمی می‌توانید به جدول (۱-۴) مراجعه نمایید. توجه داشته باشید که E_F نوعاً از مرتبه چند الکترون ولت است.

حال به سطح فرمی در فلزات چند ظرفیتی می‌پردازیم. فرض کنید که تعداد الکترون‌های ظرفیت به قدر کافی زیاد باشد. همان گونه که در شکل (۲۹-۵ الف) نشان داده شده است، سطح فرمی مرزهای منطقه‌ی بریلیون را قطع کند. در این جا از مدل شبکه‌ی خالی برای بنا کردن سطح فرمی، استفاده کردیم. بنابراین پتانسیل بلور را مساوی صفر در نظر گرفتیم. ملاحظه می‌شود که سطح فرمی به دو منطقه‌ی بریلیون گسترش یافته است. قسمتی از سطح فرمی که در منطقه‌ی اول بریلیون قرار گرفته در شکل (۲۹-۵ ج) مجدداً رسم شده است. چنان که از مناطق بریلیون مختلف

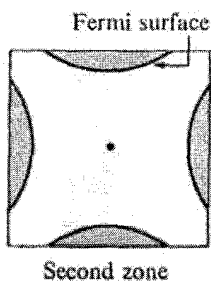
به سطح فرمی بنگریم، این سطح حتی برای یک الکترون آزاد کاملاً پیچیده به نظر می رسد. البته اگر از نمایش منطقه ای گسترش یافته استفاده کنیم، شکل کروی اصلی (۲۹-۵ الف) را می توان بازسازی کرد. ولی این جدای از تک تک شکل های (۲۹-۵ ب) یا (۲۹-۵ ج) نیست. حال اگر به یک پتانسیل ضعیف بلور بپردازیم، شکل سطح فرمی در دو منطقه ی بریلیون فقط کمی تغییر می کند. این اثر قبلاً گوشه های تیز شکل را گرد کرده بود. نکته این است که سطوح فرمی پیچیده که معمولاً در فلزات چند اتمی ظاهر می شوند، الزاماً نتیجه پتانسیل قوی بلوری (آن چنان که فکر می کردیم) نمی باشند. بلکه ممکن است عمدتاً مربوط به قطع مناطق بریلیون توسط سطوح فرمی و به هم پیوستن اجزاء مختلف سطوح فرمی باشد.



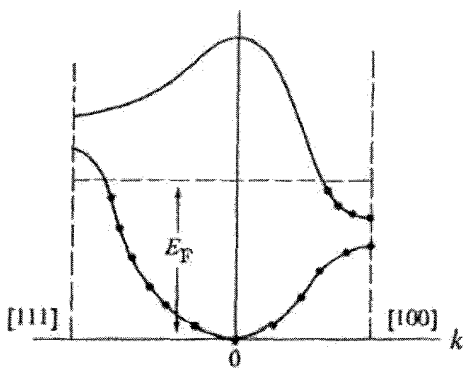
(a)



(b)



(c)



(d)

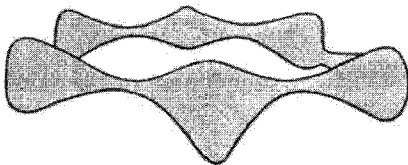
شکل ۲۹-۵ ساختار هریسن. (الف) سطح فرمی در مدل شبکه ی خالی با استفاده از نمایش گسترش یافته (ب) سطح فرمی در منطقه ی اول بریلیون. (ج) سطح فرمی در منطقه ی دوم (د) همپوشی نوارها.

روش بنا کردن سطوح فرمی بر مبنای مدل شبکه‌ی خالی، روش ساختار هریسن^۱ نامیده می‌شود.

شکل (۲۹-۵) دو نوار انرژی را در دو منطقه‌ی مختلف که در دو جهت مختلف رسم شده‌اند نشان می‌دهد. دو نوار هم پوشی دارند. نوک نوار اول در امتداد [۱۱۱] از انتهای نوار دوم در امتداد [۱۰۰] بلندتر است. تراز فرمی هر دو نوار را قطع می‌کند و هر دو نوار در فرآیند رسانش سهیم‌اند.

ذکر این نکته مهم است که در ناحیه‌ی ای که انحنای نوار به طرف پایین است یعنی در جایی که جرم موثر منفی است، تراز فرمی پایین نوار را قطع می‌کند (سمت چپ شکل (۲۹-۵)). همان گونه که در بخش (۱۷-۵) خواهیم دید، چنین وضعیتی را می‌توان بر مبنای مفهوم حفره به بهترین نحوی توصیف کرد.

شکل (۲۹-۵) آن چه را که به نام مدل دو نواری برای یک فلز نامیده می‌شود، نشان می‌دهد، جریان الکتریکی توسط حامل‌های هر دو نوار، یعنی الکترون‌ها در نوار بالایی و حفره‌ها در نوار پایینی انتقال می‌یابند. از این مدل در بخش (۱۸-۵) به طور کامل استفاده خواهد شد.



شکل ۳۰-۵ سطح فرمی برلیوم.

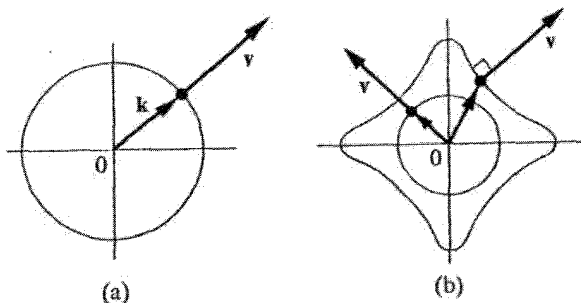
شکل (۳۰-۵) سطح فرمی را برای Be (که Be Coronet نامیده می‌شود) نشان می‌دهد. در چنین شکل‌های پیچیده‌ای، سطح فرمی کاملاً شبیه به شکلی است که با استفاده از ساختار هریسن به دست می‌آید. توجه کنید که با توجه به ساختار شش گوشه‌ی Be انتظار وجود تقارن شش گوشه‌ی را داریم.

۱۳-۵ سرعت الکترون بلوخ

حال حرکت الکترون های بلوخ در جامدات را مطالعه می کنیم. یک الکترون در حالتی که با $\hbar k$ مشخص می شود. با سرعتی که مستقیماً به انرژی آن حالت بستگی دارد، در داخل بلور حرکت می کند. ابتدا یک ذره ی آزاد را در نظر می گیریم. سرعت با رابطه ی $v = \frac{P}{m_0}$ بیان می شود که P اندازه حرکت است. از آن جا که $p = \hbar k$ است، برای یک الکترون آزاد سرعت با رابطه ی زیر بیان می شود:

$$V = \frac{\hbar k}{m_0} \quad (5-68)$$

همان گونه که در شکل (۳۱-۵ الف) نشان داده شده است، سرعت متناسب و موازی با عدد موج K است.



شکل ۳۱-۵ (الف) سرعت یک (الکترون آزاد) (ب) سرعت یک الکترون بلوخ برای یک الکترون بلوخ.

سرعت نیز تابعی از k است ولی رابطه ی تابعیت آن به سادگی رابطه ی (۵-۶۸) نیست. برای به دست آوردن این رابطه، از فرمول آشنای انتشار موج استفاده می کنیم. سرعت گروه یک بسته ی موج با رابطه ی زیر بیان می شود.

$$V = \nabla_k \omega(k) \quad (5-69)$$

که ω فرکانس و k بردار موج بسته ی موج است. با به کار بردن این معادله بر موج الکترونی در بلور و در نظر گرفتن رابطه ی انیشتین $\omega = E/\hbar$ می توانیم برای سرعت الکترون بلوخ رابطه ی زیر را بنویسیم:

$$v = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(k) \quad (5-70)$$

و این بیان می‌دارد که سرعت یک الکترون در حالت k متناسب با گرادیان انرژی در فضای k است. معادله ی (۵-۱۷) را هم چنین می‌توان با نوشتن عبارت کوانتومی برای سرعت موج، احتمال متناظر با الکترون بلوخ و یافتن مقدار چشم‌داشتی کوانتومی استنتاج کنیم؛ [Mott(1936). تلویحاً فرض کرده ایم که در این جا با نوار ظرفیت سروکار داریم و بنابراین اندیس نوار را حذف کردیم، اگر چه باید روشن کنیم که عبارت (۵-۷۰) در هر نوازی معتبر است.

از آن جا بردار گرادیان متناسب با خطوط پربند است (این واقعیتی است که از آنالیز برداری می‌دانیم)؛ نتیجه می‌شود که بردار v در هر نقطه در فضای k عمود بر پربند انرژی است که از آن نقطه می‌گذرد. شکل (۵-۳۱) ب) را ملاحظه نمایید. چون این پربندها در حالت کلی غیر کروی هستند و بر خلاف حالت مربوط به یک ذره ی آزاد، در این جا سرعت الزاماً عمود بر بردار موج k نیست.

در نزدیکی مرکز منطقه ی بریلیون که انتظار می‌رود رابطه ی پاشندگی استاندارد $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ درست باشد، رابطه ی (۵-۷۰) به رابطه ی زیر متجر می‌شود.

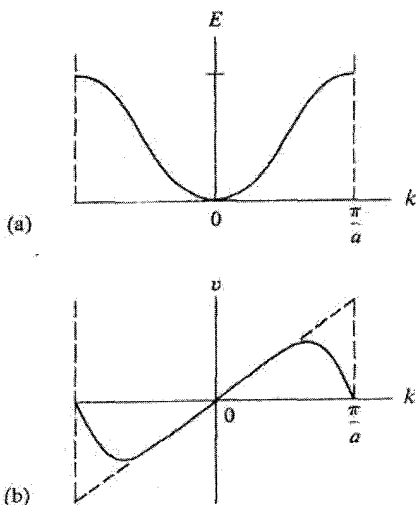
$$v = \frac{\hbar k}{m^*} \quad (5-71)$$

که به همان شکل رابطه ی مربوط به ذره ی آزاد یعنی رابطه ی (۵-۶۹) است؛ به جز این که به جای m_0 ، جرم مؤثر m^* جای‌گزین شده است، این قابل انتظار است؛ زیرا اغلب می‌گوییم که الکترون بلوخ از بسیاری جهات مانند یک الکترون آزاد رفتار می‌کند، به جز این که جرم‌های آن‌ها متفاوت است. در نتیجه همان طور که در شکل (۵-۳۱) ب) نشان داده شده است؛ در نزدیکی مرکز منطقه ی بریلیون، v موازی با k و جهت آن شعاعی و به طرف خارج است. در نزدیکی مرزهای منطقه ی بریلیون پربندهای انرژی آن چنان تغییر شکل می‌یابند که این رابطه ی ساده بین v و k از بین می‌رود، بنابراین باید از رابطه ی کلی تر (۵-۷۰) استفاده کرد.

هنگامی که یک الکترون در یک حالت معین ψ_k است، فقط به شرطی در آن حالت برای همیشه می‌ماند که شبکه تناوبی باقی بماند. بنابراین مادامی که این وضعیت برقرار است، الکترون به حرکت خود در بلور با همان سرعت v ادامه می‌دهد و پراکندگی از شبکه آن را متوقف

نمی‌کند^۱. به بیان دیگر سرعت الکترون مقدار ثابتی است. هر گونه اثری که شبکه ممکن است بر سرعت انتشار اعمال کند در انرژی $E(k)$ و در رابطه ی (۵-۷۰) وارد شده است.

البته هر گونه انحراف از تناوبی بودن شبکه باعث پراکندگی الکترون می‌شود و در نتیجه سرعت آن تغییر می‌کند. مثلاً الکترونی که در شبکه ی مرتعش حرکت می‌کند، برخوردهای بسیاری با فونون‌ها انجام می‌دهد که بر سرعت الکترون تأثیر می‌گذارد. همین طور میدان های خارجی الکتریکی و مغناطیسی باعث تغییر سرعت الکترون می‌گردد. این آثار را در بخش بعد مطالعه خواهیم کرد.



شکل ۳۲-۵ (الف) ساختار نواری و (ب) سرعت الکترون مربوط در یک شبکه ی یک بعدی، خطوط منفصل در (ب) نمایان گر سرعت الکترون آزاد است.

شکل (۳۲-۵ الف) یک ساختار نواری که بعدی نوعی را نشان می‌دهد و سرعت متناظر با آن در شکل (۳۲-۵ ب) نشان داده شده است که در این مورد به رابطه ی زیر تحویل می‌شود.

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} \quad (5-72)$$

یعنی سرعت متناسب با شیب منحنی انرژی است. ملاحظه می شود اگر k از مبدا تا لبه ی منطقه ی بریلیون تغییر کند، ابتدا سرعت به طور خطی افزایش می یابد، به یک بیشینه می رسد و سپس در لبه ی منطقه ی بریلیون سرعت به صفر کاهش می یابد. حال می خواهیم این رفتار را بر مبنای مدل الکترون تقریباً آزاد توضیح دهیم و به ویژه کاهش های به ظاهر غیر عادی سرعت در نزدیکی لبه ی منطقه ی بریلیون را توجیه کنیم. بحث زیر به بحث بخش (۷-۵) خیلی نزدیک است.

در نزدیکی مرکز منطقه ی بریلیون، الکترون با یک موج تخت $\psi_k \sim e^{ikx}$ نشان داده می شود و بنابراین $V = \frac{\hbar k}{m_0}$ که این رابطه ناحیه ی خطی شکل (۳۲-۵) را توجیه می کند. با افزایش k ، به واسطه ی پراکندگی موج آزاد توسط شبکه، یک موج جدید رونده به سمت چپ با عدد موج $k' = k - \frac{2\pi}{a}$ ایجاد می شود که با موج اصلی رونده به سمت راست با عدد موج k برهم نهاده می شود. بنابراین حالا الکترون توسط موج مرکب زیر بیان می گردد:

$$\psi_k \cong e^{ikx} + be^{-i(2\pi/a-k)x} \quad (۷۳-۵)$$

که ضریب b از تئوری پرتشیدگی معادله (۲۴-۵) به دست می آید. در مکانیک کوانتومی سرعت چنین موجی از رابطه ی زیر به دست می آید:

$$v = \frac{\hbar k}{m_0} - |b|^2 \frac{\hbar}{m_0} \left(\frac{2\pi}{a} - k \right) \quad (۷۴-۵)$$

اولین جمله، سهم موج رونده به سمت راست و دومین جمله سهم موج رونده به طرف چپ است. در مقادیر کوچک k ، ضریب b کوچک است و هم چنان که در بالا گفته شد، اساساً با رابطه ی $\frac{\hbar k}{m_0}$ بیان می شود. با افزایش k ضریب موج پراکنده شده افزایش می یابد و بنابراین دومین جمله

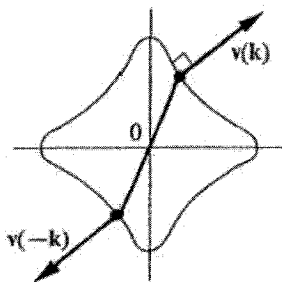
ی رابطه ی (۷۴-۵) قابل ملاحظه می شود. از آن جا که جمله ی دوم منفی است ($k < \frac{2\pi}{a}$)، در جهت حذف جمله ی اول عمل می کند. نزدیکی مرزهای منطقه ی بریلیون ضریب b آن قدر بزرگ است که سهم حذفی جمله ی دوم بیش از افزایش جمله ی اول می شود و همان گونه که ملاحظه می شود سرعت کاهش می یابد.

در مرز منطقه ی بریلیون $(k = \frac{\pi}{a})$ ، و در نتیجه ی بازتاب شدید براگ، موج پراکنده شده مساوی موج فرودی و $b = 1$ می شود، که وقتی در رابطه ی جای گزین شود، $v = 0$ می شود که با شکل (۵-۳۲) توافقی دارد. این نتیجه در بخش (۵-۷) هم قابل انتظار بود زیرا در آن جا دیدیم که در لبه ی منطقه ی بریلیون، الکترون توسط یک موج ایستاده نشان داده می شود.

حال در پی به دست آوردن نتیجه ای بر می آیم که قبلاً در بخش (۵-۱۰) استفاده شد آن نتیجه این است: یک نوار کاملاً پر هیچ جریان الکتریکی را حمل نمی کند. طبق رابطه ی (۵-۷۰) داریم.

$$V(-k) = V(k) \quad (5-75)$$

که $v(k)$ و $-v(k)$ به ترتیب سرعت الکترون در حالت های بلوخ k و $-k$ می باشند (شکل (۵-۳۳)) را ملاحظه نمایید). این معادله از رابطه ی تقارنی $E(-k) = E(k)$ نتیجه می شود، که در بخش (۵-۴) اثبات شد.



شکل ۵-۳۳ $v(-k) = v(k)$

چگالی جریان مربوط به همه ی الکترون های نوار با رابطه ی زیر بیان می شود.

$$J = \frac{1}{V} (-e) \sum_k v(k) \quad (5-76)$$

که V حجم ، نوار و $-e$ بار الکترون است. جمع روی تمام حالت های نوار بسته شده است. از رابطه ی (۵-۷۵) نتیجه می شود که جمع روی تمام نوارها صفر است یعنی $J=0$ زیرا سرعت های الکترون ها دویبه دو یکدیگر را حذف می کنند.

۱۴-۵ دینامیک الکترون در یک میدان الکتریکی

هنگامی که یک میدان الکتریکی بر جسم جامدی اعمال گردد، الکترون های آن شتاب می گیرند. مطالعه ی حرکت این الکترون ها در فضای k ساده تر است. فرض کنید که یک میدان الکتریکی \mathcal{E} بر بلور معینی اعمال گردد. نیروی $F = -e\mathcal{E}$ بر یک الکترون نوعی درون بلور وارد می شود و در نتیجه انرژی آن تغییر می کند. آهنگ جذب انرژی توسط الکترون برابر است با:

$$\frac{dE(k)}{dt} = -e\mathcal{E}.v \quad (5-77)$$

که جمله ی طرف راست، توان جذب شده توسط یک جسم متحرک است. اگر بنویسیم:

$$\frac{dE(K)}{dt} = \nabla_k E(k). \frac{dk}{dt}$$

و از عبارت (۵-۷۰) برای v استفاده کنیم، سپس آن ها را در (۵-۷۷) جایگزین نماییم به رابطه ی ساده ی زیر می رسم:

$$\hbar \frac{dk}{dt} = -e\mathcal{E} = F \quad (5-78)$$

این رابطه نشان می دهد که آهنگ تغییر k متناسب و هم جهت با نیروی F است. (یعنی خلاف جهت میدان \mathcal{E} است چون بار الکتریکی منفی است). این رابطه در دینامیک الکترون های بلوخ بسیار مهم است و به نام قضیه ی شتاب موسوم است.

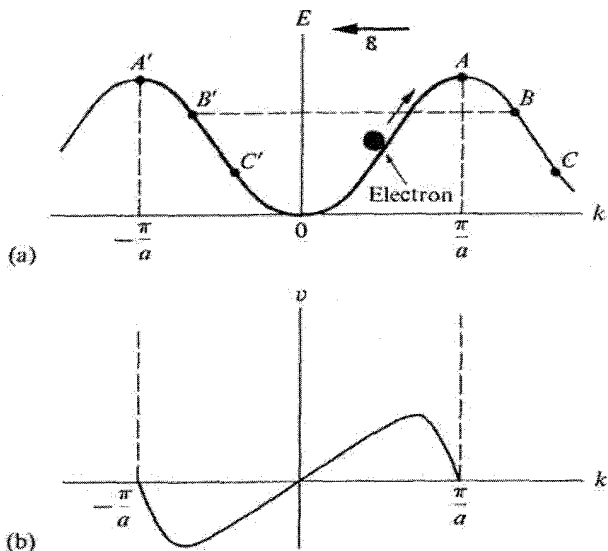
معادله ی (۵-۷۸) غیر منتظره نیست. باید به این واقعیت توجه کرد، که بردار $\hbar k$ هم چون اندازه حرکت الکترون بلوخ رفتار می کند (بخش ۳-۵). از طرفی معادله ی (۵-۷۸) بیان می کند که آهنگ زمانی تغییر اندازه حرکت مساوی نیرو است که همان قانون دوم نیوتن است.

حال نتایج قضیه ی شتاب را بررسی می کنیم. از حالت یک بعدی آغاز می کنیم. معادله ی (۵-۷۸) را می توانیم به شکل زیر بنویسیم:

$$\frac{dk}{dt} = \frac{F}{\hbar} \quad (5-79)$$

که نشان می دهد بردار موج k به طور یک نواخت با زمان افزایش می یابد. بنابراین هم چنان که در شکل (۵-۳۴) نشان داده شده است، الکترون در فضای k با افزایش t ، با آهنگ یک نواخت

حرکت می‌کند. اگر از نمایش منطقه ی افزایش یافته استفاده کنیم؛ الکترون مثلاً از $k=0$ آغاز می‌کند، به سمت بالای نوار می‌رود تا به نوک آن (نقطه ی A) می‌رسد و سپس شروع به پایین آمدن در مسیر BC می‌کند.



شکل ۳۴-۵ (الف) حرکت یک الکترون در یک میدان الکتریکی (که جهت آن به سمت چپ است). (ب) سرعت متناظر با آن.

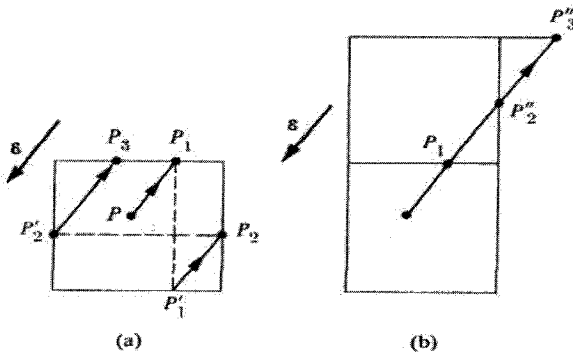
اگر از نمایش منطقه ای کاهش یافته استفاده کنیم، در آن صورت، به مجردی که الکترون از لبه ی منطقه ی در A' بگذرد فوراً در نقطه ی معادل آن A ظاهر می‌گردد. سپس به پایین آمدن در مسیر $A'B'C'$ ادامه می‌دهد. یادآوری می‌کنیم که بر طبق خاصیت تقارن انتقالی (بخش ۴-۵) نقاط B' و C' به ترتیب معادل نقاط B و C هستند، به طوری که می‌توانیم از هر کدام از این دو نمایش که خواسته باشیم استفاده کنیم.

توجه کنید که در حضور یک میدان الکتریکی، الکترون در فضای k دائم در حال حرکت است و هرگز ساکن نیست. حرکت در فضای k در نمایش منطقه ای کاهش یافته تناوبی است. زیرا الکترون بعد از یک بار عبور از منطقه، حرکت خود را تکرار می‌کند. زمان تناوب حرکت بر مبنای رابطه ی (۷۹-۵) به سادگی به دست می‌آید که مساوی است با:

$$T = \frac{\gamma\pi\hbar}{Fa} = \frac{\gamma\pi\hbar}{e\epsilon a} \quad (5-80)$$

شکل (۳۴-۵ب) سرعت الکترون هنگامی که در فضای k حرکت می کند را نشان می دهد. الکترون از نقطه $k = 0$ شروع می کند، با گذشت زمان سرعت آن افزایش می یابد، به بیشینه می رسد، سپس کاهش می یابد و بعد در لبه ی منطقه ی بریلویون صفر می شود. الکترون سپس بر می گردد و یک سرعت منفی کسف می کند و به پیش می رود. سرعتی که راجع به آن صحبت می کنیم، سرعت در فضای حقیقی است یعنی سرعت فیزیکی معمولی. در نتیجه، الکترون بلوخ در حضور میدان الکتریکی استاتیک، حرکت تناوبی نوسانی انجام می دهد و خیلی شبیه به یک الکترون آزاد است. این یکی از نتایج شگفت دینامیک الکترون در یک بلور است.

حرکت نوسانی که در بالا توصیف شد، هنوز مشاهده نشده است و دلیل آن مشکل نیست. زمان تناوب T در رابطه ی (۵-۸۰) به ازای مقادیر معمولی پارامترهای دیگر در حدود 10^{-5} S است که در مقایسه با زمان برخورد نوعی الکترون در دمای اتاق که $\tau = 10^{-14}$ ، خیلی بزرگ است. بنابراین در یک دوره ی تناوب الکترون تعداد بسیار زیادی برخورد انجام می دهد. در نتیجه حرکت تناوبی آن کاملاً محو می شود.^۱



شکل ۳۵-۵ حرکت یک الکترون در یک شبکه ی دو بعدی در حضور یک میدان الکتریکی (الف) برطبق نمایش منطقه ای کاهش یافته (ب) برطبق نمایش منطقه ای افزایش یافته.

۱- Leo Esaki و همکارانش در تلاشند (در زمان نوشتن این کتاب - مترجم) تا بوسیله رشد دادن ابر شبکه های بسیار خالص که در آن ها $\hbar \approx 50-100$ اوسیله ای بسازند که در آن $T \leq \tau$ چنین نوسان گر بلوخ را می توان به عنوان نوسان گر یا تقویت کننده استفاده کرد. این کار در نزدیک نقاطی که انرژی یک مقدار بیشینه یا کمینه دارد ممکن است.

حال وضعیت را در دو بعد بررسی می کنیم شکل (۳۲-۵) هنگامی که یک نیروی الکتریکی F اعمال گردد، الکترون با شروع از یک نقطه ی اختیاری P در فضای k بر طبق رابطه ی (۷۸-۵) به حرکت مستقیم الخط ادامه می دهد. وقتی به لبه ی منطقه ی بریلین در نقطه ی P' می رسد، در نقطه P' ظاهر می شود. بنابراین یک مسیر ضربدری نظیر شکل (۳۲-۵ الف) را طی می کند. اگر در عوض از نمایش منطقه ای افزایش یافته استفاده کنیم، (شکل ۳۲-۵ ب)، مسیر الکترون در فضای k یک خط مستقیم $P''_1 P''_2$ خواهد بود (توجه کنید که P''_1 معادل P_1 ، P''_2 معادل P_2 و غیره است). این وضعیتی است که نشان می دهد نمایش منطقه ای افزایش یافته مناسب تر از نمایش منطقه ای گسترش یافته است.

۱۵-۵ جرم مؤثر دینامیکی

هنگامی که یک میدان الکتریکی بر بلوری اعمال گردد، الکترون های بلوخ شتاب می گیرند. این شتاب را می توان به طریق زیر محاسبه نمود: از آن جا که شتاب مشتق زمانی سرعت است؛ داریم:

$$a = \frac{dv}{dt} \quad (۵-۸۱)$$

که حالت یک بعدی را در نظر گرفته ایم. سرعت تابعی از بردار موج k است در نتیجه معادله ی بالا را می توان به صورت زیر نوشت:

$$a = \frac{dv}{dk} \cdot \frac{dk}{dt}$$

که اگر سرعت را از رابطه ی (۷۹-۵) و $\frac{dk}{dt}$ را از رابطه ی (۷۸-۵) جایگزین نماییم خواهیم داشت:

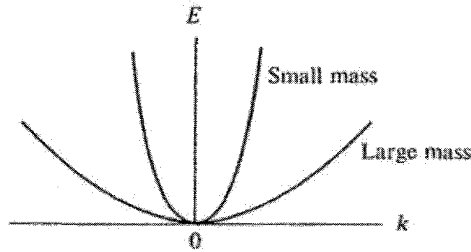
$$a = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} F \quad (۵-۸۲)$$

این رابطه شبیه قانون دوم نیوتن است به شرطی که یک جرم مؤثر دینامیکی m^* را به صورت زیر تعریف کنیم:

$$m^* = \hbar^2 / \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right) \quad (۵-۸۳)$$

بنابراین تا آن جا که حرکت در میدان الکتریکی مورد نظر است، الکترون بلوخ مانند یک الکترون آزاد رفتار می کند که جرم آن از رابطه ی (۵-۸۳) به دست می آید.

جرم m^* به طور معکوس با انحنای نوار متناسب است. جایی که انحنای یعنی $\frac{d^2E}{dk^2}$ بزرگ است، جرم کوچک است و یک انحنای کوچک نشان دهنده جرم بزرگ است شکل (۵-۳۶).



شکل ۵-۳۶ رابطه ی معکوس بین جرم و انحنای نوار انرژی.

ما قبلاً از مفهوم جرم موثر استفاده کرده ایم (بخش های ۶-۵ و ۸-۵). به جای آن وضعیت ها، حالا رابطه ی عمومی (۵-۸۳) قرار گرفته است. بنابراین اگر انرژی تابع درجه ی دومی از k باشد داریم:

$$E = \alpha k^2 \quad (5-84)$$

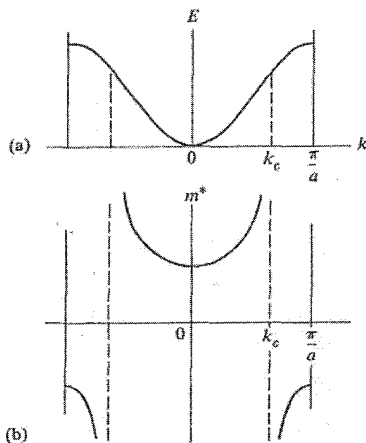
که α یک مقدار ثابتی است. از معادله ی (۵-۸۳) نتیجه می شود:

$$m^* = \hbar^2 / 2\alpha \quad (5-85)$$

که معادل بازنویسی معادله ی (۵-۸۴) به شکل استاندارد آن $E = \hbar^2 k^2 / 2m^*$ است.

شکل های (۵-۳۷ الف) و (۵-۳۷ ب) به ترتیب ساختاری نواری و جرم موثر را بر حسب k نشان می دهد. جرم موثر از رابطه ی (۵-۸۳) حساب شده است. در نزدیکی انتهای نوار، جرم مؤثر مقدار ثابت و مثبتی است زیرا رابطه ی درجه ی دوم (۵-۸۴) در نزدیکی انتهای نوار ارضا می شود. ولی با افزایش k ، m^* دیگر یک مقدار دقیقاً ثابتی نیست و تابعی از k است زیرا دیگر رابطه ی درجه ی دو (۵-۸۴) برقرار نیست.

در آن سوی نقطه ی عطف k_c جرم موثر m^* منفی می شود، زیرا این ناحیه نزدیک بالای نوار است و جرم موثر منفی قابل انتظار است (بخش های ۶-۵ و ۸-۵).



شکل ۳۷-۵ (الف) ساختار نواری و (ب) جرم مؤثر m^* برحسب k

جرم مؤثر را می توان به طور دینامیکی و با توجه به این که مطابق شکل (۳۴-۵)، به ازای $k > k_c$ سرعت کاهش می یابد، ملاحظه نمود. بنابراین شتاب منفی و در خلاف جهت نیروی اعمال شده است، و این دلالت بر یک جرم منفی دارد. معنی این جمله این است که در این ناحیه از فضای k ، شبکه آن چنان نیروی ترمزی بزرگی بر الکترون اعمال می کند که بر نیروی اعمال شده غلبه می کند و یک شتاب منفی ایجاد می کند.

نتیجه‌ی فوق را می توان به سه بعد تعمیم داد. حالا شتاب برابر است با:

$$a = \frac{dv}{dt}$$

اگر این رابطه را در مختصات کارترین بنویسیم و از روابط (۷۰-۵) و (۷۸-۵) استفاده کنیم، خواهیم داشت:

$$a_i = \sum_j \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} F_j \quad i, j = x, y, z$$

که منجر به تعریف جرم مؤثر به صورت زیر می شود:

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} \quad i, j = x, y, z \quad (۸۶-۵)$$

حالا جرم موثر یک تانوسور مرتبه ی دوم است که نه مؤلفه دارد. چنان چه رابطه ی پراکندگی را به صورت زیر بنویسیم^۱

$$E(K) = (\alpha_x k_x^2 + \alpha_y k_y^2 + \alpha_z k_z^2) \quad (5-87)$$

استفاده از رابطه ی (۵-۸۶) منجر به جرم مؤثری با سه مؤلفه: $m_{xx}^* = \frac{\hbar^2}{2\alpha_x}$ و $m_{yy}^* = \frac{\hbar^2}{2\alpha_y}$

$m_{zz}^* = \frac{\hbar^2}{2\alpha_z}$ می شود. در این حالت جرم الکترون ناهمگن است؛ و بستگی به جهت نیروی

خارجی دارد. وقتی نیرو در جهت محور k_x ، باشد، الکترون با جرم m_{xx}^* به نیرو پاسخ می گوید و در قبال نیروی در جهت k_y ، جرم موثر m_{yy} ظاهر می گردد. رابطه ای از نوع (۵-۸۷) که متناظر با پرندهای بیضوی است، در نیمه رساناها مانند Si و Ge بسیار معمول است. توجه کنید که در این حالت بر خلاف حالت الکترون آزاد، در حالت کلی شتاب در همان جهت نیروی وارده نیست.

ممکن است حالتی اتفاق افتد که یکی از α_i ها در رابطه ی (۵-۸۷) منفی شود. این بدین معنی است که جرم در جهت مربوطه منفی است، در حالی که در جهات دیگر جرم مثبت است. این نیز با رفتار الکترون آزاد کاملاً متفاوت است.

مفهوم جرم موثر از آن جهت که اغلب ما را قادر می سازد که الکترون بلوخ را مانسته ی الکترون آزاد بدانیم، بسیار مفید است. ولی الکترون بلوخ خواص غیر عادی بسیاری از خود بروز می دهد که با خواص الکترون آزاد متفاوت است.

۱۶-۵ اندازه حرکت، اندازه حرکت بلور و مبداء فیزیکی جرم مؤثر

گفتیم که یک الکترون بلوخ در حالت ψ_k آن چنان رفتار می کند که گویی اندازه حرکت $\hbar k$ را دارد. اساساً سه دلیل مختلف در دفاع از این گفته وجود دارد.

الف) تابع بلوخ شکل زیر را دارد:

$$\psi_k = e^{ik \cdot r} u_k \quad (5-89)$$

۱- این کار در نزدیکی نقاطی که انرژی یک مقدار بیشینه یا کمینه دارد ممکن است.

که چون u_k تناوبی است، اساساً به عنوان یک موج تحت با طول موج $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ ظاهر می شود. از ترکیب این رابطه با رابطه ی دو بروی، اندازه حرکت $\hbar k$ نتیجه می شود.

ب) هنگامی که یک میدان الکتریکی اعمال گردد، بردار موج مطابق رابطه ی زیر با زمان تغییر می کند:

$$\frac{d(\hbar k)}{dt} = F_{\text{ext}} \quad (5-90)$$

که بازهم مبین این است که $\hbar k$ به عنوان اندازه حرکت عمل می کند. در اینجا F_{ext} نیروی خارجی وارد بر بلور است.

ج) در فرآیندهای برخورد که شامل یک الکترون بلوخ است؛ سهم اندازه حرکت الکترون مساوی $\hbar k$ است.

این دلایل آن قدر کافی و مهم هستند که $\hbar k$ را به عنوان اندازه حرکت در نظر بگیریم. ولی در حقیقت $\hbar k$ معادل اندازه حرکت واقعی الکترون بلوخ نیست. برای این که اختلاف آن ها روشن گردد، بردار $\hbar k$ را به P_c نمایش می دهیم. یعنی:

$$P_c = \hbar k \quad (5-91)$$

از این کمیت به عنوان اندازه حرکت بلور یاد خواهیم کرد. اندازه حرکت واقعی الکترون، P را می توان با استفاده از مکانیک کوانتومی محاسبه کرد. بر طبق آن چه از مکانیک کوانتومی می دانیم اندازه حرکت میانگین با رابطه ی زیر بیان می شود:

$$P = \langle \psi_k | -i\hbar \nabla | \psi_k \rangle \quad (5-92)$$

که $-i\hbar \nabla$ ، عملگر اندازه حرکت و ψ_k تابع بلوخ است. اگر این انتگرال را با استفاده از تابع موج ψ_k محاسبه نماییم (بخش مسائل را در انتهای این فصل ملاحظه نمایید) در خواهیم یافت:

$$P = m_0 v \quad (5-93)$$

m جرم الکترون آزاد و v سرعتی است که با رابطه ی (5-70) بیان می شود. بنابراین اندازه حرکت واقعی الکترون برابر است با جرم واقعی m ضرب در سرعت واقعی v ، که یک نتیجه ی قابل قبول است.

راجع به ارتباط بین P_0 و اندازه حرکت واقعی باید گفت: از آن جا که تابع u_k در (۵-۸۹) یک مقدار ثابت نیست، تابع بلوخ ψ_k یک موج کاملاً تخت نیست، و بنابراین بردار $\hbar k$ کاملاً مساوی اندازه حرکت نیست. هم چنین، اگر $P_0 = \hbar k$ اندازه حرکت واقعی بود نیرویی که در طرف راست رابطه ی (۵-۹۰) آمده، باید نه فقط نیروی خارجی بلکه نیروی کلی باشد.

هم چنان که خواهیم دید، نیرویی توسط شبکه اعمال می گردد که بر P_0 تاثیر نمی گذارد. از نظریات فوق می توان برای توجیه جرم مؤثر استفاده کرد. از آن جا که بردار $P = m_0 v$ مساوی اندازه حرکت واقعی است، می توان نوشت:

$$m_0 \frac{dv}{dt} = F_{\text{tot}} = F_{\text{ext}} + F_L \quad (5-94)$$

که F_L و F_{ext} به ترتیب نیروی کلی و نیروی شبکه وارد بر الکترون هستند. منظور از نیروی شبکه نیرویی است که در نتیجه ی برهم کنش شبکه با پتانسیل بلور بر الکترون اعمال گردد. طرف چپ رابطه ی (۵-۹۴) را می توان بر حسب جرم مؤثر بیان کرد:

$$m_0 \frac{dv}{dt} = m_0 \frac{F_{\text{ext}}}{m^*} \quad (5-95)$$

رابطه ی فوق را می توان با مراجعه به روابط (۵-۸۱) الی (۵-۸۳) به دست آورد. با جایگزینی رابطه ی فوق در (۵-۹۴) و حل معادله بر حسب m^* خواهیم داشت:

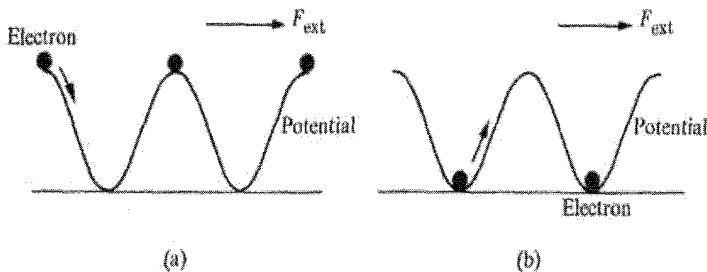
$$m^* = m_0 \frac{F_{\text{ext}}}{F_{\text{ext}} + F_L} \quad (5-96)$$

دلیل این که چرا m^* با جرم آزاد m_0 متفاوت است در وجود نیروی شبکه ی F_L نهفته است. اگر F_L خیلی کوچک باشد، جرم مؤثر خیلی نزدیک به جرم واقعی خواهد شد.

بسته به نیروی شبکه ی، جرم مؤثر m^* ممکن است کوچک تر یا بزرگ تر از m_0 یا حتی منفی باشد. فرض کنید همان طور که در شکل (۵-۳۸ الف) نشان داده شده است. الکترون در بالای پتانسیل بلور قرار گرفته باشد.

هنگامی که یک نیروی خارجی اعمال گردد، سبب می شود الکترون در امتداد منحنی پتانسیل به سمت پایین برود. در نتیجه نیروی شبکه وارد عمل می شود و بر طبق رابطه ی (۵-۹۶)، $m^* < m_0$. این همان چیزی است که در فلزات قلبایی و در نوار رسانش نیمه رساناها اتفاق می

افتد. در این جا m^* کوچک تر از m_0 است زیرا نیروی شبکه به نیروی خارجی کمک می کند. از طرف دیگر هنگامی که الکترون اساساً در انتهای منحنی پتانسیل قرار دارد شکل (۳۸-۵) ب) نیروی شبکه تمایل به مقابله با نیروی خاری دارد که نتیجه ی آن $m^* < m_0$ می شود. برای مثال این وضعیت در هالوژن های قلیایی ایجاد می شود. اگر شیب موج پتانسیل خیلی زیاد باشد، F_L از F_{ext} بزرگ تر می شود و m^* منفی می شود.



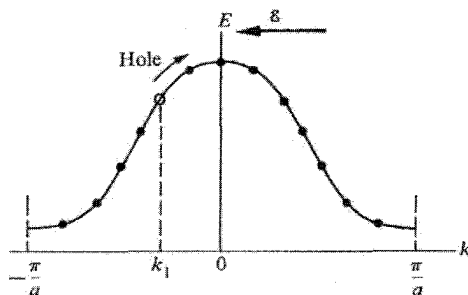
شکل ۳۸-۵ (الف) یک توزیع فضایی الکترون که منجر به یک جرم موثر کوچکتر از m_0 می شود. (ب) یک توزیع که منجر به $m^* < m_0$ می شود.

نیروی شبکه F_L که در رابطه ی (۹۴-۵) ظاهر می شود، نیرویی است که توسط نیروی خارجی ایجاد می شود. اگر $F_{ext} = 0$ باشد، سرعت ثابت است بخش (۱۳-۵) و مطابق رابطه ی (۹۴-۵)، $F_L = 0$. درست است که حتی در غیاب نیروی خارجی، از طرف شبکه نیرویی بر یک الکترون آزاد اعمال می گردد، ولی این نیرو قبلاً در حل معادله ی شرودینگر و خواص تابع حالت ψ_k را پراکنده نمی کند.

اندازه حرکت $P_0 = \hbar k$ هنوز هم کمیت خیلی مفیدی است. در مسائل دینامیک الکترون در میدان خارجی، اندازه حرکت بلور خیلی مفید تر از اندازه حرکت واقعی است. زیرا پیگیری حرکت در فضای k ساده تر از فضای حقیقی است. بنابراین ما هنوز هم از P_0 استفاده خواهیم کرد و جایی که ابهامی پیش نیاید، از آن به عنوان اندازه حرکت یاد می کنیم و حتی اندیس c را حذف می کنیم. در واقع، جرم مؤثر m^* و اندازه حرکت بلور $\hbar k$ کمیت های ساختگی اند که بتوانیم از نیروی شبکه صرف نظر کنیم و فقط بر نیروی خارجی تمرکز نماییم. نیروی شبکه را نمی توان به سادگی نیروی خارجی به دست آورد.

۱۷-۵ حفره

حفره در نواری ایجاد می شود که به جز یک حالت خالی بقیه ی حالت های آن کاملاً پر هستند. شکل (۵-۳۹) چنین حفره ای را نشان می دهد. هنگامی که دینامیک حفره را در یک میدان خارجی بررسی کنیم در می یابیم به جای بررسی تعداد بسیار زیاد الکترون هایی که نوار را پر کرده اند، مناسب تر و راحت تر این است که توجه خود را به حرکت جایگاه خالی معطوف نماییم. مفهوم حفره، مفهوم مهمی در تئوری نوار و به خصوص در نیمه رساناها است، که قسمت اصلی قطعات با ارزشی چون ترانزیستور می باشند.



شکل ۵-۳۹ حفره و حرکت آن در حضور میدان الکتریکی.

فرض کنید همان گونه که در شکل (۵-۳۹) نشان داده شده است؛ حفره در مکانی واقع شده که با بردار موج k_1 مشخص می شود چگالی جریان تمام سیستم برابر است با:

$$J_h = \frac{-e}{V} \sum_k v_e(k) \quad (5-97)$$

که جمع روی تمام الکترون های نوار بسته شده است. علامت پریم روی سیکما نشان دهنده این است که حالت k_1 محاسبه نمی شود. زیرا آن حالت خالی است. از آنجا که جمع روی نوار پر مساوی صفر است چگالی جریان (۵-۹۷) مساوی است با:

$$J_h = \frac{e}{V} v_e(k_1) \quad (5-98)$$

یعنی جریان مشابه حالتی است که گویی همه ی نوار خالی است و تنها یک الکترون با بار مثبت $+e$ در مکان k_1 قرار دارد.

حال اگر یک میدان الکتریکی که جهت آن به سمت چپ است (شکل ۳۹-۵) بر سیستم اعمال گردد، تمام الکترون ها، در فضای k با آهنگ یکسان حرکت یک نواختی به سمت راست خواهند داشت. (بخش ۳۹-۵) در نتیجه جای خالی نیز همراه با سیستم به سمت راست حرکت می کند. تغییر در جریان حفره در یک بازه ی زمانی δt را می توان از رابطه ی (۵-۹۸) بدست آورد.

$$\delta J_h = \frac{e}{V} \left(\frac{dv_e}{dk} \right)_{k_1} \frac{dk}{dt} \delta t$$

که وقتی از روابط (۵-۷۰) و (۵-۷۸) استفاده کنیم به رابطه ی زیر تحویل می شود:

$$\delta J_h = \frac{e}{v} \frac{1}{m^*(k_1)} F \delta t = \frac{1}{v} \left(\frac{-e^2}{m^*(k_1)} \right) \varepsilon \delta t \quad (5-99)$$

$m^*(k_1)$ جرم الکترونی است که حالت k_1 را اشغال کرده است.

این معادله جریان الکتریکی حفره را می دهد که توسط میدان الکتریکی ایجاد می شود و جریان قابل مشاهده است^۱. به خاطر برانگیختگی گرمایی الکترون ها به نوار بالاتر در جایی که $m^*(k_1)$ منفی است، می روند و حفره ها معمولاً در نزدیکی بالای نوار ایجاد می شوند. بنابراین مناسب است که جرم حفره را به صورت زیر تعریف کنیم.

$$m_h^* = -m^*(k_1) \quad (5-100)$$

که یک کمیت مثبت است. رابطه ی (۵-۹۹) را می توان به صورت زیر نوشت:

$$\delta J_h = \frac{1}{V} \frac{e^2}{m_h^*} \varepsilon \delta t \quad (5-101)$$

توجه کنید که جریان حفره مانند جریان الکترون در همان جهت میدان الکتریکی است.

با بررسی روابط (۵-۹۸) و (۵-۱۰۱) ملاحظه می کنیم که حرکت حفره، همراه یا بدون میدان الکتریکی مشابه حرکت یک ذره با بار مثبت e و جرم مثبت m_h^* است. مفهوم حفره مساله را به نحو قابل ملاحظه ای نسبت به وقتی که حرکت تمام الکترون های نوار مورد نظر است ساده

۱- در عمل، یک نوار فقط شامل یک حفره منفرد نیست بلکه تعداد بسیاری حفره دارد. در غیاب میدان الکتریکی جریان خالص این حفره ها صفر است. زیرا سهم جریان حفره های مختلف یک دیگر را حذف می کند و جمع عبارت (۵-۹۸) روی حفره ها صفر می شود. وقتی یک میدان الکتریکی اعمال گردد، جریان هایی تولید می شوند باهم جمع می شوند، و همان گونه که از رابطه ی (۵-۹۹) ملاحظه می شود، یک جریان خالص غیر صفر برقرار می گردد

می‌کند، و آن را به مساله یک تک ذره محدود می‌کند. از این مفهوم در بحثی که به دنبال می‌آید مکرراً استفاده خواهد شد.

مطابق رابطه ی (۵-۹۹) اگر حفره در انتهای نوار یعنی جایی که $\langle k_y \rangle > 0$ است، قرار داشته باشد، جریان با میدان مخالفت می‌کند. این بدان معنی است که سیستم همچون تقویت کننده ای عمل می‌کند که میدان از سیستم انرژی جذب کند. چنین وضعیتی بسیار نامتحمّل است زیرا معمولاً حفره در نزدیکی بالای نوار قرار دارد.^۱

۱۸-۵ رسانایی الکتریکی

قبلاً رسانایی الکتریکی را در ارتباط با مدل الکترون آزاد (بخش های ۴-۴ و ۴-۸) بحث کردیم. نتیجه ی زیر بدست آمد:

$$\sigma = \frac{ne^v \tau_F}{m^*} \quad (۵-۱۰۲)$$

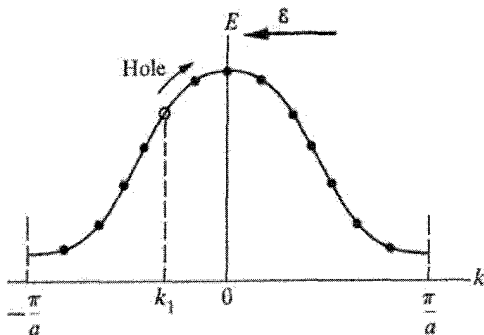
n چگالی الکترون های رسانش یا ظرفیت و τ_F زمان برخورد الکترون ها در سطح فرمی است. حال عبارت متناظری برای رسانایی الکتریکی در چهارچوب تئوری نواری استنتاج می‌کنیم. وقتی سیستم در حال تعادل است، یعنی هنگامی که هیچ میدان الکتریکی وجود ندارد، همان گونه که در شکل (۵-۴۰) الف) نشان داده شده است، مبداء دقیقاً در مرکز سطح فرمی قرار دارد. در نتیجه جریان خالص صفر است. زیرا سرعت الکترون ها دوبندو یک دیگر را خنثی می‌کنند یعنی برای هر الکترون در حالت k که سرعت آن $V(K)$ است. الکترون دیگری در حالت $-k$ قرار دارد که سرعت آن $V(-K) = -V(K)$ درست معکوس سرعت الکترون اول است. این نتیجه که در مدل الکترون آزاد بدست آمد، در تئوری نواری نیز درست است و در محاسبه صفر شدن جریان در حالت تعادل بکار می‌رود.

وقتی که میدان الکتریکی اعمال گردد، همان گونه که در بخش (۵-۱۴) بحث شد، هر الکترون با آهنگ یک نواختی در فضای k حرکت می‌کند یعنی:

۱- طرح یک تقویت کنند که براساس برچین اصلی کار کند توسط H.Kroemer ارائه شده است.

$$\delta k_x = -\frac{e\mathcal{E}}{\hbar} \delta t$$

که δt جابه جایی در بازه ی زمانی δt است.



شکل (۴۰-۵ الف) در غیاب میدان الکتریکی، مبدأ در مرکز سطح فرمی قرار دارد و جریان های الکترونی دو به دو یکدیگر را حذف می کنند. (ب) در اثر اعمال میدان الکتریکی سطح فرمی جابه جا می شود که نتیجه آن یک جریان خالص است.

از آن جا که معمولاً الکترون برای مدت زمانی که مساوی یک زمان برخورد است عمر می کند، جابه جایی متوسط برابر است با:

$$\delta k_x = -\frac{e\mathcal{E}}{\hbar} \tau \quad (۵-۱۰۳)$$

و همان گونه که در شکل (۴۰-۵ ب) نشان داده شده است، کل سطح فرمی به این اندازه جابه جا می شود. حالا الکترون هایی هستند که توسط الکترون های دیگر جبران یا حذف نشده اند. این الکترون ها که در ناحیه ی هاشور زده ی شکل قرار دارند، یک جریان خالص ایجاد می کنند. چگالی این جریان را می توان به صورت زیر محاسبه نمود:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_x &= -e\bar{v}_{FX} \times \text{چگالی الکترون های جبران نشده} \\ &= -e\bar{v}_{FX} g(E_F) \delta E \\ &= -e\bar{v}_{FX} g(E_F) \left(\frac{\partial E}{\partial k_x} \right)_{E_F} \delta k_x \end{aligned}$$

که $\bar{v}_{F,x}$ مؤلفه ی سرعت فرمی در امتداد محور x هاست و خط بالای آن نشان دهنده ی یک مقدار متوسط است.

مقدار $g(E_F)\delta E$ چگالی الکترون های جبران نشده، $g(E_F)$ چگالی حالت ها در سطح فرمی و δE انرژی حذف نشده از میدان توسط الکترون است. توجه کنید که مقدار $\frac{\partial E}{\partial k_x} = \hbar v_{FX}$ و با جایگزینی δk_x از رابطه ی (۵-۱۰۳) خواهیم داشت:

$$J_x = e^{\tau} \bar{v}_{FX}^{\tau} \tau_F g(E_F) \varepsilon \quad (5-105)$$

که زمان برخورد با τ_F نمایش داده شده است، در این جا با الکترونی سروکار داریم که در سطح فرمی قرار دارد. و باید توجه داشت که جریان در همان جهت میدان است.

در یک سطح فرمی کروی، تقارن کروی وجود دارد و می توان نوشت؛ $\bar{v}_{FX}^{\tau} = \frac{1}{3} v_F^{\tau}$ که اگر در رابطه ی (۵-۱۰۶) جایگزین گردد، نهایتاً منجر به عبارتی برای رسانایی الکتریکی می گردد.

$$\sigma = \frac{1}{3} e^{\tau} v_F^{\tau} \tau_F g(E_F) \quad (5-106)$$

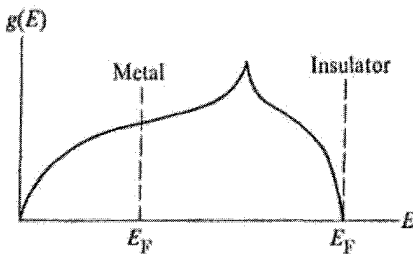
که همان عبارتی است که در پی آن بودیم.

σ به سرعت فرمی و زمان برخورد بستگی دارد. ولی توجه داشته باشید که σ به چگالی حالت ها در سطح فرمی یعنی $g(E_F)$ نیز بستگی دارد؛ به زودی خواهیم دید، این جمله در تعیین رسانایی الکتریکی، ضریب غالب است.

عبارت (۵-۱۰۶) از فرمول الکترون آزاد (۵-۱۰۲) کلی تر و معنی دار تر است. معادله ی (۵-۱۰۲) دلالت می کند که رسانایی الکتریکی در درجه ی اول، توسط چگالی الکترونی n کنترل می شود، ولی در واقع رسانایی در درجه ی نخست توسط چگالی حالت ها $g(E_F)$ کنترل می شود. در یک حالت حدی مناسب رابطه ی (۵-۱۰۶) به عنوان یک حالت خاص به رابطه ی (۵-۱۰۲)

تحویل می گردد که باید چنین باشد. برای اثبات آن، رابطه: $g(E_F) = \frac{1}{\pi} \pi^{\tau} \left(\frac{\tau m^*}{\hbar^{\tau}} \right)^{\tau/2} E_F^{\frac{1}{2}}$ (بخش ۵-۶۳) را ملاحظه کنید. $E_F = \frac{1}{\tau} m^* v_F^{\tau}$ و $E_F = \left(\frac{\hbar^{\tau}}{\tau m^*} \right) (\tau \pi^{\tau} n)^{\tau/2}$ (از رابطه ی ۵-۶۷)

می باشد.



شکل ۴۱-۵ موقعیت تراز انرژی فرمی در یک فلز یک ظرفیتی و در یک عایق. در فلز یک ظرفیتی $g(E_F)$ بزرگ است، در حالی که در عایق $g(E_F) = 0$

شکل (۴۱-۵) چگالی حالت ها را برای یک جسم جامد نوعی نشان می دهد و موقعیت تراز فرمی برای یک فلز یک ظرفیتی و همین طور برای یک عایق در این شکل مشخص می گردد، تراز E_F در فلز، در میانه ی نوار جایی که $g(E_F)$ بزرگ است قرار گرفته است که بر طبق رابطه ی (۱۰۶-۵) منجر به یک رسانایی بزرگ می شود. در عایق ها، تراز E_F درست بالای نوار، جایی که $g(E_F) = 0$ است قرار دارد. بنابراین علی رغم این که سرعت فرمی که در رابطه ی (۱۰۶-۵) نیز ظاهر می گردد، خیلی بزرگ است، رسانایی صفر است.

گرچه عبارت (۱۰۶-۵) محدود به موردی است که سطح فرمی کروی است، در تبیین نقش مهمی که توسط چگالی حالت ها ایفا می گردد نیز مفید است. این نتایج را می توان به گونه ای تعمیم داد که آثار پیچیده تر شکل سطح فرمی را نیز شامل گردد که اغلب منجر به عبارتهای پیچیده ای می گردند.

جنبه ی مهم دیگر فرآیند رسانش الکتریکی و به طور کلی پدیده ترابری این است که به کمک آن می توانیم زمان برخورد τ_F را محاسبه نماییم. قبلاً این موضوع را به صورت نیمه کلاسیک در بخش (۴-۴) برای مدل الکترون آزاد بررسی کرده ایم، ولی برای بررسی کامل تر آن باید از روش های کوانتومی (پیوست A) و به خصوص از تئوری پریشیدگی استفاده کرد. مکانیزم پراکندگی شبیه آن است که در ارتباط با مدل الکترون آزاد یعنی پراکندگی توسط ارتعاشات شبکه، ناخالصی ها و دیگر نقایص شبکه بحث شد (بخش ۵-۴) ولی تفصیل محاسبات بسیار پیچیده است (Ziman ۱۹۶۰)، و در این جا بیان نمی گردد.

۱۹-۵ دینامیک الکترون در یک میدان مغناطیسی: تشدید سیکلو ترونی و اثر هال

دینامیک الکترون در میدان مغناطیسی با استفاده از مدل الکترون آزاد در بخش (۱۰-۴) بحث شد و در آنجا تشدید سیکلو ترونی و اثر هال نیز بررسی شد. در این جا؛ با به حساب آوردن برهم کنش یا پتانسیل شبکه، این مطلب را برای الکترون بلوخ مورد بحث قرار می دهیم. در عمل این موضوع بسیار مفید است. زیرا اغلب از میدان مغناطیسی برای مطالعه ساختار نواری استفاده می گردد.

تشدید سیکلو ترونی

معادله‌ی اساسی که دینامیک ذره در یک میدان مغناطیسی را توصیف می کند به صورت زیر است:

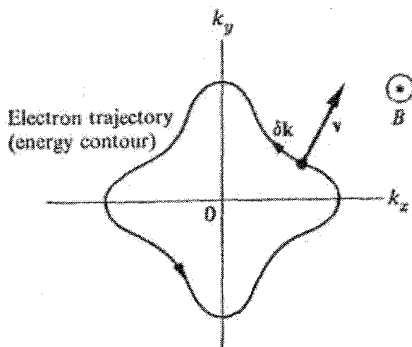
$$\hbar \frac{dk}{dt} = -e[v(k) \times B] \quad (5-107)$$

که طرف چپ رابطه‌ی فوق مشتق زمانی اندازه حرکت بلور و طرف راست آن نیروی لورنتس است که مربوط به میدان مغناطیسی است. این معادله در بخش های (۱۴-۵) و (۱۶-۵) بسیار مفید واقع شدند. در آن بخش ها نتیجه گرفتیم که اندازه حرکت بلور معمولاً به عنوان همان اندازه‌ی حرکت معمولی عمل می کند. به شرطی که فقط نیروهای خارج منظور گردد. [معادله‌ی (۱۰۷-۵) را می توان با محاسبات مفصل کوانتومی بدست آورد].

بر طبق معادله (۱۰۷-۵) تغییر در k در یک بازه‌ی زمانی δk با رابطه‌ی زیر بیان می گردد:

$$\delta k = -\left(\frac{e}{\hbar}\right)[v(k) \times B] \delta t \quad (5-108)$$

که نشان می دهد الکترون در فضای k آن چنان حرکت می کند که جابه جایی δk عمود بر صفحه‌ای است که از B و v می گذرد. این که δk عمود بر B است بدین معنی است که مسیر حرکت الکترون در صفحه‌ای عمود بر میدان مغناطیسی قرار دارد. بعلاوه δk عمود بر v است که چون v عمود بر پریندهای انرژی در فضا k است. نتیجه می شود که δk در امتداد آن پر بندها قرار دارد. از قرار دادن این دو نکته در کنار هم نتیجه می شود که الکترون در امتداد یک پر بند انرژی که عمود بر میدان مغناطیسی است در خلاف جهت عقربه های ساعت دوران می کند.



شکل ۵-۴۲ مسیر حرکت الکترون در فضای k در حضور یک میدان مغناطیسی.

باید توجه داشت که چون الکترون در امتداد یک پربند انرژی حرکت می کند، هیچ گونه انرژی از میدان مغناطیسی جذب و یا به آن منتقل نمی کند؛ که این با واقعیت آشنای مربوط به برهم کنش بارهای الکتریکی با میدان مغناطیسی سازگار است.

همان گونه که شکل ۵-۴۲ نشان می دهد، حرکت الکترون در فضای k دوره ای است. زیرا بعد از یک زمان معین الکترون به نقطه ای که از آن حرکت را آغاز کرده بود بر می گردد. بر طبق رابطه ی (۵-۱۰۸) زمان تناوب چنین حرکتی از رابطه ی زیر بدست می آید:

$$T = \oint \delta t = \frac{\hbar}{eB} \oint \frac{\delta k}{v(k)} \quad (5-109)$$

دایره ی روی علامت انتگرال نشان می دهد که انتگرال روی یک دور کامل در فضای k یعنی یک مدار بسته گرفته می شود. در رابطه ی (۵-۱۰۹) دیفرانسیل δk در امتداد محیط مدار گرفته شده در حالی که بزرگی $v(k)$ برابر سرعت الکترون و جهت آن عمود بر مدار است. در به دست آوردن رابطه ی (۵-۱۰۹)، از رابطه ی (۵-۱۰۸)، از این واقعیت استفاده کردیم که v عمود بر B است. زیرا مسیر حرکت الکترون در صفحه ای عمود بر B قرار دارد.

فرکانس زاویه ای ω_c مربوط به این حرکت $\omega_c = \frac{2\pi}{T}$ است که با توجه به رابطه ی (۵-۱۰۹) با رابطه ی زیر بیان می گردد.

$$\omega_c = (2\pi eB / \hbar) / \oint \frac{\delta k}{v(k)} \quad (5-110)$$

که ω_c فرکانس سیکلو ترونی الکترون بلوخ است و تعمیمی است از فرکانس سیکلو ترونی (۳۸-۴) که برای مدل الکترون آزاد بدست آمد.

حرکت یک الکترون بلوخ در میدان مغناطیسی تعمیمی از حرکت یک الکترون آزاد در همان میدان و در فضای سرعت است. الکترون آزاد در امتداد یک پربند انرژی، حرکت دایروی با فرکانس $\omega_c = eB/m^*$ خواهد داشت. الکترون بلوخ در امتداد یک پربند انرژی حرکت سیکلو ترونی با فرکانسی که از رابطه (۱۱۰-۵) به دست می آید، انجام می دهد. البته پربند انرژی در مورد اخیر بسیار پیچیده است.

هنگامی که فرم استاندارد $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ به کار رود، فرکانس ω_c (رابطه ی ۱۱۰-۵) را می توان به سادگی محاسبه نمود. در این مورد مدار سیکلو ترونی، دایروی است. پس از محاسبه انتگرال در می یابیم $v(k) = \frac{\hbar k}{m^*}$ ، که در طول مدار مقدار ثابتی است، زیرا بزرگی بردار موج k در طول پربند مقدار ثابتی است. بنابراین

$$\oint \frac{\delta k}{v(k)} = \frac{1}{(\hbar k / m^*)} \oint \delta k = \frac{2\pi k}{(\hbar k / m^*)} = \frac{2\pi m^*}{\hbar}$$

که چون در رابطه ی (۱۱۰-۵) جایگزین گردد نتیجه می شود:

$$\omega_c = eB/m^*$$

همان گونه که انتظار می رود این نتیجه با نتیجه ی حاصل برای مدل الکترون آزاد سازگار است.

معادله ی (۱۱۰-۵) از نتیجه الکترون آزاد کلی تر است و می توان آن را برای یک پربند با شکل اختیاری به کار برد، ولی ممکن است محاسبه انتگرال خیلی طولانی و خسته کننده باشد. در بخش مسائل پایانی این فصل، مسائلی برای محاسبه ی انتگرال (۱۱۰-۵) را دارند، مطرح شده است.

در بحث حرکتی سیکلو ترونی فوق، اثرهای نوسانی را منظور نکردیم. اگر این حرکت سیکلو ترونی را بخواهیم مشاهده نماییم. الکترون باید در خلال یک زمان برخورد قسمت اعظم مدارش را طی کند یعنی $\omega_c \tau \geq 1$. لازمه این امر این است که از نمونه های بسیار خالص و در دماهای پایین استفاده شود و یک میدان مغناطیسی خیلی قوی بر نمونه اعمال گردد.

اثر هال

در بخش (۱۰-۴) که راجع به اثر هال در مدل الکترون آزاد بحث می کردیم. ثابت هال را به صورت زیر به دست آوردیم.

$$R_e = -\frac{1}{n_e e} \quad (۵-۱۱۱)$$

که n_e چگالی الکترون است. علامت منفی به خاطر بار منفی الکترون است. بررسی کلی اثر هال برای الکترون بلوخ و برای یک سطح فرمی اختیاری، کاملاً پیچیده و نیاز به عملیات ریاضی مفصل دارد (Ziman 1960) ولی بعضی از نتایج مهم آن به سادگی به دست می آید.

فرض می کنیم که فقط حفره ها در نمونه حضور دارند و حفره ها را همان گونه بررسی می کنیم که در بخش (۱۰-۴) با الکترون ها رفتار کردیم. بدین ترتیب یک ثابت هال به صورت زیر به دست می آید:

$$R_h = \frac{1}{n_h e} \quad (۵-۱۱۲)$$

حالا R مثبت است، زیرا بار حفره مثبت است (n_h چگالی حفره است).

در واقع در فلزات حفره ها به خودی خود وجود ندارند و همیشه تعدادی الکترون حضور دارند. بنابراین وقتی دو نوار هم پوشی دارند، الکترون ها در قسمت بالایی نوار و حفره ها در قسمت پایین نوار حضور دارند. هنگامی که هم الکترون ها و هم حفره ها به طور هم زمان حضور دارند ثابت هال توسط عبارت زیر بیان می گردد. (بخش مسائل را ملاحظه نمایند).

$$R = \frac{R_e \sigma_e^{\uparrow} + R_h \sigma_h^{\uparrow}}{(\sigma_e + \sigma_h)^{\uparrow}} \quad (۵-۱۱۳)$$

که R_e و R_h سهم الکترون ها و حفره ها و σ_e و σ_h رسانایی الکترون ها و حفره ها می باشند $(\sigma_e = n_e e^2 \tau_e / m_e^*, \sigma_h = n_h e^2 \tau_h / m_h^*)$.

معادله (۵-۱۱۳) بیان می کند، بسته به این که سهم الکترون ها یا حفره ها کدام یک غالب باشد، علامت ثابت هال R ممکن است منفی یا مثبت باشد. اگر $n_e = n_h$ باشد که در مورد فلزات چنین است، $|R_e| = |R_h|$ و علامت R کاملاً توسط بزرگی های نسبی رسانش σ_e و σ_h تعیین می

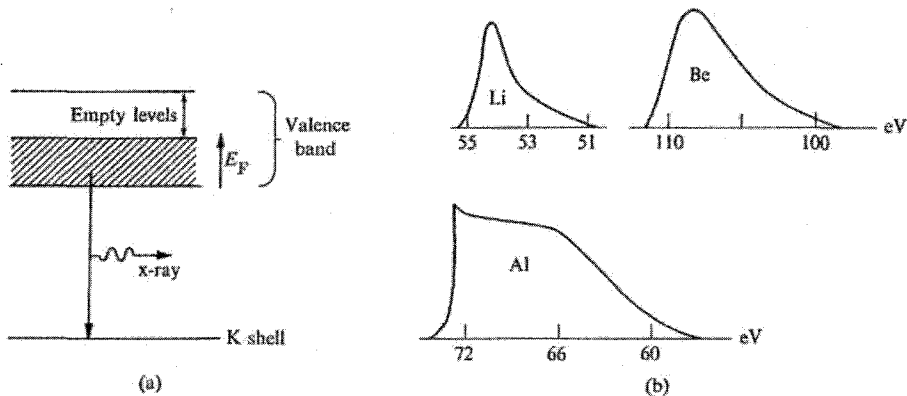
گردد. پس اگر $\sigma_e > \sigma_h$ یعنی اگر جرم الکترون های کوچک و عمر آنها طولانی باشد، سهم الکترون ها غالب و R منفی است. اگر شرایط مخالف برقرار باشد سهم حفره ها غالب و R مثبت است و حال متوجه می شویم که چرا در بعضی از فلزات چند ظرفیتی مانند Cd, Zn ثابت هال مثبت است (جدول ۳-۴ را ملاحظه نمایید).

۲۰-۵ روش های تجربی در تعیین ساختار نوار

حال راجع به بعضی از تکنیک ها تجربی بحث می کنیم که از آن ها برای تعیین ساختار نوار در فلزات استفاده می شود. مثلاً این که چگونه فیزیک دانان، انرژی های فرم جدول ۱-۴ را معین کرده اند، یا سطوح فرمی شکل های (۲۶-۵) برای Cu و (۳۰-۵) برای Be چگونه تعیین شده اند. این قسمت از فیزیک حالت جامد بسیار گسترده است و سریعاً نیز گسترش می یابد. بنابراین بحث ما در این جا مختصر است و برای بررسی تفصیلی آن خواننده ی علاقه مند را به مراجعی که در کتاب شناسی آمده است مراجعه می دهیم.

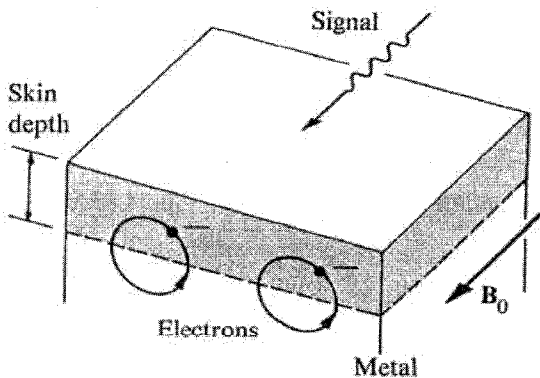
انرژی فرمی را می توان با روش گسیل پرتوایکس نرم تعیین کرد. هنگامی که فلزی را توسط باریکه ای از الکترون های پر انرژی بمباران کنیم، الکترون ها از پوسته داخلی K خارج می شود، و جاهای خالی را پر کنند. همان گونه که در شکل (۴۳-۵الف) نشان داده شده است، گدازه هایی به سمت پایین انجام می دهند. فوتون هایی که در اثر این گذارها گسیل می شوند، معمولاً در ناحیه پرتو ایکس نرم قرار دارند و حدود 20 eV انرژی دارند این فوتون ها مثبت و انرژی آن ها اندازه گیری می شود. شکل (۴۳-۵ب) شدت طیف پرتوهای ایکس و محدوده ی انرژی آن ها را برای چندین فلز مختلف نشان می دهد.

از آن جا که پوسته K خیلی باریک و تقریباً به صورت یک تراز گسسته است؛ عرض محدوده ای که در شکل (۴۳-۵ب) نشان داده شده است کاملاً مربوط به پخش شدن حالت های اشتغال شده در نوار ظرفیت است. یعنی عرض آن مساوی تراز فرمی است. از شکل (۴۳-۵ب) هم چنین می توان اطلاعاتی راجع به شکل چگالی حالت ها بدست آورد. در واقع در درجه ی اول شکل منحنی را چگالی حالت های نوار ظرفیت تعیین می کند.



شکل ۴۳-۵ (الف) گسیل پرتوهای ایکس نرم؛ (ب) شدت طیف پرتوهای ایکس گسیلی بر حسب انرژی برای Al, Be, Li

حال به تعیین سطح فرمی می پردازیم و راجع به یکی از چندین روش متداول یعنی روش تشدید سیکلوترونی آزیل - کنر^۱ بحث می کنیم. قطعه فلزی که از یک طرف نامحدود است در یک میدان مغناطیسی ایستای قوی B_0 که موازی با سطح قطعه است قرار می گیرد (شکل ۴۴-۵). در نتیجه، الکترون های فلز شروع به یک حرکت سیکلوترونی با فرکانس سیکلوترونی ω_c می کنند. حال یک سینگنال متفاوت الکترومغناطیسی با فرکانس ω که به طور دایروی در جهت پادساعتگرد قطیده است به موازات سطح قطعه و در جهت میدان ایستای B_0 وارد می شود.



شکل ۴۴-۵ طرح آزمایش تشدید سیکلوترونی آزیل - کنر.

این سیگنال فقط کمی، (به اندازه ی عمق پوست) در فلز نفوذ می کند (بخش ۱۱-۴ را ملاحظه نمایید) و در فاصله ی کمی از سطح فلز محبوس می شود. تنها الکترون های این ناحیه تحت تاثیر سیگنال الکترومغناطیسی قرار می گیرد.

میدان بر الکترون های نزدیک سطح اثر می کند و الکترون ها از میدان انرژی جذب می کنند. در صورتی بیشترین جذب انرژی وجود دارد که شرط:

$$\omega = \omega_c \quad (5-114)$$

برقرار باشد، زیرا در این صورت الکترون در طول یک دوره ی تناوب با میدان سیگنال هم فاز است. این شرط تشدید است.

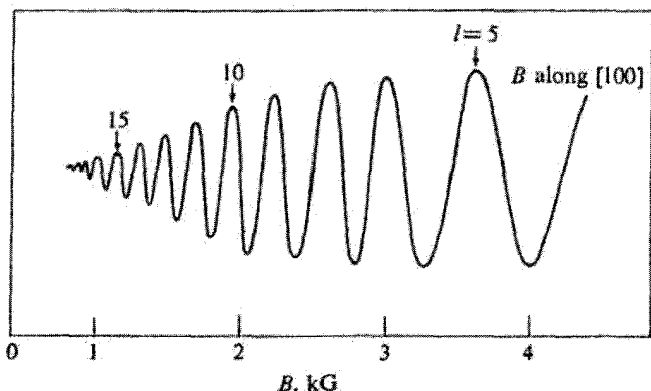
در واقع الکترون در جزیی از دوره تناوب خود بیشتر از عمق پوست و تا جایی که میدان سنگال صفر می شود نیز در فلز نفوذ می کند. فقط به شرطی که هنگام رسیدن الکترون به سطح فلز هنوز هم فاز با میدان باشد، شرط تشدید برقرار می ماند. بنابراین در حالت کلی شرط تشدید به صورت زیر است:

$$\omega = l\omega_c \quad (5-115)$$

که $l = 1, 2, 3, \dots$ می باشد و این مقادیر تمام هماهنگ های فرکانس سیکلوترونی ω_c را بدست می دهد.

در شکل (۵-۴۵) تشدید سیکلوترونی آزیل-کنر برای Cu نشان داده شده است (معمولاً فرکانس ω ثابت نگه داشته می شود و میدان آن قدر تغییر می کند تا شرط تشدید برقرار گردد).

این روش نه تنها قادر است ω_c (و بنابراین جرم مؤثر) را تعیین نماید، بلکه می تواند شکل واقعی سطح فرمی را معین کند. در حلت کلی، نواحی مختلف سطح، فرکانس های سیکلوترونی متفاوتی دارد ولی فرکانسی که بیشترین جذب را دارد آن فرکانسی است که برای مدار خارجی مناسب است. یعنی در جایی که مقطعی از سطح فرمی که عمود بر B_0 است، بیشترین یا کم ترین باشد. بنابراین با تغییر جهت B_0 می توان مقطع های خارجی در جهت های مختلف را اندازه گرفت و سطح فرمی را بازسازی نمود.

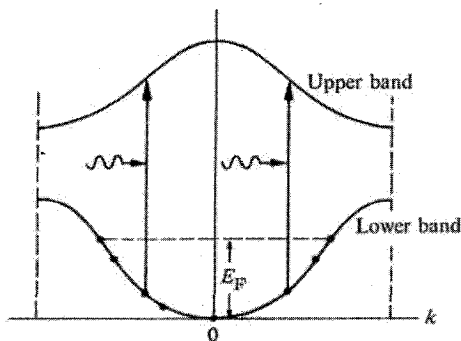


شکل ۴۵-۵ طیف AKCR برای Cu در $T = 4/2^\circ \text{K}$ سطح بلور (سطح بالایی) در امتداد صفحه (۱۰۰) برش داده شده است. مرتبه منحنی نمایان گر مشتق مقاومت سطح نسبت به میدان است.

(Haussler and wells, phys. Rev, 152, 675, 1966)

این آزمایش معمولاً در دمای خیلی پایین $T \cong 4^\circ \text{K}$ ، روی نمونه های خیلی خالص و در میدان های خیلی قوی حدود 100 kG انجام می شود و در چنین شرایطی، زمان برخورد τ به اندازه کافی طولانی و فرکانس سیکلوترونی ω_c آن قدر بزرگ است که شرط میدان قوی $\omega_c \tau \geq 1$ برقرار باشد. در چنین حالتی، الکترون ها در خلال یک زمان برخورد چندین دور می زند و این منجر به یک تشدید تیز و قابل تفکیک می شود. فرکانس ω_c معمولاً در ناحیه یک میکرو موج قرار دارد.

تکنیک های فرابنفش نوری نیز برای تعیین ساختار نوار استفاده می شوند. شکل (۴۶-۵) اساس این روش را نشان می دهد. هنگامی که یک باریکه ی نوری بر فلزی بتابد الکترون ها از پایین تر از فرمی برانگیخته و به نوار بالاتر منتقل می شوند. این جذب بین نواری را می توان به کمک روش های نوری یعنی تکنیک های بازتاب و جذب مشاهده کرد که اطلاعاتی راجع به شکل و انرژی نوارها بدست می آورد در این حالت دو نوار به طور هم زمان مورد مطالعه قرار می گیرند و نتیجه را نمی توان به هر یک از نوارها به طور جداگانه نسبت داد. ولی اگر شکل یکی از نوارها معلوم باشد؛ شکل نوار دیگر را می توان تعیین کرد. برای بحث بیش تر راجع به خواص نوری فلزات در ناحیه ی فرابنفش به بخش (۸-۹) مراجعه نمایید.



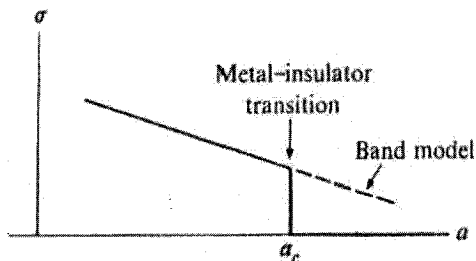
شکل ۴۶-۵ جذب نوری بین نواری.

۲-۵ محدودیت های تئوری نوار؛ گداز فلز - عایق

در این فصل تاکنون بحث خود را بر مبنای مدل نواری در جامدات بنا نهادیم. این مدل مزایای بسیاری دارد و قادر به توضیح همه ی خواص مشاهده شده در فلزات می باشد. خواص نیمه رساناها نیز بر مبنای همین مدل در فصل های ۶ و ۷ مورد بحث قرار می گیرند. با این همه این مدل محدودیت هایی دارد که در این جا بدان ها اشاره می گردد.

برای مثال سدیم را در نظر بگیریم. همان گونه که انتظار می رود این ماده یک رسانا است، زیرا در آن نوار ۳s فقط تا نیمه پر است. فرض کنیم که به گونه ای بتوان Na را منبسط کرد که ثابت شبکه ی آن a ، به طور اختیاری افزایش یابد. آیا این ماده به ازای هر مقدار اختیاری از a رسانا باقی می ماند؟ بر مبنای این مدل جواب باید مثبت باشد، زیرا بدون توجه به مقدار a ، نوار ۳s همیشه نیمه پر باقی می ماند. درست است که رسانایی σ با افزایش a ، کاهش می یابد (این را از پیش بینی مدل نواری در فصول آینده می گوئیم)، ولی همان گونه که در شکل (۴۷-۵) نشان داده شده این کاهش تدریجی است.

ولی در واقع این صحیح نیست. با افزایش a و رسیدن به یک مقدار بحرانی a_c رسانایی به طور ناگهانی به صفر سقوط می کند، و جسم جامد عایق می شود و برای تمام مقادیر $a > a_c$ عایق باقی می ماند. بنابراین به ازای یک ثابت شبکه ی بزرگ، فلز به عایق تبدیل می شود و این گداز فلز - عایق، گذار مات^۱ نامیده می شود.



شکل ۴۷-۵ رسانایی الکتریکی σ بر حسب ثابت شبکه a

برای توجیه این گذار، لازم است بعضی از مفاهیم اساسی تئوری نوار را یاد آوری نماییم. در این تئوری فرض شده است که الکترون های بلوخ ناجای گزیده اند هستند و در تمام بلور گسترش یافته اند. این جای گزیدگی است که باعث رسانایی فلزی است. الکترون بلوخ به عنوان یک ذره ناجای گزیده، جزیی از وقت خود (دقیقاً $\frac{1}{N}$) را در هر اتم می گذارند. این برهم کنش بین الکترون های بلوخ گوناگون فقط به طور میانگین به حساب می آید، یعنی از برهم کنش بین الکترون های منفرد چشم پوشی می شود.

به هر جهت با افزایش a ، عرض نوار کاهش می یابد (مدل بستگی قوی، بخش ۸-۵ را ملاحظه نمایید)، تا این که در مقادیر بزرگ a ، عرض نوار کاملاً کوچک می شود. در این حالت مدل نواری نقض می شود. زیرا حضور دو یا بیش از دو الکترون در یک جایگاه شبکه ای را مجاز می داند که به دلیل دافعه ی کولنی بین الکترون ها، این امر نمی تواند اتفاق افتد. وقتی نوار پهن است، این مساله یک مشکل جدی نیست. زیرا الکترون ها می توانند انرژی جنبشی خود را به گونه ای تغییر دهند که افزایش ناشی از انرژی پتانسیل را جبران کند. ولی در یک نوار باریک، انرژی جنبشی کاملاً کوچک است و تغییر انرژی جنبشی ممکن نیست.

در واقع برای مقادیر خیلی بزرگ a ، اوربیتال های الکترونی مرجح در بلور از نوع بلوخ نیستند، بلکه اوربیتال های جای گزیده ای هستند که حول جایگاه های مربوطه متمرکز شده اند و باعث انرژی کولنی می شوند. از آن جا که این اوربیتال های جای گزیده هستند، هم چون حالت مربوط به اتم های آزاد و همان گونه که در شکل (۴۷-۵) نشان داده شده است، رسانایی صفر می شود.

توجه کنید که نتیجه فوق حتی اگر ترازهای انرژی نوار تشکیل دهنده و نیز اگر نوار فقط تا نیمه پر باشد، درست است. نکته در این است که اوربیتال های الکترونی جای گزیده می شوند و بنابراین جسم عایق می شود.

گذار فلز - عایق در V_{O_2} (اکسید وانادیوم) و دیگر اکسیدها مشاهده شده است. گرچه V_{O_2} به طور طبیعی یک عایق است در فشارهای زیاد به یک ماده ی فلزی تبدیل می شود.

قضیه‌ی بلوخ و نوارهای انرژی در جامدات

تابع موج یک الکترون متحرک در یک پتانسیل تناوبی مانند مورد مربوط به یک بلور، را می‌توان به شکل بلوخ نوشت:

$$\psi_k(\mathbf{r}) = e^{ik \cdot \mathbf{r}} u_k(\mathbf{r})$$

که تابع $u_k(\mathbf{r})$ به همان شکل پتانسیل تناوبی است. تابع u_k به شکل یک موج تخت به بردار k است که با تابع تناوبی u_k مدوله شده است. گرچه تابع u_k خودش غیر تناوبی است چگالی احتمال الکترون $|\psi_k(\mathbf{r})|^2$ تناوبی است؛ یعنی الکترون نا جای گزیده و به طور تناوبی در طول بلور توقف می‌کند.

طیف انرژی الکترون از یک سری از نوارهای پیوسته تشکیل یافته است، که توسط نواحی از انرژی‌های ممنوعه که گاف‌های انرژی نام دارند از یک دیگر جدا شده‌اند. انرژی الکترون را معمولاً به $E_n(k)$ نشان می‌دهند که n اندیس نوار است.

انرژی $E(k)$ که تابعی از بردار k است چندین خاصیت تقارنی دارد. اول این که تقارن انتقالی دارد، یعنی:

$$E(k + G) = E(k)$$

که ما را قادر می‌سازد بررسی خود را فقط به اولین منطقه ی بریلیون محدود کنیم. هم چنین تابع انرژی تقارن وارونی $E(-k) = E(k)$ و در فضای k تقارن دورانی دارد.

مدل‌های الکترون تقریباً آزاد (NFE) و بستگی قوی (TB)

در مدل NFE پتانسیل بلور خیلی ضعیف فرض می‌شود. حل معادله ی شرودینگر نشان می‌دهد که به جز وقتی که بردار موج k خیلی نزدیک یا در مرزهای منطقه ی بریلیون است، الکترون اساساً هم چون یک ذره ی آزاد عمل می‌کند. در این نواحی اخیر، پتانسیل منجر به گاف‌های انرژی معینی می‌شود. اولین گاف با رابطه ی زیر بیان می‌گردد.

$$E_g = 2|V_{-\pi/a}|$$

که $V_{-r\pi/a}$ مؤلفه ی فوریه پتانسیل بلور است .

توابع موج در منطقه بریلیون توسط امواج ایستاده ای توصیف می شوند که از بازتاب شدید براگ موج الکترونی توسط شبکه نتیجه می شوند.

مدل بستگی قوی که در آن پتانسیل بلور قوی فرض می شود، منجر به یک سری نتایج عمومی، شبیه نتایج مدل الکترون تقریباً آزاد می گردد. یعنی طیف انرژی از یک سری نوارهای پیوسته تشکیل یافته است. مدل بستگی قوی نشان می دهد که وقتی هم پوشانی بین توابع اتمی همسایه افزایش یابد، عرض نوار افزایش می یابد و تحرک الکترون ها بیشتر (و جرم آن سبک تر) می گردد.

فلزات و عایق ها

اگر فقط قسمتی از نوار ظرفیت ماده معینی پر باشد، آن ماده به صورت یک فلز یا رسانا عمل می کند. زیرا اعمال میدان الکتریکی می تواند جریان الکتریکی در ماده ایجاد کند. ولی چنان چه نوار ظرفیت کاملاً پر باشد، بدون ملاحظه به وجود میدان، هیچ جریانی ایجاد نمی شود و ماده یک عایق است.

هنگامی که گاف بین نوار ظرفیت و نوار بلافاصله بالای آن کوچک باشد، ممکن است الکترون ها به طور حرارتی تحریک می شوند و از گاف عبور کنند. این اگر منجر به یک رسانایی کوچک گردد، ماده نیمه رسانا نامیده می شود.

سرعت الکترون بلوخ

یک الکترون در حالت بلوخ ψ_k در طول بلور با سرعت زیر حرکت می کند.

$$v = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(k)$$

مادامی که شبکه کاملاً تناوبی است این سرعت ثابت باقی می ماند.

دینامیک الکترون در یک میدان الکتریکی

الکترون در حضور میدان الکتریکی و در فضای k بر طبق رابطه زیر حرکت می کند:

$$\vec{K} = -\left(\frac{e}{\hbar}\right)\mathcal{E}$$

حرکت یک نواخت و آهنگ آن متناسب با میدان است. این رابطه با در نظر گرفتن این که الکترون اندازه حرکتی معادل $\hbar k$ دارد، به دست می آید.

جرم موثر

جرم موثر الکترون بلوخ با رابطه ی زیر بیان می شود:

$$m^* = \hbar^2 / \left(\frac{d^2 E}{dk^2}\right)$$

ولی در نزدیکی بالای نوار، جایی که انحنای نوار منفی است جرم موثر نیز منفی است. این واقعیت که جرم موثر با جرم الکترون آزاد متفاوت است مربوط به اثر نیروی شبکه بر الکترون است.

حفره

حفره در نواری که کاملاً پر و فقط یک جای خالی دارد به وجود می آید. حفره مانند ذره ای با بار مثبت $+e$ عمل می کند. وقتی حفره در نزدیکی بالای نوار قرار گیرد، که معمولاً چنین است؛ به گونه ای رفتار می کند که گویی یک جرم موثر مثبت دارد.

رسانایی الکتریکی

رسانایی الکتریکی با رابطه ی زیر بیان می شود:

$$\sigma = \frac{1}{3} e^2 v_F^2 \tau_F g(E_F)$$

این عبارت به خصوص به تابع $g(E_F)$ ، چگالی حالت ها در انرژی فرمی، حساس است. در فلزات یک ظرفیتی، σ بزرگ است، زیرا $g(E_F)$ بزرگ است. ولی در فلزات چند ظرفیتی عکس این امر صادق است. رسانایی الکتریکی در عایق ها صفر است زیرا $g(E_F) = 0$.

تحت شرایط مناسب عبارت فوق برای σ به رابطه ی آشنای $\sigma = ne^2 \tau_F / m^*$ که مربوط به مدل الکترون آزاد است، تحویل می گردد.

تشدید سیکلوترونی و اثر هال

حرکت یک الکترون بلوخ در یک میدان مغناطیسی با رابطه‌ی زیر بیان می‌گردد:

$$\hbar \frac{dk}{dt} = -e(v \times B)$$

الکترون در طول یک پربند انرژی در مسیری عمود بر میدان B حرکت می‌کند. این حرکت به نام حرکت سیکلوترونی نامیده می‌شود. فرکانس سیکلو ترونی به صورت زیر است:

$$\omega_c = (2\pi eB/h) / \int \frac{\delta k}{v}$$

که انتگرال در مخرج کسر روی یک پربند بسته گرفته می‌شود. اندازه گیری این فرکانس، اطلاعاتی راجع به شکل پربند و بنابراین شکل نوار به دست می‌دهد. در مورد یک نوار استاندارد، عبارت فوق به رابطه‌ی آشنای $\omega_c = eB/m^*$ تحویل می‌شود.

وقتی الکترون و حفره، هر دو در فلز حاضر باشند، هر دو در ضریب هال سهم اند. عبارت حاصل برابر است با

$$R = \frac{R_e \sigma_e^2 + R_h \sigma_h^2}{(\sigma_e + \sigma_h)^2}$$

وقتی جمله‌ی مربوط به الکترون غالب است، ضریب هال R منفی و هنگامی که جمله‌ی مربوط به حفره غالب باشد، ضریب هال R مثبت است.

References

- J. Callaway, 1963, *Energy Band Theory*, New York: Academic press.
- J. F. Cochran and R. R. Haering, editors, 1968, *Electrons in Metals*, London: Gordon and Breach
- W. A. Harrison, and M. B. Webb, editors, 1968, *The Fermi Surface*, New York: Wiley
- W. A. Harrison, 1970, *Solid State Theory*, New York: Mc GIW - Hill
- N. F. Mott and H. Jones, 1936, *Theory of the Properties of Metals and Alloys*, Oxford: Oxford University Press; also Dover Press (reprint)
- B. Pippard, 1965, *Dynamics of Solids*, New York: Mc Graw - Hill
- J. C. Slater, 1965, *Quantum Theory of Molecules and Solids*, Volume II, New York: Mc Graw - Hill.
- A. H. Wilson, 1953, *Theory of Metals*, second edition, Cambridge: Cambridge University Press

پوشش‌ها

۱- در بخش‌های ۳-۶ و ۳-۴ اشاره شد که الکترون فقط قسمت کمی از وقت خود را در اطراف یون می‌گذراند، زیرا سرعت الکترون در آنجا زیاد است. در همان حال ادعا شده است که الکترون‌ها یون‌ها را محافظت می‌کنند و این دلالت بر آن دارد که الکترون‌ها آن چنان توزیع می‌شود که اکثر آن‌ها در اطراف یون‌ها جای گزیده شده‌اند. آیا در این جا یک پارادوکس وجود ندارد؟

۲- شکل (۱۰-۵ ج) با بریدن و جابه‌جا کردن قطعات مختلف منحنی پاشندگی الکترون آزاد در شکل (۱۰-۵ الف) به دست آمده است. آیا این کار برای یک الکترون واقعاً آزاد مناسب است؟ چگونه بین یک شبکه‌ی خالی و فضای آزاد تمایز قایل می‌شوید؟

۳- توضیح دهید که چرا در شکل (۱۸-۵ ب)، به جز در نواحی نزدیک به یون، تابع ψ/k ، در طول یاخته‌ی ویگنر-سایتس تخت است؟ توجه کنید که این رفتار، با رفتار یک تابع موجی اتمی که با دور شدن از یون به سرعت کاهش می‌یابد متفاوت است. این امر نشان می‌دهد که نیروی کولنی مربوط به یون در یاخته A، در ناحیه‌ی تخت منحنی خیلی ضعیف شده است. دلیل فیزیکی این امر چیست؟

۴- هم پوشانی نواری در رسانایی فلزات چند ظرفیتی خیلی مهم است. آیا انتظار دارید که این هم پوشانی در یک بلور یک بعدی صورت گیرد؟ می‌توانید از خواص تقارنی نوار انرژی استفاده کنید.

مسائل

۱- شکل (۷-۵) اولین سه منطقه ی بریلیون یک شبکه ی مربعی را نشان می دهد.

الف) نشان دهید که سطح منطقه ی سوم مساوی سطح منطقه اول است. این کار را با انتقال های مناسب اجزاء مختلف منطقه سوم بر منطقه ی اول تا جایی که کاملاً منطقه اول را بپوشاند. انجام دهید.

ب) چهارمین منطقه را رسم کنید و نشان دهید که سطح آن مساوی سطح منطقه ی اول است.

۲- سه منطقه ی اول بریلیون برای یک شبکه ی مستطیلی دو بعدی که نسبت بردارهای شبکه ی آن $\frac{a}{b} = 2$ است را رسم کنید. نشان دهید که سطوح مناطق دوم و سوم هر کدام مساوی سطح منطقه ی اول است.

۳- تحقیق کنید که شکل اولین مناطق بریلیون برای شبکه های bcc, fcc همان است که در شکل (۸-۵) رسم شده است.

۴- نشان دهید که تعداد مقادیر مجاز k در یک نوار یک شبکه ی مکعبی ساده سه بعدی مساوی N ، یعنی تعداد یاخته های واحد بلور است.

۵- مساله ی ۴ را برای منطقه ی اول یک شبکه fcc (منطقه ای که در شکل ۸-۵ الف) نشان داده شده است) تکرار کنید.

۶- معادلات (۲۱-۵) و (۲۲-۵) را به دست آورید.

۷- نشان دهید که اولین سه نوار در مدل شبکه خالی در محدودی انرژی های زیر قرار دارند.

$$E_1 : 0 \text{ تا } \pi^2 \hbar^2 / 2m_0 a^2 \quad E_2 : \pi^2 \hbar^2 / m_0 a^2 \text{ تا } 2\pi^2 \hbar^2 / m_0 a^2$$

$$E_3 : 2\pi^2 \hbar^2 / m_0 a^2 \text{ تا } 9\pi^2 \hbar^2 / 2m_0 a^2$$

۸- الف) نشان دهید وجوه هشت گانه اولین منطقه ی بریلیون یک شبکه fcc (شکل ۸-۵ الف) مربوط به بازتاب براگ از صفحات اتمی (۱۱۱) است در حالی که وجوه دیگر مربوط به بازتاب از صفحات (۲۰۰) می باشند.

(ب) به طور مشابه نشان دهید که وجوه منطقه ی بریلیون شبکه ی bcc متناظر با بازتاب براگ از صفحات اتمی (۱۱۰) می باشند.

۹- فرض کنید که پتانسیل بلور در یک شبکه ی یک بعدی از یک سری چاه های مستطیلی که اتم را احاطه کرده اند تشکیل یافته است. فرض کنید که عمق هر چاه V_0 و عرض آن $a/5$ باشد.

(الف) با استفاده از مدل الکترون تقریباً آزاد مقادیر اولین سه گاف انرژی را محاسبه کنید بزرگی های این گاف ها را با یک دیگر مقایسه کنید .

(ب) این گاف ها را برای حالتی $V_0 = 5eV$, $a = 4 \text{ \AA}$ است محاسبه نمایید .

۱۰- ثابت کنید: به شرطی که تابع اتمی ϕ_v به یک هنجار شده باشد، تابع موجی که در مدل بستگی قوی استفاده شده است (معادله ی ۲۷-۵) نیز به یک هنجار می شود. (راهنمایی برای این منظور می توان از هم پوشی بین توابع اتمی چشم پوشی کرد).

۱۱- انرژی نوار در مدل بستگی قوی با رابطه ی زیر بیان می گردد :

$$E(k) = E_v - \beta - \gamma \sum_j e^{ik \cdot x_j}$$

β و γ مقادیر ثابتی هستند و x_j موقعیت اتم j ام نسبت به اتم واقع در مبدا است.

(الف) با استفاده از تقریب نزدیک ترین همسایه ها، عبارت انرژی را برای یک شبکه ی bcc بیابید. پرندهای انرژی را در صفحه ی $k_x - k_y$ رسم کنید، عرض نوار انرژی را تعیین کنید.

(ب) قسمت (الف) را برای شبکه ی fcc تکرار کنید.

۱۲- (الف) با استفاده از این واقعیت که مقادیر مجاز k در یک شبکه ی یک بعدی با رابطه ی

$$k = n \left(\frac{2\pi}{L} \right)$$

طول واحد از رابطه ی زیر به دست می آید:

$$g(E) = \frac{1}{2\pi} \left/ \left(\frac{dE}{dk} \right) \right.$$

(ب) این چگالی حالت ها را در مدل بستگی قوی محاسبه کنید و $g(E)$ را بر حسب E رسم نمایید.

۱۳- چگالی حالت ها را برای اولین منطقه ی بریلین از یک شبکه ی مکعبی ساده بر مبنای مدل شبکه ی خالی محاسبه نمایید. $g(E)$ را رسم کنید و تعیین کنید انرژی به ازای چه مقدای از $g(E)$ بیشینه است. رفتار منحنی را به طور کیفی رسم نمایید.

۱۴- الف) با استفاده از مدل الکترون آزاد و نمایش چگالی الکترونی به n نشان دهید که شعاع کره ی فرمی در فضای k با رابطه ی زیر بیان می شود:

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$$

ب) با افزایش چگالی الکترونی، کره ی فرمی گسترش می یابد، نشان دهید که در یک شبکه ی fcc نسبت چگالی الکترون به چگالی اتم $\frac{n}{n_a} = 1/36$ شود، کره ی فرمی شروع به تماس با وجه اولین منطقه ی بریلین می کند. n_a چگالی اتمی است.

ج) فرض کنید بعضی از اتم ها در بلور Cu که شبکه ی fcc دارد تدریجاً با اتم های Zn جای گزین شوند. با در نظر گرفتن این که Zn دو ظرفیتی و Cu یک ظرفیتی است، نسبت اتمی Zn به Cu در آلیاژ Zn Cu (برنج) که در آن کره ی فرمی بر وجه منطقه ی بریلین مماس است را محاسبه نمایید. از مدل الکترون آزاد استفاده نمایید. (این مخلوط خاص جالب و مورد توجه است زیرا به ازای این نسبت چگالی های اتمی، فاز ساختاری جسم جامد تغییر می کند).

۱۵- الف) سرعت الکترون برای یک بلور یک بعدی در مدل بستگی قوی را محاسبه نمایید و ثابت کنید که در لبه های منطقه ی بریلین سرعت صفر می شود.

ب) قسمت الف) را برای یک شبکه مربعی محاسبه نمایید. نشان دهید که سرعت در مرز منطقه ی بریلین موازی با آن مرز است. این نتیجه را بر مبنای بازتاب براگک توجیه کنید.

ج) محاسبات را برای یک شبکه ی مکعبی ساده سه بعدی تکرار کنید و یک بار دیگر نشان دهید که سرعت الکترون در یک وجه منطقه ی بریلین موازی با وجه دیگر آن است. این مطلب را براساس بازتاب براگک توضیح دهید. آیا می توانید یک عبارت کلی درباره ی جهت سرعت در یک وجه منطقه ی بریلین بیان کنید؟

۱۶- فرض کنید در لحظه ی $t = 0$ که الکترونی در انتهای نوار است، یک میدان الکتریکی ایستایر الکترون اعمال گردد. نشان دهید که موقعیت الکترون در فضای حقیقی در زمان t با رابطه ی زیر بیان می شود:

$$x = x_0 + \frac{1}{F} E(k = Ft/\hbar)$$

که x_0 موقعیت اولیه و $F = -eE$ نیروی الکتریکی است. یک بلور یک بعدی را فرض کنید و تراز انرژی صفر را در انتهای نوار در نظر بگیرید. آیا حرکت در فضای حقیقی تناوبی است؟ توضیح دهید.

۱۷- الف) با استفاده از مدل بستگی قوی جرم مؤثر را برای یک الکترون در یک شبکه ی یک بعدی محاسبه نمایید. جرم مؤثر m^* را بر حسب k رسم کنید و نشان دهید که تنها در نزدیکی مبدا و در نزدیکی لبه ی منطقه ی بریلیون جرم مستقل از k است.

ب) جرم مؤثر را در مرکز منطقه ی یک شبکه ی مکعبی ساده و با استفاده از مدل بستگی قوی محاسبه نمایید.

ج) قسمت (ب) را در مرکز منطقه در امتداد جهت [۱۱۱] تکرار کنید.

۱۸- معادله ی (۱۸-۵) را اثبات کنید.

۱۹- الف) فرکانس سیکلوترونی ω_c را برای یک پربند انرژی رابطه ی زیر، محاسبه نمایید.

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2m_x^*} k_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m_y^*} k_y^2$$

که میدان مغناطیسی عمود بر صفحه پربند است. [جواب $\omega_c = \sqrt{\frac{e^2}{m_x^* m_y^*}} B$]

ب) قسمت (الف) را برای سطح انرژی بیضوی تکرار کنید.

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2m_x^*} (k_x^2 + k_y^2) + \frac{\hbar^2}{2m_z^*} k_z^2$$

که θ زاویه بین میدان B ، با محور تقارن بیضی k_z است.

$$[\omega_c = [(\frac{eB}{m_x^*})^2 \cos^2 \theta + \frac{e^2 B^2}{m_x^* m_z^*} \sin^2 \theta]^{1/2}] \text{ جواب}$$

۲۰- در بخش (۱۹-۵) راجع به حرکت یک الکترون بلوخ در فضای k در حضور یک میدان مغناطیسی بحث شد. هم چنین الکترون به طور هم زمان یک حرکت در فضای r دارد. راجع به این

حرکت بحث کنید و نشان دهید که مسیر الکترون در فضای τ در صفحه ای موازی با مسیر آن در فضای k قرار دارد و شکل های دو مسیر مشابه اند، به جز اینکه شکل مسیر در فضای τ تحت زاویه $-\frac{\pi}{2}$ نسبت به دیگری دوران یافته و با یک ضریب خطی $(\frac{\hbar}{eB})$ گسترش یافته است [راهنمایی: از معادله ی (۵-۱۰۸) برای مرتبط کردن جابه جایی های الکترون در فضاهای τ و k استفاده کنید]

۲۱- معادله ی (۵-۱۸) را برای ثابت هال یک سیستم الکترون - حفره ثابت کنید.

فصل ششم

نیمه رساناها I : تئوری

- ۶-۱ مقدمه
- ۶-۲ پیوند و ساختار بلوری
- ۶-۳ ساختار نواری
- ۶-۴ چگالی حامل‌ها؛ نیمه‌رساناهای ذاتی
- ۶-۵ حالت‌های ناخالصی
- ۶-۶ آمار نیمه‌رسانا
- ۶-۷ رسانایی الکتریکی: تحرک
- ۶-۸ آثار میدان مغناطیسی: تشدید سیکلوترونی و اثر هال
- ۶-۹ ساختار نواری نیمه‌رساناهای واقعی
- ۶-۱۰ میدان الکترونی و الکترون‌های داغ
- ۶-۱۱ اثر گان
- ۶-۱۲ خواص اپتیکی؛ فرآیندهای جذب
- ۶-۱۳ فوتو رسانش
- ۶-۱۴ لومینسانس
- ۶-۱۶ اثرهای دیگر اپتیکی
- ۶-۱۶ تقویت موج-صدا (اثر آکوستوالکتریک)
- ۶-۱۷ پخش

نیمه رساناها از جالب ترین و مفیدترین گروه جامدات هستند. این مواد طیف وسیعی از پدیده‌ها (از خواص کاملاً فلزی تا خواص عایق‌ها) را نشان می‌دهند و کاربردهای فراوانی دارند. نیمه رساناها در انواع مختلف قطعات و وسایل فیزیکی به کار می‌روند. گرچه از سالهای ۱۹۲۰ و برای مدتی طولانی، نیمه رساناها مورد مطالعه قرار گرفته بودند، در واقع بعد از اواخر دهه ۱۹۴۰ که شاکلی^۱، باردین^۲ و براتین^۳ ترانزیستور را اختراع کردند، نیمه رساناها جای گاه واقعی خود را یافتند. به دلیل این اختراع و نیز به دلیل تکامل و توسعه قطعات مرتبط با آن‌ها، نیمه رساناها از جالب توجه ترین موضوع‌ها در فیزیک حالت جامد درآمدند. در این راستا، مطالب بسیاری درباره‌ی خواص بنیادی این جامدات و چگونگی استفاده از آن‌ها برای ساخت قطعات جدیدتر و با کارایی بیشتر ارائه شد. به دلیل گستردگی زیاد مطالب مربوط به نیمه رساناها در اینجا مطالعه‌ی آنها را در دو فصل انجام می‌دهیم. این فصل به خواص فیزیکی بنیادی آنها می‌پردازد. استفاده از این خواص در قطعات مهم و کاربردی در فصل بعد خواهد شد.

این فصل با نیروهای پیوندی در نیمه رساناها آغاز می‌شود و با ساختار نواری این مواد ادامه می‌یابد. سپس روشی برای ارزیابی تعداد الکترون‌ها و حفره‌ها که عامل جریان الکتریکی و پدیده ترابری هستند، ارائه می‌گردد. نیمه رساناها به ندرت به شکل خالص استفاده می‌شوند. معمولاً ناخالصی‌هایی از خارج به درون آنها تزریق می‌شود. بنابراین تأثیر ناخالصی‌ها در تولید الکترون‌ها و حفره‌ها بایستی مورد بحث قرار گیرد.

مهم ترین خواص نیمه رساناها رسانایی الکتریکی آن‌ها است. این مطلب نیز در این فصل به تفصیل مورد بحث قرار گرفته است. سپس نشان خواهیم داد چگونه تکنیک‌های تشدید سیکلوترونی و اثرهال برای اندازه گیری پارامترهای مهم به کار می‌روند. آثار به خصوصی که از میدان‌های الکتریکی قوی ناشی می‌شود در ارتباط با الکترون‌های داغ و اثر گان^۴ مورد آزمایش قرار می‌گیرد. خواص اپتیکی نیمه رساناها و همین طور رابطه‌ی نزدیک بین این خواص و ساختار نواری مورد بررسی قرار می‌گیرد. این خواص در پدیده‌هایی چون لومینسانس^۵ و فوتورسانس^۶ کاربرد

-
1. Shockley
 2. Bardeen
 3. Brattain
 4. Gunn
 5. Luminescence
 6. Photoconductivity

دارند.

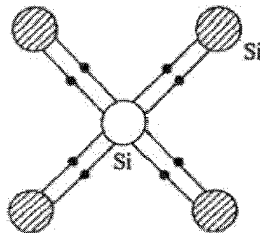
این فصل با مبحث پخش^۱ خاتمه می‌یابد. این پدیده هنگامی ایجاد می‌شود که توزیع الکترون‌ها (یا حفره‌ها) نایکنواخت باشد. از آنجا که چنین توزیعی در بسیاری از قطعات الکترونیکی (و در واقع در تمام آن‌ها که شامل پیوندهایی بین مواد مثبت و منفی‌اند) وجود دارد، فرایند پخش نقش مهمی در بسیاری از کاربردها ایفا می‌کند.

۶-۲ پیوند و ساختار بلوری

نیمه‌رساناها شامل تعداد بسیاری از مواد با خواص فیزیکی و شیمیایی متفاوت‌اند. این مواد در گروه‌هایی که رفتارهای مشابهی دارند طبقه‌بندی می‌شوند. این طبقه‌بندی بر اساس موقعیت آنها در جدول تناوبی عناصر است.

معروف‌ترین طبقه نیمه‌رساناهای گروه IV هستند. C (الماس)، Si، Ge و α -Sn (قلع خاکستری) نیمه‌رساناهایی هستند که همه در ستون پنجم جدول تناوبی قرار دارند. مشخصه‌ی نیمه‌رسانایی این عناصر از همان ابتدا که تحقیقات در فیزیک حالت جامد شروع شد، شناخته شده بود. Si و Ge که کاربردهای بسیاری در قطعات الکترونیکی دارند، به طور گسترده مورد مطالعه قرار گرفتند.

نیمه‌رساناهای عنصری همه به ساختار الماسی متبلور می‌شوند (بخش ۷-۱ و شکل ۱۵-۱ را ملاحظه نمایید). ساختار الماسی شبکه‌ی fcc دارد که پایه‌ی آن از دو اتم مشابه تشکیل شده است. به طوری که هر اتم توسط چهار اتم همسایه احاطه شده است و یک چهاروجهی منتظم را تشکیل می‌دهند. شکل ۱-۶ تصویر چهاروجهی بلور Si را در یک صفحه نشان می‌دهد.



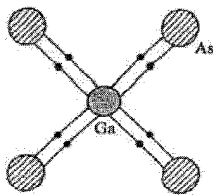
شکل ۱-۶ پیوند چهار وجهی در Si. دایره‌های کوچک توپر نمایانگر الکترون‌هایی هستند که پیوند کووالان را تشکیل می‌دهند. (شکل ۱۹-۱ را نیز ملاحظه کنید).

نیمه رساناهای گروه IV بلورهای کووالان هستند. یعنی اتم‌های آنها توسط پیوندهای کووالان در کنار هم قرار گرفته‌اند. این پیوندها (بخش ۷-۸-A را ملاحظه نمایید) شامل دو الکترون با اسپین‌های مخالف‌اند که در امتداد خطی که دو اتم را به هم متصل می‌کند، توزیع شده‌اند. بنابراین در شکل ۱-۶ هر کدام از چهار پیوندی که یک اتم Si را به همسایه‌هایش متصل می‌کند، یک پیوند کووالان دو الکترونی است. هر یک از این دو اتم، یک الکترون در این پیوند به اشتراک می‌گذارد. هم چنین الکترون‌های کووالان که پیوندها را تشکیل می‌دهند، در اوربیتال‌های اتمی sp^3 هیبرید هستند (بخش ۸-۸-A را ملاحظه کنید). مطالبی که درباره‌ی Si گفته شد، به خوبی برای دیگر عناصر گروه IV نیز به کار می‌رود.

تصویری که از یک بلور کووالان ارائه می‌گردد، بدین گونه است که مغزهای یونی مثبت در جایگاه شبکه‌ای قرار می‌گیرند و توسط تعدادی از پیوندهای کووالان به یکدیگر ارتباط می‌یابند. بار کل هر اتم صفر است، زیرا بار یونی هر اتم توسط الکترون‌های کووالان جبران می‌شود.

گروه مهم دیگر نیمه رساناها، گروه ترکیبات III-V است. این نامگذاری به خاطر این است که هر کدام از این نیمه رساناها از دو عنصر تشکیل یافته‌اند که یکی در ستون سوم و دیگری در ستون پنجم جدول تناوبی جای دارند. معروفترین اعضای این گروه GaAs و InSb هستند. ولی ترکیبات دیگری همچون GaP، InAs و GaSb نیز جزء این گروه‌اند.

ساختار بلوری این مواد، همان ساختار سولفید روی است. همان گونه که در بخش ۷-۱ بیان شد، این ساختار شبیه ساختار الماسی است. ولی دو اتمی که پایه را در شبکه تشکیل می‌دهند، از دو نوع متفاوت هستند. بنابراین در GaAs، پایه‌ی شبکه‌ی fcc، شامل دو اتم Ga و As می‌باشد. به واسطه‌ی این ساختار، هر اتم توسط چهار اتم مخالف احاطه شده است که این چهار اتم درست مانند ساختار الماس یک چهار وجهی منظم را تشکیل می‌دهند. شکل ۲-۶ این مورد را برای GaAs نشان می‌دهد.



شکل ۲-۶ پیوند چهار وجهی در GaAs.

در ترکیبات III-V نیز پیوندها اساساً کووالان هستند. هشت الکترون لازم برای پیوندهای کووالان چهار وجهی توسط دو نوع از اتم‌ها تأمین می‌گردد. اتم سه ظرفیتی، سه الکترون و اتم پنج ظرفیتی، پنج الکترون خود را به اشتراک می‌گذارد. از آنجا که پیوند چهاروجهی معمولاً مربوط به پیوند کووالان است، می‌توان انتظار داشت پیوند در این مواد به دلیل ساختار بلوری، از نوع پیوند کووالان باشد. پیوند در گروه III-V، کاملاً کووالان نیست. از آنجا که عناصر تشکیل دهنده پیوند متفاوت اند؛ توزیع الکترون‌ها در امتداد پیوند متقارن نیست بلکه به طرف یکی از اتم‌ها جابه‌جا شده است. در نتیجه یکی از اتم‌ها یک بار خالص دارد. چنین پیوندی چندقطب^۱ نامیده می‌شود. پیوند خالص در نیمه‌رساناهای عنصری هم‌قطب^۲ نام دارد.

توزیع الکترون‌ها در پیوند به طرف اتمی جابه‌جا می‌شود که الکترونگاتیویته^۳ بیشتری داشته باشد. مثلاً در GaAs، اتم As الکترونگاتیویتهی بیشتری از Ga دارد و در نتیجه یک بار خالص منفی دریافت می‌کند که مقدار آن $0.46e$ - بر اتم است (که این یک مقدار نوعی برای ترکیبات گروه III-V می‌باشد). متناظراً اتم Ga یک بار خالص مثبت $0.46e$ دریافت می‌کند. مقدار بار انتقال یافته بر اتم به بار مؤثر معروف است. انتقال بار متعجبانه به یک سهم یونی در پیوند ترکیبات گروه III-V می‌شود. بنابراین، پیوندهای این گروه در واقع مخلوطی از پیوند کووالان و یونی است ولی پیوند کووالان در اغلب این مواد، پیوند غالب است.

ترکیبات III-V یک مشخصه‌ی قطبی دارند. به دلیل این که، یون‌ها بار مخالف دارند؛ در اثر اعمال یک میدان الکتریکی، شبکه قطبیده می‌شود. بنابراین در این مواد جابه‌جایی یون‌ها در ثابت دی الکتریک سهمیم است. نمود روشن و جالب این نکته، پراکندگی در ناحیه‌ی فروسرخ به خاطر برهم‌کنش نور با فونون‌های اپتیکی است (بخش ۱۲-۳ را ملاحظه نمایید).

طبقه‌ی دیگری از مواد که اخیراً توجه بسیاری را به خود معطوف کرده‌اند، نیمه‌رساناهای II-VI مانند CdS و ZnS می‌باشند. اغلب این مواد به ساختار سولفید روی متبلور می‌شوند و بیان‌گر این است که پیوند در درجه‌ی اول طبیعت کووالان دارد. ولی انتقال بار در اینجا بیشتر از انتقال بار در ترکیبات III-V است (مقدار نوعی آن $0.48e$ است). بنابراین در ترکیبات II-VI سهم پیوند یونی بیشتر و مشخصه‌ی قطبی آن قوی‌تر است.

1. Heteropolar
2. Homopolar
3. Electronegativity

و بالاخره گروه مهمی از نمک های سرب هستند که ترکیبات نیمه رسانای IV-VI را تشکیل می دهند، مانند: PbTe.

۳-۶ ساختار نواری

در بخش ۱۰-۵، نیمه رساناها را به عنوان جامداتی تعریف کردیم که در آنها بالاترین نوار انرژی اشغال شده، (نوار ظرفیت)، در دمای $T = 0^{\circ}K$ کاملاً پر است. ولی شکاف بالای این نوار کوچک است به طوری که در دمای اتاق هم ممکن است الکترون ها به طور حرارتی از نوار ظرفیت به نوار بالاتر بعدی که نوار رسانش^۱ نام دارد برانگیخته شوند. به بیان کلی هنگامی که گاف انرژی E_g کمتر از ۲eV باشد، در دمای اتاق تعداد الکترون های برانگیخته قابل ملاحظه خواهد بود و ماده به عنوان نیمه رسانا طبقه بندی می شود. ولی وقتی گاف انرژی بزرگ باشد، تعداد الکترون ها قابل چشم پوشی و ماده یک عایق است.

هنگامی الکترون ها برانگیخته می شوند، که بتوانند از گاف انرژی بگذرند. پایین نوار رسانش از الکترون ها پر می شود و بالای نوار ظرفیت از حفره ها. در نتیجه حالا هر دو نوار فقط به طور جزئی پر هستند و اگر یک میدان الکتریکی اعمال گردد، الکترون ها و حفره ها می توانند جریان الکتریکی حمل نمایند. گرچه رسانایی نیمه رساناها (که تعداد کمی الکترون و حفره دارند) در مقایسه با رسانایی فلزات کوچک است، ولی هنوز هم این رسانایی برای مقاصد علمی قابل ملاحظه است.

ما فقط به نوارهای رسانش و ظرفیت علاقه مندیم زیرا فقط این دو نوار در ایجاد جریان الکتریکی سهیم هستند. نوارهای پایین تر از نوار ظرفیت کاملاً پرند و نوارهای بالای نوار رسانش کاملاً خالی هستند و هیچ کدام از این دو در جریان الکتریکی سهمی ندارند. مادامی که خواص نیمه رسانایی مورد توجه است، این نوارها را می توان نادیده انگاشت. بنابراین برای تعیین مشخصه های نیمه رساناها فقط به نوارهای رسانش و ظرفیت نیاز داریم.

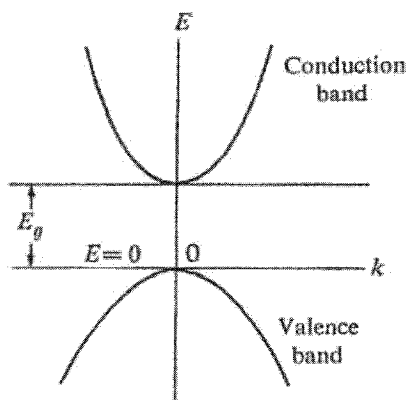
۱- مطلبی در مورد لغت شناسی کلمات: وقتی در مورد فلزات بحث می کنیم، لغات ظرفیت "valance" و رسانش "conduction" را می توان به جای یکدیگر به کار برد. الکترون های جای گزیده نشده در فلزات، الکترون های رسانش یا الکترون های ظرفیت نامیده می شود. ولی وقتی راجع به نیمه رساناها صحبت می کنیم کلمات ظرفیت و رسانش به الکترون ها و نوارهای مختلف اطلاق می شوند.

شکل ۳-۶، ساده‌ترین ساختار نواری یک نیمه‌رسانا را نشان می‌دهد. انرژی نواری رسانش به شکل زیر است.

$$E_C(k) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} \quad (6-1)$$

که k بردار موج و m_e^* جرم مؤثر الکترون است. انرژی E_g نمایانگر انرژی گاف است. تراز انرژی صفر در بالای نوار ظرفیت قرار گرفته است.

در اینجا ما از یک شکل استاندارد نوار برای توصیف نوار رسانش استفاده کرده‌ایم. در درجه‌ی اول به محدوده‌ی انرژی نزدیک پایین نوار علاقه‌مندیم، چون اکثر الکترون‌ها در این محدوده قرار دارند. از بخش ۶-۵ یادآوری می‌کنیم که شکل استاندارد نوار در نزدیکی پایین نوار حفظ می‌شود.



شکل ۳-۶ ساختار نواری در یک نیمه‌رسانا.

انرژی نواری ظرفیت (شکل ۳-۶) را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$E_V(k) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*} \quad (6-2)$$

که m_h^* جرم مؤثر حفره است. (از بخش ۱-۵ یادآوری می‌کنیم که به خاطر شکل وارونه‌ی نوار ظرفیت، جرم مؤثر الکترون در نوار ظرفیت منفی و مساوی m_h^* است ولی جرم حفره مثبت است). نوار ظرفیت با یک شکل وارونه شده، نشان داده می‌شود، زیرا ما فقط به ناحیه‌ی نزدیک بالای نوار یعنی جایی که اکثر حفره‌ها در آنجا قرار دارند، علاقه داریم.

پارامترهای مهم ساختار نواری، عبارتند از: جرم‌های الکترون و حفره، m_e و m_h (برای سهولت علامت ستاره را حذف کرده‌ایم) و انرژی نواری E_g . جدول ۱-۶ این پارامترها را برای نیمه‌رساناهای مختلف می‌دهد. توجه کنید که این جرم‌ها به طور قابل ملاحظه‌ای متفاوت و اغلب خیلی کوچک‌تر از جرم الکترون آزاداند. گاف‌های انرژی در محدوده‌ی بین 0.18 eV در InSb تا 3 eV در ZnS قرار دارند. این جدول هم چنین نشان می‌دهد که هر چه نوار پهن‌تر باشد، جرم الکترون بزرگ‌تر است. این خاصیت را در مدل الکترون تقریباً آزاد مختصراً مورد بحث قرار دادیم (به مطلبی که در پی معادله‌ی (۲۳-۵) آمده است مراجعه نمایید).

گاف انرژی برای یک نیمه‌رسانا بر حسب دما تغییر می‌کند. ولی معمولاً تغییرات آن اندک است. این که چنین تغییراتی بر حسب دما بایستی وجود داشته باشد را می‌توان بر مبنای این واقعیت دریافت که وقتی بلور گرما می‌بیند، انبساط حجم می‌یابد و بنابراین تغییری در ثابت شبکه‌ی آن ایجاد می‌شود. این امر به نوبه‌ی خود بر ساختار نواری اثر می‌کند. همان‌گونه که در بخش ۵ دریافتیم ساختار نواری تابع حساسی از ثابت شبکه است. هم چنین ممکن است در اثر اعمال فشار گاف انرژی تغییر کند که این خود تغییری در ثابت شبکه ایجاد می‌کند. از مطالعه‌ی نیمه‌رساناها که تحت فشار زیاد قرار دارند، نکاتی درک می‌شود که در توجیه بعضی از خواص نیمه‌رساناها بسیار مفید است.

توجه: m_e و m_h به ترتیب جرم‌های طولی و عرضی در سطوح انرژی بیضوی‌اند. وقتی بیش از یک مقدار جرم برای حفره وجود دارد، این مقادیر به حفره‌های سبک و سنگین اطلاق می‌شود.

نوارهای رسانش و ظرفیت در نیمه‌رساناها به حالت‌های اتمی مربوط‌اند. بحث مربوط به مولکول هیدروژن (بخش ۷-A) بیان می‌دارد که هنگامی که دو اتم هیدروژن نزدیک یکدیگر آورده می‌شوند تا یک مولکول هیدروژن را تشکیل دهند، حالت اتمی $1s$ به دو حالت شکافته می‌شود: یک حالت پیوندی با انرژی کم و یک حالت پادپیوندی^۱ با انرژی زیاد. در هیدروژن جامد، این حالت‌ها به ترتیب به دو نوار انرژی پیوندی و پادپیوندی گسترش می‌یابند. بنابراین مثلاً نوارهای ظرفیت و رسانش در Si از حالت‌های پیوندی و پادپیوندی هیبرید $3s^1 3p^3$ نتیجه می‌شوند (بخش ۸-A را ملاحظه نمایید). نتیجه‌ی مشابهی برای نوارها در C ، Ge و نیمه‌رساناهای دیگر به کار می‌رود.

جدول ۱-۶: پارامترهای ساختار نواری نیمه‌رساناها (در دمای اتاق)

جرم مؤثر m/m_0		E_g, eV	بلور	گروه
حفره	الکترون			
		۵/۳	C	IV
۰/۵۰, ۰/۱۶	$m_1=0.97, m_2=0.19$	۱/۱	Si	
۰/۳۰, ۰/۴	$m_1=1/6, m_2=0.08$	۰/۷	Ge	
		۰/۰۸	α Sn	
۰/۰۹	۰/۰۷	۱/۴	GaAs	III-V
۰/۵۰	۰/۱۲	۲/۳	GaP	
۰/۳۹	۰/۲۰	۰/۷	GaSb	
۰/۰۲	۰/۰۳	۰/۴	InAs	
۰/۶۹	۰/۰۷	۱/۳	InP	
۰/۱۸	۰/۰۱	۰/۲	InSb	
۰/۱۸۰	۰/۲۱	۲/۶	CdS	II-VI
۰/۴۵	۰/۱۳	۱/۷	CdSe	
۰/۳۷	۰/۱۴	۱/۵	CdTe	
۵/۴۱	۰/۴۰	۳/۶	ZnS	
۰/۶۰	۰/۱۰	۲/۷	ZnSe	
۰/۶۰	۰/۱۰	۲/۳	ZnTe	
۰/۲۵	۰/۲۵	۰/۴	PbS	IV-VI
۰/۳۴	۰/۳۳	۰/۳	PbSe	
۰/۲۹	۰/۲۲	۰/۳	PbTe	

ساختار نواری در شکل ۳-۶ ساده‌ترین ساختار ممکن است. همان‌گونه که خواهیم دید، ساختار نواری نیمه‌رساناهای واقعی پیچیده‌ترند. ولی در این مرحله ساختار ساده نیز برای مقصود ما کافی است.

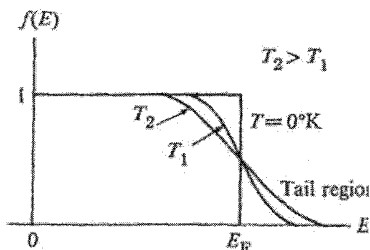
۴-۶ چگالی حامل‌ها؛ نیمه‌رساناهای ذاتی

در مبحث نیمه‌رساناها، معمولاً به الکترون‌ها و حفره‌ها حامل‌های آزاد و یا به بیان ساده‌تر حامل‌ها اطلاق می‌گردد؛ زیرا این ذرات هستند که مسئول انتقال جریان الکتریکی هستند. همچنان که در مورد رسانایی الکتریکی نیمه‌رساناها بیان شد، چگالی حامل‌ها عامل مهمی در نیمه‌رساناها است. به منظور تعیین تعداد حامل‌ها به بعضی از نتایج بنیادی مکانیک آماری نیاز داریم. مهم‌ترین نتیجه در

این مورد تابع توزیع فرمی-دیراک است:

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/k_B T} + 1} \quad (6-3)$$

این تابع^۱ که در بخش (۴-۶) مورد بحث قرار گرفت، احتمال این که وقتی سیستم در دمای T است، یک تراز انرژی E توسط یک الکترون اشغال شود را می دهد. این تابع بر حسب E در شکل (۶-۴) رسم شده است.



شکل ۶-۴ تابع توزیع فرمی-دیراک.

ملاحظه می شود که با افزایش دما، ناحیه ی اشغال نشده زیر تراز فرمی، E_F ، بزرگ تر می شود بنابراین با افزایش دما، احتمال اشغال حالت های با انرژی بالا افزایش می یابد. این نتیجه ای است که قابل قبول به نظر می رسد. زیرا افزایش دما سبب افزایش کل انرژی سیستم می شود. در تراز فرمی ($E = E_F$) بدون توجه به مقدار دما، $f(E) = \frac{1}{2}$ است. یعنی احتمال این که تراز فرمی اشغال شود

همیشه مساوی $\frac{1}{2}$ است.

در نیمه رساناها انتهای ناحیه ی توزیع فرمی-دیراک از اهمیت ویژه ای برخوردار است. در این ناحیه نامعادله $(E - E_F) \gg k_B T$ برقرار است و می توان در مخرج کسر (رابطه ی ۱-۶) از عدد یک صرف نظر کرد. پس توزیع فرمی-دیراک به صورت زیر درمی آید.

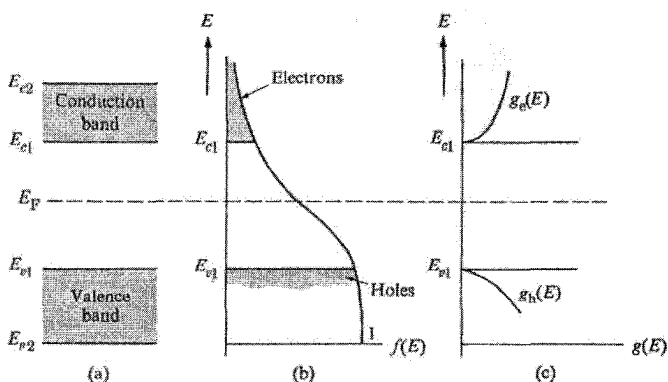
$$f(E) = e^{E_F/k_B T} e^{-E/k_B T} \quad (6-4)$$

۱- در این فصل هم چون فصل بعدی، ثابت بولترمن با نماد k_B به جای نماد معمول آن k نشان داده می شود. این به منظور اجتناب از اشتباهی است که ممکن است با k نمادی که مبین بردار موج در فضای k در تئوری نوار است پیش آید. ولی در باقی مانده کتاب این اشتباه پیش نخواهد آمد و بنابراین ثابت بولترمن، همان گونه که معمول است با نماد k نشان داده می شود.

که همان توزیع ماکسول بولتزمن یا توزیع کلاسیک است. بنابراین همین توزیع ساده برای آمار الکترون در نیمه‌رساناها کافی است.

حال می‌توانیم چگالی الکترون‌ها در نوار رسانش را به طریق زیر محاسبه نماییم. تعداد حالت‌هایی که انرژی آنها در محدوده‌ی $(E$ و $E+dE)$ است مساوی $g_E(E)dE$ است که $g_E(E)$ چگالی حالت‌های الکترون (بخش ۱۱-۵) می‌باشد. از آنجا که احتمال اشغال شدن هر کدام از این حالت‌ها، $f(E)$ است، در واقع تعداد الکترون‌ها در این محدوده برابر است با $f(E)g_E(E)dE$. بنابراین می‌توان چگالی الکترون‌ها را در نوار رسانش با انتگرال‌گیری روی تمام نوار به دست آورد.

$$n = \int_{E_{C1}}^{E_{Cv}} f(E)g_e(E)dE \quad (۶-۵)$$



شکل (۶-۵) (الف) نوارهای ظرفیت و رسانش (ب) تابع توزیع (ج) چگالی حالت‌ها برای الکترون‌ها و حفره‌ها: $g_h(E)$ و $g_e(E)$

همان گونه که در شکل ۶-۵ (الف) نشان داده شده است، E_{C1} و E_{Cv} به ترتیب انرژی‌های پایین و بالای نوار هستند. و این تابع توزیع در شکل ۶-۵ (ب) نشان داده شده است. توجه کنید که تمام نوار رسانش در قسمت انتهایی قرار می‌گیرد. بنابراین می‌توانیم تابع ماکسول-بولتزمن را برای محاسبه‌ی $f(E)$ در رابطه‌ی (۶-۵) به کار ببریم. (اثبات این مطلب را بعداً، وقتی که انرژی فرمی نزدیک وسط گاف انرژی قرار می‌گیرد، بیان خواهیم کرد.)

چگالی حالت‌ها را در بخش ۱۱-۵ محاسبه کردیم. در جایی که عبارت مربوط به فرم نوار استاندارد نزدیک باشد، چگالی حالت‌ها به کمک رابطه‌ی (۶۳-۵) به صورت زیر به دست

می آید.

$$g_e(E) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E - E_g)^{1/2} \quad (6-6)$$

تراز انرژی صفر به گونه‌ای انتخاب شده است که در بالای نوار ظرفیت قرار گیرد. بنابراین به ازای $E < E_g$ ، مقدار $g_e(E)$ صفر می‌شود و همان‌گونه که در شکل ۲-۶ (ج) نشان داده شده است، این مقدار فقط به ازای $E > E_g$ یک مقدار متناهی است. وقتی مقادیر $f(E)$ و $g_e(E)$ را در رابطه‌ی (۶-۵) جایگزین کنیم، خواهیم داشت.

$$n = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} e^{\frac{E_F}{k_B T}} \int_{E_g}^{\infty} (E - E_g)^{1/2} e^{-\frac{E}{k_B T}} dE \quad (6-7)$$

برای سهولت، بالای نوار رسانش در بی‌نهایت فرض شده است. از آن جا که در انرژی‌های بالا انتگرال ده به طور نمایی کاهش می‌یابد، خطایی که در اثر تغییر این حد از E_{cv} به ∞ ایجاد می‌شود، قابل چشم‌پوشی است. با تغییر متغیر و با استفاده از نتیجه‌ی

$$\int_0^{\infty} x^{1/2} e^{-x} dx = \frac{\pi^{1/2}}{2}$$

به سادگی می‌توان انتگرال (۶-۷) را محاسبه کرد. بنابراین چگالی الکترونی به عبارت زیر تحویل می‌شود.

$$n = 2 \left(\frac{m_e k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{\frac{E_F}{k_B T}} e^{-\frac{E_g}{k_B T}} \quad (6-8)$$

هنوز چگالی الکترونی به طور آشکار معلوم نشده است. زیرا انرژی فرمی هنوز معلوم نیست. انرژی فرمی را می‌توان به صورت زیر محاسبه کرد. اساساً همان ایده‌ای که در بالا به کار رفت، برای ارزیابی تعداد حفره‌ها در نوار ظرفیت نیز به کار می‌رود. احتمال این که یک حفره تراز E را در این نوار اشغال کند، برابر است با $1 - f(E)$ که $f(E)$ احتمال اشغال الکترون است. بنابراین احتمال اشغال حفره f_h برابر است با:

$$f_h = 1 - f(E) \quad (6-9)$$

از آنجا که محدوده‌ی انرژی که در اینجا مطرح است، بسیار کوچک‌تر از E_F است، تابع فرمی-دیراک (رابطه‌ی ۳-۶) بایستی به جای رابطه‌ی (۴-۶) به کار رود. بنابراین:

$$f_h = 1 - \frac{1}{e^{(E-E_F)/k_B T} + 1} = \frac{1}{e^{(E_F-E)/k_B T} + 1} \cong e^{-E_F/k_B T} e^{E/k_B T} \quad (6-10)$$

تقریبی که در عبارت آخر به کار رفته است، نتیجه‌ای است از نامساوی $(E - E_F) \gg k_B T$. اعتبار این نامساوی را می‌توان با مراجعه به شکل ۵-۶ (ب) ملاحظه نمود. که نشان می‌دهد $E_F - E$ از مرتبه $E_g/4$ است و در دمای اتاق بسیار بزرگ‌تر از k_B می‌باشد. چگالی حالت‌ها برای حفره‌ها برابر است با:

$$g_h(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_h}{\hbar^2} \right)^{3/2} (-E)^{1/2} \quad (6-11)$$

که برای یک نوار وارونه مناسب است (معادله‌ی ۴۴-۵ را ملاحظه نمایید). توجه کنید که جمله‌ی $(-E)$ در این معادله مثبت است زیرا تراز انرژی صفر در بالای نوار ظرفیت قرار دارد. بالای این تراز، انرژی مثبت و در پایین آن انرژی منفی است. بنابراین چگالی حالت‌ها با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود:

$$p = \int_{-\infty}^0 f_h(E) g_h(E) dE \quad (6-12)$$

چنانچه مقادیر $f_h(E)$ و $g_h(E)$ را از معادلات فوق در رابطه‌ی اخیر جایگزین نماییم و انتگرال را مانند حالت مربوط به الکترون محاسبه نماییم، خواهیم داشت:

$$p = 2 \left(\frac{m_h k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-E_F/k_B T} \quad (6-13)$$

چگالی‌های الکترون و حفره تا کنون به عنوان کمیت‌های مستقل در نظر گرفته شده بودند. در واقع این دو چگالی مساوی هستند. زیرا وجود الکترون‌ها در نوار رسانش به واسطه‌ی برانگیختگی آنها از نوار ظرفیت است و یک حفره ایجاد می‌کند. بنابراین؛

$$n = p \quad (6-14)$$

اگر مقادیر n و p را به ترتیب از روابط (۸-۶) و (۱۳-۶) در رابطه‌ی (۱۴-۶) جای‌گزین نماییم، معادله‌ای به دست می‌آید که در آن فقط مقدار E_F مجهول است. حل این معادله چنین است:

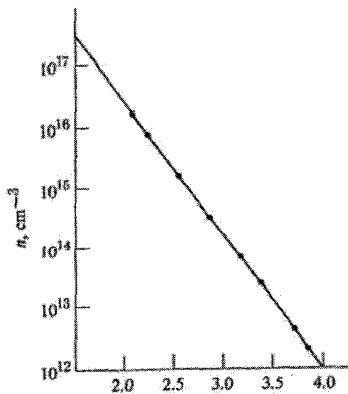
$$E_F = \frac{1}{4} E_g + \frac{3}{4} k_B T \log \left(\frac{m_h}{m_e} \right) \quad (6-15)$$

در شرایط عادی $k_B T \ll E_g$ است، جمله‌ی دوم طرف راست در مقایسه با جمله اول خیلی

کوچک است، و تراز انرژی، نزدیک وسط گاف انرژی می‌باشد. این با مطلبی که قبلاً بیان شد که هم پایین نوار رسانش و هم بالای نوار ظرفیت از تراز فرمی دور هستند، سازگار است.^۱ حال می‌توان چگالی الکترون‌ها را با استفاده از مقدار E_F به دست آورد. از جای‌گزینی رابطه‌ی (۶-۱۵) در رابطه‌ی (۶-۸) به دست می‌آید:

$$n = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^{3/2} (m_e m_h)^{3/4} e^{-E_g / 2k_B T} \quad (6-16)$$

نکته‌ی مهم این عبارت این است که n بر حسب دما خیلی سریع و به طور نمایی افزایش می‌یابد. بنابراین با افزایش دما، تعداد بسیاری از الکترون‌ها برای عبور از گاف انرژی برانگیخته می‌شوند. (این نکته را با یادآوری این که دنباله‌ی توزیع فرمی-دیراک در نوار رسانش بلندتر می‌شود و حالت‌های بیش‌تری در این نوار اشغال می‌شود، می‌توان روشن‌تر بیان کرد).



شکل ۶-۶ چگالی الکترونی n بر حسب $\frac{1}{T}$ در Ge.

[1953, 28, 86 Rev, Phy, After Morin and Morital.]

در شکل ۶-۶ مقدار $\log n$ بر حسب $\frac{1}{T}$ رسم شده است. این منحنی خطی و شیب آن مساوی $\left(\frac{-E_g}{2k_B} \right)$ است. [بستگی $T^{3/2}$ در رابطه‌ی (۶-۱۶) در مقایسه با بستگی نمایی به قدری ضعیف است که در این جا می‌توان از آن صرف‌نظر کرد.]

۱- این واقعیت که تراز فرمی در گاف انرژی منطقی ممنوعه قرار می‌گیرد مشکلی ایجاد نمی‌کند. این تراز یک مفهوم تئوری است و لازم نیست الکترونی در آنجا باشد.

مقدار عددی n را با جای گزین کردن مقادیر $E_g = 1\text{eV}$ ، $m_e = m_h = m_0$ و $T = 300\text{K}$ می توان تخمین زد. مقدار $n \cong 10^{15}$ الکترون/cm^۳ به دست می آید که یک مقدار نوعی برای چگالی الکترونی در نیمه رساناها است. رابطه‌ی (۱۶-۶) چگالی حفره‌ها را نیز می دهد. زیرا $n=p$ است.

بحث ما درباره‌ی چگالی حامل‌ها در این بخش بر اساس این فرض است که نیمه‌رسانا خالص باشد. هنگامی که ماده ناخالصی داشته باشد، همان‌گونه که در بخش ۵-۶ ملاحظه خواهد شد، الکترون‌ها و حفره‌های اضافی توسط ناخالصی‌ها تولید می شوند. در این صورت دیگر چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها مساوی نیست و مقدار هر کدام به چگالی و نوع ناخالصی بستگی دارد. اگر ماده آنقدر خالص باشد که چگالی‌های الکترون‌ها و حفره‌ها مساوی باشند، ماده نیمه‌رسانای ذاتی^۱ خوانده می شود. یعنی چگالی‌ها توسط خواص ذاتی نیمه‌رسانا تعیین می گردند. وقتی ماده شامل مقدار زیادی ناخالصی باشد به طوری که اغلب حامل‌ها را ناخالصی‌ها تأمین کرده باشند، ماده، نیمه‌رسانای غیر ذاتی^۲ نامیده می شود.

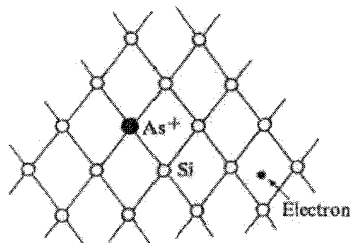
۶-۵ حالت‌های ناخالصی

یک نیمه‌رسانای خالص به تعداد مساوی از هر دو نوع حامل یعنی الکترون و حفره دارد. ولی در اغلب کاربردها نمونه‌هایی نیاز است که فقط دارای یک نوع حامل باشند و از نوع دیگر هیچ نداشته باشند. (این را در فصل ۷، هنگامی که مثلاً ترانزیستور پیوندی^۳ مورد بحث قرار می گیرد، ملاحظه خواهیم کرد). با آلائیدن نیمه‌رسانا به ناخالصی‌های مناسب، می توان نمونه‌هایی به دست آورد که فقط شامل الکترون یا حفره باشد.

نمونه‌ای از Si که با As آلائیده شده است را در نظر بگیرید. اتم‌های As (ناخالصی‌ها) بعضی از جای گاه‌های شبکه را که قبلاً توسط اتم میزبان Si اشغال شده بود را اشغال می کنند. توزیع ناخالصی‌ها درون نمونه در تمام شبکه کاتوره‌ای است. ولی حضور آن‌ها از یک جنبه‌ی خیلی مهم بر خواص فیزیکی جسم جامد اثر می گذارد: اتم As پنج ظرفیتی است (در حالی که Si چهار ظرفیتی است). همان‌گونه که در شکل ۷-۶ نشان داده شده است، از پنج الکترون As چهارتای

1. Intrinsic Semiconductor
2. Extrinsic Semiconductor
3. Junction Transistor

آن‌ها در پیوند چهار وجهی Si شرکت می‌کنند. الکترون پنجم نمی‌تواند در پیوند - که حالا اشباع شده است- شرکت کند. بنابراین این الکترون از ناخالصی جدا می‌شود و آزاد است که به عنوان الکترون رسانش در تمام شبکه حرکت کند. یعنی در نوار رسانش وارد می‌شود. حالا ناخالصی یک یون مثبت As^+ است (زیرا یک الکترون خود را از دست داده است)، و تمایل دارد که یک الکترون آزاد را به دام اندازد. ولی به زودی نشان می‌دهیم که نیروی جاذبه‌ی As^+ خیلی ضعیف است و کافی نیست که بتواند الکترونی را به دام اندازد.

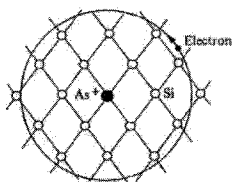


شکل ۶-۷ یک ناخالصی As در یک بلور Si. الکترون اضافی درون بلور حرکت می‌کند.

نتیجه فرآیند فوق این است که ناخالصی‌های As در دادن الکترون‌ها به نوار رسانش سهم می‌شود. به این دلیل این ناخالصی‌های بخشنده نامیده می‌شوند توجه کنید که الکترون‌ها، بدون ایجاد حفره‌ها تولید شده‌اند. هنگامی که یک الکترون توسط یک یون بخشنده به دام می‌افتد، مدار آن در اطراف یون بخشنده شبیه وضعیت الکترون در اتم هیدروژن است (شکل ۸-۶). انرژی پیوندی را می‌توان با استفاده از مدل بوهر محاسبه نمود. ولی بایستی این واقعیت را به حساب آورد که در این جا بر هم کش کولنی توسط حفاظی که مربوط به حضور بلور نیمه‌رسانا است، تضعیف می‌شود. این حفاظ به عنوان محیطی عمل می‌کند که در آن، هم یون‌ها و هم اتم‌های بخشنده قرار می‌گیرند. بنابراین پتانسیل کولنی به صورت زیر درمی‌آید:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 r} \quad (6-17)$$

که ϵ_r ثابت دی‌الکتریک کاهش یافته‌ی محیط است. مثلاً در Si ثابت دی‌الکتریک $\epsilon_r = 11.7$ است که نشان دهنده یک کاهش قابل ملاحظه در نیروی برهم کنشی است. این حفاظ مسئول کوچک بودن انرژی پیوندی الکترون در جای گاه اتم بخشنده است.



شکل ۶-۸ مدار یک الکترون در اطراف یک اتم بخشنده.

چنانچه این پتانسیل را در مدل بوهر به کار بریم، انرژی پیوندی متناظر با حالت پایه‌ی یک اتم بخشنده را به صورت زیر به دست می‌آوریم:

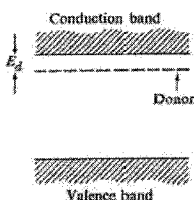
$$E_d = + \frac{1}{\epsilon_r} \left(\frac{m_e}{m_0} \right) \left[\frac{e^2 m_0}{\epsilon_r \pi \epsilon_0 \hbar^2} \right] \quad (6-18)$$

توجه کنید که در اینجا جرم مؤثر (m_e) به جای جرم آزاد (m_0) به کار رفته است. [در واقع در رابطه‌ی (۶-۱۸) جرم آزاد m_0 حذف می‌شود و فقط برای سهولت آورده شده است]. فاکتور آخر در طرف راست معادله‌ی (۶-۱۸) انرژی پیوندی اتم هیدروژن است که مساوی 13.6eV است.

بنابراین انرژی پیوندی اتم بخشنده با ضریب $\frac{1}{\epsilon_r}$ و همچنین ضریب $-\frac{m_e}{m_0}$ که معمولاً کوچک‌تر از یک است، کاهش می‌یابد. اگر مقادیر نوعی $\epsilon_r \cong 10$ و $\frac{m_e}{m_0} \cong 0.2$ را به کار بریم ملاحظه می‌کنیم که انرژی پیوندی اتم بخشنده در حدود $\frac{1}{5}$ ام انرژی هیدروژن یعنی در حدود 0.1eV

است. این مقدار، در حقیقت مرتبه‌ی بزرگی مقادیر مشاهده شده است.

همان‌گونه که در شکل (۶-۹) نشان داده شده است، تراز بخشنده در محدوده‌ی گاف انرژی به مقدار خیلی کمی پایین‌تر از نوار رسانش قرار می‌گیرد. چون این تراز خیلی به نوار رسانش نزدیک است، تقریباً همه‌ی اتم‌های بخشنده در دمای اتاق یونیده هستند و الکترون‌هایشان به نوار رسانش برانگیخته می‌شوند. لیست انرژی‌های پیوندی برای بلورهای مختلف در جدول (۶-۲) ارائه شده است.



شکل ۶-۹ تراز بخشنده در یک نیمه‌رسانا.

جدول ۲-۶: انرژی‌های یونی اتم‌های بخشنده و پذیرنده در Ge و Si (بر حسب الکترون ولت)

Ge($\epsilon_r = 16$)	Si($\epsilon_r = 11.7$)	ناخالصی
اتم‌های بخشنده:		
-	۰/۰۳۳	Li
۰/۰۱۲	۰/۰۴۴	P
۰/۰۱۳	۰/۰۴۹	As
۰/۰۹۶	۰/۰۳۹	Sb
-	۰/۰۶۹	Bi
اتم‌های پذیرنده:		
۰/۰۱۰	۰/۰۴۵	B
۰/۰۱۰	۰/۰۵۷	Al
۰/۰۱۱	۰/۰۶۵	Ga
۰/۰۱۱	۰/۱۶	In

آموخته است که شعاع بوهر الکترون اتم‌های بخشنده را محاسبه نماییم. با به کار بردن نتایج تئوری بوهر خواهیم داشت:

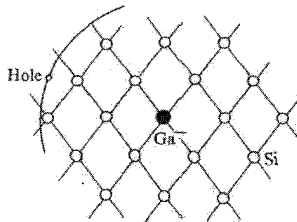
$$r_d = \epsilon_r \left(\frac{m_0}{m_e} \right) a_0 \quad (6-19)$$

که a_0 شعاع الکترون در اتم هیدروژن و مساوی 0.53 \AA است. بنابراین اگر مقادیر قبلی m_e و ϵ_r را به کار بریم، شعاع مدار اتم بخشنده با یک ضریب ۵۰ بزرگ‌تر از a_0 است. مقدار نوعی شعاع از مرتبه 30 \AA است. از آن جا که این مقدار خیلی بزرگ‌تر از فاصله بین اتمی است، مدار الکترون تعداد بسیاری از اتم‌های میزبان را در برمی گیرد (شکل ۸-۶). بنابراین تصویری که از شبکه به عنوان یک دی‌الکتریک پیوسته و قطبش‌پذیر ارائه کردیم، به نظر قابل قبول می‌آید.

از آنجا که تقریباً تمام اتم‌های بخشنده یونیده هستند، چگالی الکترون‌ها تقریباً مساوی چگالی اتم‌های پذیرنده است. مقدار نوعی چگالی در حدود 10^{15} cm^{-3} است، ولی گاهی در اثر آلایندگی بسیار زیاد مقادیر چگالی خیلی بالاتر نیز به دست می‌آید.

اتم‌های پذیرنده

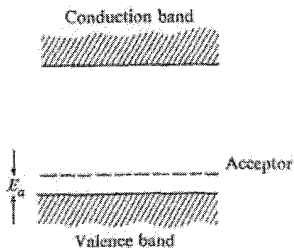
با انتخاب مناسب اتم‌های ناخالصی می‌توان به جای الکترون، حفره تولید کرد. فرض کنید بلور Si با اتم‌های ناخالصی Ga آلاینده شود. ناخالصی Ga در جای گاهی که قبلاً توسط اتم Si اشغال شده بود، جای می‌گیرد؛ ولی از آن جا که Ga سه ظرفیتی است، یکی از پیوندهای الکترونی خالی می‌ماند (شکل ۱۵-۶). ممکن است الکترونی از پیوند دیگری به سمت این جای خالی حرکت کند و آن را پر کند که نتیجه‌ی آن ایجاد یک جای خالی یا حفره در پیوند اخیر می‌شود. بنابراین حفره می‌تواند آزادانه در داخل بلور حرکت کند. به این ترتیب با وارد کردن تعداد زیادی از ناخالصی‌های سه ظرفیتی می‌توان یک چگالی مناسبی از حفره‌ها را که در واقع عدم وجود الکترون‌ها هستند، ایجاد کرد.



شکل ۱۰-۶ یک ناخالصی Ga در بلور Si. حفره اضافی درون بلور حرکت می‌کند.

ناخالصی سه ظرفیتی، پذیرنده نامیده می‌شود، زیرا یک الکترون را می‌پذیرد تا پیوند چهار وجهی خود را کامل کند. اتم پذیرنده به دلیل الکترون اضافی که به دام می‌اندازد، بار الکتریکی منفی دارد. حفره‌ای که ایجاد می‌شود، بار مثبت دارد و توسط اتم پذیرنده جذب می‌شود. انرژی پیوندی حفره در اتم پذیرنده را می‌توان به همان روشی که در بالا برای اتم‌های بخشنده عمل شد، محاسبه کرد. در این حالت نیز انرژی خیلی کم و از مرتبه‌ی 0.1eV است. (جدول ۲-۶ را ملاحظه نمایید.) بنابراین اساساً تمام اتم‌های پذیرنده در دمای اتاق یونیده هستند.

تراز انرژی اتم‌های پذیرنده هم چنان که در شکل ۱۱-۶ نشان داده شده است، در محدوده‌ی گاف انرژی و کمی بالاتر از لبه‌ی نوار ظرفیت است. این تراز متناظر با حفره‌ای است که توسط اتم پذیرنده به دام افتاده است. هنگامی که یک اتم پذیرنده یونیده می‌شود (یک الکترون از بالای نوار ظرفیت برانگیخته می‌شود تا این حفره را پر کند)، حفره در بالای نوار ظرفیت قرار می‌گیرد و یک حامل آزاد می‌شود. بنابراین فرآیند یونش را که با گذار به سمت بالای الکترون (در مقیاس انرژی) صورت می‌گیرد، می‌توان با گذار به سمت پایین حفره نشان داد.

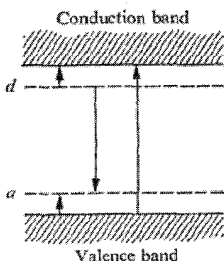


شکل ۱۱-۶ تراز پذیرنده در یک نیمه‌رسانا.

گفتیم ترازهای انرژی اتم‌های بخشنده و پذیرنده در محدوده‌ی گاف انرژی بلور قرار می‌گیرند. ولی در فصل ۵، آنجا که مدل نواری را بحث می‌کردیم، تأکید کردیم که محدوده‌ی گاف انرژی، یک منطقه‌ی ممنوعه است و هیچ حالت الکترونی نمی‌تواند در این محدوده قرار گیرد. تعارضی بین این دو عبارت نیست زیرا در بحث فصل ۵ با تک بلور سروکار داشتیم در حالی که ترازهای اتم‌های بخشنده و پذیرنده مربوط به حالت‌های ناخالصی‌اند. بنابراین به ناکاملی‌های بلور مربوط می‌شوند. توجیه دیگر این اختلاف این است که حالت‌های ناخالصی نمایان گر حالت‌های مفید و جای گزیده شده‌اند. در حالی که الکترون‌های بلوخ جای گزیده نشده‌اند. بنابراین حالت‌های ناخالصی، حالت‌های نارسانا هستند.

۶-۶ آمار نیمه‌رسانا

نیمه‌رساناها معمولاً هم شامل اتم‌های بخشنده و هم شامل اتم‌های پذیرنده هستند. الکترون‌ها در نوار رسانش را می‌توان یا با برانگیختگی حرارتی بین نواری و یا با یونش حرارتی اتم‌های بخشنده تولید کرد. حضرها در نوار ظرفیت را می‌توان با برانگیختگی بین نواری یا با برانگیختگی حرارتی الکترون‌ها از نوار ظرفیت به تراز پذیرنده تولید کرد. بعلاوه ممکن است الکترون‌ها را از ترازهای بخشنده به تراز پذیرنده انداخت. شکل ۱۲-۶ انجام این فرایندهای مختلف را نشان می‌دهد.



شکل ۱۲-۶ فرآیندهای الکترونی مختلف در یک رسانا (مقن درس را ملاحظه نمایید)

محاسبه چگالی حامل‌های بار (هم الکترون‌ها و هم حفره‌ها) تحت شرایط کلی و با در نظر گرفتن تمام این فرایندها بسیار پیچیده است. در این جا به جای انجام چنین محاسبه‌ی کلی چند حالت خاص را که در عمل بیش‌تر با آنها مواجه می‌شویم، محاسبه می‌کنیم. بسته به پارامترهای فیزیکی موجود، دو ناحیه را می‌توان از هم تفکیک کرد، ناحیه ذاتی و ناحیه غیرذاتی.

ناحیه ذاتی

چگالی حامل‌ها در ناحیه ذاتی در درجه اول توسط گذارهای بین نواری که در اثر گرما ایجاد می‌شوند، تعیین می‌گردد. در نتیجه با تقریب خوبی داریم:

$$n = p \quad (۶-۲۰)$$

در این صورت چگالی حامل‌ها را نظیر آنچه در بخش ۴-۶ یافتیم به دست می‌آوریم، یعنی:

$$n = p = n_i = \sqrt{\left(\frac{k_B T}{\pi \hbar}\right)^3} (m_e m_h)^{3/4} e^{-E_g/2k_B T} \quad (۶-۲۱)$$

این به نام چگالی ذاتی خوانده می‌شود و به n_i نشان داده می‌شود.

ناحیه ذاتی وقتی به دست می‌آید که ناخالصی‌های آلاینده کوچک باشند. اگر چگالی‌های بخشنده و پذیرنده را به N_d و N_a نشان دهیم، لازمه اعتبار شرط ذاتی این است که:

$$n_i \gg (N_d - N_a) \quad (۶-۲۲)$$

دلیل این امر به سادگی قابل درک است. N_d الکترون در تراز بخشنده وجود دارد. ولی از این تعداد N_a آن‌ها، ممکن است به دام اتم‌های پذیرنده بیفتند، و فقط $N_d - N_a$ الکترون باقی می‌ماند که از تراز بخشنده به نوار رسانش برانگیخته می‌شوند. هنگامی که شرط (۶-۲۲) برقرار شود حتی یونیزاسیون تمام این اتم‌های ناخالصی باقی مانده کافی نیست تا اثر قابل ملاحظه‌ای بر الکترون‌هایی که به طور حرارتی از نوار ظرفیت برانگیخته می‌شوند، بگذارد. بنابراین چنین نیمه‌رسانایی را می‌توان به عنوان یک نمونه خالص در نظر گرفت و از تأثیر ناخالصی‌های آن صرف‌نظر کرد. این دقیقاً آن کاری است که در رابطه (۶-۱۲) انجام دادیم.

از آنجا n_i که سریعاً برحسب دما تغییر می‌کند. شرط ذاتی در دماهای بالاتر بهتر برآورده می‌شود. در حقیقت تمام نیمه‌رساناها در دماهای خیلی بالا ذاتی می‌شوند مگر این که آلایندگی به طور غیر عادی زیاد باشد.

ناحیه غیر ذاتی

بسیار اتفاق می افتد که شرط ذاتی برقرار نمی شود. مثلاً برای یک میزان آلاینده‌گی در حد معمول 10^{15} cm^{-3} ، تعداد حامل‌های تولید شده توسط ناخالصی‌ها آن قدر بزرگ است که در دمای اتاق، چگالی ذاتی را به طور قابل ملاحظه‌ای تغییر دهد. در واقع ناخالصی‌ها، حامل‌هایی را که توسط برانگیختگی بین نواری تولید می شوند، افزایش می دهند. وقتی چنین شد نمونه در ناحیه غیر ذاتی می باشد.

دو نوع مختلف ناحیه غیر ذاتی را می توان از هم تمیز داد. اولی وقتی رخ می دهد که چگالی اتم‌های بخشنده از چگالی اتم‌های پذیرنده خیلی بیش تر می شود؛ یعنی وقتی که $N_a \gg N_d$ است. در این حالت چگالی الکترون‌ها را می توان به سادگی محاسبه کرد. از آنجا که انرژی یونش اتم‌های بخشنده (انرژی پیوندی که در بخش ۲-۶ بحث شد) کاملاً کوچک است، اساساً تمام اتم‌های بخشنده یونیده هستند و الکترون‌هایشان به نوار رسانش رفته است. بنابر این با تقریب خوبی رابطه زیر برقرار است.

$$n = N_d \quad (۶-۲۳)$$

تحت این شرایط چگالی حفره‌ها کوچک است. برای محاسبه این چگالی، مشاهده مفید زیر را انجام می دهیم. با مراجعه به بخش ۴-۶ درمی یابیم که معادله (۸-۶) حتی در مورد یک نمونه آلاینده هنوز معتبر است. فقط هنگامی از رابطه (۱۴-۶) برای محاسبه E_F استفاده کردیم که بحث فقط مربوط به یک نمونه ذاتی بود. به طور مشابه، معادله (۱۳-۶) نیز اعم از این که نمونه خالص یا آلاینده باشد، معتبر است. اگر این دو معادله را در هم ضرب کنیم خواهیم داشت:

$$np = 4 \left(\frac{k_B T}{\pi \hbar} \right)^3 (m_e m_h)^{3/2} e^{-E_g/k_B T} \quad (۶-۲۴)$$

انرژی فرمی که در دسرآفرین بود از طرف راست رابطه فوق حذف شده است. بنابراین حاصل ضرب np از E_F و هم چنین از مقدار و نوع آلاینده‌گی مستقل است. حاصل ضرب np فقط به دما بستگی دارد. این مطلب را از مقایسه با رابطه (۱۱-۶) که از طرف راست آن مساوی n_i^2 است نیز می توان دریافت. این نکته قابل قبول است؛ زیرا معادله (۲۴-۶) نیز در ناحیه ذاتی معتبر است و در آن صورت طرف چپ معادله مساوی n_i^2 است بنابراین می توان نوشت:

$$np = n_i^2 \quad (۶-۲۵)$$

این معادله به این معنی است که اگر هیچ تغییری در دما صورت نگیرد، حاصل ضرب مقدار np ثابت و مستقل از آلایندگی است. اگر با تغییر میزان آلایندگی چگالی، الکترون‌ها افزایش یابد چگالی حفره‌ها نیز کاهش می‌یابد و بالعکس.

همان‌گونه که در رابطه با (۶-۲۳) نشان داده شده، وقتی آلایندگی در درجه اول مربوط به اتم‌های نوع n باشد، $n \cong N_d$ است. برطبق رابطه (۶-۲۵) چگالی حفره‌ها برابر است با

$$p = \frac{n_i^2}{N_d} \quad (6-26)$$

چون در ناحیه غیر ذاتی هستیم $n_i \ll N_d$ بنابراین $n \ll N_d = n$. پس چگالی الکترون‌ها خیلی بزرگ‌تر از چگالی حفره‌هاست.

نیمه‌رسانایی که در آن $p \gg n$ است، نیمه‌رسانایی نوع n نامیده می‌شود (n اول کلمه negative است). این نام گذاری به اوایل کشف نیمه‌رساناها برمی‌گردد. همان‌طور که ملاحظه شد چنین نمونه‌ای با چگالی بسیار زیاد الکترون‌ها (بخشنده) مشخص می‌شود برای یک نمونه قوی نوع n ، $p \gg n$ است در حالی که برای یک نمونه ضعیف نوع n ، $n \geq p$ می‌باشد).

نوع دیگری از ناحیه غیر ذاتی هنگامی رخ می‌دهد که $N_a \gg N_d$ یعنی آلایندگی عمدتاً توسط اتم‌های پذیرنده صورت گرفته باشد. با استفاده از استدلالی مشابه استدلال فوق، خواهیم داشت:

$$p \cong N_a \quad (6-27)$$

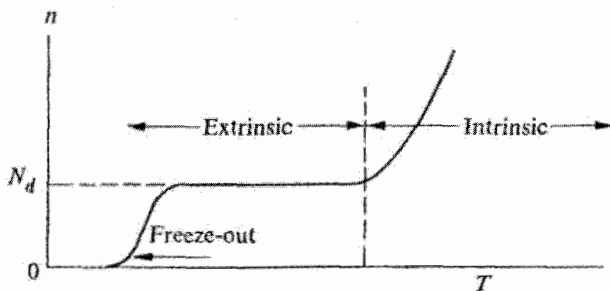
یعنی تمام اتم‌های پذیرنده یونیده هستند. چگالی الکترونی کوچک است و برابر است با:

$$n = \frac{n_i^2}{N_a} \quad (6-28)$$

چنین ماده‌ای، نیمه‌رسانای نوع p نامیده می‌شود که مشخصه آن غالب بودن تعداد حفره‌ها (اتم‌های پذیرنده) نسبت به تعداد الکترون‌ها است.

در بحث یونیزاسیون اتم‌های بخشنده (و پذیرنده) فرض کردیم دما به اندازه‌ی کافی بالا باشد به طوری که تمام اتم‌ها یونیزه باشند. قطعاً در دمای اتاق این فرض درست است. ولی اگر دما به طور فزاینده‌ای کاهش یابد، به نقطه‌ای می‌رسیم که انرژی گرمایی خیلی کوچک‌تر از آنی است که سبب برانگیختگی الکترون شود. در این صورت الکترون‌ها از نوار رسانش به تراز بخشنده می‌افتند

و رسانایی نمونه سریعاً افت می‌کند. این پدیده را انجماد^۱ گویند. زیرا در این حالت الکترون‌ها حالا در جای گاه‌های ناخالصی خود منجمد شده‌اند. از معادله $E_d \cong k_B T$ می‌توانیم دمای انجماد را تخمین بزنیم که دمایی حدود $100^\circ K$ می‌شود.



شکل ۶-۱۳ تغییرات چگالی الکترونی n برحسب دما در یک نیمه‌رسانای نوع n

تغییرات چگالی الکترونی برحسب دما در یک نمونه نوع n به طور شماتیک در شکل ۶-۱۳ نشان داده شده است. نواحی مختلف انجماد غیر ذاتی و ذاتی به وضوح در شکل مشخص شده‌اند.

۶-۷ رسانایی الکتریکی: تحرک

رسانایی الکتریکی کمیتهی است که در نیمه‌رساناها از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. هم الکترون‌ها و هم حفره‌ها در ایجاد جریان الکتریکی سهیم‌اند. ولی برای سادگی، بحث را بانمونه‌ای که فقط شامل یک نوع حامل (الکترون) است، آغاز می‌کنیم. به بیان دیگر فرض می‌کنیم نمونه نیمه‌رسانای قوی نوع n باشد.

هنگامی که یک میدان الکتریکی اعمال گردد الکترون‌ها در خلاف جهت میدان سوق می‌یابند و یک جریان خالص الکتریکی ایجاد می‌کنند. از آنجا که الکترون‌ها با یک جرم مؤثر m_e مشخص می‌شوند، می‌توان آنها را بر طبق مدل الکترون آزاد (فصل ۴) بررسی کرد.

$$\sigma_e = \frac{ne^2 \tau_e}{m_e} \quad (6-29)$$

بنابراین رسانایی الکتریکی الکترون‌ها از رابطه زیر به دست می‌آید. (بخش ۴-۴) که τ_e عمر الکترون است. برای به دست آوردن مرتبه‌ی بزرگی τ_e ، مقادیر زیر را جای‌گزین

می‌نماییم. $m_e = 0.1 m_0$, $\tau_e = 10^{-12}$ s, $n = 10^{15} \text{ cm}^{-3} = 10^{21} \text{ m}^{-3}$.

مقدار چندین مرتبه‌ی بزرگی کمتر از مقدار نوعی رسانایی فلزات $\sigma \cong 1 \text{ (ohm-m)}^{-1}$ است. اگر چه این

مقدار رسانایی یک نیمه‌رسانا برای مقاصد و کاربردهای عملی، به اندازه‌ی کافی بزرگ است. دلیل این که σ_e در نیمه‌رساناها این قدر کوچک است این است که در این مواد چگالی الکترونی

کوچک است. چگالی الکترونی در فلزات معمولاً در حدود 10^{28} m^{-3} و در نیمه‌رساناها در

حدود 10^{21} m^{-3} است. از نسبت این اعداد برای محاسبه مقادیر نسبی رسانندگی استفاده می‌شود.

فیزیک دان‌های نیمه‌رسانا، اغلب از ضریب ترابری دیگری به نام μ_e استفاده می‌کنند که به صورت زیر تعریف می‌شود: سرعت سوق الکترون در میدان الکتریکی مطابق رابطه‌ی (۷-۴) به صورت زیر نوشته می‌شود

$$v_e = -\frac{e\tau_e}{m_e} \mathcal{E} \quad (۶-۳۰)$$

علامت منفی به خاطر بار منفی الکترون است. تحرک الکترون μ_e به صورت نسبت $\frac{v_e}{\mathcal{E}}$ یعنی

سرعت بر واحد شدت میدان تعریف می‌شود. بنابراین

$$\mu_e = \frac{e\tau_e}{m_e} \quad (۶-۳۱)$$

در تعریف تحرک معمولاً علامت منفی در نظر گرفته نمی‌شود. همان‌گونه که تعریف شد، تحرک، معیاری از سرعت و تحرک الکترون در میدان الکتریکی است. هر چه عمر الکترون τ_e طولانی‌تر و جرم آن کمتر باشد، تحرک الکترون بیش‌تر است. مقادیر تحرک برای تعدادی از مواد در جدول ۶-۳ آمده است.

حال می‌توانیم رسانایی را بر حسب تحرک بیان نماییم. با مراجعه به روابط (۲۹-۶) و (۳۱-۶) می‌توان نوشت:

$$\sigma_e = ne\mu_e \quad (۶-۳۲)$$

که نشان می‌دهد σ_e متناسب با μ_e است. مقدار نوعی μ_e را می‌توان با جای‌گزینی

$$\sigma_e \cong 1 \text{ (ohm-m)}^{-1} \text{ و } n = 10^{21} \text{ m}^{-3} \text{ به دست آورد:}$$

$$\mu_e \cong 10^{-2} \text{ cm}^2/\text{V-s} = 100 \text{ cm}^2/\text{V-s}$$

که با اعدادی که در جدول ۳-۶ آمده است، سازگاری دارد.

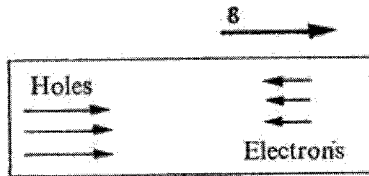
آن چه را که درباره‌ی الکترون‌ها در یک نمونه‌ی نیمه‌رسانای قوی نوع n گفته شد می‌توان به بحث حفره‌ها در یک نیمه‌رسانای قوی نوع p تعمیم داد. رسانایی الکتریکی حفره‌ها با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود:

$$\sigma_h = \frac{pe^y \tau_h}{m_h} = pe\mu_h \quad (6-33)$$

که μ_e ، تحرک حفره است. مقادیر μ_e برای نیمه‌رساناها در جدول ۳-۶ آمده است.

جدول ۳-۶: تحرک نیمه‌رسانای مختلف (در دمای اتاق)

$\mu(\text{cm}^2/\text{volt-s})$		بلور
حفره	الکترون	
۱۶۰۰	۱۸۰۰	C
۴۷۵	۱۳۵۰	Si
۱۹۰۰	۳۹۰۰	Ge
۴۰۰	۸۵۰۰	GaAs
۷۵	۱۱۰	GaP
۱۴۰۰	۴۰۰۰	GaSb
۴۶۰	۳۳۰۰۰	InAs
۱۵۰	۴۶۰۰	Inp
۷۵۰	۸۰۰۰۰	InSb
۱۸	۳۴۰	CdS
-	۶۰۰	CdSe
۶۵	۳۰۰	CdTe
۵	۱۲۰	ZnS
۱۶	۵۳۰	ZnSe
۹۰۰	۵۳۰	ZnTe



شکل ۱۴-۶ سوق الکترون‌ها و حفره‌ها در حضور یک میدان الکتریکی.

حالا به حالت کلی می‌پردازیم که در آن هم الکترون‌ها و هم حفره‌ها حضور دارند. هنگامی که یک میدان الکتریکی بر نمونه اعمال شود، مطابق شکل ۱۴-۶ الکترون‌ها در خلاف جهت میدان و حفره‌ها در جهت میدان جریان می‌یابند. جریان و رسانایی دو حامل با هم جمع می‌شود. بنابراین:

$$\sigma = \sigma_e + \sigma_h$$

یعنی هم الکترون‌ها و هم حفره‌ها در جریان الکتریکی سهم هستند. بر حسب تحرک‌های الکترون و حفره می‌توان نوشت:

$$\sigma = ne\mu_e + pe\mu_h \quad (۶-۳۴)$$

همان‌گونه که در بخش قبل بحث شد، اگر نمونه آلاینده شده باشد، لازم نیست چگالی‌های n و p با هم برابر باشند. بسته به این که نیمه‌رسانا نوع n یا p باشد، چگالی الکترون یا حفره ممکن است، بیش تر باشد. ولی هنگامی که ماده در ناحیه‌ی ذاتی است، $n=p$ و معادله (۶-۳۴) به شکل زیر در می‌آید:

$$\sigma = ne(\mu_e + \mu_h) \quad (۶-۳۵)$$

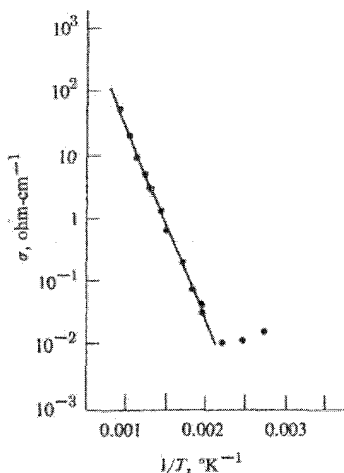
که $n = n_i$ ، چگالی ذاتی است. حتی حالا هم سهم دو حامل در ایجاد جریان مساوی نیست. حامل‌های با تحرک بیشتر (معمولاً الکترون‌ها) سهم بیش تری دارند.

بستگی به دما

رسانایی به دما بستگی دارد و این بستگی اغلب قابل ملاحظه است. نیمه‌رسانایی را در ناحیه‌ی ذاتی در نظر بگیرید؛ رسانایی آن با رابطه‌ی (۶-۳۵) بیان می‌شود. ولی در این وضعیت، هم چنان که از رابطه‌ی (۶-۱۶) نیز ملاحظه می‌شود، چگالی n با دما به طور نمایی افزایش می‌یابد. اگر این رابطه را با رابطه‌ی (۶-۳۵) ترکیب نماییم می‌توانیم رسانایی را به صورت زیر بنویسیم:

$$\sigma = f(T)e^{-E_g/2k_B T} \quad (۶-۳۶)$$

که $f(T)$ تابعی است که به طور ضعیف (مثلاً به صورت چند جمله‌ای) به دما بستگی دارد. این تابع به تحرک و جرم مؤثر ذرات بستگی دارد. به دلیل وجود ضریب نمایی در رابطه‌ی (۶-۳۶)، رسانایی به طور نمایی به دما بستگی دارد. چنین رفتاری با منحنی شکل (۶-۱۵) تأیید می‌شود.



شکل ۶-۱۵ رسانایی Si بصورت تابعی از $1/T$ در ناحیه ذاتی.

[۱۹۵۴, ۲۸, ۹۶. Rev. phys, Morita and Morin After]

نتیجه (۶-۳۶) برای تعیین گاف انرژی در نیمه‌رساناها مورد استفاده قرار می‌گیرد. اگر از طرفین رابطه‌ی فوق لگاریتم بگیریم، خواهیم داشت:

$$\log \sigma = \log f(T) - \frac{E_g}{2k_B} \cdot \frac{1}{T}$$

نمودار $\log \sigma$ بر حسب $\frac{1}{T}$ خط مستقیمی می‌شود که از شیب آن $\frac{-E_g}{2k_B}$ ، می‌توان گاف انرژی

را تعیین نمود. (بستگی ضعیف دمایی $f(T)$ قابل چشم پوشی است). در اوایل کشف نیمه‌رساناها، از این روش به عنوان یک روش استاندارد برای تعیین گاف انرژی استفاده می‌کردند ولی امروزه گاف انرژی را اغلب با روش‌های اپتیکی اندازه‌گیری می‌کنند (بخش ۶-۱۲ را ملاحظه نمایید).

هنگامی که ماده‌ای در ناحیه‌ی ذاتی نباشد، رسانایی آن با رابطه‌ی کلی (۳۴-۶) بیان می‌شود. در این حالت بستگی دمایی σ به T معمولاً به آن شدت که در بالا بیان شد، نیست. برای این که دلیل آن را متوجه شویم، فرض کنیم که ماده در ناحیه‌ی غیر ذاتی و از نوع قوی n است. رسانایی برابر است با:

$$\sigma_e = ne\mu_e$$

ولی چگالی الکترونی n همان‌گونه که در بخش ۶-۶ اشاره شد حالا مقداری ثابت و مساوی N_d یعنی چگالی اتم‌های بخشنده (حفره‌ها) است. بنابراین هر گونه بستگی دمایی موجود بایستی مربوط به تحرک الکترون‌ها یا حفره‌ها باشد.

تغییرات تحرک نسبت به دما: مکانیسم پراکندگی

تحرک الکترون‌ها (یا حفره‌ها) بر حسب دما تغییر می‌کند. این را به بهترین شکلی می‌توان از رابطه‌ی (۳۱-۶) ملاحظه نمود.

$$\mu_e = \frac{e\tau_e}{m_e} \quad (۳۱-۶)$$

که برای اختصار فقط الکترون‌ها را منظور کرده‌ایم. از آن جا که عمر الکترون یا زمان برخورد آن بر حسب دما تغییر می‌کند (بخش ۵-۴)، تحرک آن نیز با دما تغییر می‌کند. در حالت کلی هم عمر الکترون و هم تحرک آن در اثر افزایش دما کاهش می‌یابد. (جرم مؤثر یک الکترون مستقل از دما است). ولی بستگی دمایی τ_e در یک نیمه‌رسانا کاملاً متفاوت با فلزات است. برای ملاحظه این مطلب می‌نویسیم:

$$\tau_e = \frac{l_e}{v_r} \quad (۳۷-۶)$$

که l_e پویش آزاد میانگین الکترون و v_r سرعت کاتوره‌ای آن است (بخش ۴-۴ را ملاحظه نمایید). الکترون‌ها در انتهای نوار رسانش در یک نیمه‌رسانا از آمار کلاسیک پیروی می‌کنند (بخش ۴-۶)؛ و نیازی به به کار بردن آمار فرمی-دیراک که در فلزات به کار می‌رود، نیست. این الکترون‌ها بسته به جای گاه شان در نوار، سرعت‌های متفاوتی دارند. هر چه در نوار بالاتر باشند، سرعتشان بیش تر است. در واقع بر طبق رابطه‌ی (۳۷-۶) عمر یگانه‌ای برای الکترون‌ها موجود نیست. الکترون‌های مختلف، عمرهای مختلفی دارند. الکترون‌هایی که سریع حرکت می‌کنند،

نسبت به الکترون‌هایی که آهسته‌تر حرکت می‌کنند، عمر طولانی‌تری دارند. (پویش آزاد میانگین l_e برای همه‌ی الکترون‌ها یکسان است.)

حال می‌توان یک عمر متوسط \bar{t}_e تعریف کرد که میانگینی برای همه‌ی الکترون‌ها است. بنابراین

$$\bar{t}_e = \frac{l_e}{\bar{v}_r} \quad (6-38)$$

و تحرک به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\mu_e = \frac{e\bar{t}_e}{m_e} \quad (6-39)$$

رابطه بین رسانایی و تحرک مانند رابطه‌ی (۶-۳۲) است. با جای‌گزینی رابطه‌ی (۶-۳۸) در رابطه‌ی (۶-۳۹) درمی‌یابیم که

$$\mu_e = \frac{el_e}{m_e \bar{v}_r}$$

می‌توان سرعت میانگین الکترون‌ها را به وسیله‌ی روش معمول در نظریه جنبشی گازها محاسبه کرد. از فیزیک عمومی یادآوری می‌کنیم.

$$\frac{1}{2} m_e \bar{v}_r^2 = \frac{3}{2} k_B T$$

بنابراین

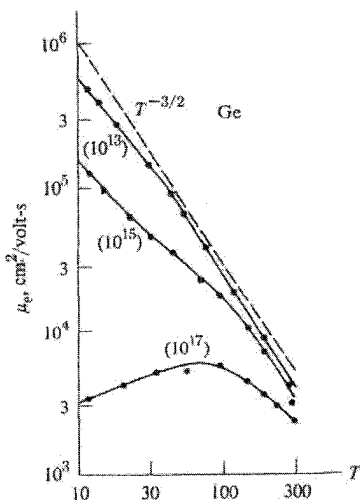
$$\mu_e = \frac{el_e}{m_e (3k_B T)^{1/2}} \quad (6-40)$$

بنابراین با استفاده از توزیع آماری برای الکترون ملاحظه می‌کنیم تحرک با $T^{-1/2}$ بستگی دارد.

پویش آزاد میانگین l_e به دما نیز بستگی دارد و این بستگی شبیه بستگی دمایی فلزات است.

از بخش ۴-۵ یادآوری می‌کنیم که l_e با مکانیسم‌های برخورد مختلف که بر الکترون اعمال می‌گردد، تعیین می‌شود. (این مکانیسم‌ها، عبارتند: از برخورد الکترون با فونون‌ها، ارتعاشات حرارتی که شبکه ایجاد می‌کند و برخورد با ناخالصی‌ها). در دماهای بالا که برخورد الکترون با فونون‌ها عامل غالب است، l_e با دما نسبت عکس دارد یعنی $l_e \sim T^{-1}$.

در این حالت تحرک به صورت $\mu_e \sim T^{-3/2}$ تغییر می‌کند. شکل ۱۶-۶ این تغییر را برای Ge نشان می‌دهد.



شکل ۱۶-۶ حرکت الکترون μ_e بر حسب T برای Ge. منحنی خط چین نمایانگر پراکندگی خالص فوتون است. اعداد داخل پرانتزها مربوط چگالی‌های اتم‌های بخشنده هستند

(After Debye and Conwell)

مکانیسم مهم دیگر پراکندگی در نیمه‌رساناها مربوط به ناخالصی‌های یونیده است. یادآوری می‌کنیم، هنگامی که یک ماده آلاییده می‌شود، اتم‌های بخشنده (یا پذیرنده) الکترون (یا حفره) خود را به نوار رسانش می‌دهند. بنابراین ناخالصی‌ها یونیده هستند و در پراکندگی الکترون‌ها (یا حفره‌ها) کاملاً مؤثرند. (خیلی شبیه به یون‌های آزاد که الکترون‌ها را در عبور از نزدیکی خود پراکنده می‌کنند). در دماهای بالا این پراکندگی توسط مکانیسم قوی‌تر فونون‌ها پوشیده می‌شود ولی در دماهای پایین مکانیسم اخیر ضعیف می‌شود و پراکندگی توسط ناخالصی‌های یونیده، تدریجاً قابل ملاحظه می‌شود.

۸-۶ آثار میدان مغناطیسی: تشدید سیکلوترونی و اثر هال

آثار میدان مغناطیسی بر خواص الکترونی جامدات در بخش ۱۰-۴ و سپس در بخش ۱۹-۵ مورد بحث قرار گرفت. در بخش ۱۰-۴ مدل الکترون آزاد را برای الکترون‌ها به کار بردیم در حالی که در بخش ۱۹-۵ مدل نواری به کار گرفته شد. در اینجا نتایج به دست آمده قبلی را برای نیمه‌رساناها به کار می‌بریم؛ زیرا هم‌چنان که گفتیم آثار مغناطیسی در مطالعه‌ی خواص فیزیکی جامدات خیلی مهم هستند.

تشدید سیکلوترونی

قبلاً گفته شد که یک ذره‌ی باردار در میدان مغناطیسی یک حرکت سیکلوترونی (دایروی) با فرکانس $\omega_{ce} = \frac{eB}{m_e^*}$ خواهد داشت که B میدان مغناطیسی است. حالا این نتایج را برای یک نیمه‌رسانا که حاوی الکترون و حفره‌هایی است به کار می‌بریم. هنگامی که یک میدان مغناطیسی اعمال می‌گردد، الکترون‌ها یک حرکت سیکلوترونی با فرکانس

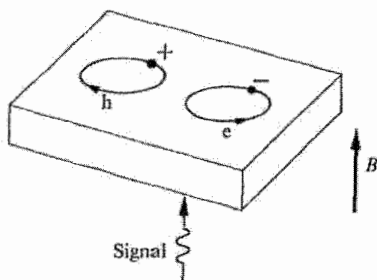
$$\omega_{ce} = \frac{eB}{m_e^*} \quad (6-41)$$

خواهند داشت (شکل ۱۷-۶). جهت این دوران پاد ساعتگرد است. هم زمان، حفره‌ها نیز یک حرکت سیکلوترونی با فرکانس

$$\omega_{ch} = \frac{eB}{m_h^*} \quad (6-42)$$

خواهند داشت. ولی جهت حرکت آنها در خلاف جهت حرکت الکترون‌ها (ساعتگرد) است، که البته این به خاطر بار مثبت حفره‌ها است.

بنابراین دو فرکانس سیکلوترونی متمایز وجود دارد که یکی مربوط به الکترون‌ها و دیگری مربوط به حفره‌ها است. با فرستادن یک سیگنال ac به داخل یک قطعه‌ی نیمه‌رسانا، در جایی که سیگنال در همان جهت میدان مغناطیسی منتشر می‌شود، تشدید سیکلوترونی رخ می‌دهد. هنگامی که فرکانس سیگنال ω مساوی ω_{ce} یا ω_{ch} باشد توان توسط الکترون‌ها یا حفره‌ها جذب می‌شود.



شکل ۱۷-۶ حرکت سیکلوترونی الکترون‌ها (e) و حفره‌ها (h) در یک میدان مغناطیسی

یک نتیجه‌ی مفید این روش این است که می‌توان جرم مؤثر حامل‌ها را تعیین کرد. با اندازه‌گیری فرکانس سیکلوترونی و استفاده از روابط (۶-۴۱) و (۴-۲۶) می‌توان جرم مؤثر الکترون و حفره را

تعیین کرد. این یک روش استاندارد است. در واقع جرم‌هایی که در جدول ۱-۶ آمده است به این روش تعیین شده‌اند.

تکنیک تشدید سیکلوترونی، قادر به تشخیص بین الکترون‌ها و حفره‌ها می‌باشد. فرض کنید که موج تابشی قطبیده فضایی باشد. می‌توان فرض کرد که این موج از دو موج قطبیده دایروی، یکی در جهت ساعت گرد و دیگری در جهت پادساعت گرد تشکیل شده است. دامنه‌ی این امواج مساوی است. این امواج از نمونه عبور می‌کنند و می‌توان تصور کرد $\omega = \omega_{ce}$ که است یعنی، تشدید الکترونی وجود دارد. چون مدار الکترون‌ها در جهت پادساعت گرد است، جذب انرژی فقط از موج دایروی پادساعت گرد صورت می‌گیرد و موج دیگر بدون تأثیر می‌ماند. بنابراین موج عبوری، قطبیده‌ی تخت نیست، بلکه به طور جزئی در جهت ساعت گرد قطبیده می‌شود، و قطبش آن دلیل روشنی است که جذب توسط الکترون‌ها صورت می‌گیرد.

در مورد تشدید حفره، جذب توسط موج ساعت گرد صورت می‌گیرد و بنابراین موج عبوری در خلاف جهت موج مربوط به الکترون‌ها قطبیده است.

آزمایش‌های تشدید سیکلوترونی در دماهای پایین و بر روی نمونه‌های نسبتاً خالص انجام می‌شود. برای این که فرکانس جذب کاملاً قابل تشخیص باشد، لازم است که $\omega_{ce}T \gg 1$ باشد که T زمان برخورد است. این معادل آن است که بگوییم ذره در طول یک زمان برخورد چندین مدار دایروی را باید طی کند. هنگامی که دما تا حدود $4^\circ K$ کاهش داده شود و از یک نمونه‌ی نسبتاً خالص استفاده شود، زمان برخورد طولانی‌تر و کمیت $\omega_{ce}T$ بزرگ‌تر می‌شود.

در اغلب آزمایش‌های مربوط به تشدید سیکلوترونی، فرکانس ω_{ce} در ناحیه‌ی میکروموج قرار می‌گیرد. ولی اخیراً موفق شده‌اند با استفاده از سیگنال‌هایی از لیزر فروسرخ، فرکانس‌های سیکلوترونی را با دقت بیشتری تعیین کنند. فرکانس چنین سیگنال‌هایی به دقت معلوم است. هم چنین، از آنجا که ω_{ce} در ناحیه‌ی فروسرخ است (که یک میدان مغناطیسی قوی مثلاً $50kG$ لازم دارد) و این فرکانس از فرکانس‌های میکروموج خیلی بزرگ‌تر است، کمیت $\omega_{ce}T$ خیلی بزرگ و خط سیکلوترونی به روشنی قابل تشخیص است.

اثر هال

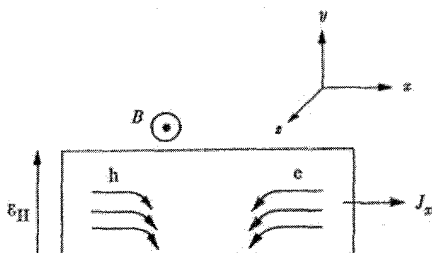
اثر هال را در بخش ۱۰-۴ برای یک حامل بار منفرد مورد بحث قرار دادیم و در آنجا ثابت هال را برای یک الکترون به صورت زیر به دست آوردیم:

$$R_e = -\frac{1}{ne} \quad (6-43)$$

همین طور، ثابت هال برای حفره‌ها عبارتست از:

$$R_h = \frac{1}{pe} \quad (6-44)$$

که علامت مثبت مربوط به بار حفره است. حال عبارت مناسبی برای هر دو نوع حامل موجود در نمونه به دست می‌آوریم.



شکل ۶.۱۸ اثر هال در یک نیمه‌رسانای دو حاملی. علامت‌های h ، e مربوط به الکترون‌ها و حفره‌ها هستند.

شکل (۶-۱۸) چنین وضعیتی را نشان می‌دهد. میدان الکتریکی E_x در امتداد محور x ها و به طور هم زمان یک میدان مغناطیسی B_z در امتداد z ها (عمود بر صفحه) اعمال می‌گردد. به دلیل اعمال میدان الکتریکی E_x ، حامل‌های بار، الکترون‌ها به طرف چپ و حفره‌ها به طرف راست سوق می‌یابند. در اثر سوق این حامل‌ها، میدان مغناطیسی یک نیروی لورنتس بر حامل‌ها اعمال می‌کند که باعث انحراف آنها می‌شود. (انحراف الکترون‌ها و حفره‌ها در دو جهت مخالف اند زیرا بار آن‌ها مخالف است).

الکترون‌ها و حفره‌ها هر دو به طرف سطح پایینی نمونه منحرف می‌شوند و تمایل به حذف یکدیگر دارند. ولی هم چنان که به زودی ملاحظه خواهیم کرد، کاملاً یکدیگر را حذف نمی‌کنند. بنابراین یک بار خالص روی سطح پایینی تجمع می‌کند. از آن جا که کل نمونه به لحاظ الکتریکی خنثی است میدان الکتریکی در امتداد محور y ها ایجاد می‌شود. این همان میدان هال، E_H است.

میدان حال را می توان به روش زیر محاسبه نمود. نیروی لورنتس وارد بر یک الکترون به صورت زیر است:

$$F_{Le} = -e(V_e \times B) = +ev_e B_z$$

که v_e سرعت سوق الکترون ها است. نیروی F_{Le} در جهت محور y ها است. (چون e منفی است، نیروی به طرف پایین یعنی در امتداد منفی محور y ها است.)

$$\varepsilon_{Le} = -v_e B_z \quad (6-45)$$

این نیرو معادل با یک میدان لورنتس است که بر الکترون اعمال می شود. (علامت منفی به خاطر این است که معادله ی قبلی بر $-e$ بار الکترون تقسیم شده است). از آن جا که $J_e = -nev_e$ است، معادله ی فوق را می توان به صورت زیر نوشت:

$$\varepsilon_{Le} = -\frac{J_e B_z}{ne} \quad (6-46)$$

که J_e جزیی از جریان J_x است که الکترون ها حمل می کنند. با انجام روشی مشابه، می توان نتیجه گرفت که بر حفره ها نیز یک میدان لورنتس در جهت y ها اعمال می شود که با رابطه ی زیر بیان می شود: (حامل های بار در رابطه ی ۶-۴۶ جایگزین شده اند).

$$\varepsilon_{Lh} = -\frac{J_h B_z}{pe} \quad (6-47)$$

حال به کل مسأله به صورت زیر نظر می اندازیم: حامل ها در امتداد محور x ها جریان می یابند، ولی میدان های الکتریکی زیادی در امتداد محور y ها بر آن ها اعمال می شود. این میدان ها عبارتند از: ε_{Le} (که بر الکترون ها اثر می کند) و ε_{Lh} (که بر حفره ها اثر می کند)؛ و میدان ε_H (که بر هر دو حامل اثر می کند). بنابراین چگالی جریان کل در امتداد محور y ها برابر است با

$$J_y = ne\mu_e \varepsilon_{Le} + pe\mu_h \varepsilon_{Lh} + (ne\mu_e + pe\mu_h)\varepsilon_H \quad (6-48)$$

ولی این جریان صفر می شود. زیرا بواسطه ی وجود سطوح در نمونه، ذرات مجاز نیستند که در امتداد محور y ها حرکت کنند. بنابراین J_h را مساوی صفر قرار می دهیم و از معادله به دست آمده برای تعیین میدان حال ε_H استفاده می کنیم. یادآوری می کنیم که ثابت حال R به صورت $R = \varepsilon_H / J_x B$ تعریف می شود. به جای گزینی معادلات (۶-۴۶) و (۶-۴۷) معادله ی (۶-۴۸) و توجه به این که $J_h = J_x - J_e$ و $J_e = [n\mu_e / (n\mu_e + p\mu_e)] J_x$ در می یابیم که:

$$R = \frac{p \mu_h^2 - n \mu_e^2}{e(n \mu_e + p \mu_h)^2} \quad (6-49)$$

و همان نتیجه‌ای است که در پی آن بودیم. واضح است که در حالت‌هایی که نمونه نوع n یا نوع p باشد، عبارت فوق به ترتیب به شکل معادلات (۶-۴۳) و (۶-۴۴) در می‌آید.

مطابق رابطه‌ی (۶-۴۹)، بسته به چگالی حامل‌ها و تحرک آنها، ثابت هال ممکن است مثبت، منفی و یا صفر باشد. بنابراین با اندازه‌گیری R اطلاعاتی راجع به نسبت بین این کمیت‌ها در آن نمونه‌ی به خصوص به دست می‌آید. [توجه کنید که عبارت‌های مربوط به الکترون و حفره در رابطه‌ی (۶-۴۹) علامت‌های مخالف دارند و همان‌گونه که قبلاً بیان شد، تمایل به حذف یکدیگر دارند].

اولین استفاده‌ی اثر هال در نیمه‌رساناها این است که ما را قادر می‌سازد، چگالی حامل‌ها را تعیین کنیم. از روابط (۶-۴۳) و (۶-۴۴) روشن می‌گردد؛ در نمونه‌های شامل یک نوع حامل به مجرد این که ثابت هال اندازه‌گیری شود، چگالی حامل‌ها به دست می‌آید.

از ثابت هال در تعیین تحرک نیز می‌توان استفاده نمود. با ترکیب روابط (۶-۳۲) و (۶-۴۳) در می‌یابیم که برای یک ماده نوع n تحرک برابر است با:

$$\mu_e = \sigma_e R_e \quad (6-50)$$

رابطه‌ی مشابهی برای حفره‌ها در مواد نوع p برقرار است. بنابراین تحرک الکترون‌ها و حفره‌ها را می‌توان هم با اندازه‌گیری رسانایی الکتریکی و هم با اندازه‌گیری ثابت هال در نمونه‌ی غیر ذاتی تعیین کرد. حاصلضرب σR را معمولاً تحرک هال می‌نامند و به μ_H نمایش می‌دهند.

۹-۶ ساختارهای نواری نیمه‌رساناهای واقعی

تا اینجا در بررسی خواص نیمه‌رساناها فرض کردیم که نیمه‌رساناها ساده‌ترین ساختار نواری را دارند. یعنی یک نوار رسانش استاندارد حول مبدأ $k=0$ ، و یک نوار ظرفیت به شکل وارون شده استاندارد حول مبدأ دارند. چنین ساختار ساده‌ای، بسیاری از پدیده‌های مشاهده شده را توجیه می‌کند. ولی نمایان‌گر ساختار نواری واقعی بسیاری از نیمه‌رساناها نیست. تنها هنگامی که ساختارهای نواری واقعی به کار رود می‌توان به سازگاری کمی بین تحلیل‌های تئوری و نتایج تجربی دست یافت.

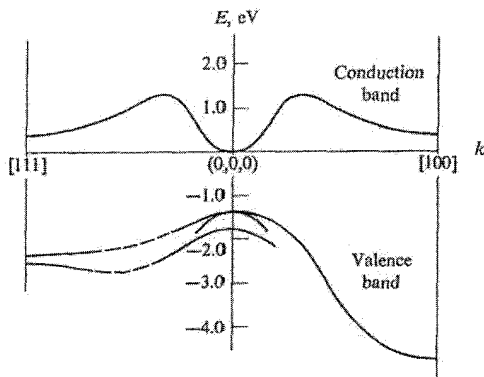
ماده‌ای که ساختار نواری آن خیلی شبیه به ساختار ایده آل است، GaAs (شکل ۶-۱۹) است.

ابتدا نوار رسانش GaAs را بررسی می‌کنیم. این نوار یک مقدار کمینه در مبدأ $k=0$ دارد و ناحیه نزدیک مبدأ با یک رابطه‌ی درجه‌ی دو به انرژی بستگی دارد، $E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m_e}$ ، که $m_e = 0.077m_0$ است. از آن جا که بیشترین احتمال این است که الکترون‌ها در این ناحیه جای گیرند، می‌توان این نوار را به کمک یک جرم مؤثر نمایش داد.

با افزایش k ، انرژی $E(k)$ دیگر تابعی درجه دو از k نیست و آن حالت‌ها را دیگر نمی‌توان توسط یک جرم مؤثر یگانه نشان داد. به خصوص توجه کنید که مینیمم انرژی بعدی در امتداد $[100]$ رخ می‌دهد. بستگی انرژی به k در همسایگی این مینیمم ثانوی از درجه‌ی دو است و بنابراین به طور موضعی یک جرم مؤثر می‌توان تعریف کرد ولی مقدار آن خیلی بزرگ‌تر از مینیمم اولی (در مرکز) است. (مقدار واقعی $0.36m_0$ است).

در واقع مینیمم‌های ثانویه دیگری معادل با آن چه اخیراً توصیف شد، وجود دارند. یکی از این‌ها در امتداد جهت $[100]$ رخ می‌دهد. همان‌گونه که در بخش ۵-۴ توضیح داده شد. این مینیمم از تقارن وارونی $E(k)$ در فضای k نتیجه می‌شود. هم چنین دو مینیمم در امتداد محور k_y و دو مینیمم دیگر در امتداد محور k_z وجود دارد. این‌ها از این واقعیت نتیجه می‌شوند که چون بلور تقارن مکعبی دارد، نوار انرژی نیز بایستی تقارن مکعبی دورانی داشته باشد. [خاصیت (iii) بخش ۴-۵]. بنابراین نوار در امتداد محورهای k_y و k_z باید همان شکلی را داشته باشد که در امتداد محور k_x دارد. پس شش مینیمم یا «دره» ثانویه وجود دارد که همگی در امتدادهای $\langle 100 \rangle$ قرار دارند.

دره‌های ثانویه در اغلب شرایط نقشی ایفا نمی‌کنند، زیرا معمولاً الکترون‌ها دره اولیه یا دره مرکزی را اشغال می‌کنند. در چنین وضعیتی همه‌ی این دره‌های ثانویه را می‌توان نادیده انگاشت. ولی حالت‌هایی وجود دارد که تعداد قابل ملاحظه‌ای از الکترون‌ها از دره مرکزی به دره‌ی ثانویه انتقال می‌یابند و در چنین شرایطی، این دره‌ها بایستی به حساب آیند. چنین موردی در اثرگان در بخش ۱۱-۶ بحث خواهد شد. (همان‌گونه که در شکل ۱۹-۶ نشان داده شده است، دره‌های ثانویه دیگری در امتداد جهت‌های $\langle 111 \rangle$ وجود دارند. این دره‌ها از دره‌های $\langle 100 \rangle$ بلندترند و احتمال کم تری هست که الکترون‌ها، آن‌ها را اشغال کنند.)



شکل ۱۹-۶ ساختار نواری GaAs که در امتداد جهت‌های [۱۰۰] و [۱۱۱] رسم شده‌اند.

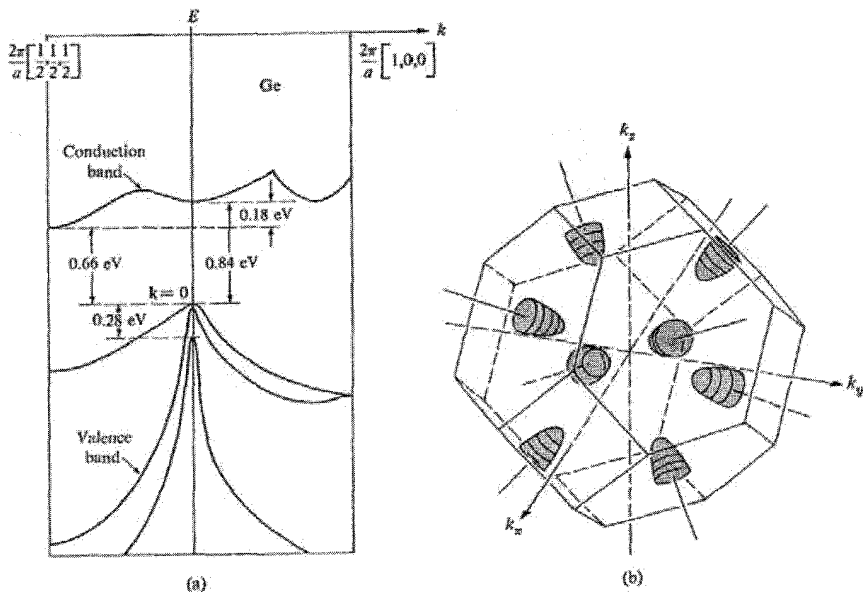
نوار ظرفیت نیز در شکل ۱۹-۶ رسم شده است. اینجا ترکیبی از سه زیر نوار وجود دارد. به دلیل این که انحنای نوارها مختلف است، جرم‌های مؤثر حفره‌های مربوطه نیز متفاوت خواهد بود. به دلیل این که انحنای نوارها مختلف است می‌توان راجع به حفره‌های سبک و حفره‌های سنگین^۱ صحبت کرد.

ساختار نواری نیمه‌رساناهای دیگر گروه V-III کاملاً مشابه GaAs است.

ساختار نواری Si که پایین‌ترین (اولین) مینیمم نوار رسانش آن در امتداد جهت [۱۰۰] در فاصله ۰/۸۵ از مرکز و به طرف لبه منطقه برلیون قرار دارد، در شکل ۲۰-۶ نشان داده شده است. به دلیل تقارن مکعبی شش دره اولیه که معادل یکدیگرند، در امتداد جهت‌های $\langle 100 \rangle$ قرار گرفته‌اند. این دره‌ها در شکل ۲۰-۶ (ب) نشان داده شده‌اند. سطوح انرژی در این دره‌ها از بیضوی‌های دواری تشکیل یافته است که محور تقارن آن‌ها در امتداد جهت‌های $\langle 100 \rangle$ است. جرم طولی $m_1 = 0.97 m_0$ است در حالی که دو جرم عرضی مشابه می‌باشند، ($m_t = 0.19 m_0$) جدول ۱-۶ را ملاحظه نمایید). نسبت ناهمسان گردی $\frac{m_l}{m_t} \cong 5$ است.

نوار ظرفیت در سیلیسیوم با سه حفره‌ی متفاوت، نشان داده می‌شود (شکل ۲۰-۶). یکی از حفره‌ها سنگین ($m_h = 0.5 m_0$) و دو حفره‌ی دیگر سبک هستند.

۱- شکافتگی نوار ظرفیت مربوط به برهم‌کنش اسپین - مدار است. این برهم‌کنش توسط اعمال میدان مغناطیسی هسته آن گونه که در دستگاه مرجع الکترون مشاهده می‌شود بر اسپین الکترون ایجاد می‌شود. هر چه Z اتم بزرگ تر باشد، برهم‌کنش و شکافتگی بیش تر می‌شود.



شکل ۲۱-۶ (الف) ساختار نواری Ge که در امتداد جهت‌های [۱۱۱] و [۱۰۰] رسم شده است. (ب) سطوح انرژی متناظر با دره‌های اولیه در امتداد جهت‌های $\langle 111 \rangle$.

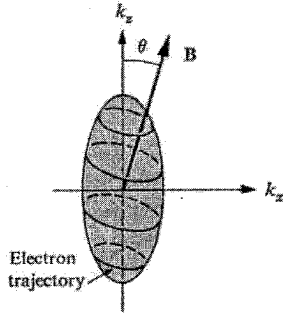
نوار ظرفیت در Ge مشابه Si است این نوار با یک حفره‌ی سنگین و دو حفره سبک نمایش داده می‌شود. گاف انرژی 0.74 eV است (نوار رسانش در Ge دره‌های ثانویه‌ای در امتداد جهت‌های $\langle 100 \rangle$ دارد).

چگونه می‌توان به چنین اطلاعات مبسوطی در مورد ساختار نواری دست یافت؟ به کمک تکنیک‌های تشدید سیکلوترونی می‌توان شکل سطوح انرژی را تعیین کرد. فرض کنید سطح انرژی یک بیضوی دوار باشد و میدان مغناطیسی B با محور تقارن زاویه θ بسازد (شکل ۲۲-۶) الکترون در صفحه سطوح انرژی و عمود بر میدان مغناطیسی یک حرکت سیکلوترونی انجام می‌دهد. می‌توان نشان داد (مساله ۱۶-۴) که فرکانس الکترون برای این حالت برابر است با

$$\omega_c = eB \left[\frac{\cos^2 \theta}{m_t} + \frac{\sin^2 \theta}{m_l} \right]^{1/2} \quad (6-51)$$

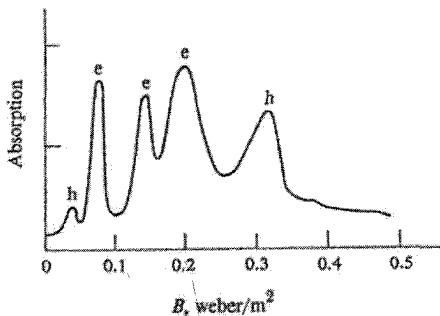
فرکانس سیکلوترونی نه تنها به جرم‌های طولی و عرضی بلکه به زاویه θ هم بستگی دارد. با اندازه‌گیری فرکانس سیکلوترونی در زوایای مختلف، می‌توان جرم‌های مؤثر m_t و m_l را تعیین

کرد. (در واقع تنها لازم است دو اندازه گیری انجام شود.)



شکل ۶-۲۲ حرکت سیکلوترونی سطح انرژی بیضی وار یک الکترون.

طیف تشدید سیکلوترونی Ge در شکل ۶-۲۳ نشان داده شده است. میدان B در صفحه (۱۰۰) است و با جهت [۱۰۰] زاویه 60° می سازد. توجه کنید که به جای چهار خطی که انتظار داریم، فقط سه خط الکترون وجود دارد. دلیل این امر این است که در این جهت انتخابی دو تا از بیضوی زاویه یکسانی با میدان می سازند و بنابراین فرکانس های سیکلوترونی یکسانی دارند (کدام دو بیضوی؟). همین طور به جای سه خط حفره فقط دو خط ظاهر می شود زیرا دو حفره ی بالاتر جرم یکسان و بنابراین فرکانس یکسانی دارند. این مطلب را می توان بر پایه این واقعیت بیان کرد که خطوط مربوط به حفره های سبک یعنی حفره ای که بالاترین فرکانس را دارد، شدیدتر از خط مربوط به حفره سنگین است. دلیل آن این است که دو حفره سبک تر شدیدتر از یک حفره ی سنگین انرژی جذب می کنند.

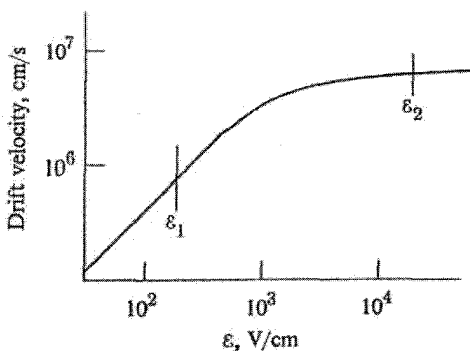


شکل ۶-۲۳ تشدید سیکلوترونی در Ge در ۲۴GHz و $4^\circ K$. میدان مغناطیسی در صفحه (۱۰۰) است و با محور [۱۰۰] زاویه 60° می سازد.

با استفاده از تشدید سیکلوترونی می توان اطلاعات گران قدری راجع به ساختار نواری اجسام به دست آورد.

۶-۱۰ میدان الکترونی و الکترون های داغ

نیمه رساناها رفتار اهمی خطی از خود نشان می دهند، یعنی در میدان های الکتریکی پایین که معمولاً با آن مواجه هستیم، $\epsilon \sim J$ است. همان طور که شکل ۶-۲۴ برای ژرمانیوم نوع n نشان می دهد، در میدان های قوی تر که در بعضی از قطعات وجود دارد، انحراف هایی از قانون اهم مشاهده می شود. در میدان های بزرگ تر از یک مقدار مشخص (که در شکل به ϵ_1 نشان داده شده است)، چگالی جریان کم تر از مقدار اهمی قابل انتظار آن است. در میدان های بالاتر (قوی تر از ϵ_2 در شکل ۶-۲۴)، چگالی جریان به سمت یک مقدار اشباع میل می کند، تا این که در یک میدان فوق العاده قوی که معمولاً در حدود $10^6 \frac{kV}{cm}$ است، نمونه فروریزش الکتریکی می کند.



شکل ۶-۲۴ سرعت سوق بر حسب میدان الکتریکی در Ge نوع n. چگالی جریان $J = ne v$ متناسب با سرعت است.

حال می خواهیم یک تئوری ارائه دهیم که بنیان های فیزیکی این رفتار غیر اهمی در میدان های بالا را بیان می کند. میانگین انرژی الکترون را $\bar{E} = \frac{3}{2} K_B T$ در نظر می گیریم. در میدان های بالا برای سادگی یک نمونه ی نوع n را در نظر می گیریم. به دلیل شتابی که الکترون در فاصله برخورد ها پیدا می کند و همین طور تلفات انرژی شبکه (انرژی که به صورت گرمای ژول ظاهر می شود)، الکترون مقدار قابل ملاحظه ای انرژی از میدان دریافت می کند. در حالت پایدار میزان دریافت و از دست دادن انرژی بایستی مساوی باشد. یعنی

$$\frac{d\bar{E}}{dt} = \left(\frac{d\bar{E}}{dt}\right)_E + \left(\frac{d\bar{E}}{dt}\right)_L = (-e\epsilon v) - \frac{\bar{E}(T_e) - \bar{E}(T)}{\tau_E} = 0 \quad (6-52)$$

که v سرعت سوق الکترون و τ_E زمان و اهلش انرژی است. این احتمال وجود دارد که دمای الکترون T_e بیش تر از دمای شبکه T باشد که این منجر به مفهوم الکترون های داغ می شود. با جای گزینی مقادیر:

$$\bar{E}(T_e) = \frac{3}{2} k_B T_e, \quad \bar{E}(T) = \frac{3}{2} k_B T, \quad v = \mu_e \epsilon$$

و حل معادله فوق بر حسب دمای الکترون خواهیم داشت: ۲

$$T_e = T + \frac{1}{2} \frac{e\tau_e \mu_e}{k_B} \epsilon^2 \quad (6-53)$$

برای $\tau_E = 10^{-11}$ s، $\mu_e = 10^3$ cm²/V-s، و $\epsilon = 10^3$ V/cm خواهیم داشت:

$$\Delta T = T_e - T \cong 100 \text{ K}$$

یعنی الکترون به اندازه 100°K از شبکه داغ تر است. دمای الکترون در میدان های قوی تر و یا تحرک بیش تر خیلی بالاتر می رود.

از معادلات (6-31) و (6-37) یادآوری می کنیم که $\mu_1 = \frac{e\ell}{m_e v_T}$ که v_T سرعت کاتوره ای الکترون است و از آن جا که $v_T \sim T^{1/2}$ نتیجه می شود که $\mu_e \sim T^{1/2}$ بنا بر این می توان نوشت:

$$\mu_e = \mu_{e,0} \left(\frac{T}{T_0}\right)^{1/2} \quad (6-54)$$

که $\mu_{e,0}$ تحرک میدان پایین است. معادلات (6-53) و (6-54)، معادلاتی بر حسب T_e و μ_e هستند و می توان از آن ها برای به دست آوردن این مقادیر مجهول استفاده کرد. در محدوده ای که میدان خیلی شدید نیست، خواهیم داشت:

$$\mu_e = \mu_{e,0} \left(1 - \frac{e\tau_e \mu_e}{2k_B T} \epsilon^2\right) \quad (6-55)$$

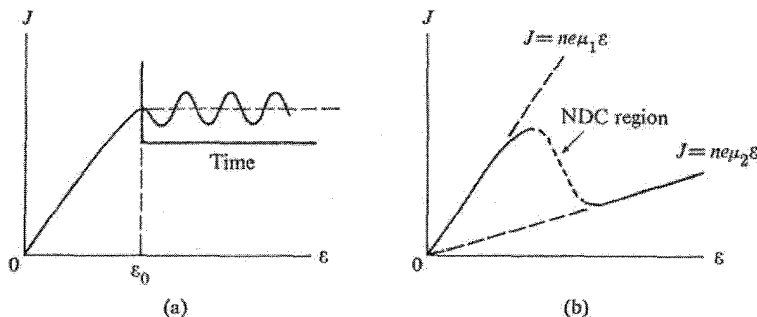
که این رابطه کاهش اولیه تحرک در بالای میدان ϵ_1 در شکل ۶-۲۴ را توضیح می دهد. وضعیت در محدوده میدان های میانی پیچیده است و در این جا مورد بحث قرار نمی گیرد. با این فرض که الکترون ها در اثر گسیل فونون های اپتیکی در شبکه، انرژی خود را از دست می دهند، می توان

اشباع جریان در میدان‌های بالا را توجیه کرد. از آن جا که فونون‌های اپتیکی انرژی بیش‌تری نسبت به همتای آکوستیکی خود دارند، بهتر می‌توانند از انرژی که از میدان کسب کرده‌اند، خلاص شوند بنابراین شرط حالت پایدار برقرار می‌شود.

۱۱-۶ اثر گان

اثر گان به افتخار J. B. Gunn نام‌گذاری شده است که با اندازه‌گیری جریان‌های الکترون‌های داغ در GaAs و نیمه‌رساناهای دیگر گروه III-V، این اثر را کشف کرد. هنگامی که گان مشغول اندازه‌گیری J بر حسب \mathcal{E} در یک نمونه GaAs نوع n بود، پدیده‌ی غیر منتظره‌ای مشاهده کرد: وقتی \mathcal{E} از مقدار صفر افزایش می‌یابد، جریان آهسته و اساساً خطی افزایش می‌یابد (شکل ۵۵-۶الف) تا میدان به \mathcal{E}_1 برسد. با افزایش میدان فراتر از \mathcal{E}_1 ، ناگهان جریان نوسانی می‌شود (بر حسب t نه بر حسب \mathcal{E}) این نوسان‌ها به شرطی که نمونه به اندازه کافی نازک باشد، اساساً همدوس هستند میدان لازم \mathcal{E}_1 برای شروع نوسان گان میدان آستانه نامیده می‌شود. مقادیر نوعی برای GaAs، آنطور که توسط گان به دست آمده است، چنین‌اند:

$$\nu \cong 5 \text{ GHz} \quad \text{و} \quad L = 2/5 \times 10^{-3} \text{ cm} \quad \text{و} \quad \mathcal{E}_0 \cong 3 \text{ kV/cm}$$



شکل ۲۵-۶، (الف) گراف نشان دهنده‌ی اثر گان (ب) جریان J بر حسب \mathcal{E} در GaAs که نشان دهنده ناحیه NDC است (منحنی خط چین)

گان برای این که بتواند مکانیسم فیزیکی مسئول نوسان‌ها را کشف و مشخصه‌ی نوسان‌ها را تعیین کند، چندین آزمایش دیگر انجام داد. شکل ۲۵-۶ (ب) تغییرات J بر حسب \mathcal{E} برای GaAs را که بر مبنای تئوری محاسبه شده است، نشان می‌دهد. به یک واقعیت مهم توجه کنید: یک محدوده‌ی معین میدان وجود دارد که J با افزایش \mathcal{E} ، کاهش می‌یابد (منحنی متناظر با این ناحیه به صورت

خط چین در شکل نشان داده شده است). این رفتار (برخلاف حالت معمول که افزایش ϵ سبب افزایش J می‌شود) بدین ترتیب توجیه می‌شود که بگوئیم نمونه یک رسانایی دیفرانسیلی منفی^۱ (NDC) دارد. راجع به منشاء NDC در GaAs به زودی بحث خواهیم کرد ولی فعلاً به خود NDC توجه می‌کنیم.

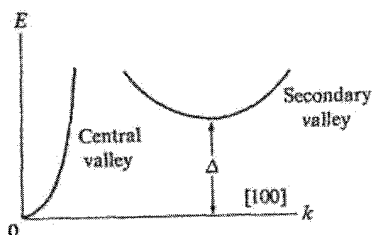
قضیه‌ای در الکترو دینامیک هست که بیان می‌کند وضعیت NDC یک وضعیت ناپایدار است. به بیان دیگر در یک وضعیت پایدار، وجود NDC غیرمتحمل است. یک سیستم نمی‌تواند به طور نامتناهی در وضعیت ناپایدار بماند. هرگونه افت و خیز ممکن، به طور فزاینده‌ای سیستم را ناپایدار می‌کند تا این که یک گذار ناگهانی به حالت پایدار پیش آید. در مورد اثرگان، حالت ناپایدار جریان پایا، با یک رفتار NDC، به یک حالت کاملاً متفاوتی منجر می‌شود که در آن، جریان با زمان به طور همدوس نوسان می‌کند. میدان آستانه‌ی برای این نوسان‌ها، همان میدان در ناحیه‌ی NDC است و این تأیید دیگری بر بحث فوق می‌باشد.

در فصل ۷، جنبه‌هایی از اثرگان که مربوط به قطعات نیمه‌رسانا است، بحث می‌شود. همین طور راجع به ناپایداری و مدگان صحبت خواهیم کرد. در این جا به طور ساده می‌گوئیم که فرکانس نوسانی مشخصه در محدوده‌ی GHz است. بنابراین می‌توان از قطعات گان به عنوان مولد میکروموج یا نوسان گر استفاده کرد. کاربردهای بالقوه‌ی اثرگان، مورد توجه بسیار قرار گرفته است.

حال به مکانیسم فیزیکی که عامل ظاهر شدن NDC در میدانهای قوی در GaAs نوع n است می‌پردازیم. برای این کار می‌بایست به ساختار نوار رسانش GaAs که در شکل ۲۶-۶ نشان داده شده است، نظر بیندازیم. دو نوع درّه در نوار رسانش وجود دارد. (بخش ۹-۶ را ملاحظه نمایید). الف) یک درّه‌ی مرکزی؛ به این معنی که انتهای درّه در مرکز منطقه‌ی برلیون در $k=0$ قرار دارد. ب) علاوه بر آن، شش درّه‌ی ثانویه وجود دارد که انتهای آن‌ها در امتداد جهت $\langle 100 \rangle$ در منطقه

۱. کلمه تفاضلی مهم است. رسانایی دیفرانسیلی به صورت $\frac{\partial I}{\partial V}$ تعریف می‌شود: مقایسه شود با رسانایی واقعی که به صورت I/V تعریف می‌شود. رسانایی دیفرانسیلی منفی نیز اغلب به مقاومت دیفرانسیلی منفی با علامت اختصاری NDR ارجاع داده می‌شود.

برلیون قرار دارد. بنابر تقارن معکبی در بلوار، شش دره معادل یکدیگراند، ولی معادل با دره‌ی مرکزی نیستند. در GaAs، انتهای دره‌ی ثانوی بالای دره‌ی مرکزی و به اندازه $\Delta = 0.36 \text{ eV}$ بالای آن قرار گرفته است.



شکل ۲۶-۶ نوار رسانش در GaAs که دره‌های مرکزی و ثانوی را نشان می‌دهد. (فقط نصف نوار نشان داده شده است).

دره‌های مرکزی و ثانوی، جرم‌ها و تحرک‌های کاملاً متفاوتی دارند. اگر دره‌های مرکزی و ثانوی را به ترتیب با اندیس‌های ۱ و ۲ مشخص کنیم؛ برای GaAs خواهیم داشت:

$$m_1 = 0.072m_0, \quad \mu_1 = 5 \times 10^3 \text{ cm}^2/V-s$$

$$m_2 = 0.36m_0, \quad \mu_2 = 100 \text{ cm}^2/V-s$$

توجه کنید که m_2 به طور قابل ملاحظه‌ای بزرگ‌تر از m_1 است ($m_2 = 5m_1$)، ولی مهم‌تر از آن تحرک μ_2 خیلی کوچک‌تر از μ_1 است ($\mu_2 = \frac{\mu_1}{5}$). این به این معنی است که الکترون در دره‌ی ثانویه خیلی آهسته‌تر از الکترون در دره‌ی مرکزی سوق می‌یابد. در شرایط عادی، همه‌ی الکترون‌ها در دره‌ی مرکزی جای می‌گیرند. (فرض می‌کنیم که نمونه آلائیده شده باشد به طوری که چگالی n در حدود $10^{15} - 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ باشد) چون انرژی انتهای دره‌ی ثانوی ($\Delta = 0.36 \text{ eV}$) در دمای اتاق خیلی بزرگ‌تر از $k_B T$ است، فقط کسر قابل اغماضی از الکترون‌ها در دره‌ی ثانوی برانگیخته شده‌اند. بنابراین می‌توان گفت $n_2 \cong n$ و جریان به ازای میدان با رابطه زیر بیان می‌شود.

$$J = n_1 e \mu_1 \varepsilon = n e \mu_1 \varepsilon \quad (6-56)$$

از آن جا که دره‌های ثانوی، اشغال نشده‌اند، در بحث مربوط به خواص ترابری می‌توان آن‌ها را نادیده انگاشت (همان طور که در بخش ۶-۶ انجام شد).

به هر جهت وقتی یک میدان الکتریکی قوی به سیستم اعمال شود، وضعیت به طور قابل ملاحظه‌ای تغییر می‌کند. همان طور که قبلاً گفتیم (بخش ۶-۱۰)، چنین میدان بزرگی سبب داغ شدن الکترون می‌شود یعنی الکترون دمایی بالاتر از شبکه پیدا می‌کند. در میدان‌هایی که به اندازه‌ی کافی بزرگ هستند دمای الکترون T_e ممکن است کاملاً بالا رود. ولی در دماهای زیاد دره‌های ثانویه اشغال می‌شوند. هنگامی که چنین امری اتفاق افتد، جریان با رابطه‌ی (۶-۲۶) بیان نمی‌شود، بلکه فرمول کلی‌تر زیر به کار می‌رود.

$$J = J_1 + J_2 = n_1 e \mu_1 \varepsilon + n_2 e \mu_2 \varepsilon \quad (6-57)$$

که J_1 و J_2 به ترتیب جریان‌های الکترون دره‌های مرکزی و ثانوی (تمام شش دره) هستند. حال با بررسی دو جمله رابطه‌ی (۶-۵۷) ملاحظه می‌کنیم چگونه ممکن است ماده‌ای رسانش دیفرانسیلی منفی داشته باشد. به این دو واقعیت بایستی توجه داشته باشیم: مجموع $n_1 + n_2$ مساوی n است که یک مقدار ثابت و مستقل از ε است و $\mu_1 \ll \mu_2$ است. با افزایش ε از صفر تا کمی کمتر از ε_0 تمام الکترون‌ها اساساً در دره‌ی مرکزی هستند و جریان با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود:

$$J \cong n e \mu_1 \varepsilon \quad (6-57)$$

اگر J بر حسب ε رسم شود خط مستقیمی به دست می‌آید که شیب آن μ_1 را می‌دهد (شکل ۶-۲۵ ب را ملاحظه نمایید).^۱ ولی هنگامی که ε به ε_0 می‌رسد و دما افزایش می‌یابد، چگالی n_1 ناگهان کاهش و n_2 به همان میزان افزایش می‌یابد. در این میدان کوچک، J_1 به سرعت کاهش می‌یابد زیرا n_1 سریعاً کاهش می‌یابد. این کاهش به طور جزئی با افزایش J_2 جبران می‌شود. به هر جهت چون μ_2 کوچک است، افزایش J_2 خیلی کوچک است و نمی‌تواند کاهش J_1 را جبران کند. در نتیجه جریان کلی $J = J_1 + J_2$ کاهش می‌یابد که منجر به یک رسانش دیفرانسیلی منفی، (NDC) می‌شود. با افزایش بیشتر ε ، الکترون‌های بیش‌تر و بیش‌تری از دره‌ی مرکزی به دره‌ی ثانوی انتقال می‌یابند، که منجر به کاهش بیشتر J می‌شود. همان طور که در شکل ۶-۵۶ (ب) نشان

۱- همان‌طور که در بخش ۶-۱۰ بحث شد، تغییرات حرکت‌های μ_1 و μ_2 نسبت به میدان کوچک و قابل چشم‌پوشی است زیرا این‌ها در اثرگان نقش اساسی را ایفا نمی‌کنند.

داده شده است NDC نتیجه این گذار بین دره‌ای است. سرانجام در یک میدان بالا، تمام الکترون‌ها اساساً به دره‌های ثانوی انتقال می‌یابند و بنابراین می‌توان نوشت:

$$J \cong J_p = ne\mu_p \varepsilon \quad (6-58)$$

حال جریان برحسب ε شروع به افزایش مجدد می‌کند، ولی با یک شیب مناسب با μ_2 (شکل ۲۶-۶ را ملاحظه نمایید). توجیه اثرگان بر مبنای این که NDC از گذار بین دره‌ای ناشی می‌شود توسط کرومر انجام گرفت.^۱ گذار بین دره‌ای و سرعت وقوع آن متحمل است. زیرا چگالی حالت‌ها در دره‌ی ثانوی خیلی بیش تر از چگالی حالت‌ها در دره‌ی مرکزی است. مطابق آن چه

در بخش ۱۶-۵ دیدیم $g_p(E) \sim m_p^{*2}$ و از آن جا که شش دره وجود دارد، نتیجه می‌شود

$$g_p(E) \sim 6 m_p^{*2} \quad ; \quad g_v(E) \sim m_v^{*2} \quad \text{است. برای GaAs, } g_v(E) / g_p(E) \cong 60 \quad \text{است.}$$

برای محدوده انرژی یکسان، حالت‌های دسترس‌پذیر خیلی بیش تری در دره‌های ثانوی نسبت به دره‌ی مرکزی وجود دارد.

اثرگان در InP ، $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ ، CdTe ، ZnSe ، InAs و نیمه‌رساناهای ترکیبی دیگر نیز مشاهده شده است. ساختار نوار رسانش در تمام این نیمه‌رساناها شبیه به GaAs است و در هر مورد عامل نوسان‌های گان گذار بین دره‌ای است. Ge ، Si ساختارهای نواری متفاوتی دارند و اثرگان را نشان نمی‌دهند.^۲

1. Kroemer

-گان خودش این احتمال را بررسی کرد، ولی با این استدلال که در دمای اتاق به اندازه کافی الکترون وجود ندارد که به دره ثانوی برانگیخته شوند آن را رد کرد. او این واقعیت را که با افزایش میدان دمای الکترون به طور قابل ملاحظه‌ای افزایش می‌یابد به حساب نیاورد.

۲- اثرگان در Ge ، تحت فشار تک محوری مشاهده شده است. دلیل آن چنین است، تحت چنین فشاری، دره‌های $\langle 111 \rangle$ غیر معادل می‌شوند، که این امر منجر به نوارهای غیر معادل می‌شود. برای جهت‌های معین میدان، تحرک‌های مؤثر ممکن است به طور قابل ملاحظه‌ای کوچک‌تر از دره‌ی پایینی باشد به طوری که در میدان بالا نوسان‌های گان را نتیجه می‌دهد. ناهمسان گردی بزرگ جرم دره‌های $\langle 111 \rangle$ نقش مهمی در اینجا ایفا می‌کند.

۱۲-۶ خواص اپتیکی؛ فرآیندهای جذب

در این بخش و بخش بعدی، خواص اپتیکی نیمه‌رساناها را بررسی می‌کنیم. این خواص محدوده‌ی وسیعی از پدیده‌ها را شامل می‌شوند و به درک ما از خواص بنیادی و فیزیکی نیمه‌رساناها کمک می‌کنند. از این پدیده‌ها در توسعه و تکامل قطعات اپتیکی استفاده می‌شود و این قطعات در بخش‌های پژوهشی و صنعتی به طور وسیعی به کار می‌روند. خواص اپتیکی به خواص شبکه‌ای و خواص الکترونی تقسیم می‌شود. خواص الکترونی، همان طور که از نام آن برمی‌آید، به فرآیندهایی مربوط می‌شود که شامل حالت‌های الکترونی یک جسم جامد است. در حالی که خواص شبکه‌ای شامل ارتعاشات شبکه می‌باشد (ایجاد و جذب فوتون‌ها). گرچه خواص شبکه‌ای بسیار مورد توجه است، ولی خواص الکترونی نیمه‌رساناها، بخصوص به خاطر کاربردهای عملی آن، بیش‌ترین توجه را به خود معطوف داشته است. بنابراین بحث این جا، تقریباً به طور کامل، حول خواص الکترونی متمرکز می‌شود.

ابتدا خواص شبکه‌ای اپتیکی مهم را بازگو می‌کنیم. در بخش ۱۲-۳ گفتیم که بلورهای یونی در نتیجه‌ی برهم‌کنش نور با فوتون‌های اپتیکی، جذب و بازتاب شدیدی در ناحیه‌ی فروسرخ نشان می‌دهند. نیمه‌رساناهای ترکیبی مانند GaAs و GaP به دلیل مشخصه‌ی یونی جزیی پیوندهایشان می‌بایست این خواص را نشان دهند و می‌دهند. (حتی بلورهای کووالان خالص مانند Si جذب شبکه‌ای فروسرخ از خود نشان می‌دهند، ولی برای توضیح آن بایستی فرآیندهای مرتبه بالاتر را بررسی کنیم.

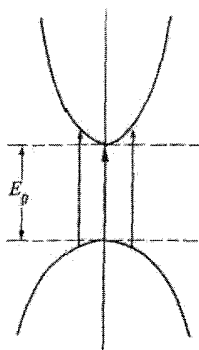
در نیمه‌رساناها، تعدادی از فرآیندهای الکترونی نوری به طور مستقل صورت می‌گیرد. حال به یکایک آن‌ها نظر می‌افکنیم.

فرآیند جذب اساسی

مهم‌ترین فرآیند جذب، شامل گذار الکترون‌ها از نوار ظرفیت به نوار رسانش است (شکل ۲۷-۶). به دلیل اهمیت آن این فرآیند جذب اساسی^۱ نامیده می‌شود. در جذب اساسی، الکترون یک فوتون جذب می‌کند (از باریکه‌ی فرودی) و از نوار ظرفیت به نوار رسانش می‌جهد. انرژی فوتون می‌بایست مساوی یا بزرگ‌تر از گاف انرژی باشد. بنابراین برای فرکانس بایستی داشته باشیم

$$v \geq (E_g/h) \quad (6-59)$$

فرکانس $\nu = \frac{E_g}{h}$ لبه‌ی جذب^۱ نامیده می‌شود.



شکل ۶-۲۷ فرآیند جذب اساسی در نیمه‌رساناها

در فرآیند گذار (جذب فوتون) انرژی کل و اندازه حرکت دستگاه الکترون-فوتون بایستی پایسته باشد. بنابراین

$$E_f = E_i + h\nu \quad (6-60)$$

$$k_f = k_i + q \quad (6-61)$$

که E_i به E_f ترتیب انرژی‌های اولیه و نهایی الکترون در نوارهای ظرفیت و رسانش‌اند. k_i و k_f اندازه حرکت اولیه و نهایی الکترون‌اند. بردار q بردار موج برای جذب فوتون است. از بخش ۱۰-۳ یادآوری می‌کنیم که بردار موج یک فوتون در ناحیه‌ی اپتیکی به طور قابل اغماضی کوچک است. بنابراین شرط اندازه حرکت (۶-۶۱) به شکل زیر تحویل می‌شود:

$$k_f = k_i \quad (6-62)$$

یعنی اندازه حرکت الکترون به تنهایی پایسته است. *قانون انتخاب*^۲ بیان می‌دارد که تنها گذارهای قائم در فضای k مجازند که بین نوارهای ظرفیت و رسانش انجام گیرند (شکل ۶-۲۷).

برای محاسبه‌ی ضریب جذب در فرآیند جذب اساسی باید از روش‌های کوانتومی استفاده کرد.

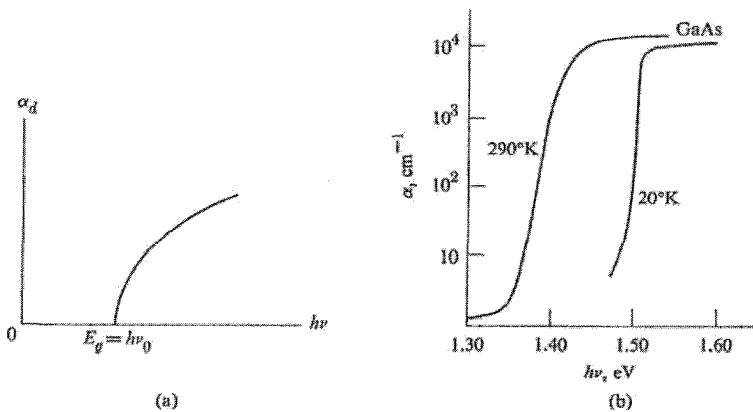
این روش اساساً شامل بررسی تابش فرودی به عنوان یک پریشیدگی، که حالت‌های الکترونی در نوار ظرفیت را با حالت‌های متناظر در نوار ظرفیت جفت می‌کند، و استفاده از تکنیک تئوری پریشیدگی کوانتومی (بخش ۶-۴) است. می‌توان ضریب جذب را به صورت زیر به دست آورد:

$$\alpha_d = A(h\nu - E_g)^{\frac{1}{2}} \quad (6-63)$$

A ضریب ثابتی است که شامل خواص نوارها است و E_g گاف انرژی است. [معنی اندیس d به زودی روشن خواهد شد. معادله (۶-۶۳) را نیز بعداً به دست خواهیم آورد].

در بالای لبه جذب، ضریب جذب سهمی‌وار با فرکانس افزایش می‌یابد (شکل ۶-۲۸ الف، البته برای $v < v_0$, $\alpha_d = 0$). ضریب جذب برای GaAs در شکل ۶-۲۸ ب با این تحلیل سازگار است.

یک کاربرد مهم این نتایج، استفاده از آن‌ها در اندازه‌گیری گاف انرژی در نیمه‌رساناها است. E_g مستقیماً با لبه‌ی فرکانس مربوط است، $E_g = h\nu_0$. به دلیل دقت و سهولت آن، این روش به عنوان یک روش استاندارد برای تعیین گاف انرژی به کار می‌رود و جای‌گزین روش‌های قبلی که بر پایه‌ی رسانایی بوده‌اند، شده است (بخش ۷-۶ و همچنین بحث بعد از رابطه‌ی ۶-۳۶ را ملاحظه نمایید). روش اپتیکی نسبت به روش رسانایی، اطلاعات تفصیلی بیش‌تری ارائه می‌دهد.



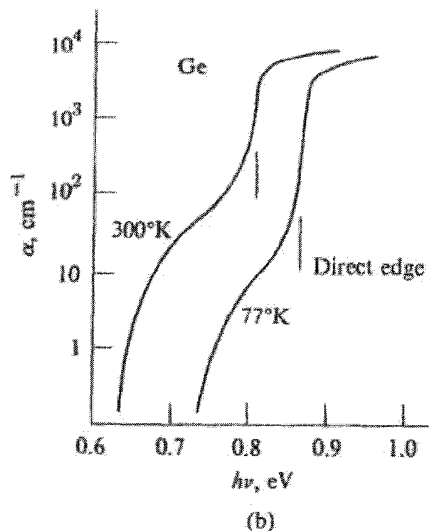
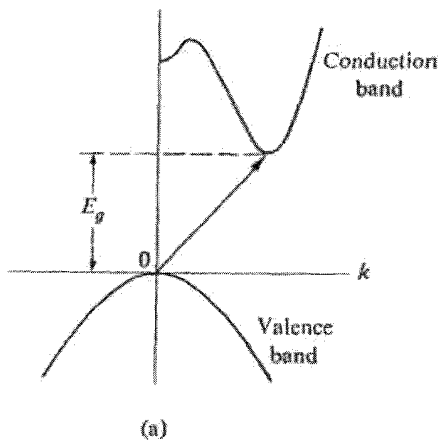
شکل ۶-۲۸ الف) ضریب جذب α_d بر حسب $h\nu$ در یک نیمه‌رسانا.

ب) ضریب جذب α بر حسب $h\nu$ در یک نیمه‌رسانا GaAs.

[After Hilsum]

ضریب جذب مربوط به جذب اساسی بزرگ و در حدود 10^{14} cm^{-1} است. بنابراین حتی برای نمونه‌های نازک، جذب قابل مشاهده است (در واقع اگر بخواهیم عبور نور مشاهده شود نمونه باید نازک باشد).

از آن جا که گاف انرژی در نیمه‌رسانا کوچک است (در حدود 1 eV یا کمتر) لبه‌ی جذب اساسی معمولاً در ناحیه‌ی فرو سرخ می‌دهد. به همین دلیل، انجام تحقیقات در نیمه‌رساناها باعث توسعه‌ی مطالعه‌ی ناحیه‌ی فرو سرخ در طیف‌های نوری گردیده است. توسعه و تکامل آشکار سازهای فرو سرخ، یکی از چندین مزیتی است که از این کار حاصل شده است (بخش ۸-۷ را ملاحظه نمایید). فرآیند جذب در نیمه‌رساناهای گاف مستقیم رخ می‌دهد. در این مواد، انتهای نوار رسانش در $k=0$ و مستقیماً بالای قله‌ی نوار ظرفیت قرار می‌گیرد. الکترون‌های نزدیک قله‌ی نوار ظرفیت قادرند گذاری به حالت‌های نزدیک انتهای نوار رسانش انجام دهند به طوری که این گذارها با قاعده‌ی انتخاب سازگار باشد. مثالهای از این مواد عبارتند از: GaAs , InSb و بسیاری دیگر از نیمه‌رساناهای ترکیبی گروه III-V، III-VI.



شکل ۲۹-۶. (الف) یک نیمه‌رسانای گاف مستقیم، (ب) ضریب جذب بر حسب در Ge

[Newma and Dash After]

نیمه‌رساناهای گاف غیر مستقیم نیز وجود دارند که در آن‌ها انتهای نوار رسانش در مبدأ قرار نمی‌گیرد (شکل ۲۹-۶ الف). یادآوری می‌کنیم که Si و Ge هر دو در این گروه قرار می‌گیرند. مینیم Si در جهت [۱۰۰] و مینیم Ge در جهت [۱۱۱] است. در این حالت الکترون نمی‌تواند با یک گذار مستقیم از قله‌ی نوار ظرفیت به انتهای نوار رسانش برود زیرا این گذار قاعده‌ی انتخاب اندازه حرکت (۶۲-۶) را نقض می‌کند.

هنوز هم چنین گذاری ممکن است رخ دهد، ولی در یک فرآیند دو مرحله‌ای. الکترون یک فوتون و یک فوتون را هر دو و همزمان جذب می‌کند. فوتون انرژی لازم و فوتون اندازه حرکت لازم را تأمین می‌کنند. انرژی فوتون که فقط در حدود 0.25eV است در مقایسه با انرژی فوتون که در حدود 1eV است بسیار کوچک و قابل چشم‌پوشی است. (اندازه حرکت فوتون به طور قابل ملاحظه‌ای پایین‌تر است).

فرمول ضریب جذب گاف غیر مستقیم، که معمول‌تر از جذب مستقیم است، توسط بلت^۱ به صورت زیر محاسبه شده است

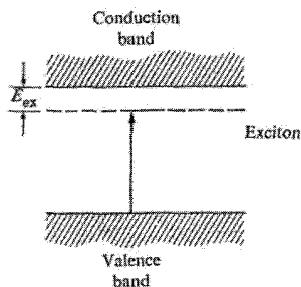
$$\alpha_i = \hat{A}(T)(h\nu - E_g)^2 \quad (6-64)$$

$\hat{A}(T)$ مقدار ثابتی است که شامل پارامترهای مرتبط با نوارها و دما است (دما مربوط به سهم فوتون در فرآیند است). α_i با توان دوم $(h\nu - E_g)$ افزایش می‌یابد که خیلی سریع‌تر از توان یک دوم اختلاف انرژی (آن چنان که در گذار مستقیم وجود دارد) تغییر می‌کند. بنابراین می‌توان از روش‌های اپتیکی برای تشخیص بین نیمه‌رساناهای گاف مستقیم و غیر مستقیم استفاده کرد. این روش نسبت به روش رسانایی مزیت دارد. شکل ۲۹-۶ (ب) طیف جذبی Ge را نشان می‌دهد.

جذب اکسیتون

در بحث مربوط به جذب اساسی، فرض کردیم؛ الکترون برانگیخته، تبدیل به یک ذره آزاد در نوار رسانش می‌شود و حفره‌ای که در نوار ظرفیت بر جای می‌ماند نیز یک ذره‌ی آزاد می‌شود. الکترون و حفره یکدیگر را جذب می‌کنند و یک حالت مقید را تشکیل می‌دهند. دو ذره به دور یکدیگر می‌گردند (به بیان دقیق‌تر ذرات بدور مرکز جرمشان می‌گردند). چنین حالتی اکسیتون خوانده می‌شود. انرژی پیوندی اکسیتون کوچک و در حدود 0.1eV است. بنابراین همان‌گونه که شکل ۳۰-۶ نشان می‌دهد تراز اکسیتون پایین‌تر از لبه‌ی نوار رسانش قرار می‌گیرد (تراز

اکسیتون در همسایگی تراز اتم‌های بخشنده است.



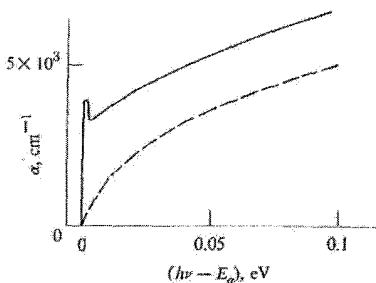
شکل ۳۰-۶ تراز اکسیتون و جذب مربوط به آن

انرژی فوتون مربوط به جذب اکسیتون با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود:

$$h\nu = E_g - E_{ex} \quad (6-65)$$

که E_{ex} انرژی پیوندی اکسیتون است. بنابراین طیف اکسیتون شامل یک خط تیز است که زیر لبه‌ی جذب اساسی قرار می‌گیرد. این خط اغلب به واسطه‌ی برهم کنش اکسیتون با ناخالصی‌ها و یا آثار مشابه دیگر پهن می‌شود و ممکن است در حاشیه‌ی نوار جذب اساسی قرار گیرد، ولی اغلب پیک خط اکسیتون به وضوح قابل تشخیص می‌ماند. اثر جذب اکسیتون بر طیف جذبی Ge در شکل ۳۱-۶ نشان داده شده است.

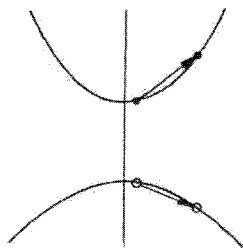
این واقعیت اغلب مشاهده می‌شود که: جذب یک اکسیتون باعث پیچیدگی در طیف جذب اساسی به ویژه در نزدیکی لبه‌ی آن می‌شود و تعیین گاف انرژی در نیمه‌رساناها را مشکل‌تر می‌کند. به هر جهت جذب اکسیتون در بحث مربوط به خواص اپتیکی عایق‌ها در ناحیه‌ی فرابنفش طیف بسیار مهم است. برای تفصیل بیش‌تر به بخش ۱۰-۸ مراجعه نمایید.



شکل ۳۱-۶ جذب اکسیتون در Ge. منحنی خط‌چین مربوط به جذب اساسی (تئوری) است؛ منحنی پر(تجربی) شامل جذب اکسیتون و جذب اساسی، هر دو است (اندازه‌گیری در $T=20^\circ \text{K}$)

جذب حامل‌های آزاد

حامل‌های آزاد (الکترون‌ها و حفره‌ها هر دو) بدون این که به نوار دیگری برانگیخته شوند، تابش را جذب می‌کنند. در جذب یک فوتون، الکترون یا حفره گذاری به حالت دیگر در همان نوار انجام می‌دهند (شکل ۶-۳۲) چنین فرآیندی معمولاً گذار بین نواری خوانده می‌شود.



شکل ۶-۳۲ جذب حامل آزاد

جذب حامل‌های آزاد را می‌توان به همان روشی که در بخش ۱۱-۴ برای بررسی خواص اپتیکی فلزات بیان شد، به دقت بررسی کرد. (خواص اپتیکی که در آنجا بحث شد، مربوط به گذار بین نواری در نوار ظرفیت فلزات است). در این جا فقط به نتایج آن اشاره می‌کنیم. برای سهولت، نمونه را نوع n می‌گیریم به طوری که فقط الکترون‌ها حضور داشته باشند. جزء حقیقی و موهومی ثابت دی‌الکتریک برابر است با:

$$\epsilon_r' = \epsilon_{L,r} - \frac{\sigma_0 \tau}{\epsilon_0 (1 + \omega^2 \tau^2)} = n_0^2 - K^2 \quad (6-66)$$

$$\epsilon_r'' = \frac{\sigma_0}{\epsilon_0 \omega (1 + \omega^2 \tau^2)} = 2n_0 K \quad (6-67)$$

نمادها همان هستند که در بخش ۱۱-۴ بیان شد (به جای n برای ضریب شکست n_0 قرار داده‌ایم، که با چگالی الکترونی اشتباه نشود).

چندین ناحیه‌ی مختلف را می‌توان از هم تمیز داد. در فرکانس پایین و رسانش کم (چگالی کم)، سهم شبکه $\epsilon_{L,r}$ بر قطبش دی‌الکتریک در رابطه‌ی (۶-۶۶) غالب می‌شود. بنابراین ماده به عنوان یک دی‌الکتریک عادی رفتار می‌کند. ولی یک جذب کوچک متناظر با ϵ'' در رابطه (۶-۶۷) وجود دارد که نمایان‌گر جذب تابش توسط حامل‌های آزاد است.

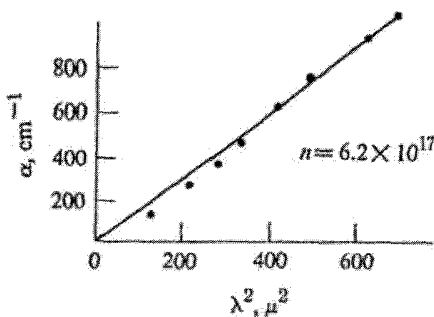
در ناحیه‌ی فرکانس پایین و رسانش بالا جمله‌ی مربوط به حامل‌های آزاد در رابطه‌ی (۶-۶۶)

جمله‌ی غالب است. بنابراین $\epsilon_r < 0$ است و ماده مانند یک فلز بازتاب کامل نشان می‌دهد. این امر قابل انتظار است. زیرا چگالی الکترون زیاد است (ولی هنوز از چگالی الکترون‌ها در فلزات خیلی کمتر است).

در ناحیه‌ی فرکانس بالا (طول موج کوتاه)، $\omega t \gg 1$ (ولی رسانایی کم است)، ماده مانند یک دی‌الکتریک عادی با $\epsilon_{L,r} \cong n_0^{1/2}$ رفتار می‌کند و ضریب جذب آن برابر است با:

$$\alpha = \frac{\sigma_0}{\epsilon_0 c n_0 \tau^2} \frac{1}{\omega^2} \quad (6-68)$$

بنابراین $\alpha \sim \omega^{-2}$ یا $\alpha \sim \lambda^2$ است که این مطلب به طور تجربی در شکل ۶-۳۳ نشان داده شده است.

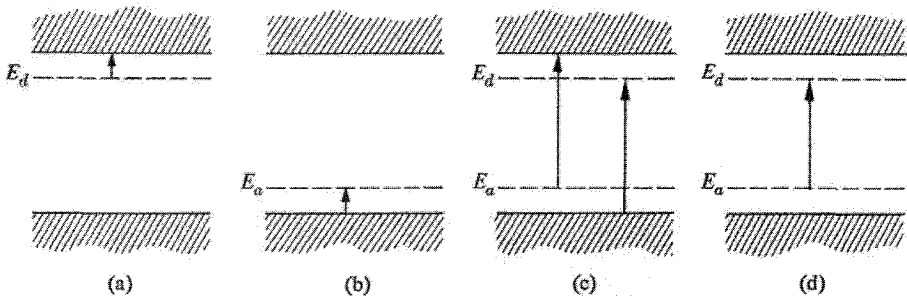


شکل ۶-۳۳ ضریب جذب بر حسب λ^2 در نوع InSb [Moss After] n

جذب حامل‌های آزاد حتی وقتی که $h\nu < E_g$ است نیز صورت می‌گیرد و فرکانس این جذب بر طیف پایین لبه‌ی جذب اساسی غالب است. البته برای هر دو نوع جذب یعنی جذب اساسی و جذب حامل‌های آزاد به طور هم زمان رخ می‌دهند.

فرآیندهای جذب شامل ناخالصی‌ها

فرآیندهای جذب که ناشی از وجود ناخالصی‌ها است در نیمه‌رساناها رخ می‌دهد. نوع و میزان جذب به نوع خلوص یا ناخالصی‌های موجود در نمونه و چگالی آن‌ها بستگی دارد.



شکل ۳۴-۶ فرآیندهای جذب مختلف شامل ناخالصی‌ها (متن درس را ملاحظه نمایید)

شکل ۳۴-۶ نوع اصلی این فرایند را نشان می‌دهد. شکل ۳۴-۶ (الف) حالتی را نشان می‌دهد که در آن یک اتم بخشنده ی خنثی، یک فوتون جذب می‌کند و الکترون به تراز بالاتر در نوار رسانش یا به تراز ناخالصی گذار انجام دهد. گذارهایی که به ترازهای ناخالصی بالاتر انجام می‌شوند، به صورت خطوط تیز در طیف جذبی ظاهر می‌شوند. شکل ۳۴-۶ (ب) یک گذار از نوار ظرفیت به تراز پذیرنده خنثی را نشان می‌دهد که مانده ی گذار بخشنده-نوار رسانش است. شکل ۳۵-۶ نشان دهنده ی طیف جذبی متناظر با گذار نوار ظرفیت-پذیرنده در Si می‌باشد.

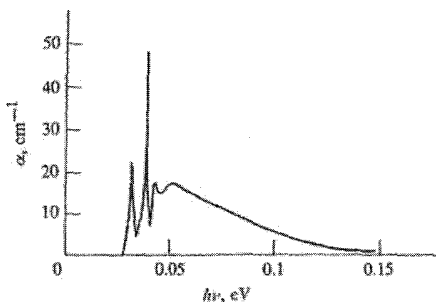
برای ناخالصی‌های کم، خطوط جذبی متناظر با اتم‌های بخشنده و پذیرنده در ناحیه ی فروسرخ قرار می‌گیرند (زیرا انرژی مربوطه کوچک و فقط در حدود 0.1 eV است). از چنین فرآیندی می‌توان به عنوان ابزاری برای آشکارسازها در این ناحیه ی نسبتاً مشکل طیف استفاده کرد.

شکل ۳۴-۶ (ج) فرآیندی را نشان می‌دهد که در آن یک الکترون از نوار ظرفیت به یکتراز اتم بخشنده ی یونیده (اتم بایستی یونیده باشد؛ چرا)، یا از یک تراز اتم پذیرنده به نوار رسانش برانگیخته شود. چنین فرآیندهایی منجر به یک جذب می‌شود که نزدیک به جذب اساسی است و به سختی از آن قابل تفکیک می‌باشد.

شکل ۳-۶۴ (د) یک فرآیند جذب را نشان می‌دهد که شامل گذار از یک اتم پذیرنده ی یونیده به یک اتم بخشنده ی یونیده می‌باشد. انرژی فوتون در این حالت برابر است با:

$$h\nu = E_g - E_d - E_a \quad (6-69)$$

این به یک ساختار گسسته در منحنی جذب منجر می‌شود، ولی به دلیل نزدیکی به لبه جذب اساسی، تفکیک آن بسیار مشکل است.



شکل ۳۵-۶ ضریب جذب یک نمونه Si که با برلیون آلاینده شده است بر حسب انرژی فوتون $h\nu$

هم چنین ممکن است ناخالصی در طیف جذبی به روش‌های غیر مستقیم دیگر اثر بگذارد، مثلاً اکسیژن اغلب توسط یک ناخالصی به دام می‌افتد. این عمل به صورت زیر اتفاق می‌افتد: ابتدا ناخالصی، یک الکترون به دام می‌اندازد. وقتی چنین شد، ناخالصی که حالا باردار است، در اثر نیروی کولنی، یک حفره به طرف خود جذب می‌کند. بنابراین الکترون و حفره، هر دو توسط ناخالصی به دام می‌افتند. طیف این اکسیژن به دلیل برهم کنش آن با ناخالصی، با طیف اکسیژن آزاد متفاوت است.

۱۳-۶ فوتو رسانش

پدیده‌ی فوتورسانش هنگامی رخ می‌دهد که یک باریکه‌ی نوری به نیمه‌رسانایی برخورد کند و سبب افزایش رسانایی آن شود. این امر به خاطر برانگیختگی الکترون‌ها در گاف انرژی است و همان طور که در بخش ۱۲-۶ بحث شد منجر به افزایش تعداد حامل‌های آزاد، (هر دو الکترون‌ها و حفره‌ها) و بنابراین باعث افزایش رسانایی می‌شود. همان طور که می‌دانیم برانگیختگی فقط در صورتی رخ می‌دهد که $\hbar\omega > E_g$. پدیده‌ی فوتورسانش خیلی مهم است. زیرا این پدیده اساس آشکار سازهای حالت جامد است.

مفهوم فوتورسانش در شکل ۳۶-۶ نشان داده شده است. جریان الکتریکی از قطعه‌ی نیمه‌رسانایی عبور می‌کند. یک باریکه‌ی نوری عمود بر وجه بالایی قطعه بر آن می‌تابد. قبل از این که نور به قطعه بتابد، رسانایی با معادله (۳۴-۶) بیان می‌شود:

$$\sigma_0 = e(n_0\mu_e + p_0\mu_h) \quad (6-70)$$

که n_0 و p_0 چگالی‌های الکترون و حفره (در تعادل) و σ_0 رسانایی در تاریکی است. وقتی که باریکه‌ی نوری می‌تابد، چگالی‌های حامل‌های آزاد به طور ناگهانی به اندازه Δn و Δp افزایش می‌یابند. از آن جا که همیشه الکترون‌ها و حفره‌ها به طور زوج آفریده می‌شوند؛ داریم

$$\Delta n = \Delta p$$

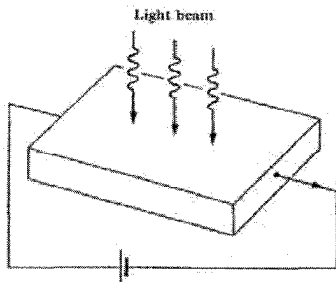
در این صورت رسانایی برابر می‌شود با:

$$\sigma = \sigma_0 + e\Delta n(\mu_e + \mu_h) = \sigma_0 + e\Delta n \mu_h (1 + b) \quad (6-71)$$

که $b = \frac{\mu_e}{\mu_h}$ ، نسبت تحرک است. افزایش نسبی رسانش برابر خواهد شد با:

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma_0} = \frac{e\Delta n \mu_h (1+b)}{\sigma_0} \quad (6-72)$$

حال لازم است که Δn را ارزیابی کنیم و اینجا است که خواص اپتیکی جسم جامد مطرح می‌شود. در این فرآیند مقدار بسیار زیادی حامل‌های بار آفریده می‌شوند؛ به طوری که وضعیت نامتعادل می‌شود. دو عامل وجود دارد که منجر به تغییرات n بر حسب زمان می‌شود:



شکل ۶-۳۶ طرح آزمایش فوتورسانش

(الف) حامل‌های بار به طور دائم توسط باریکه فرودی آفریده می‌شوند (ب) در اثر ترکیب مجدد، حامل‌های بسیاری نیز به طور دائم نابود می‌شوند. در هر جا که چگالی حامل‌ها با وضعیت تعادل متفاوت باشد، ترکیب مجدد وجود دارد. بنابراین چگالی حامل‌ها بر حسب زمان به صورت معادله زیر تغییر می‌کند.

$$\frac{dn}{dt} = g - \frac{n-n_0}{\tau} \quad (6-73)$$

که g آهنگ تولید الکترون بر واحد حجم به خاطر جذب نور است. جمله دوم در طرف راست

آهنگ ترکیب مجدد را بیان می‌کند: \dot{t} زمان ترکیب مجدد نامیده می‌شود که اساساً عمر یک حامل آزاد است. در حالت پایا $\frac{dn}{dt} = 0$ ، یعنی دو آهنگ، مساوی یکدیگرند. بنابراین داریم:

$$\Delta n = g\dot{t} \quad (6-74)$$

آهنگ تولید به صورت زیر به ضریب جذب و شدت تابش مربوط می‌شود. اگر ضخامت قطعه را d بگیریم، کسری از توان که در قطعه جذب می‌شود αd است [این، تعریف α است، بخش ۱۱-۴ را ملاحظه نمایید]. بنابراین اگر $N(\omega)$ تعداد فوتون‌هایی باشد که در واحد زمان به نمونه برخورد می‌کند، تعداد فوتون‌های جذب شده در واحد زمان برابر $\alpha d N(\omega)$ است. بنابراین:

$$g = \frac{\alpha d N(\omega)}{V} \quad (6-75)$$

زیرا هر فوتون که جذب شود، منجر به آفرینش یک زوج الکترون-حفره می‌شود. تقسیم بر V لازم است زیرا می‌خواهیم آهنگ تولید بر واحد حجم را پیدا کنیم. تعداد فوتون‌های فرودی $N(\omega)$ با رابطه زیر به شدت $I(\omega)$ مربوط است:

$$N(\omega) = \frac{I(\omega)A}{\hbar\omega} \quad (6-76)$$

که A سطح نمونه و $I(\omega)A$ توان فرودی و $\hbar\omega$ انرژی فوتون است با ترکیب روابط (۶-۷۴) و (۶-۷۶) داریم:

$$\Delta n = \frac{\alpha I(\omega)}{\hbar\omega} \dot{t} \quad (6-77)$$

اگر این مقدار را در رابطه (۶-۷۲) جای‌گزین نماییم، خواهیم داشت:

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma_0} = \frac{\alpha I(\omega)\dot{t}\mu_h(1+b)}{\hbar\omega\sigma_0} \quad (6-78)$$

توجه کنید که $I(\omega) \sim \left(\frac{\Delta\sigma}{\sigma_0}\right)$ است و به ویژه این که $\alpha \sim \left(\frac{\Delta\sigma}{\sigma_0}\right)$ است. ضریب جذب اساساً است که در بخش ۱۲-۶ بحث شد. حال یک برآورد عددی انجام می‌دهیم. اگر $\dot{t} \cong 5 \times 10^{-4}$ s، $I \cong 10^{-4}$ W/cm²، $\hbar\omega \cong 0.7$ eV (برای Ge) باشد، خواهیم داشت $\Delta n \cong 5 \times 10^{14}$ cm⁻³ که یک افزایش قابل ملاحظه در تعداد حامل‌های آزاد است.

نحوه بررسی ما از پدیده‌ی فوتورسانش از جهاتی آرمانی است. مثلاً از ترکیب مجدد حامل‌های آزاد در نزدیکی سطح صرف نظر کردیم. این اثر ترکیب مجدد سطحی نامیده می‌شود. ولی مفاهیم اصلی که عامل پدیده‌ی فوتورسانش هستند به روشنی تصویر شده‌اند.

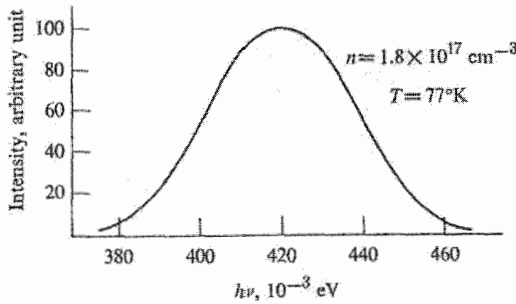
۱۴-۶ لومینسانس

در بخش ۱۲-۶ فرآیندهایی بیان شد که در آن‌ها الکترون‌ها در اثر جذب تابش برانگیخته می‌شوند. همین که الکترون‌ها برانگیخته شوند، دیگر توزیع الکترون‌ها در وضعیت تعادل نیست و بالاخره الکترون‌ها در اثر فرآیند تابش به پایین‌ترین حالت انرژی می‌روند. این گسیل لومینسانس نامیده می‌شود. بنابراین لومینسانس عکس فرآیند جذب است. اغلب فرآیندهای جذب که در بخش ۱۲-۶ بحث شدند، در جهت معکوس نیز ممکن است، صورت پذیرند که منجر به چندین نوع از مکانیسم‌های لومینسانس می‌شوند.

لومینسانس (مکانیسم برانگیختگی الکترون) را می‌توان توسط روشی به جز جذب تابش نیز ایجاد کرد. برانگیختگی توسط یک جریان الکتریکی در یک پیوند p-n (بخش ۷-۷) سبب الکترو لومینسانس و برانگیختگی توسط جذب اپتیکی (بخش ۱۲-۶)، باعث فوتولومینسانس می‌شود. هنگامی که در دماهای پایین ابتدا حامل‌ها به طریقی برانگیخته شوند و الکترون‌ها در حالت‌هایی که به دام افتاده‌اند، منجمد شوند ترمولومینسانس رخ می‌دهد. سپس اگر جسم جامد را حرارت دهیم، برانگیختگی حرارتی، الکترون‌ها را وادار به وبرانگیختگی می‌کند و انرژی آزاد می‌کند. (فرآیند سرراستی که الکترون‌ها به طور حرارتی برانگیخته می‌شوند و سپس انرژی تابشی آزاد می‌کنند، التهاب نامیده می‌شود). برانگیختگی‌های دیگری نیز وجود دارد ولی ما در اینجا فقط به متداول‌ترین روشها اشاره کردیم.

گسیل لومینسانس ممکن است در حین برانگیختگی صورت گیرد؛ در آن صورت پدیده فلوروسانس نامیده می‌شوند. فسفرسانس، فلورسانسی است که برای مدتی بعد از این که برانگیختگی خاتمه یافت، ادامه می‌یابد.

فرآیندهای فیزیکی که شامل لومینسانس هستند، شبیه آن‌چه که در بخش ۱۲-۶ بحث شد هستند. به جز این که این فرآیندها در خلاف جهت رخ می‌دهند. شاخص‌ترین فرآیند، گذار نوار رسانش به نوار ظرفیت است. به عنوان مثال طیف فوتولومینسانس در *InAs* نوع *nd* در شکل ۳۷-۶ نشان داده شده است. شکل پهن طیف، نشان دهنده‌ی گسترده بودن چگالی حالت‌های نوارهای مورد مطالعه می‌باشد.



شکل ۳۷-۶ طیف فوتولومینسانس InAs نوع n مربوط به ترکیب مجدد الکترون حفره.

After Mooradian and Fan, 7th Internat. Conf. Physics of Semiconductors, Paris, Dunod 1965

علاوه بر لومینسانس که مربوط به گذار بین ناخالصی‌ها و حالت‌های نواری است، لومینسانس اکستیونی^۱ نیز مشاهده شده است. همین طور علاوه بر لومینسانسی که مربوط به گذار بین نواری است، گذار بین ترازهای اتم‌های بخشنده و پذیرنده نیز مشاهده شده است.

مطالعه این فرآیندهای مختلف در مواد گوناگون یکی از شاخه‌های اصلی پژوهش در نیمه‌رساناها را تشکیل می‌دهد. یک وسیله خیلی متداول لومینسانس، صفحه تصویر تلویزیون است. تصاویری که مشاهده می‌شوند در اثر برانگیختگی لایه نازک لومینسانس است که سطح داخلی لامپ تصویر را پوشانده است. این برانگیختگی توسط باریکه الکترونی که به آن برخورد می‌کند، ایجاد می‌شود.

قطعه‌ی لومینسانس دیگر، لیزر نیمه‌رسانا است. در این قطعه، در اثر گذار الکترون‌ها از نوار رسانش به نوار ظرفیت، باریکه‌ی شدیدی از تابش همدوس ایجاد می‌شود (بخش ۷-۷ را ملاحظه نمایید).

۱۰-۶ اثرهای دیگر اپتیکی

در سه بخش قبل، اغلب پدیده‌های مهم مربوط به خواص اپتیکی نیمه‌رساناها را توصیف کردیم. خواص دیگری نیز وجود دارند که در حجم این کتاب نمی‌گنجند.^۲ در اینجا به بعضی از زمینه‌هایی که در سال‌های اخیر توجه فیزیک‌دانان را به خود معطوف داشته‌اند، اشاره می‌کنیم.

1. Excitonic luminescence

۲- برای مطالعه‌ی بیشتر به مرجع زیر مراجعه نمایید.

از آن جا که می توان یک باریکه‌ی تابشی پر شدت توسط لیزر ایجاد کرد، خواص اپتیکی غیر خطی اجسام به طور فزاینده‌ای مورد بررسی قرار گرفته است. تولید هماهنگ فرکانس (چند برابر شدن فرکانس فرودی) در GaAs و InP و بسیاری مواد دیگر امکان پذیر شده است. هم چنین اختلاط فرکانس (تولید ترکیب‌های مختلفی از فرکانس دو باریکه فرودی) در موادی چون GaAs، InAs، Si و Ge مشاهده شده است.

فرآیندهای غیر خطی مهم دیگر در نیمه‌رساناها عبارتند از: پراکندگی از فونون‌ها (برلیون و رامان). این آثار غیر خطی در بخش ۴-۳ در ارتباط با فونون‌ها، مورد بحث قرار گرفتند.

۱۶-۶ تقویت موج - صدا (اثر آکوستوالکتریک)

خواص آکوستیکی نیمه‌رساناها نیز به طور وسیعی مورد بررسی قرار گرفته‌اند. محرک اولیه این تحقیقات طراحی تقویت کننده‌های آکوستیکی به ویژه در ناحیه فرا صوت (میکرو موج) است که تحلیل ریاضی آن مشکل است. بنابراین در اینجا فقط مفاهیم فیزیکی آن را بیان می‌کنیم و خواننده علاقه‌مند را به کتاب شناسی پایان فصل ارجاع می‌دهیم.^۱

قبلاً ملاحظه کردیم که تقویت امواج صوتی در نیمه‌رساناها چگونه صورت می‌گیرد (بخش ۱۱-۳). حامل‌های آزاد در نمونه، در اثر اعمال یک میدان الکتریکی قوی، با یک سرعت سوق حرکت می‌کنند. اگر میدان به قدر کافی بزرگ باشد به طوری که سرعت سوق v_d از سرعت صوت بزرگ تر شود، انرژی از حامل‌ها به فونون‌هایی که در همان جهت حامل‌ها حرکت می‌کنند منتقل می‌شود و موج صوتی تقویت می‌شود. اگر بخواهیم تقویت مناسبی صورت گیرد، جفت شدگی بین حامل‌ها و فونون یا امواج شبکه باید خیلی قوی باشد.

این شرط در بلورهایی مانند CdS که خاصیت پیزوالکتریک شدید دارند قابل حصول است. شکل ۳۸-۶، ضریب بهره آکوستیکی را به صورت تابعی از میدان نشان می‌دهد. برای $v_d < v_s$ ضریب بهره منفی است (تضعیف). یعنی در این ناحیه حامل‌ها از موج، انرژی جذب می‌کنند. از طرف دیگر در ناحیه‌ی $v_d > v_s$ ، بهره مثبت است.

تقویت آکوستیکی ابتدا توسط هاتسون و دیگران^۲ در سال ۱۹۶۱ مشاهده شد. آن‌ها از ماده

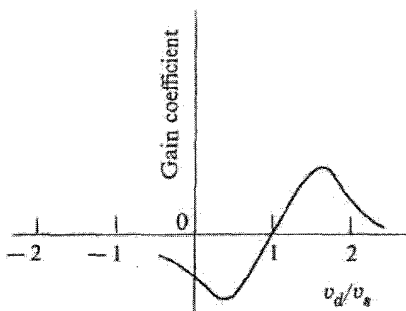
1. Solid State Physics, S. Wang, 1966

2. Hutson, et al 1961

نارسانای CdS به عنوان محیط استفاده کردند، بنابراین در ابتدا هیچ حامل باری وجود نداشت. سپس با تابش نور بر نمونه، الکترون‌ها به نوار رسانش برانگیخته و حامل‌های بار ایجاد شدند. آن‌ها یک موج برشی را در جهتی موازی با محور شش گوشه بلور فرستادند. (با تبدیل یک سیگنال الکترومغناطیسی به اکوستیکی از طریق جفت شدگی پیزوالکتریک، موجی در یک انتهای بلور پیزوالکتریک به وجود می‌آید). از فرکانس‌های ۱۵ و ۴۵ مگاهرتز استفاده شد. وقتی بلور در تاریکی است تنها تضعیف صورت می‌گیرد. ولی هنگامی که بلور تحت تابش قرار گیرد؛ تقویت مشاهده می‌شود. نتیجه تجربی این اندازه‌گیری در شکل ۶-۳۹ نشان داده شده است و خیلی شبیه به شکل ۶-۳۸ است.

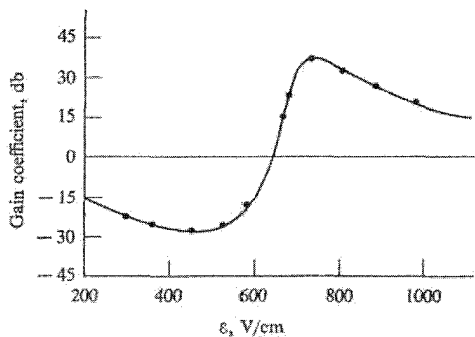
نقطه‌ای که تقویت شروع می‌شود متناظر با میدان $E = 700 \text{ V/cm}$ است. از آن جا که تحرک الکترون در CdS، مساوی $s = 285 \text{ cm}^2/\text{V}$ است، سرعت الکترون در آن نقطه مساوی

$2 \times 10^5 \text{ cm/s}$ است که خیلی نزدیک به سرعت صوت در این ماده است.



شکل ۶-۳۸ ضریب بهره آکوستیکی بر حسب v_d/v_s

با حرکت دادن موج به سمت جلو و عقب در اثر بازتاب از دو انتهای نمونه، می‌توان یک تقویت کننده‌ی صوتی را به یک نوسان گر آکوستیکی تبدیل کرد.



شکل ۳۹-۶ ضریب بهره (برحسب دسی بل) نسبت به میدان الکتریکی، در فرکانس ۲۵MHz

[Adapted from White and Letters, Rev. Phys. 7, ۲۳۷, ۱۹۶۱]

گرچه موج در بازگشت از قطعه تضعیف می‌شود (زیرا سرعت انتشار در خلاف جهت میدان است)، ولی بهره کلی در طول یک رفت و برگشت ممکن است مثبت باشد (در واقع برای یک نوسان گر پایدار این بهره می‌بایست درست مساوی صفر باشد).

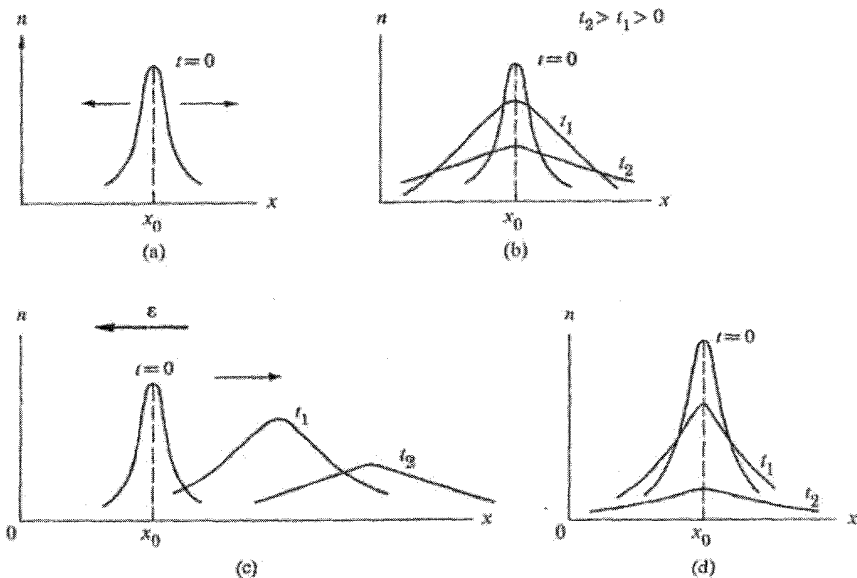
۱۷-۶ پخش

چگالی حامل‌ها در یک نیمه‌رسانا اغلب غیریکنواخت است. این حالت در تمام قطعاتی که شامل پیوندهای p-n هستند، مانند ترانزیستورها اتفاق می‌افتد (فصل ۷ را ملاحظه نمایید). هر وقت چگالی غیریکنواخت باشد، پدیده پخش اتفاق می‌افتد. این پدیده در وضعیت فوق اغلب نقش اساسی را ایفا می‌کند. به خاطر این است که موضوع پخش در تحقیقات مربوط به نیمه‌رساناها، توجه بسیاری را به خود جلب کرده است.^۱

مفهوم پخش را می‌توان به صورت زیر تصویر کرد. فرض کنید به طریقی یک چگالی پالس در لحظه $t=0$ در یک نیمه‌رسانا ایجاد شود و این پالس حول نقطه $x = x_0$ متمرکز شود (شکل ۴۰-۶ الف). معمولاً چگالی پالس توسط تزریق حامل‌ها از یک مدار خارجی به نمونه ایجاد می‌شود. فرض می‌کنیم که چگالی حامل‌ها در یک حالت عدم تعادل باشد (فرض می‌شود زمینه یکنواخت و چگالی در حالت تعادل یکنواخت باشد). بنابراین همان‌گونه که در شکل ۴۰-۶ الف نشان داده شده است، در دو لبه پالس جریانی ایجاد می‌شود. این شارش جریان که در آن n بر

۱- پخش اتم‌ها در جامدات نیز که به لحاظ عملی بسیار مهم است در بخش ۴-۱۱ آمده است.

حسب x به سرعت تغییر می کند، پخش نام دارد. اثر پخش در نهایت این است که چگالی حاملها به سمت وضعیت تعادل پیش رود به طوری که چگالی یکنواخت می شود. شکل پالس در لحظات مختلف بعدی در شکل ۴۰-۶ (ب) نشان داده شده است. با گذشت زمان، پالس در هر دو جهت منتشر و پخش می شود و با وجود این که مرکز پالس در باقی می ماند، قله ی منحنی افزایش می یابد. در این حالت گوییم که پالس پخش شده است.



شکل ۴۰-۶ پخش در شرایط مختلف: (الف) پالس چگالی n بر حسب x در $t=0$. پیکانها جریان ذرات را نشان می دهند. (ب) انتشار پهن شدگی پالس به خاطر پدیده پخش در سه لحظه متوالی (ج) پالس الکترونی در یک میدان الکتریکی در سه لحظه متوالی پخش می شود و سوق می یابد (د) ناپدید شدن پالس به خاطر ترکیب مجدد.

اگر در لحظه $t=0$ یک میدان الکتریکی نیز به پالس اعمال گردد، پالس مانند قبل پخش می شود، ولی همان گونه که در شکل ۴۰-۶ (ج) نشان داده شده است، مرکز آن در خلاف جهت میدان جابه جا می شود.

فرآیند دیگری که صورت می گیرد، ترکیب مجدد است. همان گونه که در بخش ۱۳-۶ بحث شد، وقتی چگالی حاملها در حالت تعادل نیست، حامل های اضافی با ترکیب مجدد با بارهای مخالف با به دام ناخالصی ها افتادن، ناپدید می شوند. اثر ترکیب مجدد این است که چگالی حاملها را به

سمت تعادل سوق می‌دهد. با در نظر گرفتن این که زمان ترکیب مجدد τ است، عمر پالس بایستی اساساً مساوی τ باشد و در مدت زمان $t < \tau$ پالس پخش می‌شود؛ برای $t > \tau$ پالس اساساً از بین می‌رود (شکل ۴۰-۶د). وضعیت شکل ۴۰-۶د) برخلاف وضعیت ۴۰-۶ب) است که در آن ترکیب مجدد قابل چشم پوشی است.

حال که به یک تصویر فیزیکی نسبتاً کاملی از فرآیند پخش دست یافتیم، فرآیندهای فوق را به طور کمی بررسی می‌کنیم. قانون اصلی که بر فرآیند پخش حاکم است قانون فیک^۱ است که بیان می‌دارد: برای یک چگالی یکنواخت، چگالی جریان ذرات J (که تعداد ذراتی است که در واحد زمان از واحد سطح می‌گذرند) از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$J = -D \frac{\partial n}{\partial x} \quad (۶-۷۹)$$

D مقدار ثابتی است که ضریب جذب نام دارد. این قانون بیان می‌کند که جریان متناسب با گرادینان چگالی $J = -D \frac{\partial n}{\partial x}$ است. بنابراین هر چه n سریع‌تر تغییر کند، جریان بزرگ‌تر است که نتیجه‌ی قابل قبولی به نظر می‌رسد.

علامت منفی در رابطه (۶-۷۹) برای این وارد شده است که D یک کمیت مثبت به دست آید. آن طور که در این رابطه و همین‌طور از شکل ۴۰-۶ مشاهده می‌شود، J در خلاف جهت $\frac{\partial n}{\partial x}$ است. بنابراین اگر n به طرف راست افزایش یابد، J به سمت چپ افزایش می‌یابد و بالعکس.

معادله (۶-۷۹) هم برای ذرات خنثی و هم برای ذرات باردار معتبر است. در نیمه‌رساناها حامل‌های بار (الکترون‌ها و حفره‌ها) بار دارند. بنابراین جریان ذرات J هم یک جریان الکتریکی حمل می‌کند. برای به دست آوردن جریان الکتریکی، بایستی J را در اندازه بار ذره ضرب کنیم. بنابراین جریان‌های الکترون‌ها و حفره‌ها به ترتیب برابرند با:

$$J_e = eD_e \frac{\partial n}{\partial x} \quad (۸۰-الف)$$

$$J_h = -eD_h \frac{\partial p}{\partial x} \quad (۸۰-ب)$$

قانون فیک را می‌توان با استفاده از مکانیک آماری استنتاج کرد. (جزئیات آن به صورت یک تمرین ارائه شده است). مکانیک آماری نه تنها ما را قادر می‌سازد که این قانون را به دست آوریم،

بلکه رابطه انیشتن را نیز به دست می دهد.

$$D = \frac{\mu k_B T}{e} \quad (6-81)$$

که رابطه ای است بین تحرک و ضریب جذب ذره ی باردار. این رابطه هم برای الکترون ها و هم برای حفره ها معتبر است و فرمول مفیدی که کمیت جدید D را با کمیت تحرک (که برای ما کاملاً آشنا است، بخش ۶-۶۱) بیان می کند. رابطه ای شبیه (۶-۸۱) قابل انتظار است. زیرا D در واقع یک ضریب ترابری دیگری مانند است.

حال معادله پخش را ابتدا برای یک نوع و سپس برای دو نوع حامل بار به دست می آوریم.

معادله پخش برای یک نوع حامل

فرض می کنیم فقط یک نوع حامل داشته باشیم و برای این که علامت بار ایجاد اشتباه نکند فرض می کنیم حامل ها حفره باشند. در حضور گرادیان چگالی و میدان الکتریکی، جریان کل با رابطه زیر بیان می شود:

$$J = -eD \frac{\partial p}{\partial x} + pe\mu \epsilon \quad (6-82)$$

(برای سادگی اندیس h مربوط به حفره را در D و μ حذف کرده ایم). اولین جمله طرف راست جریان پخش و دومین جمله مربوط به سوق است.

حال این مطلب بررسی می کنیم که چگالی $p(x,t)$ در یک نقطه اختیاری x ، چگونه بر حسب زمان تغییر می کند. توجه کنید که چگالی $p(x,t)$ تابعی از هر دو مقدار x و t است. از رابطه (۶-۷۳) ملاحظه می شود که چگالی حفره ها $p(x)$ با زمان تغییر می کند. این تغییرات با معادله پیوستگی^۱ بیان می شود.

$$\left(\frac{\partial p}{\partial t}\right)_{\text{Flow}} = -\frac{1}{e} \frac{\partial}{\partial x} J = D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \mu \frac{\partial}{\partial x} (p\epsilon) \quad (6-83)$$

۱- معادله پیوستگی در الکتروپدینامیک و مکانیک معادله ی آشنایی است. شکل آن در سه بعد به صورت زیر است:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot J = 0$$

• $J = t + p$ که چگالی و J جریان است (کتابهای درسی الکترومغناطیسی را ملاحظه نمایید).

که J را از رابطه (۶-۸۲) جایگزین کرده‌ایم. علاوه بر تغییراتی که چگالی p به واسطه جریان حفره‌ها بر حسب زمان دارد، به خاطر ترکیب مجدد نیز p بر حسب زمان تغییر می‌کند. این تغییرات را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial t}\right)_{\text{Re comb}} = -\frac{p-p_0}{\tau} \quad (6-84)$$

که p_0 چگالی تعادل و τ زمان ترکیب مجدد حفره‌ها است (معادله ۶-۷۳ را ملاحظه کنید). آهنگ کلی تغییرات با عبارت زیر بیان می‌شود.

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \left(\frac{\partial p}{\partial t}\right)_{\text{Flow}} + \left(\frac{\partial p}{\partial t}\right)_{\text{Recomb}}$$

که چون با معادلات (۶-۸۳) و (۶-۸۴) ترکیب گردد، معادله دیفرانسیل زیر نتیجه می‌شود:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial t}\right) = D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \mu \frac{\partial}{\partial x}(p\varepsilon) = -\frac{p-p_0}{\tau} \quad (6-85)$$

این معادله‌ی پخش^۱ است، که رفتار فضایی-زمانی چگالی حامل‌ها p را می‌دهد. اگر این معادله را برای شرایط اولیه خاصی حل کنیم، چگالی را در نقطه x و در هر زمان t خواهیم داشت. در حالت کلی قادر به انجام این کار نیستیم، ولی معادله را برای چند وضعیت خاص حل می‌کنیم که از آن می‌توان مفهوم فیزیکی مطلب فوق را استنباط کرد.

i) حل مانا^۲ برای $\varepsilon = 0$. با قراردادن $\varepsilon = 0$ در رابطه (۶-۸۵) به معادله‌ای مناسب برای این وضعیت می‌رسیم.

$$D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \frac{p-p_0}{\tau} = 0 \quad (6-86)$$

این یک معادله دیفرانسیل استاندارد است که حل آن به صورت زیر است:

$$p_1 \equiv p - p_0 = A e^{-x/(D\tau)^{1/2}} \quad (6-87)$$

۱- معادله پخش استاندارد به صورت زیر است.

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}$$

که با قراردادن $\varepsilon = 0$ از معادله ۶-۸۲ و صرف نظر کردن از ترکیب مجدد به دست می‌آید.

A مقدار ثابتی است که از شرایط مرزی به دست می آید. چگالی p_1 بر حسب x به طور نمایی کاهش می یابد و اساساً در $x > (D\tau)^{1/2}$ صفر می شود. این فاصله به نام طول پخش موسوم است و با L_D نمایش داده می شود.

$$L_D = (D\tau)^{1/2} \quad (6-88)$$

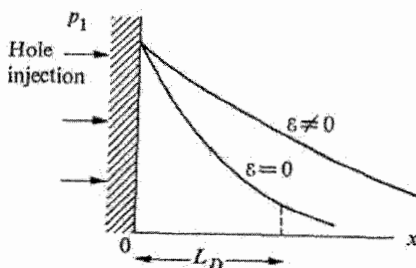
حل ۶-۸۷، برای یک نمونه نیمه متناهی با آرایش فیزیکی $0 < x < \infty$ (شکل ۶-۴۱) که حامل های اضافی با یک آهنگ ثابت به وجه چپ نمونه تزریق می شوند، مناسب است. هم چنان که حامل ها تزریق می شوند، به طرف راست پخش می شوند. ولی به دلیل ترکیب مجدد آن ها، فقط به اندازه ی زمان τ عمر می کنند و فاصله ی L_D را طی می کنند. بنابراین می توان سرعت مؤثر پخش v_D را به صورت زیر تعریف کرد.

$$v_D = \frac{L_D}{\tau} = \left(\frac{D}{\tau}\right)^{1/2} \quad (6-89)$$

جریان پخش برابر است با

$$J_{Diff} = ep_1 v_D = ep_1 \left(\frac{D}{\tau}\right)^{1/2} \quad (6-90)$$

که مشابه نتیجه ای است که با جای گزینی رابطه (۶-۸۷) در اولین جمله رابطه (۶-۸۲) به دست می آید.



شکل ۶-۴۱ حل حالت پایا برای جریان حفره که در $x=0$ از طرف چپ خارج می شود: با میدان الکتریکی و بدون میدان الکتریکی.

(ii) حل مانا برای یک میدان الکتریکی $\epsilon \neq 0$. همان طور که در رابطه ی (۶-۸۵) به دست آمد، معادله مناسب برای چگالی اضافی $p_1 = p - p_0$ حالا به صورت زیر است:

$$\frac{\partial^2 p_1}{\partial x^2} - \frac{\mu \varepsilon}{D} \frac{\partial p_1}{\partial x} - \frac{p_1}{L_D^2} = 0 \quad (6-91)$$

این نیز یک معادله دیفرانسیل استاندارد است که حل آن به صورت زیر است.

$$p_1 = A e^{-\gamma x / L_D} \quad (6-92)$$

که:

$$\gamma = \sqrt{1 + s^2} - s, \quad s = \mu \varepsilon L_D / 2D \quad (6-93)$$

این حل همان شکل رابطه (6-87) در غیاب میدان الکتریکی را دارد. تفاوت در این است که حالا طول موثر پخش L_D/γ است که γ به میدان بستگی دارد (شکل 6-41). از آن جا که $\gamma < 1$ است، (از رابطه 6-93) طول موثر پخش حالا بزرگ تر از قبل است. این قابل انتظار است، زیرا حالا به خاطر پخش، ذرات بیش تر کشیده می شوند. وقتی ε بزرگ شود، κ نیز بزرگ می شود در حالی که γ کوچک می شود؛ که این منجر به یک مقدار بزرگ برای طول پخش L_D/γ می شود.

معادله پخش برای دو نوع حامل

وقتی دو نوع حامل بار وجود دارد، می بایست دو معادله پخش شبیه رابطه (6-85) را بررسی کنیم. ولی این دو معادله مستقل نیستند، بلکه با هم جفت می شوند بنابراین بایستی به طور هم زمان بررسی شوند. این جفت شدگی از آن جا ناشی می شود که میدان الکتریکی که در هر دو معادله ظاهر می شود، میدان کل داخل نمونه است نه میدان خارجی، در واقع می توان نوشت:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \varepsilon' \quad (6-94)$$

که ε' جزئی از میدان است که مربوط به پخش الکترون ها و حفره ها است. میدان ε' نتیجه ای از این واقعیت است که الکترون ها و حفره ها باردار هستند. این بارها میدان مربوط به خودشان را ایجاد می کنند که مجدداً بر خود بارها اثر می کند. اثر این میدان کشیدن الکترون ها و حفره ها به طرف یکدیگر است به طوری که با هم حرکت می کنند. یعنی معادلات پخش الکترون ها و حفره ها جفت می شوند.

بررسی ریاضی پخش دو حامل بار نسبتاً پیچیده است و ما در این جا به آن نمی پردازیم. فقط یک

مورد را در نظر می‌گیریم که ساده ولی از لحاظ عملی مهم است. فرض کنید که با یک نمونه شدیداً غیر ذاتی، (مثلاً نمونه نوع n که در آن $p_0 \gg n_0$ است) سر و کار داریم. همچنین فرض کنید که پالس از حفره‌ها به داخل نمونه تزریق شود. به خاطر میدان داخلی، یک پالس الکترونی ایجاد می‌شود که همراه با پالس حفره‌ها حرکت می‌کند. در این نمونه‌ی نوع n ، الکترون‌ها و حفره‌ها به ترتیب حامل‌های اکثریت و اقلیت نامیده می‌شود.

پالس حفره به گونه‌ای حرکت می‌کند که گویی هیچ الکترونی وجود ندارد، یعنی رابطه (۸۵-۶) با پارامترهای مناسب حفره‌ها، برقرار می‌شود. حرکت پالس الکترون خیلی پیچیده‌تر است. زیرا، از آن جا که n بزرگ است اثر پالس الکترون روی چگالی الکترونی بسیار کوچک است. بنابراین این پالس روی زمینه خنثی‌ای که پالس حفره در آن حرکت می‌کند، تأثیر ندارد. و پالس حفره به عنوان یک پالس مستقل حرکت می‌کند. زمینه خنثی‌ای که پالس الکترون در آن حرکت می‌کند (حفره‌ها)، مستقیماً از این پالس تأثیر می‌پذیرد.

به طور خلاصه در یک نیمه‌رسانای دو حاملی، مطالعه حرکت حامل‌های اقلیت ساده‌تر از مطالعه حامل‌های اکثریت است. این نکته در بحث مربوط به ترانزیستورها در فصل ۷ بسیار مهم خواهد بود.

خلاصه

اغلب نیمه‌رساناها به ساختار الماسی یا سولفید روی متبلور می‌شوند. در هر دو حالت اتم‌ها با نزدیک‌ترین همسایگان شان پیوند کووالان ایجاد می‌کنند. هر اتم با چهار اتم همسایه احاطه شده است که یک چهار وجهی منظم را تشکیل می‌دهند.

در ساده‌ترین نیمه‌رساناها، ساختار پیوندی شامل یک نوار رسانش همسان گرد سهمی است، که در زیر آن یک نوار ظرفیت همسان گرد سهمی وارونه قرار دارد. دو نوار را یک گاف انرژی از هم جدا کرده است که این گاف در پدیده‌های مربوط به نیمه‌رساناها نقش مهمی را ایفا می‌کند.

هنگامی که ناخالصی‌های خارجی به نیمه‌رسانا وارد می‌شود. معمولاً حالت‌های الکترونی جای گزین شده‌ی اضافی در گاف انرژی ایجاد می‌شوند. این حالت‌ها اغلب خیلی نزدیک به انتهای نوار رسانش و یا بالای نوار ظرفیت اند. در آن صورت ناخالصی‌ها (بخشنده و یا پذیرنده) به راحتی یونیده می‌شوند و حامل‌های آزاد (الکترون یا حفره) تولید می‌کنند.

چگالی حامل‌ها

حامل‌های آزاد در اثر برانگیختگی حرارتی الکترون‌ها در گذرازگاف انرژی، و یا توسط یونش اتم‌های بخشنده و پذیرنده ایجاد می‌شوند. در یک نمونه‌ی ذاتی (یعنی خالص) تنها برانگیختگی حرارتی صورت می‌گیرد و تعداد الکترون‌ها و حفره‌ها مساوی است. چگالی آنها برابر است با:

$$n = p = n_i = 2 \left(\frac{k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (m_e m_h)^{3/4} e^{-E_g/2k_B T}$$

به دلیل وجود ضریب نمایی این چگالی، بر حسب دما، خیلی سریع افزایش می‌یابد.

در یک نیمه‌رسانای غیر ذاتی که یونش در اثر عبور از گاف در مقایسه با یونش در اثر ناخالصی قابل چشم پوشی است، چگالی حامل‌ها برای نمونه‌های نوع n و p به ترتیب با روابط زیر بیان می‌گردند.

$$n = N_d \quad \text{یا} \quad p = N_a$$

رسانش و تحرک

رسانش در نیمه‌رساناها معمولاً به صورت حاصل ضرب زیر نوشته می‌شود:

این رابطه تحرک μ را هم تعریف می‌کند. در نیمه‌رساناهای ذاتی، به دلیل افزایش نمایی چگالی حامل‌ها بر حسب دما، رسانایی نیز بر حسب دما به سرعت افزایش می‌یابد. گرچه تحرک نیز به دما بستگی دارد، این بستگی در مقایسه با بستگی آن به ضریب نمایی خیلی کوچک است.

آثار میدان مغناطیسی

این آثار، تشدید سیکلوترونی و اثر هال تکنیک‌های استاندارد برای اندازه‌گیری پارامترهای نیمه‌رسانا هستند. تشدید سیکلوترونی در تعیین جرم‌های مؤثر، و اثر هال برای اندازه‌گیری چگالی حامل‌ها به کار می‌رود.

الکترون‌های داغ و اثرگان

هنگامی که میدان الکتریکی بزرگ نیمه‌رسانا اعمال گردد، حامل‌ها (الکترون‌ها و حفره‌ها) از میدان انرژی جذب می‌کنند و دمای آن‌ها افزایش می‌یابد و از دمای شبکه بالاتر می‌رود یعنی داغ می‌شوند. نتیجه‌ی آن کاهش تحرک آن‌ها است.

در بعضی از نیمه‌رساناها با ساختار نواری مناسب مانند GaAs، گرم شدن حامل‌ها، باعث گذار الکترون‌ها به دره‌های با انرژی بالا و تحرک خیلی کم می‌شود. در چنین موردی ممکن است اعمال میدان الکتریکی یک ناحیه با رسانایی دیفرانسیلی منفی ایجاد کند. به دلیل این که چنین سیستمی به شدت ناپایدار است نمونه به یک نوسان گر الکتریکی همدوس تبدیل می‌شود که این همان اثرگان است.

جذب اپتیکی، فوتورسانش و لومینسانس

جذب اپتیکی در یک نیمه‌رسانا هنگامی صورت می‌گیرد که یک الکترون در نوار ظرفیت، یک فوتون از باریکه نوری جذب کند و به نوار رسانش گذار یابد. چنین جذبی اساساً فقط وقتی صورت می‌گیرد که انرژی فوتون از گاف انرژی بیش‌تر باشد یعنی $E_g < \hbar\nu$. شکل منحنی جذب، تابعی از ساختار نواری است و بنابراین از آن برای مطالعه شبکه استفاده می‌شود.

جذب اپتیکی به واسطه برانگیختگی اکسیژون یا یونیزاسیون اتم‌های بخشنده و یا پذیرنده نیز ممکن

است، صورت گیرد.

در پدیده‌ی فوتورسانش، رسانایی یک نیمه‌رسانا در اثر تابش یک باریکه‌ی نوری افزایش می‌یابد. باریکه‌ی نوری سبب می‌شود حامل‌های بیش‌تری در گذر از گاف انرژی برانگیخته شوند که این خود باعث ازدیاد رسانایی می‌شود.

لومینسانس عکس جذب اپتیکی است: الکترون‌ها ابتدا به طریقی برانگیخته می‌شوند. به تراز بالاتر می‌روند و در فرآیند بازگشت به ترازهای پایین‌تر، فوتون‌هایی گسیل می‌کنند. این فوتون منجر به لومینسانس می‌شود.

پخش

اگر چگالی حامل‌ها نایک‌نواخت باشد، این نایک‌نواختی سبب ایجاد جریانی از ذرات می‌شود. جهت این جریان به گونه‌ای است که تمایل به برطرف کردن نایک‌نواختی دارد و در نهایت منجر به یک توزیع یکنواخت حامل‌ها می‌شود رابطه اساسی در این جا *قانون فیک* است.

$$J = -D \frac{\partial n}{\partial x}$$

که J چگالی جریان ذرات است با به کار بردن قوانین مکانیک آماری می‌توان نشان داد که ضریب پخش D توسط رابطه انیشتین به تحرک حامل‌ها مربوط است.

$$D = \mu k_B T / e$$

با مطالعه دینامیکی پخش می‌توان قانون فیک را با معادله‌ی پیوستگی ترکیب کرد. معادله‌ی دیفرانسیل حاصل به معادله‌ی پخش موسوم است که می‌توان آن را با توجه به شرایط اولیه و مرزی مسأله حل کرد.

References

General

- F. J. Blatt, 1968, Physics of Electronic Conduction in Solids, New York. McGraw-Hill*
- A. F. Gibson, editor, *Progress in Semiconductors, Volumes I-IX, 1956 1964 , New York; Academic Press.*
- J. P. McKelvey, 1966 , *Solid State and Semiconductor Physics, New York: Harper and Row*
- J. L. Moll, 1964, *Physics of Semiconductors, New York: McGraw-Hill*
- R. A. Smith, 1959, *Semiconductors, New York: McGraw-Hill*
- E. Spence, 1958, *Semiconductors, Cambridge: Cambridge University Press*
- S. Wang, 1966 *Solid State Electronics, New York: McGraw-Hill*
- R. K. Willardson and A. C. Beer , editors, *Semiconductors and Semimetals, Volumes I-IV, 1966 1968 New York: Academic Press*
- H. F. Wolf , 1971, *Semiconductors, New York: Wiley-Interscience*

Band structure

- D. L. Greenway and G. Harbeke 1968, Optical Properties of Semiconductors, New York: Pergamon Press*
- D. L. Long, 1968 *Energy bands in Semiconductors, New York: John Wiley*
- R. K. Willardson and A. C. Beer (see General Refernces), *Volume I*

Semiconductor statistics

- J. S. Blakemore, 1958, Semiconductor Statistics, New York: Peragmon Press*
- J. P. McKelvey (see General References)*
- J. L. Moll (see General Referneces)*

Transport phenomena

- F. J. Blatt (see General Refernces)*
- E. M. Conwell, 1967 *High Field Transport in Semiconductors, New York: Academic Press*
- R. A. Smith (see General References)
- R. C. Smith, J. F Janak and R. B. Adler, 1968, *Electronic Conduction in Solids, New York: McGraw-Hill*

S. Wang (see General References)

Optical properties and photoconductivity

R. H. Bube, 1960 , Photoconductivity of Solids, New York: John Wiley

M. Cordona, 1968, "Electronic Optical Properties of Solids," in Solid State, Nuclear and Particle Physics, edited by I. Saavedra, New York: Benjamin

D. L. Greenway and G. Harbeke (see Band Structure References)

T. S. Moss, 1950, Optical Properties of Semiconductors, Englewood Cliffs, N. J. Prentice-Hall

J. Tauc , 1962 Photo - and Thermoelectric Effects in Semiconductors, New York: Pergamon Press

S. Wang (see General References)

R. K. Willardson and A. C. Beer , editors (see General References), Volume III

Particular classes of materials

V. I. Fistul, 1969, Heavily Doped Semiconductors, New York: Plenum Press

O. Madelung, 1964 Physics of the III-V Compounds , New York: John Wiley

B. Ray, 1969, II-V Compounds, New York: Pergamon Press

R. K. Willardson and A. C. Beer, editors (see General References)

۱- در بحث مربوط به پیوند چهار قطبی در نیمه‌رساناهای گروه IV (و مواد دیگر)، مدل پیوندی را توصیف کردیم که در آن هر الکترون در امتداد یک پیوند کووالان که دو اتم را به هم متصل می‌کند جای گزیده است. توضیح دهید چگونه ممکن است این مدل را با مدل نواری (جای گزیده نشده) آشتی داد که در آن هر الکترون با یک تابع بلوخ توصیف می‌شود که احتمال آن در همه بلور توزیع شده است.

۲- آیا اوربیتال‌های پیوندی پیوندهای فوق مربوط به نوار رسانش است یا نوار ظرفیت؟ چرا؟

۳- مدل پیوندی مربوط به الکترون‌ها در نوار رسانش نیمه‌رساناهای گروه IV را توصیف کنید. نواحی مخصوصی را که الکترون‌ها در آن نواحی قرار دارند، بیان کنید.

۴- در مدل نواری، شکستگی یک پیوند مربوط به چیست؟

۵- یک یا چند دلیل تجربی ارائه دهید که تأیید کند الکترون‌های مربوط به پیوند چهار وجهی جای گزیده نشده‌اند.

۶- ضریب پیش‌نمایی در معادله (۸۱-۶) یعنی ضریب قبل از $e^{-E_g/k_B T}$ با عنوان چگالی مؤثر حالت‌های نوار رسانش خوانده می‌شود؛ چگونه این نام گذاری را توجیه می‌کنید.

۷- آزمایش تشدید سیکلوترونی در Ge نوع n فقط یک خط الکترونی نشان می‌دهد. میدان مغناطیسی در کدام جهت است.

۸- آیا ممکن است آزمایش تشدید سیکلوترونی در Si فقط یک خط نشان دهد.

۹- اگر یک نمونه رفتار ذاتی از خود نشان دهد، اساساً دلالت بر این دارد که نمونه خالص است؟

۱۰- آزمایش گری در اندازه‌گیری اثرهال در یک نمونه نیمه‌رسانا با کمال تعجب دریافت که حتی در دمای اتاق ثابت هال نمونه‌اش کوچک و در حدود صفر است. او از شما برای تعبیر این نتیجه کمک می‌خواهد. توجیه شما چیست؟

۱۱- در بحث الکترون‌های داغ در می‌یابیم که دمای الکترون از دمای شبکه بیش‌تر است. آیا می‌توانید این را با بررسی‌های تقارنی توجیه کنید. اگر یک عبارت کلی برای Te در یک میدان اختیاری که پیچیده‌تر از معادله (۵۵-۶) است بر حسب توانی از \mathcal{E} بسط داده شود، آیا انتظار دارد

جملات شامل ϵ ، ϵ^3 ، ϵ^5 ، ... ظاهر گردد؟ چرا؟ آیا استدلال شما برای موادی مانند Ge و GaAs هم درست است؟

۱۲- در بحث مربوط به الکترون‌های داغ، دمای الکترون از دمای شبکه بیش تر است. آیا می‌توان وضعیتی را تصور کرد که در آن دمای الکترون کم تر از دمای شبکه باشد؟

۱۳- فرض کنید در کار کردن با یک نیمه‌رسانا، از یک باریکه نوری خیلی شدید استفاده می‌کنید. آیا ممکن است جذب اساسی در فرکانسهای E_g/h رخ دهد؟

۱۴- در یک نیمه‌رسانای ذاتی آیا رابطه انشتین برای الکترون‌ها و حفره‌ها به طور انفرادی معتبر است؟

- ۱- رابطه (۶-۳۱) را برای چگالی حفره به دست آورید.
- ۲- (الف) چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها را در دمای اتاق برای یک نمونه ذاتی Si محاسبه نمایید.
مقادیر m_h و m_e را به ترتیب $m_h = m_0$ و $m_e = 0.4 m_0$ بگیرید.
(ب) موقعیت تراز انرژی فرمی را تحت این شرایط تعیین کنید.
- ۳- ضرایب پیش‌نمایی در روابط (۶-۸) و (۶-۱۳) را برای Ge در دمای اتاق به ترتیب برابر 1.1×10^{19} و $0.51 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ بگیرید، مقادیر زیر را محاسبه نمایید:
(الف) جرم‌های موثر m_h و m_e را برای الکترون‌ها و حفره‌ها؛
(ب) چگالی حامل‌ها در دمای اتاق؛
(ج) چگالی حامل‌ها در 77°K با فرض این که گاف انرژی مستقل از دما است.
- ۴- ثابت دی‌الکتریک GaAs مساوی $10/4$ است.
(الف) انرژی‌های یونش اتم‌های بخشنده و پذیرنده را تعیین کنید.
(ب) شعاع بوهر را برای الکترون‌ها و حفره‌های مقید محاسبه کنید.
(ج) دمایی را محاسبه کنید که در آن یک نمونه نوع n به انجماد می‌رسد.
- ۵- یک نمونه سیلیسیوم با اتم‌های ارسینک با چگالی $1/0 \times 10^{23} \text{ m}^{-3}$ آلائیده شده است. نمونه در دمای اتاق نگهداری می‌شود.
(الف) چگالی الکترونی ذاتی را محاسبه کنید و نشان دهید که این در مقایسه با چگالی ای که توسط اتم‌های بخشنده تولید می‌شود ناچیز است.
(ب) با فرض این که تمام ناخالصی‌ها یونیده باشند، موقعیت تراز فرمی را معین کنید.
(ج) اگر در مثال فوق اتم‌های پذیرنده با چگالی 10^{21} m^{-3} وارد شوند، اثر آن را بر تراز فرمی توصیف کنید.

۶- با داشتن این مقادیر در سیلیسوم $\mu_h = 475 \text{ cm}^2/\text{Volt-s}$ ، $\mu_e = 1350 \text{ cm}^2/\text{Volt-s}$ و $E_g = 1/1 \text{ eV}$ مقادیر زیر را محاسبه نمایید.

الف) عمر متوسط الکترون‌ها و حفره‌ها؛

ب) رسانایی ذاتی σ در دمای اتاق؛

ج) بستگی دمایی σ ؛ با این فرض که برخورد الکترون عمدتاً توسط پراکندگی فونون‌ها صورت می‌گیرد. $\log \sigma$ را بر حسب T رسم کنید.

۷- با استفاده از جدول‌های ۱-۶ و ۲-۶ مساله ۶ را برای Ge تکرار کنید.

۸- یک نمونه نیمه‌رسانای غیر ذاتی به شکل بره‌ای به طول ۵cm، پهنای ۰/۵cm و ضخامت ۱mm در دست است. هنگامی که این بره در یک میدان مغناطیسی $0.6 \text{ web}/m^2$ که عمود بر بره است قرار گیرد، یک ولتاژ هال ۸mV و یک جریان ۱۰mA ایجاد می‌شود، مطلوب است محاسبه (الف) تحرک حامل‌ها، (ب) چگالی حامل‌ها.

۹- یک نمونه نوع n از GaAs که چگالی حامل‌ها در آن 10^{16} cm^{-3} با همان ابعاد نمونه مساله ۸ مفروض است و در همان میدان قرار می‌گیرد (الف) ثابت هال در این نمونه، (ب) ولتاژ هال که در دو سر بره به وجود می‌آید، را محاسبه نمایید.

۱۰- هنگامی که ثابت هال را در بخش ۴-۱۰ به دست آوردیم؛ فرض کردیم که جرم حامل‌ها و در نتیجه تحرک آن‌ها همسان گرد است. ولی ملاحظه کردیم که بعضی از نیمه‌رساناها جرم بیضوی دارند.

(الف) نشان دهید که وقتی جریان در یک نمونه Si نوع n در امتداد جهت [۱۰۰] جریان یابد، ثابت هال با رابطه زیر بیان می‌شود:

$$R = - \frac{3 \mu_l^2 + 2 \mu_t^2}{ne (\mu_l + 2 \mu_t)^2}$$

که $\mu_l = \frac{e\tau}{m_l}$ و $\mu_t = \frac{e\tau}{m_t}$ به ترتیب تحرک‌های طولی و عرضی اند.

ب) با یاد آوری این که در سیلیسیوم $\frac{m_l}{m_t} \cong 5$ است، ثابت حال را به ازای $n = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ محاسبه نمایید.

ج) با این فرض که جریان الکتریکی در امتداد [۱۰۰] جریان یابد (با جهت گیری مناسب میدان مغناطیسی) مقدار R را محاسبه کنید (راهنمایی: توجه کنید که جمعیت ۶ دره با یکدیگر مساوی است).

۱۱- الف) نشان دهید که چگالی حالت‌های متناظر با یک سطح انرژی بیضوی برابر است با

$$g(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2}{h^3} \right) (m_t m_l)^{3/2} E^{1/2}$$

که m_t و m_l به ترتیب جرم‌های عرضی و طولی‌اند. (سطح انرژی بیضوی در نظر گرفته شده است).

ب) اگر در عبارت فوق عبارت $m_t m_l = m_d^2$ را جایگزین کنیم، در آن صورت $g(E)$ فرم استاندارد برای یک جرم کروی (رابطه ۶-۶) را خواهد داشت که در آن m_d جایگزین m_e شده است. به این دلیل جرم m_d معمولاً جرم مؤثر چگالی حالت‌ها نامیده می‌شود. با در نظر گرفتن طبیعت چند دره‌ای نوار رسانش در Ge، m_d را برای این ماده پیدا کنید (نتایج را بر حسب واحد m_0 بیان کنید).

۱۲- وقتی یک حامل بار (مثلاً الکترون) در Si جرم بیضوی دارد، تحرک نیز ناهمسان گرد است. تحرک‌های طولی و عرضی μ_l و μ_t نسبت معکوس با جرم‌ها دارند، یعنی همان طور که از رابطه (۳۱-۶) به دست می‌آید $\frac{\mu_l}{\mu_t} = \frac{m_t}{m_l}$ (زمان برخورد همسان گرد است) در جدول‌هایی نظر جدول ۳-۶ تحرک $\mu = \frac{(\mu_l + 2\mu_t)}{3}$ معمولاً آمده است. (این میانگین برای یک جرم بیضوی یا کروی است).

الف) μ_l و μ_t را برای سیلیسیوم محاسبه کنید.

ب) یک میدان الکتریکی در جهت [۱۰۰] اعمال می‌گردد، میدان آن قدر قوی است که الکترون‌ها را گرم می‌کند (داغ می‌شوند)؛ ولی به دلیل اختلاف تحرک حامل‌ها در جهت‌های عرضی و

طولی، درّه‌ها با آهنگ‌های مختلفی گرم می‌شود. تعیین کنید کدام درّه داغ‌تر از درّه‌های دیگر می‌شود.

(ج) میدان الکتریکی‌ای را حساب کنید که در آن دمای الکترون‌های داغ 1000°K می‌شود (شبکه در دمای اتاق است). زمان و اهلهش انرژی را $10^{-12} \times 2$ بگیرید. (فرض کنید که تحرک مستقل از میدان باشد).

(د) فرض کنید که درّه‌ها در حالت شبه تعادل نسبت به یکدیگر باشند. سپس الکترون‌ها از یک درّه سرد به یک درّه داغ انتقال یابند و جمعیت درّه‌ها دیگر مساوی نباشد، کسری از الکترون‌های کل را که هنوز در درّه‌های داغ در میدان محاسبه شده در مساله ۱۲- (ج) باقی می‌مانند پیدا کنید.

(ه) راجع به رفتار غیر اهمی که نتیجه‌ای از انتقال بین درّه‌ای است بحث کنید. Γ را بر حسب ϵ تا میدان‌هایی که سه برابر میدان محاسبه شده در مساله ۱۲- (ج) است رسم کنید.

۱۳- مقدار میدانی را تخمین بزنید که یک انتقال مناسب الکترونی از درّه مرکزی به درّه ثانویه در GaAs صورت می‌گیرد. [یادآوری: انرژی جذب شده توسط یک الکترون، در بازه زمانی که از مرتبه‌ی بزرگی یک عمر متوسط است بایستی از مرتبه اختلاف انرژی بین درّه‌ها باشد].

۱۴- (الف) انرژی فوتون آستانه، برای جذب اساسی تابش مستقیم در GaAs در دمای اتاق را محاسبه کنید.

(ب) طول موج مربوطه را تعیین کنید.

(ج) در کدام طول موج ضریب جذب مساوی 1000 cm^{-1} می‌شود.

۱۵- فرض کنید که شما یک فیزیکدان حالت جامد هستید، و یک مهندس مواد از شما سؤال می‌کند چرا وقتی در نور مرئی به سیلیسیم نگاه کنیم، جلای فلزی دارد ولی وقتی در نور فرو سرخ به آن نگاه کنیم شفاف است؟ پاسخ شما چیست؟

۱۶- (الف) بلندترین طول موج نور جذب شده در اتم‌های بخشنده‌ی یونیده As در Si را تعیین کنید.

(ب) با استفاده از جدول ۱-۶، مساله ۱۶- (الف) را برای اتم‌های پذیرنده Ga در Si تکرار کنید.

۱۷- یک باریکه نوری تکفام بر بره‌ای از GaAs ذاتی به ابعاد $3 \times 2 \times 0.3 \text{ cm}$ می‌تابد در کدام فرکانس ضریب جذب مساوی $5.0 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ است. شدت باریکه $W \text{ cm}^{-2}$ 5×10^{-4} و نمونه در دمای اتاق است.

(الف) شار فوتونی فرودی بر بره را محاسبه نمایید.

(ب) در چه عمقی شدت به میزان ۵٪ مقدار آن در سطح کاهش می‌یابد.

(ج) تعداد زوج الکترون-حفره‌هایی را که در واحد زمان در بره آفریده می‌شود، محاسبه کنید. (فرض کنید که باریکه ورودی تماما در خلال گذار اساسی جذب شود.)

(د) افزایش رسانایی $\Delta\sigma$ مربوط به نور دهی را محاسبه کنید. زمان ترکیب مجدد را 10^{-4} s بگیرید، (ثابت دی الکتریک GaAs مساوی $10/4$ است).

۱۸- رابطه انیشتین (رابطه ۸۱-۶) را بین تحرک و ضریب جذب برقرار نمایید. نمونه‌ای به شکل میله در نظر بگیرید که ولتاژی در امتداد میله به آن اعمال می‌گردد ولی چون مدار باز است، جریانی برقرار نمی‌شود. حالا نمونه، هم یک میدان الکتریکی و هم یک گرادیان چگالی دارد. آمار ماکسول - بولتزمن را برای حامل‌ها به کار برید.

۱۹- به طور تجربی مشخص شده است که تحرک در Ge به صورت $T^{-1/66}$ بستگی دارد. تحرک

این ماده در دمای اتاق $s - \text{cm}^2/\text{Volt}$ 3900 است. ضریب جذب را در دمای اتاق ($T=300 \text{ K}$)

و در دمای نیتروژن مایع (77 K) محاسبه کنید.

۲۰- فرض کنید که چگالی الکترون‌ها در Ge نوع n در دمای اتاق به طور خطی در خلال یک بازه 2 mm از 10^{16} cm^{-3} به صفر کاهش می‌یابد.

(الف) جریان پخش را محاسبه نمایید.

(ب) مقدار میدان الکتریکی لازم برای تولید یک جریان سوق مساوی با جریان پخش قسمت (الف) چقدر است؟ از مقدار متوسط چگالی برای تعیین جریان سوق استفاده کنید.

(ج) دیاگرامی رسم کنید که جهت میدان را نشان دهد.

فصل هفتم

نیمه رساناها II : قطعات

- ۷-۱ مقدمه
- ۷-۲ پیوند p-n : یکسو کننده‌ها
- ۷-۳ پیوند p-n : خود پیوند
- ۷-۴ ترانزیستور پیوندی
- ۷-۵ دیود تونل
- ۷-۶ دیود گان
- ۷-۷ لیزر نیمه‌رسانا
- ۷-۸ ترانزیستور اثر میدان، لامپ نیمه‌رسانا و قطعات دیگر
- ۷-۹ مدارهای مجتمع و میکرو الکترونیک

در فصل ۶ راجع به اصول فیزیکی که بر رفتار نیمه‌رساناها حاکم است بحث شد. در این فصل کاربردهای این اصول را در قطعات الکترونیکی مورد توجه قرار می‌دهیم. توسعه این قطعات (بخصوص ترانزیستورها)، علاقه فراوانی در مطالعه فیزیک حالت جامد، علم مواد و مواد نیمه‌رسانا ایجاد کرده است. از اوایل دهه ۱۹۵۰، پژوهش در زمینه‌ی نیمه‌رساناها، درک ما را از ساختار این مواد گسترش داده است.

این فصل را با مطالعه‌ی خواص پیوند $p-n$ شروع می‌کنیم و خاصیت یکسو کنندگی این پیوند را توضیح می‌دهیم. سپس نشان می‌دهیم چگونه از ترکیب چنین پیوندهایی، ترانزیستور پیوندی ایجاد می‌شود که به عنوان یک تقویت کننده عمل می‌کند. این ترانزیستور به لحاظ کاربردهای عملی از مهم‌ترین قطعات حالت جامد است. سپس راجع به قطعات میکروموج که بر مبنای رسانایی دیفرانسیلی منفی کار می‌کنند (بویژه دیودهای تونل و گان) و همچنین لیزر نیمه‌رسانا و قطعات دیگر نیمه‌رسانا بحث می‌کنیم. بخش آخر این فصل راجع به مدارهای مجتمع است که اهمیت روزافزونی در قطعات حالت جامد دارند.

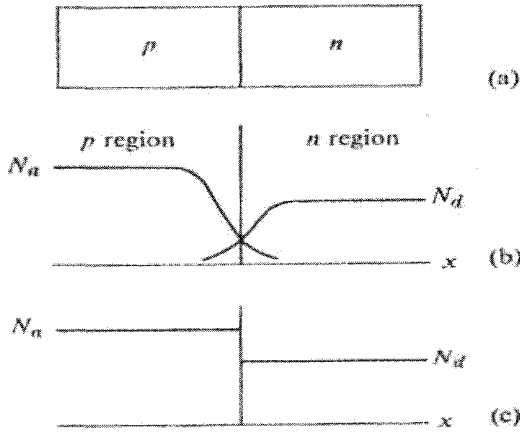
۲-۷ پیوند $p-n$ ، یکسو کننده‌ها

پیوند $p-n$ یک نیمه‌رسانای تک بلور است که از دو ناحیه‌ی مجاور یعنی یک نیمه‌رسانای نوع n و یک نیمه‌رسانای نوع p تشکیل یافته است (شکل ۷-۱ الف).

ناحیه‌ی n با ناخالصی‌های بخشنده و ناحیه‌ی p با ناخالصی‌های پذیرنده آلایده شده است. تغییرات چگالی اتم‌های بخشنده N_d و پذیرنده N_a در امتداد پیوند و در همسایگی آن در شکل (۷-۱ ب) رسم شده است. چنین پیوندی که چگالی‌های ناخالصی تدریجاً تغییر می‌کند پیوند تدریجی^۱ نامیده می‌شود. پیوند ناگهانی^۲ پیوندی است که همچون شکل (۷-۱ ج) ناخالصی‌ها به طور ناپیوسته تغییر می‌کند. چگالی اتم‌های بخشنده N_d در ناحیه‌ی n مقداری ثابت و در ناحیه‌ی p صفر است. چگالی اتم‌های پذیرنده رفتار مشابهی دارد. برای سادگی بحث، در این جا تنها پیوند ناگهانی را بررسی می‌کنیم. زیرا بدون درگیر شدن با پیچیدگی‌های غیرضروری ریاضی می‌توان مفهوم فیزیکی آن را تصور کرد. توجه داشته باشید که یک پیوند ناگهانی صرفاً نمی‌توان ایجاد کرد چون ناخالصی‌ها تا حدودی در طول پیوند پخش می‌شوند.

1. graded

2. abrupt



شکل ۷-۱. (الف) یک پیوند p-n (ب) پیوند تدریجی، (ج) پیوند ناگهانی.

وقتی از پیوند صحبت می‌کنیم، منظورمان ناحیه‌ای است که نواحی p و n به هم می‌رسند. در واقع دو قطعه‌ی مختلف به هم نپیوسته‌اند؛ بلکه پیوند، یک قطعه‌ی بلور است از همان ماده نیمه‌رسانا، و طرفین آن به گونه‌ای متفاوت آلایده شده‌اند.

جالبترین خاصیت پیوند این است که حتی وقتی پیوند در حالت تعادل است یک اختلاف پتانسیل در دو سر آن ایجاد می‌شود. این اختلاف پتانسیل، پتانسیل تماس نامیده می‌شود و معمولاً مقدار آن در محدوده‌ی ۰/۱-۱/۰ ولت است. برای توضیح این که چگونه پتانسیل تماس ایجاد می‌شود، یک پیوند p-n را در مرحله‌ی اولیه آن یعنی درست هنگامی را که پیوند ایجاد شده است در نظر می‌گیریم. در آن لحظه، در ناحیه‌ی n فقط الکترون‌ها و در ناحیه‌ی p فقط حفره‌ها وجود دارند و چگالی حامل‌های آزاد در دو طرف پیوند برابر است. میدان الکتریکی در همه‌جا صفر است زیرا بار حامل‌های آزاد با بار ناخالصی‌های یونیده مانند الکترون‌ها و اتم‌های بخشنده یونیده در ناحیه n معادلند. به هر جهت علی‌رغم اینکه میدان الکتریکی حضور ندارد، وضعیت در حال تعادل نیست. الکترون‌ها در امتداد پیوند از ناحیه‌ی n به ناحیه‌ی p پخش می‌شوند و به طور مشابه حفره‌ها از ناحیه p به ناحیه‌ی n پخش می‌شوند. حامل‌های آزاد به این دلیل پخش می‌شوند که در ابتدا یک گرادیان چگالی بزرگ در طول پیوند، هم برای الکترون‌ها و هم برای حفره‌ها وجود دارد و همانطور که در بخش ۱۶-۶ ملاحظه شد، چنین گرادیانی منجر به یک جریان پخش می‌شود که در جهت کاهش چگالی است. بنابراین در شکل (۷-۱ الف) الکترون‌ها به طرف چپ و حفره‌ها به

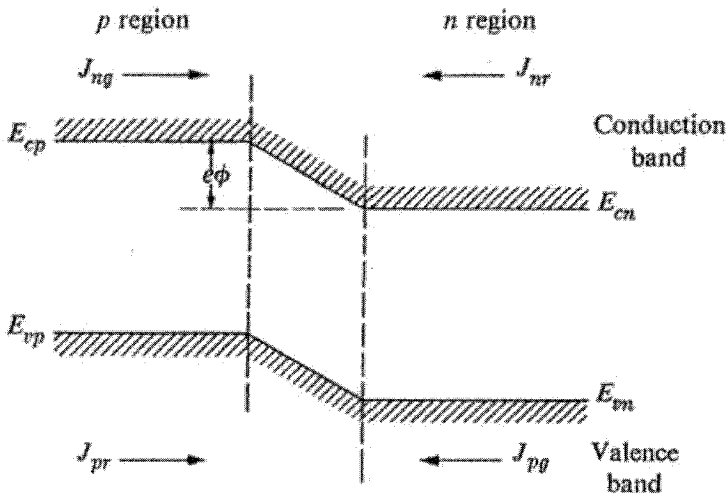
طرف راست پخش می‌شوند.

جریان پخش نمی‌تواند به طور نامتناهی ادامه یابد، زیرا با پخش الکترون‌ها به ناحیه‌ی p ، آن ناحیه یک بار خالص منفی کسب می‌کند. این بار با ترک حفره‌ها از ناحیه‌ی p و پخش در طرف n افزایش می‌یابد. اثر خالص جریان پخش این است که ناحیه‌ی p نسبت به ناحیه‌ی n ، به طور منفی باردار می‌شود. در نتیجه در آن جا یک اختلاف پتانسیلی ایجاد می‌شود که همان پتانسیل تماس است که در بالا اشاره شد.

شکل (۷-۲) موقعیت نوارهای رسانش و ظرفیت را در نزدیکی پیوند نشان می‌دهد.^۱ به دلیل انتقال بار، انرژی طرف p نسبت به طرف n افزایش می‌یابد. (طرف p بار خالص منفی کسب می‌کند). با فرض این که پتانسیل تماس ϕ است، اختلاف انرژی بین دو طرف $e\phi$ است. (مطابق قرارداد معمول در تئوری الکترومغناطیس، پتانسیل طرف n به اندازه مقدار ϕ بیش‌تر از پتانسیل طرف p است. در فیزیک حالت جامد، انرژی الکترون را می‌توان رسم کرد و از آنجا که الکترون یک بار منفی $-e$ دارد، همانگونه که در شکل ۷-۲ نشان داده شده است، طرف p انرژی الکترونی بیش‌تری دارد.)

حضور پتانسیل تماس باعث برقراری جریانهای پخش می‌شود. حالا در واقع یک میدان الکتریکی مساوی $-\frac{d\phi}{dx}$ وجود دارد که بر پیوند اثر می‌کند و در برابر پخش بیش‌تر الکترون‌ها و حفره‌ها مقابله می‌کند. با مراجعه به شکل ۷-۲ ملاحظه می‌کنیم که از الکترون‌های موجود در نوار رسانش در طرف n ، فقط آنهایی که انرژی جنبشی‌شان بیش‌تر از سد پتانسیل ϕ است قادرند به طرف p پخش شوند. همانطور که انتقال بار ادامه می‌یابد، پتانسیل به افزایش خود ادامه می‌دهد و بنابراین شار پخشی کاهش می‌یابد تا با شار الکترونی که از طرف p به طرف n جریان می‌یابد به تعادل برسند. این شار، شار تولیدی نامیده می‌شود و منشأ آن در پدیده‌ی زیر است: در طرف p ، الکترون‌ها و حفره‌ها به طور پیوسته در اثر حرارت آفریده می‌شوند؛ این تولید به دما بستگی دارد. به طور هم‌زمان این الکترون‌ها و حفره‌ها مجدداً با هم ترکیب می‌شوند. ولی در هر دمایی تعداد معینی از الکترون‌ها و حفره‌ها وجود دارد و همانطور که در بخش ۷-۶ بحث شد، چگالی نسبی آنها به چگالی ناخالصی‌ها بستگی دارد.

۱- در یک پیوند واقعی، گوشه‌هایی نیز که در شکل نشان داده شده است، گرد شده‌اند، ولی این نکته در بحث حاضر از اهمیت چندانی برخوردار نیست.



شکل ۷-۲ پیوند p-n از نقطه نظر نوار انرژی. پتانسیل تماس ϕ و شارهای مختلف متناظر با پیوند نشان داده شده‌اند.

الکترون‌ها در ناحیه p به صورت یک شار الکترونی به ناحیه n جریان می‌یابند زیرا تعدادی از آنها در خود ناحیه پیوند سرگردان هستند. این الکترون‌ها در اثر یک میدان الکتریکی قوی در داخل پیوند به سرعت به ناحیه n برگردانده می‌شوند. بنابراین اگر به یک الکترون به تنهایی بنگریم، دو شار در امتداد پیوند وجود دارد: (۱) - جریانی که از طرف n به طرف p برقرار است و مربوط به چگالی بزرگ الکترونی در ناحیه p-n است و شار باز ترکیب J_{nr} ^۱ نامیده می‌شود مربوط به این واقعیت است که الکترون‌هایی که به ناحیه p جریان می‌یابند سرانجام با حفره‌های آنها ترکیب می‌شوند. (۲) - شار تولیدی J_{ng} که از طرف p به طرف n جریان می‌یابد؛ که مربوط به تولید و در نتیجه روبش الکترون‌ها توسط میدان پیوند است. حالت تعادل وقتی ایجاد می‌شود که این دو شار مساوی باشند.

$$J_{nro} = J_{ngo} \quad (7-1)$$

به همین ترتیب الکترون‌ها در نوار ظرفیت نیز، در طول پیوند جریان می‌یابند. یک شار باز ترکیب J_{pr} وجود دارد که از طرف p به طرف n جریان می‌یابد و یک شار تولیدی حفره که از طرف

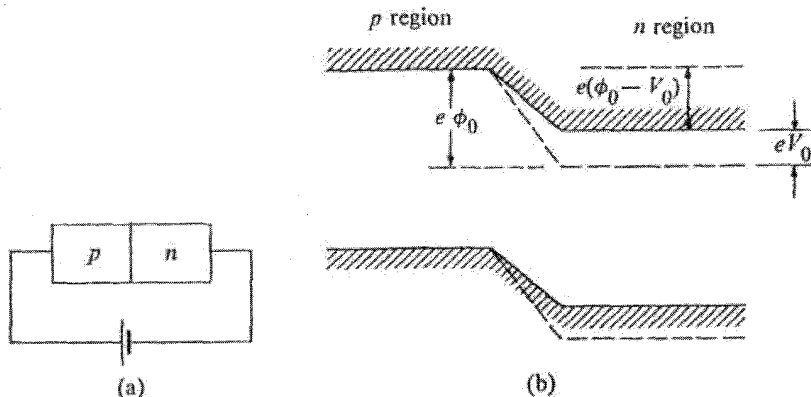
۱- در این فصل ما می‌باید بین جریان ذرات و جریان الکتریکی مربوط به آن تفاوت قائل شویم. جریان ذرات مربوط به پخش یعنی $D(\partial n / \partial x)$ شار پخش نامیده می‌شود و با J نمایش داده می‌شود. جریان الکتریکی مربوط به آن جریان خوانده و با J نمایش داده می‌شود. بنابراین برای الکترون‌ها و حفره‌ها به ترتیب داریم $I_p = +eJ_p$ و $I_n = -eJ_n$

مخالف جریان می یابد. در حالت تعادل این شارها نیز بایستی مساوی باشند.

$$J_{pro} = J_{pgo} \quad (7-2)$$

بنابراین وضعیت تعادل یک وضعیت دینامیکی است. شارها، به طور پیوسته در طول پیوند جریان دارند. ولی از آن جا که شارها برای هر دو نوع حامل به طور جداگانه یکدیگر را خنثی می کنند، انتقال بار بیش تری وجود ندارد.

حال می توانیم خاصیت یکسو سازی پیوند p-n را توضیح دهیم. فرض کنیم ولتاژ خارجی V_0 به طریقی به پیوند اعمال می گردد که مانند شکل ۷-۳ (الف) ناحیه ی p مثبت باشد (ناحیه ی p به قطب مثبت باطری وصل می شود). این روش اتصال ولتاژ به پیوند بایاس مستقیم نامیده می شود. اثر این بایاس در شکل ۷-۳ (ب) نشان داده شده است. انرژی ناحیه ی n به اندازه ی مقدار eV_0 افزایش می یابد.



شکل ۷-۳ (الف) اتصال الکتریکی بایاس مستقیم یک پیوند p-n (ب) اثر این بایاس مستقیم روی نمودار انرژی - نوار یک پیوند. خطوط خطچین موقعیت لبه های نوار بدون هیچگونه بایاس (در تعادل) را نشان می دهند.

حالا ببینیم این چه اثری بر شارهایی که در بالا بحث شد، دارد - با توجه به این که وضعیت حاضر نامتعادل است - از جریانهای الکترونی شروع می کنیم، ابتدا ملاحظه می کنیم که V_0 تأثیری بر شار تولیدی ندارد. یعنی؛

$$J_{ng} = J_{ngo} \quad (7-3)$$

زیرا هنوز میدان داخل پیوند آنقدر قوی است که الکترونهایی که از ناحیه ی p می آیند را جارو کند (به شرطی که $V_0 < \phi_0$). از طرف دیگر شار باز ترکیب J_{nr} به طور قابل ملاحظه ای از V_0

تأثیر می‌پذیرد. از آن جا که الکترون‌ها در طرف n با سد پتانسیلی مواجه می‌شوند که ارتفاع آن به اندازه‌ی مقدار eV_0 کاهش یافته است، حالا شار باز ترکیب با ضریب $e^{eV_0/kBT}$ افزایش می‌یابد. با فرض این که الکترون‌ها از آمار ماکسول - بولتزمن پیروی می‌کنند، خواهیم داشت؛

$$J_{nr} = J_{nro} e^{eV_0/kBT} \quad (۷-۴)$$

بنابراین یک جریان خالص الکترون از طرف n به طرف p وجود دارد. جریان الکتريکی واقعی از چپ به راست است زیرا الکترون‌ها بار منفی دارند و مقدار جریان برابر است با:

$$I_n = e(J_{nr} - J_{ng}) = eJ_{ngo} (e^{eV_0/kBT} - 1) \quad (۷-۵)$$

که از معادلات (۷-۱) الی (۷-۴) استفاده کردیم.

اعمال یک بایاس مستقیم منجر به ایجاد یک جریان الکتريکی حفره‌ای (شبيه رابطه‌ی ۷-۵) می‌شود. همان گونه که در شکل (۷-۳ ب) ملاحظه می‌شود، چنین بایاس مستقیمی منجر به افزایش جریان الکتريکی باز ترکیب حفره‌ای می‌شود زیرا سد پتانسیل نیز به مقدار eV_0 کاهش می‌یابد. (در مورد دی‌اگرام انرژی، می‌توان حفره را به عنوان جایی از هوا در نظر گرفت که تمایل به سرریزی دارد). این امر منجر به افزایش جریان الکتريکی با ضریب $e^{eV_0/kBT}$ می‌شود، در حالی که شار تولیدی به همان اندازه‌ی قبل باقی می‌ماند. بنابراین جریان الکتريکی که توسط حفره‌ها حمل می‌شود برابر است با:

$$I_p = e(J_{pr} - J_{pg}) = eJ_{pgo} (e^{eV_0/kBT} - 1) \quad (۷-۶)$$

جریان الکتريکی کل جمع جریان‌هایی است که توسط الکترون‌ها و حفره‌ها حمل می‌شوند. از آن جا که I_n و I_p هر دو در یک جهت هستند (از قطب مثبت به قطب منفی باطری)، بر مبنای روابط (۷-۵) و (۷-۶) داریم:

$$I = I_n + I_p = e(J_{ngo} - J_{pgo}) (e^{eV_0/kBT} - 1)$$

که به شکل زیر نوشته می‌شود.

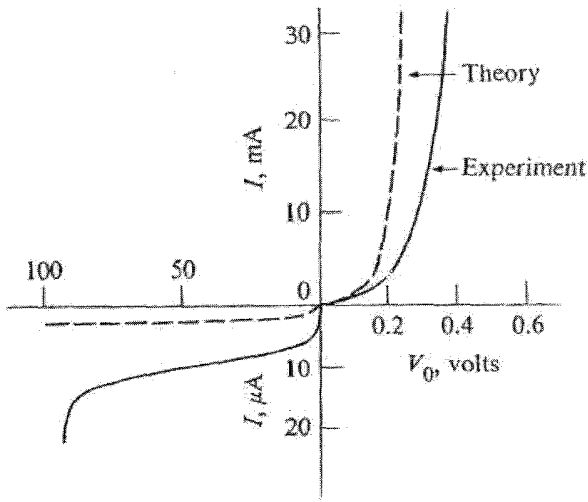
$$I = I_0 (e^{eV_0/kBT} - 1) \quad (۷-۷)$$

$$I_0 = e(J_{ngo} - J_{pgo}) \quad (۷-۸)$$

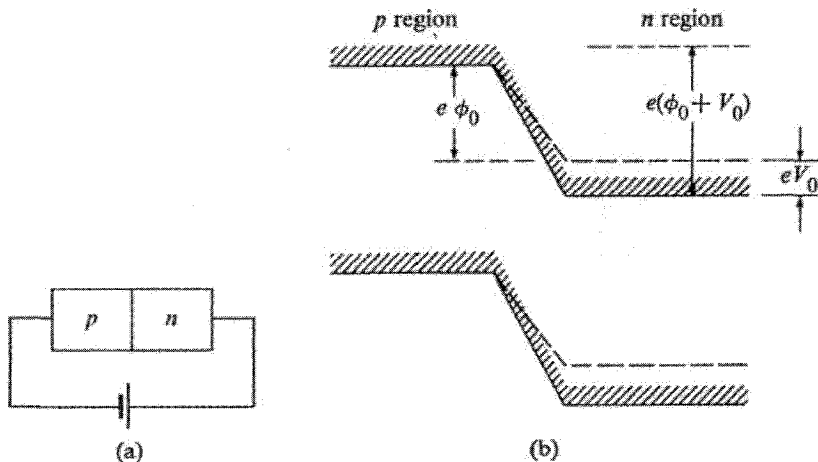
(توجه کنید که I_0 مستقل از پتانسیل بایاس V_0 است). در شکل ۷-۴، I بر حسب V_0 رسم شده است؛ ملاحظه می شود که I بر حسب V_0 به سرعت افزایش می یابد. بستگی I به V_0 اساساً نمایی است، این را می توان با توجه به این که معمولاً $k_B T / e \gg eV_0$ است از رابطه ی $(7-7)$ به دست آورد. (در دمای اتاق $k_B T / e \approx 0.025$) بنابراین، با تقریب خوبی می توان نوشت

$$I \approx I_0 e^{eV_0 / k_B T} \quad (7-9)$$

رابطه ی $I - V_0$ (رابطه ی $(7-7)$) را برای یک بایاس مستقیم به دست آوردیم. حال رابطه ی متناظری برای بایاس معکوس به دست می آوریم. در بایاس معکوس، پیوند $p-n$ به گونه ای بایاس می شود که طرف p به قطب منفی (مانند شکل ۷-۵الف) متصل می شود. اثر چنین بایاسی بر دیاگرام تراز انرژی در شکل ۷-۵ب) نشان داده شده است. ملاحظه می شود که ارتفاع پتانسیل حالا به مقدار eV_0 افزایش یافته است. در این جا نیز جریان های الکتریکی باز ترکیب و تولیدی هم برای الکترون ها و هم برای حفره ها وجود دارد. برای درک اثر V_0 می توانیم روشی مشابه با بایاس مستقیم به کار بریم. نتیجه این می شود که شارهای تولیدی باز هم از V_0 تأثیر نمی پذیرد، زیرا میدان پیوند هنوز آنقدر قوی است که بتواند روبش را کامل کند. از طرف دیگر، چون ارتفاع سد پتانسیل افزایش می یابد، شار تولیدی برای هر دو ی الکترون ها با ضریب $e^{-eV_0 / k_B T}$ افزایش می یابد.



شکل ۷-۴ جریان بر حسب ولتاژ (مشخصه ی $I - V_0$) برای یک پیوند که خاصیت یکسوسازی را نشان می دهد. ربع اول صفحه ی $I - V_0$ مربوط به شرط بایاس مستقیم و ربع سوم به بایاس معکوس مربوط است. به تغییر مقیاس بین این ربع ها توجه کنید.



شکل ۷-۵ الف) اتصال بایاس معکوس (ب) اثر آن بر لبه‌های نوارهای انرژی

حالا تعداد کمی از الکترون‌ها انرژی جنبشی کافی دارند تا از سد پتانسیل $e(\phi_0 + V_0)$ بگذرند. جریان الکتریکی کل از طرف n به طرف p (از قطب مثبت به قطب منفی) برابر است با:

$$\begin{aligned} I &= I_n + I_p = e(J_{ngo} - J_{nr}) + e(J_{pgo} - J_{pr}) \\ &= e J_{ngo} (1 - e^{-eV_0/kBT}) + e J_{pgo} (1 - e^{-eV_0/kBT}) \\ I &= I_0 (1 - e^{-eV_0/kBT}) \end{aligned} \quad (7-10)$$

که I_0 از رابطه‌ی (۷-۸) به دست می‌آید. معادله‌ی (۷-۱۰) رابطه‌ی $I - V_0$ برای یک بایاس مستقیم است. از آن جا که در شرایط معمولی $eV_0 \gg k_B T$ است، جمله‌ی نمایی در رابطه‌ی (۷-۸) آنقدر کوچک است که می‌توان آن را نادیده گرفت. بنابراین برای یک بایاس مستقیم رابطه‌ی ساده‌ی زیر را داریم.

$$I = I_0 \quad (7-11)$$

یعنی جریان مقداری ثابت و مستقل از V_0 است.

دو معادله‌ی (۷-۷) و (۷-۱۰) را می‌توان با هم ترکیب کرد و به صورت معادله زیر نوشت.

$$I = I_0 (e^{eV_0/kBT} - 1) \quad (7-12)$$

که برای بایاس مستقیم مثبت و برای بایاس معکوس منفی در نظر گرفته می‌شود. مقدار مثبت I مبین این است که جریان الکتریکی در طول پیوند از طرف p به طرف n جریان می‌یابد. در حالی که مقدار منفی I نمایانگر جریان در خلاف جهت فوق است. نمودار کامل I بر حسب V_0 با

استفاده از رابطه‌ی (۷-۱۲) و منظور کردن بایاس منفی در شکل (۷-۴) رسم شده است. روشن است که جریان در بایاس مستقیم خیلی بزرگتر از جریان در بایاس معکوس است (به ازای مقدار یکسان $|V_0|$)؛ یعنی پیوند به عنوان یک یکسو کننده عمل می‌کند و جریان‌هایی را که از طرف p به n برقرارند را بهتر از جریان‌های معکوس عبور می‌دهد.

جریان اشباع

مقدار چگالی جریان معکوس نوعاً در حدود $10^{-5} \text{ A} - \text{cm}^{-2}$ یا $10 \mu\text{A} / \text{cm}^{-2}$ است. جریان مستقیم بستگی شدیدی به ولتاژ دارد و مقدار نوعی آن برای یک بایاس 0.2V مساوی 100mA است.

ما در این جا یک فرض ضمنی کرده‌ایم. وقتی ولتاژ بایاس V_0 اعمال می‌شود، تمام این ولتاژ در طول ناحیه‌ی پیوند ظاهر می‌گردد و چیزی از آن به قسمت‌های دیگر ناحیه‌ی p و n اعمال نمی‌گردد. عبارت صحیح‌تر این است که پیوند مقاومت خیلی بیش‌تری نسبت به قسمت‌های دیگر نمونه دارد. زیرا همان‌طور که در بخش ۷-۳ خواهیم دید، در ناحیه‌ی پیوند حامل‌های آزاد بسیار کم‌اند. از آن جا که قسمت عمده‌ی مقاومت نمونه در ناحیه‌ی پیوند آن است و جریان الکتریکی معمولاً خیلی زیاد نیست، اگر ولتاژ پیوند را همان ولتاژ خارجی اعمال شده به نمونه بگیریم، تقریب خوبی است.

اگر ولتاژ معکوس خیلی بزرگ شود، در نهایت یک فروریزش الکتریکی رخ می‌دهد. در این نقطه جریان الکتریکی ناگهان به شدت افزایش می‌یابد. مسئله فروریزش خود یک مسئله جالب است. دو مکانیسم را می‌توان در نظر گرفت:

- (۱) فروریزش بهمنی که در آن بعضی از الکترون‌ها توسط یک ولتاژ معکوس بزرگ شتاب می‌گیرند و انرژی بسیار زیاد لازم برای برانگیختگی زوج الکترون - حفره را کسب می‌کنند، که اگر این انرژی بسیار زیاد باشد، می‌تواند زوج الکترون - حفره‌های دیگری را برانگیخته و بهمنی از آن‌ها ایجاد کند. (۲) فروریزش زنر که بر مبنای این است که در ولتاژهای خیلی زیاد، ضخامت (نه ارتفاع) سد پتانسیل معکوس بین دو طرف پیوند خیلی کوچک می‌شود و پدیده‌ی کوانتومی تونل‌زنی ممکن می‌گردد. در آن نقطه جریان به سرعت افزایش می‌یابد. (پدیده‌ی تونل‌زنی در پیوند $p-n$ در بخش ۷-۵ مربوط به دیود تونل بحث شده است). در محدوده‌ی ولتاژهای پایین‌تر ($\approx 4\text{V}$) مکانیسم زنر قالب است. در حالی که در ولتاژهای بالاتر ($\approx 8\text{V}$) فروریزش بهمنی مکانیسم غالب می‌شود. در ناحیه‌ی میانی ولتاژها هر دو مکانیسم به طور هم زمان اتفاق می‌افتد.

حال می‌خواهیم عبارت صریحی برای جریان اشباع، (رابطه‌ی ۷-۸) استخراج کنیم. فقط حالت بایاس مستقیم را در نظر می‌گیریم و با دقت بیش‌تری به فرآیند رسانش نگاه می‌کنیم. جریان توسط الکترون‌ها و حفره‌ها، هر دو، حمل می‌شود. ابتدا راجع به جریان حفره‌ها بحث می‌کنیم در بایاس مستقیم، سد پتانسیل به اندازه‌ی eV_0 کاهش می‌یابد و حفره‌های اضافی از ناحیه‌ی p که در آن‌جا حامل‌های اکثریت هستند به ناحیه‌ی n که در آن‌جا حامل‌های اقلیت هستند، تزریق می‌شوند (شکل ۷-۶)

در طرف n ، این حفره‌ها آزادانه پخش می‌شوند که گویی هیچ میدان الکتریکی وجود ندارد. ولی به دلیل باز ترکیب از فرونی چگالی در خلال یک طول L_p کاسته و به مقدار تعادل خود P_{n0} می‌رسد. بنابراین می‌توان برای چگالی حفره‌های اضافی در ناحیه‌ی n نوشت:

$$P_{n1}(x) = P_n(x) - P_{n0} = (P_{n1})_{x=0} e^{-x/L_p} \quad x > 0 \quad (7-13)$$

که $(P_{n1})_{x=0}$ مقدار چگالی حفره‌های اضافی در طرف راست و بلافاصله بعد از پیوند است. چگالی حفره‌ها در ناحیه‌ی n به طور نمایی کاهش می‌یابد (شکل ۷-۶ ب). حال می‌توان فهمید جریان حفره‌ها چگونه ایجاد می‌شوند: این جریان یک جریان خالص پخش است که از گرادیان پیوسته‌ی حفره‌ها در ناحیه‌ی n ناشی می‌شود. البته منشاء اصلی این جریان، تزریق پیوسته‌ی حفره‌ها از ناحیه‌ی p به ناحیه‌ی n است. بنابراین ملاحظه می‌کنیم که در حالت بایاس مستقیم، جریان الکتریکی مربوط به تزریق و در نتیجه پخش حامل‌های اقلیت است.

برای محاسبه‌ی جریان حفره‌ها، لازم است که مقدار $(P_{n1})_{x=0}$ یا $(P_n)_{x=0}$ را بدانیم. دلیل این‌که $(P_{n1})_{x=0}$ با مقدار تعادل P_{n0} متفاوت است، این است که سر پتانسیل به اندازه‌ی eV_0 کاهش یافته است. بنابراین از آمار بولتزمن داریم:

$$(P_n)_{x=0} = P_{n0} e^{eV_0/kBT} \quad (7-14)$$

که با مقایسه‌ی این رابطه با رابطه‌ی (۷-۱۳) در نقطه‌ی خواهیم داشت:

$$(P_n)_{x=0} = P_{n0} (e^{eV_0/kBT} - 1) \quad (7-15)$$

با جایگزینی این مقدار در رابطه‌ی (۷-۱۳) چگالی حفره‌های اضافی در ناحیه‌ی p به دست می‌آید:

$$P_{n1} = P_{n0} (e^{eV_0/kBT} - 1) e^{-x/L_p} \quad (7-16)$$

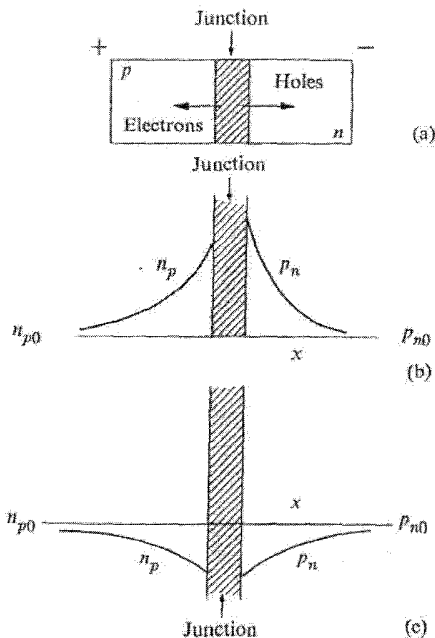
با استفاده از قانون فیک (رابطه‌ی ۶-۸۰) شار پخش حفره‌ای به دست می‌آید:

$$J_{np} = -D_p \frac{\partial P_{n1}}{\partial x} = -D_p \frac{\partial P_{n1}}{\partial x}$$

اگر با استفاده از رابطه‌ی (۷-۱۶) در نقطه‌ی $x=0$ این جریان را محاسبه کنیم و آن را در e ضرب کنیم تا به یک جریان الکتریکی تبدیل شود، خواهیم داشت:

$$(J_{pn})_{x=0} = \frac{eD_p p n_0}{L_p} (e^{eV_0/k_B T} - 1) \quad (7-17)$$

جریان حفره‌ای را در نقطه‌ای خاص در طرف راست (درست بلافاصله بعد از پیوند) محاسبه کردیم، ولی این جریان که مربوط به حفره‌ها است در هر نقطه‌ای از بلور در طرف راست پیوند جریان می‌یابد. می‌توانیم جریان الکترونی را نیز با استدلالی مشابه به دست آوریم. بایاس مستقیم، الکترون‌ها از ناحیه‌ی n به ناحیه‌ی p تزریق می‌شوند (باز هم تزریق حامل‌های اقلیت)، در ناحیه‌ی p (میدان وجود ندارد) پخش می‌شوند و یک جریان الکترونی پخش را ایجاد می‌کنند. توزیع خاص الکترون‌های اضافی با معادله‌ای شبیه معادله‌ی (۷-۱۶) ولی با تغییراتی مناسب نشان داده می‌شود و شکلی شبیه شکل (۷-۶) دارد، جریان الکترونی در طرف چپ و بلافاصله بعد از پیوند به شکل رابطه‌ی (۷-۱۷) است. این رابطه جریان در هر ناحیه‌ای از بلور را به دست می‌دهد.



شکل ۷-۶ (الف) تزریق حامل‌های اقلیت در طول یک پیوند بایاس مستقیم. (ب) تغییرات خاص چگالی‌های حامل‌های اقلیت در شرط بایاس مستقیم، که نشان دهنده‌ی آثار تزریق حامل‌های اقلیت است. (ج) تغییرات خاص حامل‌های اقلیت در شرط بایاس معکوس که نشان دهنده‌ی آثار کاهش حامل‌های اقلیت در نزدیکی پیوند است.

جریان کل I با رابطه‌ی $I_n + I_p$ بیان می‌شود. بنابراین با استفاده از رابطه‌ی (۷-۱۷) و مانسته‌ی آن برای الکترون‌ها داریم.

$$I = e \left(\frac{D_p p_{n0}}{L_p} + \frac{D_n n_{p0}}{L_n} \right) (e^{eV_0/k_B T} - 1) \quad (۷-۱۸)$$

ملاحظه می‌شود که رابطه‌ی فوق همان فرم رابطه‌ی (۷-۷) را دارد. با در نظر گرفتن رابطه‌ی (۷-۸) نتیجه می‌گیریم که جریان اشباع با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود:

$$I_0 = e (J_{n0} + J_{p0}) = e \left(\frac{D_p p_{n0}}{L_p} + \frac{D_n n_{p0}}{L_n} \right) \quad (۷-۱۹)$$

بدین ترتیب، جریان اشباع یا جریان تولیدی را بر حسب خواص مواد موجود در نمونه یعنی D_n ، D_p ، L_p ، L_n و بر حسب چگالی‌های تعادل n_{p0} و p_{n0} حامل‌های اقلیت در دو ناحیه‌ی پیوند محاسبه کردیم. معادله‌ی (۷-۱۸) نشان می‌دهد که می‌توان از این مواد به عنوان یکسو کننده استفاده کرد. اگر بخواهیم یکسو کننده را در شرایط جریان مستقیم به کار ببریم، می‌باید جریان معکوس را کوچک بگیریم. معادله‌ی (۷-۱۹) را بر حسب چگالی‌های اقلیت n_{p0} و p_{n0} و با استفاده از رابطه‌ی زیر بازنویسی می‌کنیم.

$$n_{n0} p_{n0} = p_{p0} n_{p0} = n_i^2(T) \quad (۷-۲۰)$$

$n_i^2(T)$ چگالی ذاتی است که تقریباً برابر است با $e^{-E_g/2k_B T}$ (بخش ۴-۶ را ملاحظه نمایید). بنابراین معادله‌ی (۷-۱۹) را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$I_0 = e n_i^2(T) \left(\frac{D_n}{L_n p_{p0}} + \frac{D_p}{L_p n_{n0}} \right) \quad (۷-۲۱)$$

ملاحظه می‌کنیم که حالا I_0 به شدت به دما بستگی دارد و گرچه این بستگی از بستگی کمیت‌های مختلف رابطه‌ی (۷-۲۱) به دما ناشی می‌شود، بیش‌ترین تأثیر از بستگی $n_i(T)$ به T ناشی می‌شود. از آن جا

که $n_i(T) \sim e^{-E_g/2k_B T}$ است. با انتخاب ماده‌ای با گاف انرژی بزرگ، می‌توان I_0 را کاهش داد. این دلیل اصلی برتری سیلیسیوم بر ژرمانیوم برای یکسو کننده‌هایی است که در شرایط جریان زیاد و دمای بالا کار می‌کنند.

حال به جریان حفره‌ای در ناحیه‌ی n (معادله‌ی ۷-۱۷) برمی‌گردیم: این درست است که چگالی حفره‌ای در اثر پخش حفره‌ها به طرف راست کاهش می‌یابد و در نتیجه جریان پخش که توسط این حفره‌ها حمل می‌شود نیز کاهش می‌یابد. ولی به دلیل باز ترکیب حفره‌ها، که درست به طرف راست پیوند است، الکترون‌های آن جا به شدت کاهش می‌یابد، الکترون‌های دیگری از باقیمانده

مدار به این ناحیه جریان می‌یابند تا بار را خنثی نگه دارند. این جابجایی الکترون‌ها، در نهایت باعث می‌شود که الکترون‌ها از منتهالیه سمت راست ناحیه n ، (جایی که نیمه‌رسانا در تماس با سیم فلزی مدار الکتریکی است) بیایند. این الکترون‌های تغییر مکان یافته جریان الکتریکی خود را در ناحیه n (که به طرف راست است) حمل می‌کنند. وقتی این جریان به جریان پخش حفره‌ها اضافه شود، جریان ثابتی نتیجه می‌شود که مقدار آن با رابطه‌ی (۷-۱۷) بیان می‌شود. بنابراین همچنان که در طول پیوند در ناحیه n به طرف راست حرکت کنیم، کسر بیش‌تر و بیش‌تری از جریان توسط الکترون‌های تغییر مکان یافته حمل می‌شود. استدلال مشابهی را می‌توان در بحث مربوط به جریان الکترونی در ناحیه p به کار بریم.

بازدهی تزریق η را در نظر می‌گیریم، همان‌طور که در بالا بیان شد، در یک بایاس مستقیم جریان توسط تزریق حامل‌های اقلیت، الکترون‌ها و حفره‌ها هر دو، حمل می‌شود. چه کسری از این جریان را الکترون‌ها و چه کسری از آن را حفره‌ها حمل می‌کنند؟ این کسرها را که کارآیی‌های تزریق الکترون و حفره می‌نامیم، به ترتیب به η_n و η_p نمایش می‌دهیم. با در نظر گرفتن روابط (۷-۱۹)، (۷-۲۰) و (۷-۲۱) می‌توان نوشت:

$$I_o = en_i^2(T) \left(\frac{D_n}{L_n p_{p0}} + \frac{D_p}{L_p n_{n0}} \right)$$

$$\eta_p = 1 - \eta_n \quad (7-22)$$

از این روابط ملاحظه می‌کنیم که اگر D ها و L ها برای الکترون‌ها و حفره‌ها قابل مقایسه باشند؛ خواهیم داشت:

$$\eta_n \cong \frac{n_{n0}}{n_{n0} + p_{p0}} \quad \text{و} \quad \eta_p \cong \frac{p_{p0}}{n_{n0} + p_{p0}} \quad (7-23)$$

یعنی بیش‌ترین جریان توسط حامل‌های حمل می‌شوند که در ناحیه‌ی آلاییده، حامل‌های اکثریت باشند. در یک پیوند متقارن، که $n_{n0} = p_{p0}$ است. از رابطه‌ی (۷-۲۳) نتیجه می‌شود که جریان به طور مساوی توسط الکترون‌ها و حفره‌ها حمل می‌شود.

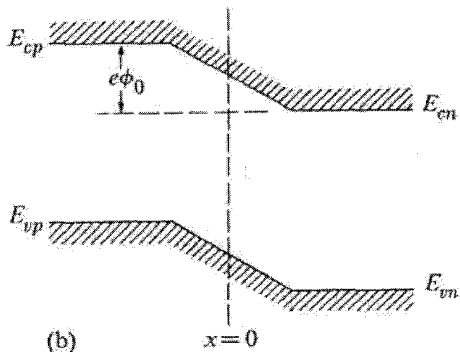
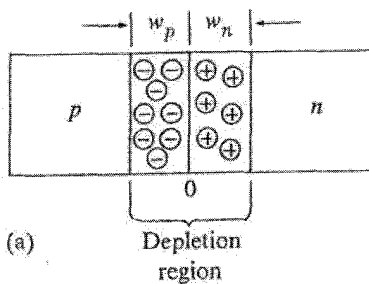
هنوز راجع به اثر بایاس معکوس، بر چگالی حامل‌ها در نزدیکی پیوند بحث نکرده‌ایم. یادآوری می‌کنیم که تأثیر بایاس معکوس این است که ارتفاع سد پتانسیل به اندازه $|V_o| e$ افزایش می‌یابد. اثر این را بر حفره‌های نزدیک پیوند بررسی می‌کنیم. جریان تولیدی از ناحیه n به

ناحیه p بدون تغییر باقی می ماند ولی جریان باز ترکیب از ناحیه p به ناحیه n کاهش می یابد. بنابراین بیش تر حفره ها از ناحیه n به p جریان می یابند و در نتیجه چگالی حفره ها در ناحیه n و در نزدیکی پیوند به کمتر از مقدار تعادل خود افت می کند. (شکل ۶-۷ ج). به طور مشابه چگالی الکترون ها در ناحیه p به کمتر از مقدار تعادل خود کاهش می یابد. بنابراین اثر کلی بایاس معکوس در حالت پایا، بیرون کشیدن حامل های اقلیت از ناحیه n نزدیک پیوند است.

۷-۳ پیوند $n-p$: خود پیوند

در بخش (۲-۷) خواص یکسو کنندگی یک پیوند $n-p$ را با استفاده از بحث آماری مربوط به توزیع حامل های آزاد در نزدیکی پیوند، به دست آوردیم. نیازی نیست که خواص خود پیوند، مثلاً پتانسیل تماس و عرض پیوند، را بررسی کنیم، زیرا این کمیت ها برای بحث ما که بیش تر حول جریان است، اساسی نیستند. ولی لازمی درک کامل تر پیوند $n-p$ داشتن اطلاعاتی راجع به خواص پیوند است. این خواص را هم در حالت تعادل و هم در حضور یک ولتاژ بایاس در نظر می گیریم اتفاقاً یافته های ما در این بخش، مطالب بخش ۲-۷ را تغییر نمی دهد؛ بلکه آن ها را به نوعی تأیید می کند.

ابتدا حالت تعادل را در نظر می گیریم. به دلیل چگالی بزرگ حامل های حاضر در پیوند هنگامی که پیوند شکل گرفته است، حامل های اکثریت به طرف مقابل پخش می شوند این مهاجرت حامل ها از دو طرف پیوند، لایه ای بر جای می گذارد، که از حامل های آزاد خالی می شود. (شکل ۷-۷ الف). در طرف n پیوند، لایه ای به ضخامت W_p به وجود می آید که تهی از الکترون است. ولی از آن جا که بخشنده های یونیده هنوز حضور دارند، این لایه بار خالص مثبت دارد. تهی لایه ای دیگری در طرف p پیوند و به ضخامت W_p به وجود می آید که بار منفی دارد. بنابراین نتیجه می گیریم که همسایه ی بلافضل پیوند از یک لایه دوتایی باردار (یا یک لایه ی دو قطبی) تشکیل شده است. این ناحیه ی از پیوند تهی لایه ^۱ یا ناحیه ی بار فضایی ^۲ نامیده می شود. در این ناحیه در نتیجه ی لایه ی دوبایی باردار، یک میدان قوی وجود دارد (جهت میدان به طرف چپ است)



شکل ۷-۷ الف) تهی لایه (لایه دوگانه) در پیوند. ب) موقعیت لبه‌های نوار در پیوند با پتانسیل تماس ϕ_0

خارج ناحیه‌ی تهی لایه، چگالی حامل‌ها از پیوند تأثیر نمی‌پذیرد و بنابراین یکنواخت است. پس به دلیل خنثی بودن بار، میدان الکتریکی یکنواخت است. شکل (۷-۷) ب) تأثیر پیوند بر نمودار تراز انرژی و همچنین سد پتانسیل $e\phi_0$ را آنطور که در بخش ۷-۲ بحث شد نشان می‌دهد (پتانسیل تماس تعادل که در بخش ۷-۲ به ϕ_0 نمایش داده شد با ϕ_0 متفاوت است).

حال پتانسیل تماس ϕ_0 را محاسبه می‌کنیم. همان طور که از شکل (۷-۷) ب) ملاحظه می‌شود:

$$\phi_0 = E_{cp} - E_{cn} \quad (۷-۲۴)$$

که E_{cp} و E_{cn} به ترتیب انرژی‌های لبه نوارهای رسانش در ناحیه‌های p و n هستند. این انرژی‌ها را می‌توان به صورت زیر به چگالی‌های تعادل مربوط کرد:

$$n_{p0} = U_c e^{-(E_{cp} - E_F)/kBT} \quad \text{و} \quad n_{n0} = U_c e^{-(E_{cn} - E_F)/kBT} \quad (۷-۲۵)$$

که $U_c = 2(m_e k_B T / 2\pi\hbar^2)^{3/2}$ (این را با مراجعه به رابطه‌ی ۶۸ می‌توان دریافت). در این جا E_F انرژی فرمی است که چون راجع به وضعیت تعادل بحث می‌کنیم، همان انرژی در طول پیوند

است. با به دست آوردن نسبت n_{p0}/n_{po} از رابطه‌ی (۷-۲۵) و استفاده از رابطه‌ی (۷-۲۴) خواهیم داشت.

$$\frac{n_{n0}}{n_{po}} = e^{e\phi_0/k_B T} \quad (۷-۲۶)$$

این رابطه، ϕ_0 را بر حسب چگالی‌های تعادل الکترون در دو طرف پیوند می‌دهد. ولی مناسب‌تر است که ϕ_0 را بر حسب حامل‌های اکثریت در دو طرف یعنی n_{po} و p_{po} بیان کرد. از رابطه‌ی (۷-۲۶)، n_{po} را بر حسب p_{po} به دست می‌آوریم و با استفاده از رابطه‌ی (۷-۲۰) رابطه‌ای بر حسب چگالی ذاتی n_i به دست می‌آوریم. از ترکیب این دو رابطه خواهیم داشت:

$$\phi_0 = \frac{k_B T}{e} \log \left(\frac{n_{n0} p_{po}}{n_i} \right) \quad (۷-۲۷)$$

از بخش ۶-۶ یادآوری می‌کنیم که معمولاً $n_{no} \approx N_d$ و $p_{po} \approx N_a$ که N_a و N_d به ترتیب چگالی‌های اتم‌های بخشنده و پذیرنده هستند. این، بدین معنی است که اساساً تمام ناخالصی‌ها یونیده هستند، (بجز در دماهای خیلی پایین؛ مثلاً کوچک‌تر از $50^\circ K$) بنابراین پتانسیل تماس با رابطه‌ی نهایی زیر بیان می‌شود.

$$\phi_0 = \frac{k_B T}{e} \log \left(\frac{N_d N_a}{n_i} \right) \quad (۷-۲۸)$$

این پتانسیل به خواص نیمه‌رسانا، میزان آلاینده‌گی و دما بستگی دارد. برای این که ایده‌ای راجع به بزرگی‌های این مقادیر داشته باشیم، یادآوری می‌کنیم که در دمای اتاق $k_B T/e \approx 0.025$ Volt است. برای میزان آلاینده‌گی $N_d=N_a=10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ، و برای ژرمانیوم 0.3 Volt $\phi_0 = 0.3$ به دست می‌آید.

یافتن پتانسیل تماس نسبتاً آسان است. برای یافتن کمیت‌های دیگر مانند عرض پیوند و میدان الکتریکی داخل آن بایستی سخت‌تر کار کرد. برای به دست آوردن این‌ها، معمولاً نیاز به حل یک معادله پواسن داریم که منجر به یک معادله دیفرانسیل غیر خطی می‌شود. فرض کنید که یک پیوند صفحه‌ای داریم که عمود بر محور x ها است. در این حالت، معادله پواسن برای پتانسیل ϕ به صورت زیر تحویل می‌شود.

$$\frac{d^2 \phi}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\epsilon} \quad (۷-۲۹)$$

که $p(x)$ چگالی بار و ϵ ثابت دی الکتریک محیط است. خواص نیمه رسانا و ناخالصی ها از طریق $\rho(x)$ وارد می شود. در کلی ترین حالت می توان برای یک نقطه‌ی اختیاری x نوشت:

$$\rho(x) = e [p(x) + N_d(x) - n(x) - N_a(x)] \quad (۷-۳۰)$$

که $N_d(x)$ و $N_a(x)$ سهم اتم‌های یونیده بخشنده و پذیرنده و $p(x)$ و $n(x)$ سهم حامل‌ها است، (همه در نقطه‌ی x). اگر این بحث کلی را دنبال کنیم، می باید کمیت‌های $p(x)$ و $n(x)$ و غیره را محاسبه کنیم که همه تابعی از $\phi(x)$ هستند، و وقتی همه‌ی این‌ها را در رابطه‌ی (۷-۳۰) و سپس در رابطه‌ی (۷-۲۹) جایگزین نماییم یک معادله دیفرانسیل غیر خطی به دست می آید.

به جای این کار، با فرض این که در ناحیه‌ی آلاییدگی هیچ نوع حاملی وجود ندارد یعنی کاملاً تهی است، می توان بحث را ساده تر کرد. در واقع این فرض‌ها قابل حصول اند. با یادآوری شکل (۷-۷) در ناحیه‌ی تهی لایه، معادله (۷-۲۹) حالا به صورت زیر درمی آید:

$$\frac{d^2 \phi_n}{dx^2} = -\frac{eN_d}{\epsilon}, \quad 0 < x < w_n \quad (۷-۳۱)$$

$$\frac{d^2 \phi}{dx^2} = \frac{eN_d}{\epsilon}, \quad -w_p < x < 0$$

در این جا N_d و N_a چگالی ناخالصی‌های یونیده در دو طرف پیوند هستند که مستقل از x می باشند. می خواهیم معادلات (۷-۳۱) را با توجه به شرایط مرزی زیر حل کنیم: (i) میدان الکتریکی در خارج ناحیه‌ی تهی لایه صفر است (یادآوری می کنیم که $\epsilon = -d\phi/dx$) (ii) میدان الکتریکی در نقطه‌ی $x=0$ مرکز پیوند پیوسته است (iii) پتانسیل در $x=0$ پیوسته است (و مساوی صفر اختیار می شود، زیرا پتانسیل یک مقدار ثابت اضافی دارد). (iv) اختلاف پتانسیل بین دو انتهای تهی لایه، $x=w_p$ و $x=w_n$ مساوی ϕ_0 است که در بالا آن را محاسبه کردیم. یعنی حلی که ارائه کردیم محدود به حالت تعادل است. حل معادلات (۷-۳۱) در شرایط مرزی فوق، سر راست است و تفصیل آن را به عنوان تمرین مطرح خواهیم کرد. نتیجه چنین است:

$$w_n N_d = w_p N_a \quad (\text{الف}) \quad (۷-۳۲)$$

$$w_p = \left[\gamma \phi_0 \cdot N_d / N_a + N_a \right]^{1/2} \quad (\text{ب})$$

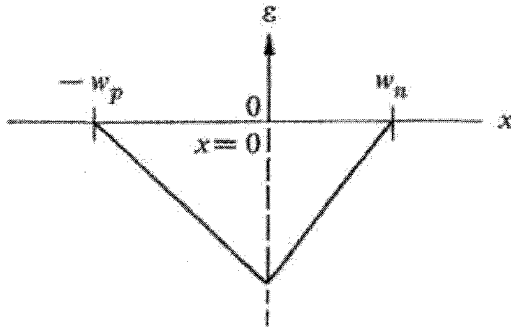
$$w_p = \left[\gamma \phi_0 \cdot N_d / N_a (N_d + N_a) \right]^{1/2} \quad (\text{ج})$$

$$w = w_n + w_p = [\epsilon_0 \phi_0 / e (1/N_d + 1/N_a)]^{1/2} \quad (د)$$

$$\epsilon_0 = \epsilon_0 / w \quad (ه)$$

که ϵ_0 بزرگی میدان الکتریکی در مرکز پیوند ($x=0$) است. از رابطه‌ی (الف) ملاحظه می‌کنیم که بار کل دو تهی لایه از نظر بزرگی مساوی‌اند. از رابطه‌ی (ب) یا (ج) در می‌یابیم که $w_n \approx N^{-1/2}$ (بستگی ϕ_0 به N_d ضعیف است زیرا لگاریتمی است)، بنابراین هر چه میزان آلایندگی بیشتر باشد، لایه نازک‌تر است. معادله‌ی (ب) همچنین بیان می‌کند میزان آلایندگی زیاد منجر به یک پیوند نازک‌تر می‌شود. بالاخره معادله‌ی (ه) بیان می‌کند که ϵ_0 مساوی دو برابر میانگین میدان (ϕ_0/w) روی تمام پیوند است.

شکل ۷-۸ نمودار تغییرات میدان در طول پیوند را نشان می‌دهد. (علامت منفی بدین معنی است که در شکل ۷-۷ میدان بطرف چپ است). مثال عددی برای Ge به صورت زیر مطرح می‌کنیم: $N_d = N_a = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ، $\phi_0 = 0.3 \text{ Volt}$ ، $w_p = w_n = 0.16 \mu$ ، $w = 0.33 \mu$ ، $\epsilon_0 = 21 \text{ kv/cm}$ عرض پیوند از مرتبه‌ی یک میکرون است و حضور میدان قابل ملاحظه است.^۱



شکل ۷-۸ تغییرات فضایی میدان الکتریکی در نزدیکی پیوند.

حال نتایج فوق را به حالت نامتعادل که در آن یک ولتاژ بایاس معین به پیوند اعمال می‌گردد، تعمیم می‌دهیم. با مشاهدات زیر می‌توانیم نتایج حالت نامتعادل را از حالت تعادل (رابطه‌ی ۷-۳۲) به دست آوریم. وقتی یک بایاس خارجی V_0 به پیوند اعمال گردد، تقریباً تمام این ولتاژ فقط در

۱- از پتانسیل تماس تعادل ϕ_0 نمی‌توان برای به دست آوردن جریان الکتریکی در یک مدار خارجی استفاده کرد. اگر پیوند به یک میله‌ی فلزی اتصال یابد که مدار را کامل کند، پتانسیل‌های تماس اضافی در فصل مشترک بین نیمه‌رسانا - فلز یعنی بین میله و دو طرف پیوند به وجود می‌آید و اثر این پتانسیل‌های تماس اضافی، حذف کامل پتانسیل اصلی ϕ_0 است. (بخش پرسش‌ها را ملاحظه نمایید).

دو سر ناحیه‌ی تهی لایه ظاهر می‌گردد و افت ولتاژ دو سر باقی‌مانده‌ی پیوند اساسا ناچیز است. یعنی

$$(۷-۳۳) \quad \text{ولتاژ دو سر ناحیه‌ی تهی لایه} = V_0 - \varnothing_0$$

بسته به این که بایاس مثبت یا منفی باشد، V_0 مثبت یا منفی است. توجیه رابطه‌ی (۷-۳۳) چنین است که چون ناحیه‌ی تهی لایه اساسا حامل بار ندارد، مقاومت خیلی زیادی دارد. حامل‌های بار به قسمت باقی‌مانده‌ی پیوند می‌روند، بنابراین مقاومت این قسمت کوچک است. چون دو مقاومت به صورت سری قرار می‌گیرند، تقریباً تمام ولتاژ در دو سر ناحیه‌ی با مقاومت زیاد ظاهر می‌شود. بهرجهت تقریب (۷-۳۳) برای بایاس معکوس بیش‌تر از بایاس مستقیم معتبر است، زیرا در بایاس مستقیم، جریان زیادی برقرار می‌شود و بنابراین مقداری از افت ولتاژ در دو سر ناحیه‌ی خارجی تهی لایه می‌افتد (اگر چه مقاومت آن کم است). معادله‌ی (۷-۳۳) معمولاً تقریب خوبی برای هر دو جهت است.

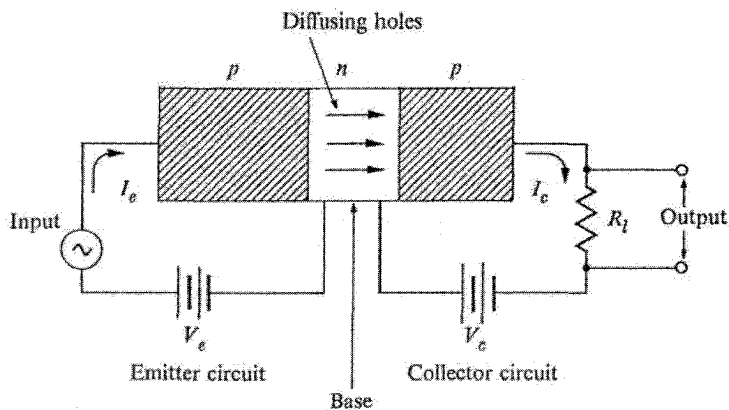
برای پیدا کردن عرض ناحیه‌ی تهی لایه و میدان در پیوند در حضور یک بایاس، با توجه به شرایط مرزی، معادله پواسن مناسب (با توجه به شرایط لرنزی) را حل می‌کنیم. روش دقیقاً مشابه حالت تعادل است، به جز این که بر طبق رابطه‌ی (۷-۳۳) در شرط مرزی (iv) به جای \varnothing_0 ، مقدار $\varnothing_0 - V$ را قرار می‌دهیم. یعنی برای بایاس مستقیم $\varnothing_0 - V$ و برای بایاس معکوس $|V| + \varnothing_0$ را قرار می‌دهیم. توجه کنید که $w \approx (\varnothing_0 - V_0)^{1/2}$ و $\varepsilon_0 \approx (\varnothing_0 - V_0)^{1/2}$ بنابراین برای بایاس مستقیم، ناحیه‌ی تهی لایه منقبض و میدان از مقدار تعادل خود کمتر می‌شود. همین‌طور اگر در حالت بایاس معکوس $\varnothing_0 \gg |V_0|$ که به سادگی قابل حصول است، در آن صورت، یعنی $|V_0| \approx \varepsilon_0$ و w هم میدان و هم عرض پیوند متناسب با جذر $|V_0|$ کاهش می‌یابند.

۷-۴ ترانزیستور پیوندی

در بین قطعات نیمه‌رسانا، ترانزیستور از همه مفیدتر است.^۱ این قطعه در صنعت مخابرات انقلاب ایجاد کرد و ایجاد تکنولوژی کامپیوتر را ممکن گردانید. در بین ترانزیستورهای موجود، ترانزیستور پیوندی، از متداول‌ترین آن‌هاست. بنابراین در این فصل ما فقط این نوع ترانزیستور را مورد بحث قرار می‌دهیم و به انواع دیگر ترانزیستور فقط اشاره‌ای خواهیم کرد.

۱- نام ترانزیستور در ابتدا به عنوان مختصر شده‌ی عبارت "Transferred resistor" به کار رفت. این نام گذاری با توجه به این واقعیت بود که عمل ترانزیستور، انتقال جریان از یک مدار به مدار دیگر است.

مفاهیم اساسی که یک ترانزیستور پیوندی p-n-p بر آن مبنا کار می‌کند، در شکل (۷-۹) نشان داده شده است. در این جا فقط ترانزیستور p-n-p بحث می‌شود و طرز کار پیوند n-p را می‌توان با توجه به تقارن آن دریافت.



شکل ۷-۹ مفاهیم اساسی و عمل ترانزیستور پیوندی.

قطعه‌ای از یک ماده‌ی بلور آن چنان آلائیده می‌شود که ناحیه‌ی میانی آن نوع n و نواحی ابتدا و انتهای آن نوع p باشد. به بیان دیگر، دو پیوند p-n داریم که از انتها و در ناحیه‌ی n، به یکدیگر متصل شده‌اند. پیوند طرف چپ بایاس مستقیم می‌شود و پیوند طرف راست بایاس معکوس. بایاس مستقیم پیوند و مدار آن، الکتروُد گسیلنده^۱ و پیوند بایاس معکوس و مدار آن، الکتروُد جمع کننده^۲ نام دارد (دلیل این نامگذاری بزودی معلوم می‌شود). ناحیه‌ی میانی n، پایه^۳ نامیده می‌شود. با مراجعه به شکل (۷-۹) و توجه به بحث قبلی در مورد پیوند p-n می‌توان به کار اصلی ترانزیستور به عنوان یک تقویت کننده پی برد. در طرف چپ بایاس مستقیم حفره‌ها را در طول پیوند و به طرف پایه گسیل می‌کند. بنابراین حفره‌ها به درون ناحیه‌ی پایه پخش می‌شوند تا این که توسط بایاس معکوس پیوند در طرف راست جمع شوند. این امر منجر به ایجاد یک جریان در مدار جمع کننده می‌شود. سیگنال ولتاژی که به مدار گسیلنده اعمال می‌گردد، باعث تزریق یک پالس حفره در پیوند گسیلنده می‌شود که بعد از پخش در پایه و رسیدن به جمع کننده به صورت یک پالس جریان ظاهر می‌شود و می‌توان آن را از یک مقاومت بار در مدار جمع کننده عبور داد. دلیل عمل

1. emitter
2. collector
3. base

تقویت کنندگی این است که بدون توجه به مقاومت بار R_1 در جریان‌هایی که در دو مدار جریان می‌یابند، اساساً مساوی یکدیگرند. بنابراین خروجی ولتاژ، V_i در دو سر R_1 می‌تواند خیلی بیش‌تر از سیگنال ورودی باشد و مورد مشابهی درباره‌ی توان‌های ورودی و خروجی برقرار است. حال به تحلیل ریاضی این مطلب می‌پردازیم.

ولتاژ و جریان در مدار گسیلنده را به V_e و I_i نمایش می‌دهیم؛ این دو کمیت با رابطه‌ی (۷-۱۲) به هم مربوط‌اند یعنی:

$$I_e = I_{e0} e^{eV_e/KBT} \quad (7-34)$$

که I_{e0} جریان اشباع در گسیلنده است. (در رابطه‌ی ۷-۱۲ از یک در برابر جمله‌نمایی صرف‌نظر می‌کنیم). همان‌طور که در بخش ۷-۲ ملاحظه شد، اعمال یک بایاس مستقیم، باعث می‌شود حفره‌ها به داخل ناحیه‌ی n پایه گسیل می‌شوند. حفره‌ها در پایه پخش می‌شوند و توسط پیوند جمع‌کننده، جمع می‌شوند، ولی ممکن است بعضی از این حفره‌ها در بین راه از بین بروند. فرض کنید کسر از این حفره‌ها باقی‌مانند. برای جریان جمع‌کننده می‌توان نوشت:

$$I_c = I_{c0} + \alpha I_e \quad (7-35)$$

که اولین جمله جریان اشباع جمع‌کننده است (در بایاس معکوس و $|V_c| \ll K_B T/e$)، و جمله دوم مربوط به حفره‌های باقی‌مانده است. از آن‌جا که I_{c0} خیلی کوچک است، می‌توان از آن چشم‌پوشی کرد و نوشت:

$$I_c \approx \alpha I_e \quad (7-36)$$

افت ولتاژ دو سر مقاومت بار برابر است با

$$V_1 = R_1 I_c = \alpha R_1 I_e \quad (7-37)$$

معادله‌ی فوق را می‌توان به شکل سُر راستی برای محاسبه‌ی بهره ولتاژ و همین‌طور بهره‌ی توان به کار برد. فرض کنید که یک سیگنال ورودی در مدار گسیلنده باعث افزایش جریان dI_e شود، از روابط (۷-۳۴) و (۷-۳۷) می‌توان بهره‌ی ولتاژ dV_1 / dV_e را محاسبه نمود.

$$\frac{dV_1}{dV_e} = \frac{\alpha R_1 I_e}{k_B T/e} \quad (7-38)$$

همین‌طور می‌توان بهره‌ی توان $\frac{dP_1}{dP_e}$ را حساب کرد. با نوشتن $P_1 = V_1 I_c$ و $P_e = V_e I_e$

دیفرانسیل گیری مناسب در می یابیم

$$\frac{dP_I}{dP_e} = \frac{\alpha^2 R_I I_e}{(k_B T / e)(1 + \log I_c / I_{e0})} \quad (۷-۳۹)$$

معادلات فوق، بهره‌ی dc سیگنال کوچک ترانزیستور را بیان می‌کند. اگر مقادیر عددی $I_{e0} = 10 \mu\text{A}$ و $I_c = 10 \text{mA}$ را در نظر می‌گیریم، در دمای $T = 300 \text{K}$ ، مقدار $k_B T / e$ تقریباً مساوی 0.025eV می‌شود. در این صورت $\alpha \approx 1$ و $R_I = 2 \times 10^6 \Omega$ می‌شود. بهره‌های ولتاژ و توان به ترتیب مساوی ۸۰۰ و ۲۰۰ به دست می‌آیند که مقادیر قابل ملاحظه‌ای هستند. بهره‌ی جریان dI_c / dI_e مساوی α (در رابطه‌ی ۷-۳۶) است. یعنی، مساوی کسری از حفره‌ها است که بین گسیلنده و جمع‌کننده باقی می‌مانند. واضح است که برای رسیدن به بیشینه‌ی بهره ولتاژ و توان، بایستی α را تا آن جا که ممکن است بزرگ کنیم. البته α نمی‌تواند از یک بیش‌تر شود، زیرا بعضی از حفره‌ها، (بابه حساب آوردن ترکیب مجدد)، در حالی که در ناحیه‌ی پایه پخش می‌شوند، از بین می‌روند.

دلیل دیگری برای این که چرا α کوچک‌تر از واحد است وجود دارد: جریان در پیوند گسیلنده تماماً توسط حفره‌هایی که بدرون پایه تزریق شده‌اند، حمل نمی‌شود، جزیی از این جریان توسط الکترون‌های تزریق شده از پایه به ناحیه‌ی p (در طرف چپ) حمل می‌شود (رابطه‌ی ۷-۲۲ و بحث مربوط را ملاحظه کنید). این الکترون‌ها بالاخره به داخل نواحی خارجی مدار حرکت می‌کنند و بنابراین در فرآیند تقویت‌کنندگی سهمی ندارند.

با منظور کردن هر دو عامل راندمان تزریق حفره و ضرایب باز ترکیب حفره، می‌توان نوشت:

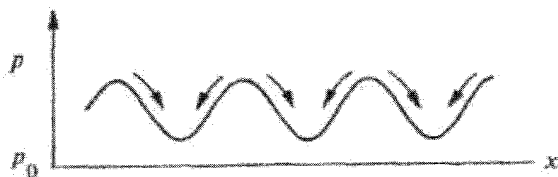
$$\alpha = \eta_p f \quad (۷-۴۰)$$

که η_p ، راندمان حفره (معادله‌ی ۷-۲۳) و f پارامتری است که ضریب ترابری پایه نامیده می‌شود. برای بیشینه کردن α ، می‌توان عرض پایه را کاهش داد به طوری که دو پیوند کاملاً نزدیک یکدیگر باشند، به این ترتیب f افزایش می‌یابد. همین‌طور می‌توان ناحیه‌ی p را بیش از ناحیه‌ی n آلاید (رابطه‌ی ۷-۳ را ملاحظه کنید) و η_p را افزایش داد. با یک طراحی مناسب (مثلاً به حداقل رساندن سطح ترکیب مجدد)، می‌توان α را به عددی نزدیک به یک، مثلاً ۰/۹۹ رساند.

یک محدودیت اساسی در کارکرد ترانزیستور پیوندی هست: محدودیت فرکانس پایین. از آن جا

که کارکرد ترانزیستور، ماهیتاً به پخش حفره‌ها در پایه بستگی دارد، در فرکانس‌های بالا، بواسطه‌ی فرآیند پخش ثانوی بین قله‌ها و دره‌های سیگنال، (همان‌طور که شکل ۷-۱۰ نشان می‌دهد) وضع پیچیده می‌شود. این، آثار افزایش سیگنال در فرکانس‌های بالا را از بین می‌برد.

در این جا وارد جزئیات نمی‌شویم ولی نتیجه‌ی آن این است که اساساً یک فرکانس بالای قطع وجود دارد که در فرکانس‌های بالاتر از آن ترانزیستور نمی‌تواند به‌طور کامل عمل کند.



شکل ۷-۱۰ پخش دینامیکی اضافی که در فرکانس‌های بالا ایجاد می‌شود.

این فرکانس، که به خواص پخش حفره‌ها و همین‌طور ضخامت پایه بستگی دارد با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود؛

$$\omega_D \cong \frac{\gamma D p}{L_D} \left[\frac{D p \tau_p}{L_p} - 1 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (7-41)$$

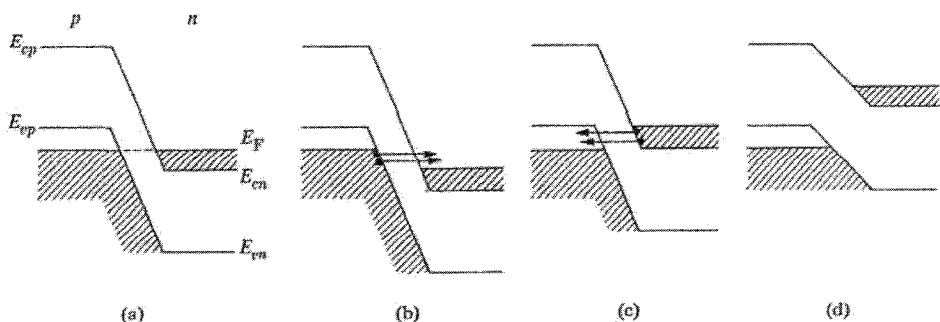
که τ_p زمان ترکیب مجدد و L_b عرض پایه است. مثلاً در ژرمانیوم، برای $L_b = 5 \times 10^{-3}$ Cm، $\nu_0 = 56 \mu\text{Hz}$ ، هر چه فرکانس قطع بیش‌تر باشد، عرض پایه باید کوچک‌تر اختیار گردد. ولی برای نازک کردن عرض پایه محدودیت تکنولوژیکی وجود دارد که باعث می‌شود ترانزیستور پیوندی به‌عنوان یک قطعه‌ی فرکانس پایین عمل کند. تحقیقات بر روی قطعات در ناحیه‌ی فرکانس‌های بالا، مثلاً در ناحیه‌ی میکروموج، منجر به تولید انواع دیگر ترانزیستورها بویژه انواعی نظیر نوسانگرگان که بعداً در این فصل بحث می‌شود گردیده است.

۷-۵ دیود تونل

دیود تونل را اِزاکی^۱ در سال ۱۹۵۸ اختراع کرد. این قطعه به خوبی می‌تواند به‌عنوان تقویت‌کننده یا نوسانگر کار کند. این دیود حتی در ناحیه‌ی میکروموج هم بخوبی کار می‌کند. اصولی که این

دیود بر اساس آن کار می‌کند به خوبی قابل درک است. ابتدا یک پیوند p-n تشکیل می‌دهیم که هر دو ناحیه‌ی n و p آن به شدت (مثلاً 10^{19} Cm^{-3}) آلاینده شده باشند. تحت چنین شرایط آلاینده‌گی شدید، پتانسیل تماس ϕ_0 بزرگ است؛ ناحیه‌ی بار فضایی (تهی لایه) خیلی باریک است، و همان طور که شکل (۷-۱۱ الف) نشان می‌دهد، میدان این ناحیه فوق‌العاده زیاد و در حدود 900 kv/cm است (معادله ۷-۳۲ را ملاحظه نمایید)

ترازهای ناخالصی نیز پهن می‌شوند و نوارهای ناخالصی را تشکیل می‌دهند که با نوارهای رسانش و ظرفیت هم‌پوشی پیدا می‌کنند. در واقع چگالی حامل‌ها آن چنان بزرگ است که الکترون‌ها و حفره‌ها از آمار فرمی - دیراک پیروی می‌کنند و تراز فرمی E_F در خود نوارها قرار می‌گیرد. این مطلب در شکل (۷-۱۱ الف) نشان داده شده است. این شکل همچنین نشان می‌دهد که در حالت تعادل، در طول پیوند یکسان است. حال ببینیم مشخصه‌ی $I-V_0$ برای چنین دیودی چگونه است.



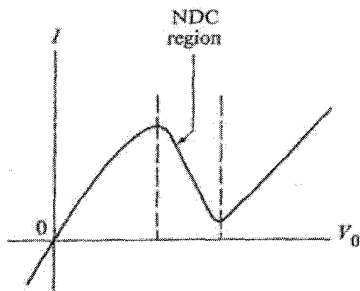
شکل ۷-۱۱ اساس دیود تونل (الف) موقعیت تعادل (ب) جریان تونلی زیاد برای بایاس معکوس (ج) جریان تونلی برای بایاس مستقیم کوچک. (د) جریان تونلی صفر برای بایاس مستقیم بزرگتر

ابتدا حالت بایاس معکوس را بررسی می‌کنیم (شکل ۷-۱۱ ب). از آن جا که نوار رسانش در ناحیه‌ی n به اندازه‌ی $|V_0| e$ پایین رفته است، الکترون‌های نوار ظرفیت در ناحیه‌ی p می‌توانند از سد پتانسیل تونل بزنند و به نوار رسانش در ناحیه‌ی n بروند. در این فرآیند یک جریان الکتریکی ایجاد می‌شود و جریان می‌یابد. فرآیند تونل زدن کاملاً ماهیت کوانتومی دارد و بستگی به این واقعیت دارد که تابع موج در مکانیک کوانتومی از یک سد پتانسیل عبور می‌کند. (کتاب آیزبرگ را ملاحظه نمایید). جریان تونلی فقط در صورتی قابل ملاحظه است که سد پتانسیل کاملاً نازک باشد. این شرط در شکل ۷-۱۱ ب نشان داده شده است. (توجه کنید که در شکل ۷-۱۱ الف اصل طرد مانع از تونل زدن می‌شود زیرا حالت‌های نهایی اشغال هستند). اثر بایاس معکوس این

است که حالت‌های خالی در ناحیه‌ی n و در ترازهای انرژی که موازی با ترازهای الکترون در ناحیه‌ی n هستند، ایجاد می‌شود. چگالی الکترون‌ها در نوار ظرفیت بزرگ است و میدان الکتریکی در ناحیه‌ی بار فضایی نیز بزرگ است. بنابراین یک جریان تونلی خیلی زیاد جریان می‌یابد. دیود تونل اساساً نمی‌تواند بایاس معکوس را تحمل کند و حتی در ولتاژهای خیلی پایین می‌توان آن را به عنوان قطعه‌ای که شکست زنر را نشان می‌دهد در نظر گرفت (بخش ۷-۲).

نقش جالب دیود تونل فقط هنگامی ظاهر می‌شود که در وضعیت بایاس مستقیم مورد بررسی قرار می‌گیرد. شکل (۷-۱۱ ج) اثر اعمال یک بایاس مستقیم را نشان می‌دهد. جریان به این دلیل برقرار می‌شود که الکترون‌های طرف n قادرند به درون حالت‌های خالی در بالای نوار ظرفیت طرف p تونل بزنند. در ابتدا با افزایش V_0 ، جریان افزایش می‌یابد و الکترون‌های بیش‌تری می‌توانند تونل بزنند. ولی فراتر از یک بایاس معین، تعداد حالت‌های خالی دسترس‌پذیر کاهش می‌یابد. با کاهش ارتفاع سد، بعضی از الکترون‌ها و حفره‌ها از بالای سد گذر می‌کنند.

شکل (۷-۱۲) مشخصه‌ی $I-V_0$ دیود تونل را نشان می‌دهد. نکته‌ی جالب منحنی، حضور یک ناحیه‌ی NDC^1 است که در آن افزایش ولتاژ منجر به کاهش جریان می‌شود. دیود تونل در ناحیه‌ی NDC را می‌توان یا به عنوان یک تقویت‌کننده و یا یک نوسانگر در یک مدار الکترونیکی مورد استفاده قرار داد.^۲



شکل ۷-۱۲. $I-V_0$ مشخصه‌ی برای یک دیود تونل

۱- رسانایی دیفرانسیلی منفی، Negative Diffrential Conductivity

۲- اساس فیزیکی تقویت‌کنندگی به صورت زیر است: وقتی یک سیگنال به یک عنصر مداری با مشخصه‌ی NDC اعمال گردد، جریان در خلاف جهت میدان تولید می‌شود. بنابراین انرژی جذب شده از عنصر و میدان سیگنال تقویت می‌شود. برای طراحی یک نوسانگر، عنصر NDC را به یک مقاومت که مقدار آن مساوی و در خلاف جهت عنصر است NDC وصل می‌کنند، مقاومت کل مدار صفر می‌شود و همین که یک نوسان شروع شود، بدون استهلاک ادامه می‌یابد.

بازده دیود تونل به نسبت جریان‌های قله به دره در شکل (۷-۱۲) بستگی دارد. (جریان دره دقیقاً به صفر نمی‌رسد. احتمالاً این به خاطر دنباله‌های چگالی حالت‌ها و یا بعضی از حالت‌های به دام افتادگی است). با اعمال یک آلاییدگی با چگالی زیاد، می‌توان نسبت فوق را به عدد ۱۵ رساند. با یک آلاییدی از مرتبه‌ی بزرگی 10^{25} Cm^{-3} جریان قله ممکن است واقعا بزرگ شود. دیودهای تونل از سیلیسیوم و آرسنید گالیوم و بعضی مواد دیگر ساخته می‌شوند.

از آن جا که فرآیند تونل زدن تقریباً به طور لحظه‌ای رخ می‌دهد، دیود تونل حتی در فرکانس‌های زیاد مثلاً ۱۰ GHz نیز می‌تواند عمل کند.

۷-۶ دیودگان^۱

دیودگان بر مبنای رسانایی دیفرانسیلی منفی (NDC) کار می‌کنند. این دیود را می‌توان به عنوان تقویت کننده، نوسانگر و یا قطعات مرتبط با آن‌ها به کار برد. خاصیت NDC دیودگان نتیجه‌ای است از انتقال الکترون‌ها از دره‌ی با انرژی پایین - تحریک زیاد، به دره‌ی با انرژی زیاد - تحریک کم و در حضور میدان‌های الکتریکی قوی (در GaAs و نیمه‌رساناهای دیگر با ساختار نواری مشابه). (بخش ۶-۱۱ را ملاحظه نمایید). یک مشخصه‌ی مهم دیودگان این است که یک قطعه کپه‌ای است یعنی قطعه‌ای است که کارکرد آن بستگی به خواص میکروسکوپی کل ماده دارد و نه به خواص سطحی پیوند p-n. دیودگان به عنوان یک مجموعه قبلاً مورد بحث قرار گرفت. مزیت مشخصه‌ی کپه‌ای دیودگان این است که تعداد حامل‌ها در یک قطعه‌ی کپه‌ای خیلی بیش‌تر از تعداد حامل‌ها در یک قطعه‌ی پیوندی است. (نامگذاری دیود بر دیودگان شاید مناسب نباشد زیرا این قطعه متقارن است و معمولاً از هر دو طرف به طور یکسان می‌توان از آن استفاده کرد).

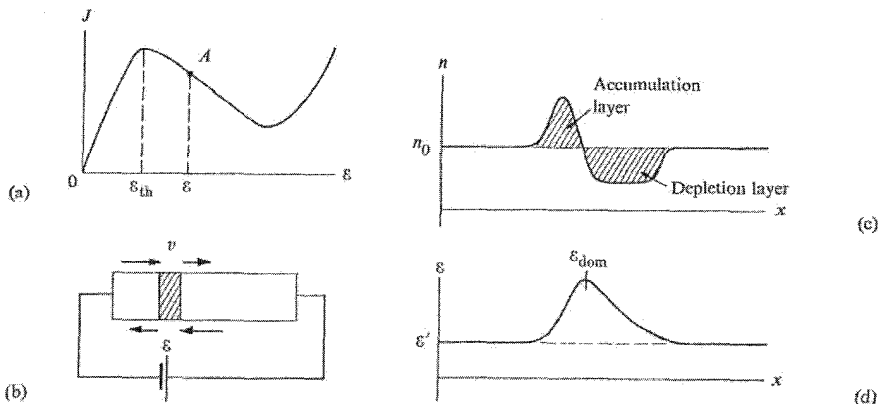
یک دیودگان در ناحیه‌ی NDC می‌تواند در چندین مد مختلف کار کند. بسته به خواص نمونه و همچنین مدار خارجی که نمونه به آن متصل است (بخش ۶-۱۱ را در نظر گرفتن نقش میدان الکتریکی در ایجاد یک NDC مرور کنید). ابتدا با مد گان شروع می‌کنیم که اولین مدی بود که کشف شد. در این مد نمونه به عنوان یک مولد میکرو موج عمل می‌کند که فرکانس آن در محدوده‌ی GHz است و با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

۱- یک بحث تفصیلی راجع به دیودگان و قطعات الکترونی دیگر در مرجع زیر آمده است.

$$v_0 = \frac{v_d}{L} \quad (7-42)$$

L طول نمونه و v_d سرعت سوق متوسط الکترون‌ها است. این رابطه مدگان را به عنوان یک اثر زمان عبور بیان می‌کند، زیرا زمان تناوب سیگنال مساوی زمان عبور الکترون از یک انتهای نمونه به انتهای دیگر آن است. چه چیزی در نمونه منتشر می‌شود که منجر به مشاهده‌ی یک سیگنال تناوبی می‌شود؟

فرض کنید نمونه طوری بایاس شده باشد که یک میدان یکنواخت $\varepsilon = v/L$ در داخل آن برقرار است. این میدان آنقدر بزرگ است که نمونه در ناحیه‌ی NDC باشد (شکل ۷-۱۳ الف)، یعنی $\varepsilon < \varepsilon_{th}$ ، که ε_{th} میدان آستانه است. می‌خواهیم نشان دهیم که این شرط، یک شرط ناپایدار است و بعید است مشاهده شود. شکل (۷-۱۳ الف) یک لایه‌ی نازک نمونه را نشان می‌دهد که به مقدار کمی الکترون اضافی دارد؛ یعنی $n > n_0$ است و چگالی تعادل یکنواخت در طول نمونه است. این لایه را لایه‌ی انبارش^۱ می‌نامند. وجود این لایه ممکن است مربوط به افت و خیز حرارتی الکترون‌ها یا به احتمال بیش‌تر مربوط به ناهمگنی مختصری در آلایش باشد. تحت شرایط عادی، لایه انبارش به سرعت از بین می‌رود و چگالی حامل‌ها اساساً در طول نمونه ثابت می‌ماند. ولی در شرایط غیر عادی NDC لایه‌ی انبارش رشد می‌کند.



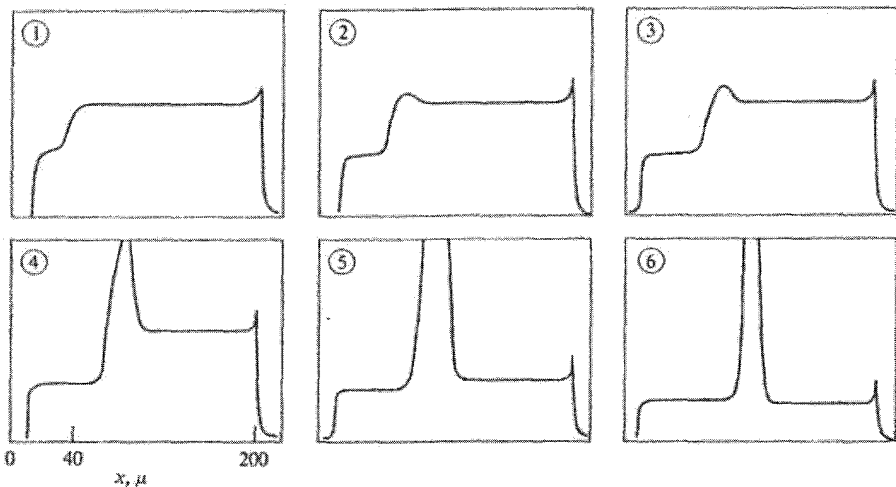
شکل ۷-۱۳ الف) نمودار J بر حسب ε که ناحیه‌ی NDC را نشان می‌دهد. ب) ناپایداری ناحیه‌ی NDC لایه‌ی عقبی (لایه‌ی انبارش) سریعتر از لایه‌ی جلویی آن حرکت می‌کند که این منجر به رشد بیش‌تر این ناحیه می‌شود. ج) چگالی n بر حسب فاصله‌ی x (د) میدان الکتریکی ε بر حسب x که نشان دهنده‌ی ناحیه‌ی با میدان زیاد است.

ابتدا توجه کنید که میدان یکنواخت \mathcal{E} در شکل (۷-۱۳ ب) بطرف چپ است، و الکترون‌ها به سمت راست سوق می‌یابند. همین‌طور توجه کنید که به خاطر سوق الکترون‌ها هم در داخل و هم در خارج لایه‌ی انبارش، خود لایه نیز سوق می‌یابد. به دلیل وجود بار خالص داخل لایه، میدان در نزدیکی آن دیگر یک‌نواخت نیست. میدان در لبه‌ی جلویی کمی بزرگ‌تر از میدان در لبه‌ی عقبی است (این را می‌توان به سادگی از قانون کولن و یا از معادله پواسن دریافت). شکل (۷-۱۳ الف) نشان می‌دهد که میدان بزرگ‌تر در ناحیه‌ی NDC به معنی سرعت کوچک‌تر است. بنابراین همین‌طور که لایه از کاتد به آند سوق می‌کند، به طور همزمان رشد هم می‌کند. رشد لایه سرانجام توسط آثار غیر خطی کنترل می‌شود (در این جا لازم نیست این آثار بررسی شود) تا این که لایه‌ی انبارش به شکل پایداری می‌رسد.

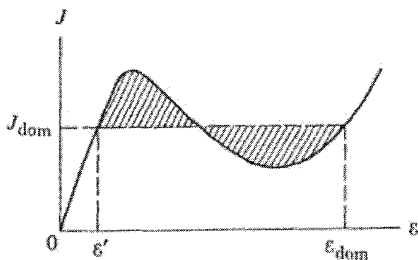
وضعیت واقعی حتی جالب‌تر از آنی است که در بالا توصیف شد. لایه‌ای که سوق می‌یابد یک تک لایه نیست بلکه یک لایه دو گانه است (شکل ۷-۱۳ ج). قسمت عقبی از یک لایه‌ی انبارش نازک تشکیل شده است ($n > n_0$)، در حالی که قسمت جلویی از یک تهی لایه پهن یافته است ($n < n_0$). وجود چنین لایه دو قطبی الکتریکی‌ای، توزیع میدان را آن‌گونه که در شکل (۷-۱۳ د) نشان داده شده است تغییر می‌دهد و یک میدان خیلی بزرگ در لایه دو قطبی تشکیل می‌شود. با نگاه کردن به توزیع میدان در طول نمونه، ملاحظه می‌کنیم که توزیع به دو قسمت شکافته می‌شود: یک ناحیه‌ی میدان قوی یا حوزه در لایه، و یک ناحیه‌ی میدان ضعیف در قسمت باقی‌مانده‌ی نمونه. با ملاحظه‌ی وضعیت دیودگان بر حسب حوزه میدان قوی، می‌توان به طور خلاصه، مدگان را این‌طور توصیف کرد: یک حوزه شروع به رشد در کاتد می‌کند، مادامی که به طرف آند سوق می‌یابد به رشد خود ادامه می‌دهد، بزرگ می‌شود تا این که سرانجام به آند می‌رسد و در آن جا فرو می‌ریزد و ناپدید می‌شود. این روند مجدداً تکرار می‌شود.

شکل (۷-۱۴) تصویر کامپیوتری رشد و سوق حوزه را نشان می‌دهد. هر وقت حوزه ناپدید می‌شود، یک پالس جریان (یک افزایش در جریان) در مدار خارجی تولید می‌شود و این همان چیزی است که در آغاز گان مشاهده کرد. شکل حوزه‌ی میدان در طول نمونه به طور تجربی نیز اندازه‌گیری شده است. جالب است که خواص حوزه‌ی میدان قوی، مانند سرعت و میدان داخلی آن را تعیین کنیم. فرمول دقیق این عوامل پیچیده است و فقط با حل عددی معادلات می‌توان جواب‌ها را به دست آورد. بنابراین ما فقط یک بررسی تقریبی خواهیم داشت. فرض کنید که

میانگین میدان داخل حوزه با ϵ_{dom} و میدان خارجی با ϵ' نشان داده شود (شکل ۷-۱۳ د). این دو میدان را به صورت زیر تعیین می‌کنیم.



شکل ۷-۱۳ مراحل که توسعه‌ی زمانی حوزه میدان قوی در یک نمونه‌ی ۲۰۰ میکرونی GaAs در دمای اتاق را نشان می‌دهد (Mc. Cumber and Chynowenth)



شکل ۷-۱۵ قاعده‌ی سطوح مساوی

با استفاده از منحنی J بر حسب ϵ ، یک خط افقی طوری رسم می‌کنیم که دو ناحیه‌ی هاشور زده سطح‌های مساوی داشته باشند (شکل ۷-۱۵). سپس ϵ' و ϵ_{dom} را آن گونه که در شکل (۷-۱۵) نشان داده شده است تعیین می‌کنیم. این روش تعیین میدان‌ها، قاعده سطح‌های مساوی نامیده می‌شود. با استفاده از این قاعده سرعت حوزه v_{dom} نیز تعیین می‌شود ($J_{dom} = nev_{dom}$). ملاحظه می‌کنیم که در حالت ناپایدار NDC توزیع میدان به دو ناحیه شکافته می‌شود؛ یک ناحیه با میدان ضعیف و یک ناحیه با میدان قوی ϵ_{dom} . سرعت سوق این دو میدان مساوی هستند و بنابراین

شکل حوزه پایدار است. حالا رسانایی دیفرانسیلی در دو ناحیه مثبت است و بر مبنای نوار رسانش بدین معنی است که حوزه‌ی میدان قوی فقط توسط الکترون‌های کم تحرک اشغال شده است، در حالی که باقی مانده‌ی نمونه را الکترون‌های با تحرک زیاد اشغال کرده‌اند. چون منحنی $\epsilon - J$ به شکل N است، هر دو دسته الکترون‌ها سرعت یکسانی دارند ولی تحرک آن‌ها کاملاً متفاوت است. میدان در داخل حوزه می‌تواند به بزرگی 100 kV/cm باشد، در حالی که \mathcal{E} می‌تواند از 1 kV/cm باشد.

عرض حوزه را به صورت زیر می‌توان تعیین کرد:

$$V = \epsilon_{dom} w + \mathcal{E}(L - w) \quad (7-43)$$

که V ولتاژ و w عرض حوزه است. اولین جمله طرف راست افت پتانسیل در دو سر حوزه و دومین جمله افت پتانسیل دو سر باقی مانده‌ی نمونه است. با حل رابطه‌ی فوق بر حسب w و با فرض این که $\mathcal{E} \ll \epsilon$ است، خواهیم داشت:

$$w \cong \frac{V - \mathcal{E}L}{\epsilon_{dom}} \quad (7-44)$$

با قرار دادن مقادیر عددی $V = 6V$ ، $L = 200 \mu$ ، $\epsilon_{dom} = 10^2 \text{ kV/cm}$ ، $\mathcal{E} = 1/0 \text{ kV/cm}$ در می‌یابیم که $w \approx 40 \mu$ است. برای این که نوسان‌ها، طیف خالص قابل قبولی داشته باشند، نمونه بایستی کاملاً نازک (از مرتبه‌ی 200μ) باشد. در غیر این صورت ممکن است، در هر زمان چندین حوزه در طول نمونه شکل گیرد و باعث ایجاد نوفه^۱ گردد. (معمولاً حوزه از کاتد شروع می‌کند، ولی اگر نمونه بلند باشد، نیازی به این امر نیست زیرا در بعضی از نواحی با مقاومت زیاد در داخل نمونه، ممکن است حوزه هسته بندی^۲ شود؛ و بعد از شکل‌گیری حوزه بطرف آند سوق می‌یابد و سپس رمبیده می‌شود).

همان طور که در بالا بیان شد، نوسان‌های گان معمولاً در ناحیه‌ی میکروموج اتفاق می‌افتد. توان ac سیگنال از چشمه‌ی میدان dc می‌آید. قطعات CW^3 با خروجی تا 100 GHz و 100 mV و راندمان ۵٪ ساخته شده‌اند. همین طور ساخت قطعات پالسی با خروجی بیک 200 W در $1/5 \text{ GHz}$ و راندمان ۵٪ نیز گزارش شده است. کارکردهای دیودگان در جدول (7-1) آمده است:

1. noise
2. nucleate
3. Continuous Wave

جدول ۷-۱: بیشینه توان دیودگان در ناحیهی موج (CW) و پالسی

n_0 CM^{-3}	راندمان %	v CH_r	بیشینه توان خروجی (WC)	ولتاژ آستانه V	ضخامت لایه فعال (μ)
CW					
1×10^{18}	۵/۲	۲/۵	۵۶ mw	۱۳/۰	۴۰
3×10^{15}	۲/۳	۵	۶۵	۷/۵	۲۵
	۳	۱۱	۱۱۰	۴/۲	۱۲
6×10^{15}	۳/۳	۵۰	۲۰	۲/۰	۵
پالسی					
3×10^{14}	۶	۱/۵	۲۰۵ w	۲۷	۱۰۰
6×10^{15}	۹	۵۰	۰/۴	۲/۰	۵

تاکنون فقط راجع به مدگان صحبت کردیم، ولی مدهای عملیاتی دیگر نیز امکان پذیر است. لازمی حوزه‌ی گان شرایط مناسب ویژه‌ای است؛ مثلاً زمان کافی برای فرآیند رشد لازم است. اگر این شرایط ارضا نشوند، حوزه‌ها نمی‌توانند رشد کنند و نوسان‌های گان مشاهده نمی‌شوند. در این حالت دیود می‌تواند به عنوان عنصر مدار دیفرانسیلی به کار رود. یک عامل جدی در تمایز بین مدهای گوناگون، کمیت n_0L حاصل ضرب طول در چگالی است. مثلاً در GaAs برای این که نمونه در مدگان عمل کند، بایستی داشته باشیم، $n_0L \geq 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ از آن جا که کمیت n_0L خیلی مهم است به منشاء آن می‌پردازیم. به خوبی می‌دانیم که اگر چگالی بار اضافی $\Delta \rho$ در محیطی وجود داشته باشد، این چگالی بر حسب زمان به صورت زیر کاهش می‌یابد:

$$\Delta \rho(t) = \Delta \rho(0) e^{-t/\tau_D}$$

τ_D زمان و اهلش مستقیم نامیده می‌شود که با رابطه‌ی زیر به خواص محیط وابسته است

$$\tau_D = \frac{\epsilon}{\sigma} \quad (7-45)$$

ϵ ثابت دی‌الکتریک و σ رسانایی محیط است. [$\Delta \rho(0)$ چگالی اولیه‌ی بار است]. در ناحیه‌ی NDC رسانایی موثر σ که در رابطه‌ی (۷-۴۵) وارد می‌شود منفی است، و بنابراین همان طور که در بالا بحث شد، بار الکتریکی با زمان مطابق رابطه‌ی زیر افزایش می‌یابد

$$\Delta \rho(t) = (\Delta \rho)_{t=0} e^{-t/|\sigma|/\epsilon} \quad (7-46)$$

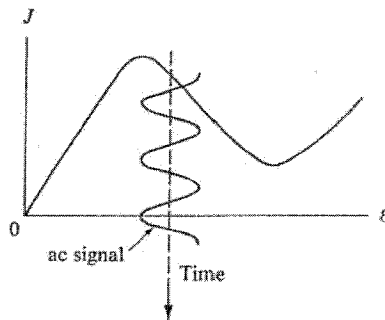
اگر این نظریه را بر بار مربوط به حوزه رونده اعمال کنیم، در آن صورت برای این که حوزه در خلال زمان گذار خود رشد کند، باید توان در رابطه‌ی (۷-۴۶) بیش‌تر از یک باشد یعنی:

$$\frac{t|\sigma|}{\epsilon} = \frac{L}{v_d} \frac{|\sigma|}{\epsilon} > 1$$

وقتی مقدار جایگزین گردد، نامساوی به صورت زیر درمی‌آید

$$n_0 L > \epsilon v_d / e \bar{\mu} \quad (7-47)$$

که $\bar{\mu} = (n_1 \mu_1 + n_2 \mu_2) / n$ با جایگزینی مقادیر عددی مناسب برای GaAs به دست می‌آید که $n_0 L \geq 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. یک مد جالب دیگر برای دیودگان، مد LSA (انبارش محدود بار فضایی)^۱ است که در سال ۱۹۶۶ توسط کاپلند^۲ کشف شد. در این مد، حوزه در طول نمونه یکنواخت باقی می‌ماند. در این مد برخلاف مدگان که خاصیت NDC ناپدید می‌شود، نمونه در ناحیه‌ی NDC است. در مد LSA در اثر اعمال بایاس با فرکانس خیلی زیاد به نمونه، حوزه فرو نشانده می‌شود.



شکل ۷-۱۶ مد LSA

در خلال قسمتی از سیکل ac، میدان منتجه کمتر از میدان آستانه ϵ_{th} می‌شود. حوزه‌ای که در خلال قسمت قبلی سیکل رشد کرده بود ناگهان در هم فرو می‌ریزد (مگر این که به کاتد رسیده باشد). بنابراین شرط لازم مد LSA اساساً این است که

$$v > v_0 \quad (7-48)$$

v فرکانس مدار و v_0 فرکانس ذاتی (رابطه‌ی ۷-۴۲) است. با جایگزینی v_0 از رابطه‌ی (۷-۴۲) در می‌یابیم در GaAs، $v_L > v_0 \approx 10^7 \text{ cm/s}$ ، بایستی توجه کرد که اگر $v_L > 10^7 \text{ cm/s}$ باشد، بدون توجه به مقدار $n_0 L$ ، دیود در مد LSA کار می‌کند. وقتی دیود در این مد است، خاصیت NDC خود را حفظ می‌کند و می‌تواند به عنوان یک تقویت کننده به کار رود.

ملاحظه می‌کنیم که مد عملیاتی به هر دو مقدار و بستگی دارد. علاوه بر مدهای LSA و گان، مدهای دیگری نیز وجود دارند. برای تفصیل بیش تر به مراجع پایان فصل مراجعه کنید.

۷-۷ لیزر نیمه رسانا

یکی از جالبترین قطعات نیمه‌رسانا، لیزر نیمه‌رسانا است که در سال ۱۹۶۳ اختراع شد. در واقع این تنها قطعه‌ی نیمه‌رسانا است که برای تقویت در ناحیه‌ی اپتیکی و فروسرخ استفاده می‌شود. قطعات دیگر همه به محدوده‌ی میکروموج و پایین تر محدوده می‌شوند. فرض شده است که خواننده این کتاب با مفاهیم پایه و عمومی لیزر آشنا باشد، به طوری که مرور مختصر آن در این جا کافی باشد.^۱ گازی را در نظر بگیرید که متشکل از تعدادی اتم باشد، دو تا از ترازهای انرژی اتمی را مورد توجه قرار می‌دهیم (ترازهای ۱ و ۲ که در شکل ۷-۱۷ الف نشان داده شده‌اند). در حالت تعادل جمعیت این ترازها بر واحد حجم n_1 و n_2 است که به صورت زیر به همدیگر مربوطاند

$$\frac{n_2}{n_1} = e^{-\Delta E/k_B T} \quad (۷-۴۹)$$

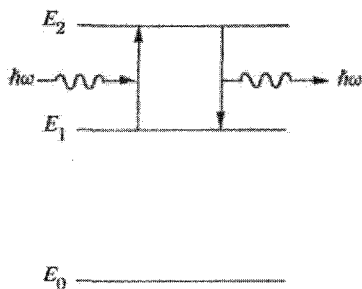
که $\Delta E = E_2 - E_1$ اختلاف انرژی بین این دو تراز است. ملاحظه می‌کنیم که $n_2 < n_1$ است.

هنگامی که یک سیگنال خارجی به فرکانس $\omega \approx \Delta E/\hbar$ از درون گاز بگذرد، به شدت جذب می‌شود. الکترون‌های تراز پایینی (تراز شماره‌ی ۱) فوتون‌هایی را از سیگنال جذب می‌کند که سبب گذارهای کوانتومی به تراز بالایی (تراز شماره‌ی ۲) می‌شود. با فرض این که طول نمونه (طول لوله محتوی گاز) L باشد شدت سیگنال در انتهای نمونه با رابطه‌ی زیر بیان می‌گردد.

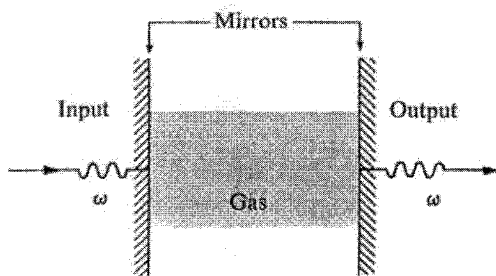
$$I = I_0 e^{-\alpha L} \quad (۷-۵۰)$$

۱- خواننده می‌تواند به مرجع زیر مراجعه نماید

که ضریب جذب و شدت اولیه است. در حقیقت یک فرآیند دیگر هم هست که به طور هم زمان رخ می‌دهد. نه تنها این سیگنال سبب گذار از تراز ۱ به تراز ۲ می‌شود بلکه سبب القای گذارهایی از تراز ۲ به تراز ۱ می‌شود. (به شرط این که $\omega \approx \Delta E / \hbar$). در این فرآیند به ازای هر گذار کوانتومی یک فوتون با فرکانس ω گسیل می‌شود.



(a)



(b)

شکل ۷-۱۷ اصول اساسی طرز کار لیزر. (الف) دو تراز فعال E_1 و E_2 ، فرآیندهای گسیل و جذب. (ب) یک کاواک لیزری.

از آن جا که در این فرآیند گسیل فوتون به کمک سیگنال انجام شده، فرآیند به گسیل القایی موسوم است. توضیح کلاسیکی گسیل القایی مشکل است، ولی از دید کوانتوم مکانیک این فرآیند نظیر فرآیند جذب است و در واقع احتمال وقوع هر دو فرآیند برابر است. حال می‌توان درک کرد که چرا سیگنال در عبور از گاز جذب می‌شود: دو فرآیند جذب و گسیل القایی به طور رقابتی روی سیگنال عمل می‌کنند. جذب، سیگنال را ضعیف می‌کند و گسیل القایی سبب بهبود آن می‌شود. اگر چه احتمال هر دو یکسان است ولی نتیجه‌ی خالص این دو فرآیند عمل جذب است، زیرا تراز پایین‌تر جمعیت بیش‌تری دارد. (است). بنابراین می‌توان نوشت؛

$$\alpha = B (n_1 - n_2) \quad (7-51)$$

که B ثابت تناسب است و نشان می‌دهد که جمعیت یک تراز متناسب با اختلاف آن تراز با تراز بعدی است. از آن جا که $n_2 < n_1$ است نتیجه می‌شود که $\alpha > 0$ می‌باشد. وظیفه‌ی اصلی قطعات لیزر این است که تلاش شود سیگنال به گونه‌ای تقویت شود که $n_2 > n_1$ شود. این کار با وارون کردن جمعیت ترازها از حالت تعادل آن‌ها صورت می‌گیرد. به سادگی می‌توان ملاحظه نمود که اگر $n_2 > n_1$ باشد، $\alpha > 0$ می‌شود و با استفاده از رابطه‌ی (۷-۵۰) نتیجه می‌شود که

$$I = I_0 e^{|\alpha|L} > I_0$$

بدین ترتیب سیگنال تقویت می‌شود، زیرا اتم‌های گسیل شده بیش از اتم‌های جذب شده است.

در یک لیزر، نمونه در یک کاواک نوری مرکب از دو آینه موازی قرار می‌گیرد [یک تداخل سنج فابری پرو (شکل ۱۷-۷ ب)] و باریکه از یکی از آینه‌ها عبور می‌کند. باریکه‌ی لیزر مزایای بسیاری نسبت به چشمه‌های معمولی نور دارد: طیف لیزر (i) خلوص بسیار بالایی دارد؛ (ii) جهت‌مندی (توانایی باریکه در سیر یک مسافت طولانی با واگرایی کم) بسیار بالایی دارد. هر دو خاصیت مربوط به این واقعیت است که فوتون‌های گسیل یافته القایی با سیگنال ورودی هم‌فاز هستند. (iii) شدت بسیار بالایی دارد.

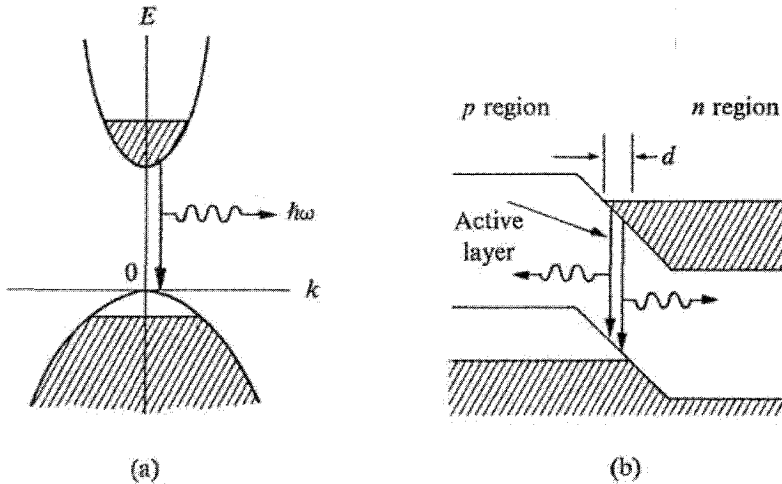
یک شرط لازم برای عمل لیزری این است که $|\alpha| \geq 1/L$ باشد. معمولاً سیگنال توسط مکانیزم‌های دیگری به جز گذارهای اتمی که در بالا توصیف شد (مثلاً یون‌های خارجی دیگر به طور جزئی جذب می‌شود و باید این قسمت نیز منظور گردد. اگر تمام این تلفات را به صورت یک ضریب جذب α نشان دهیم و تقویت‌کنندگی با ضریب g (برای بهره) را به $|\alpha|$ نمایش دهیم، شرط عمل لیزری این است که

$$(g - \alpha) = \frac{1}{2L} \quad \text{یا} \quad g = \frac{1}{2L} + \alpha \quad (7-52)$$

به وسیله‌ی پمپ کردن گاز با یک باریکه‌ی قوی به فرکانس $\omega_p = (E_p - E_0)/\hbar$ و برانگیختگی بیش‌تر الکترون‌های به تراز ۲ و بنابراین فزونی جمعیت این تراز نسبت به تراز ۱ می‌توان به وارونی جمعیت رسید.

طرز کار لیزر نیمه رسانا اساساً شبیه لیزر گازی است، ولی تغییرات مناسب لازم باید اعمال گردد. از بخش ۱۲-۶ یادآوری می‌کنیم، یک باریکه‌ی نوری که از یک نیمه رسانا عبور می‌کند، در نزدیکی لبه‌ی نوار جذب شدید دارد، یعنی $\hbar\omega \geq E_g$ این جذب مربوط به گذار بین نواری بین نوارهای ظرفیت و رسانش می‌باشد، از این مطلب و همین‌طور بحث فوق در مورد لیزر نتیجه می‌شود که اگر جمعیت نوارهای ظرفیت و رسانش در نزدیکی لبه‌های نوار را بتوان وارون کرد، عمل تقویت نیز ممکن می‌گردد.

۱- این شرط از وضعیتی استنتاج می‌شود که لیزر به عنوان یک نوسانگر CW عمل می‌کند. شدت لیزر پس از آن که باریکه یک دور کامل در داخل کاواک می‌زند (مثلاً فاصله $2L$ را طی می‌کند) باید به مقدار اولیه‌ی خود برگردد.



شکل ۷-۱۸ (الف) آرایش وارونی جمعیت در یک نیمه رسانا، مناسب برای عمل لیزر. (ب) رسیدن به وارونی جمعیت در پیوندی که شدیداً آلیایده شده است.

شکل ۷-۱۸ این ایده را نشان می‌دهد. فرض کنید که ماده به قدری با ناخالصی‌های از نوع p و n آلیایده شده است که اساساً توزیع حامل‌های آزاد تبهگن باشد و انرژی‌های فرمی آن‌ها در دو نوار رسانش و ظرفیت به ترتیب E_{FC} و E_{FV} باشند. (توزیع‌ها معادل یکدیگر نیستند، زیرا سریعاً کاهش می‌یابند و بنابراین دو تراز شبه فرمی متفاوت ممکن می‌گردد.) چنین توزیعی منجر به تقویت می‌گردد زیرا الکترون‌ها توسط سیگنال القا می‌شوند و گذارهایی از نوار رسانش به حالت‌های خالی (حفره‌ها) در بالای نوار ظرفیت انجام می‌دهند. این فرآیند باعث گسیل فوتون‌هایی با فرکانس $\nu \approx E_g/h$ می‌شود. انتظار می‌رود در این جا یک تقویت شدید صورت گیرد زیرا قبلاً دریافتیم که گذار بین نواری بسیار قوی است شرط لازم برای این تقویت این است که

$$(E_{FC} - E_{FV}) \hbar \omega \quad (7.53)$$

سؤال این است که چگونه وارونی جمعیت ایجاد می‌گردد. برای اولین بار این عمل با استفاده از یک پیوند p-n که به شدت آلیایده شده بود، صورت گرفت. شکل ۷-۱۸ (ب) نشان می‌دهد که اگر چنین پیوندی به طور مستقیم بایاس گردد، ناحیه معینی در فضا وجود دارد که وارونی جمعیت (شکل ۷-۱۸ الف) برقرار می‌گردد. شکل ۷-۱۸ (ب) موقعیت حالت پایا را نشان می‌دهد.

الکترون‌ها به طور پیوسته از طرف راست تزریق می‌شوند و در ناحیه‌ی فعال^۱ با حفره‌ها باز ترکیب می‌شوند (این حفره‌ها از طرف چپ تزریق شده بودند). به دلیل نوع روش برانگیختگی، این قطعه به نام لیزر تزریقی^۲ موسوم است.

ناحیه فعال موازی با وجه پیوند است (شکل ۱۹-۷ الف)؛ و باریکه لیزر از طرف پیوند خارج می‌گردد. کاواک اپتیکی توسط وجوه بلور شکل می‌گیرد که معمولاً در امتداد صفحه‌ی شکافت (مثلاً در GaAs) شکل می‌گیرد و سپس پولیش داده می‌شود. یک شرط آستانه‌ای برای کارکرد لیزر پیوندی هست: وارونی جمعیت باید آنقدر شدید باشد که گذارهای به سمت پایین خیلی بیش‌تر از اثرهای جذبی دیگر باشد. این اثرهای جذبی توسط حامل‌های آزاد یا آثار مضمحل‌کننده‌ی دیگر صورت می‌گیرد. بنابراین یک چگالی حامل‌ها، n ای وجود دارد که می‌توان آن را به یک کمیت قابل اندازه‌گیری مانند جریان پیوندی مربوط کرد. با استفاده از معادله‌ی پیوستگی و ترکیب آن با معادله‌ی پخش می‌توان n و I را به صورت زیر به هم مربوط کرد.

$$\frac{I}{d} \cong \frac{en}{\tau} \quad (۷-۵۴)$$

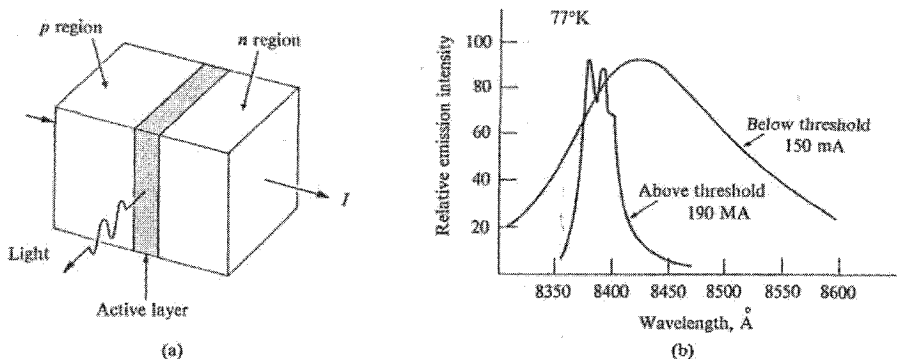
که d عرض ناحیه‌ی فعال و τ زمان باز ترکیب حامل‌ها است. شکل ۱۹-۷ (ب) گسیل از نیمه‌رسانای GaAs در پایین و بالای جریان آستانه را نشان می‌دهد. خط بالای آستانه، شروع عمل لیزر را نشان می‌دهد، مقدار نوعی جریان آستانه در دمای $T \approx 0^\circ K$ در حدود $100 A/cm^2$ است. جریان آستانه به دما بستگی دارد. در دماهای میانی و بالا، جریان آستانه با متناسب است. این بستگی دمایی مربوط به چندین عامل است. یکی از آن‌ها این است که حتی قبل از این که فرآیند گسیل القایی صورت گیرد، در $T > 0^\circ K$ بعضی از حالت‌های خالی بالای نوار ظرفیت اشتغال می‌شوند و از وقوع بعضی گذارها ممانعت می‌کنند. (اصل عدم قطعیت).

اولین عمل لیزری در پیوند GaAs مشاهده شد. خط لیزر GaAs در ناحیه‌ی فرو سرخ در $\lambda = 8400 \text{ \AA}$ و در دمای $77^\circ K$ قرار دارد و متناظر با گاف انرژی GaAs است.^۳ با افزایش دما، طول

1. active region
2. injection laser

۳- پیوند لیزر که در بالا توصیف شد فقط در دماهای پایین کوچک‌تر از $77^\circ K$ می‌تواند به طور پیوسته عمل کند زیرا به دلیل زیاد بودن چگالی جریان آستانه ($5 \times 10^4 A/cm^2$) انرژی گرمایی تولید می‌کند بیش از مقدار انرژی است که به خارج منتقل می‌کند. اخیراً یک لیزر دیودی ساخته شده است که در دمای اتاق نیز به طور پیوسته کار می‌کند و چگالی جریان آن آستانه‌ی کمتری دارد (در حدود $100 A/cm^2$) در این قطعه، پیوند p-n به بلورهای مناسب دیگر در هر دو طرف پیوند،

موج لیزر افزایش می‌یابد. این رفتار، با کاهش گاف انرژی در اثر افزایش دما سازگاری دارد. با ترکیب ماده با فسفر مثلاً استفاده از $\text{Ga(As)}_{1-x}\text{P}_x$ فرکانس لیزر را می‌توان افزایش داد و به ناحیه‌ی نور مرئی رساند.



شکل ۱۹-۷. (الف) طرح یک لیزر پیوندی (ب) طیف تابش گسیل شده از یک لیزر پیوندی GaAs پایین و بالای شرط آستانه.

از سال ۱۹۶۳، ترکیبات دیگر نیمه‌رسانای یافته شده‌اند که می‌توانند عمل لیزری انجام دهند. برای مثال InP و InSb و غیره (جدول ۲-۷ را ملاحظه نمایید). که فرکانس آن‌ها از ناحیه‌ی فرسرخ تا فرا بنفش گسترش دارد. جدول ۲-۷ نکته‌ی دیگری را نیز نشان می‌دهد، و آن این که ایجاد وارونی جمعیت نیز امکان‌پذیر است. در روش باریکه‌ی الکترونی، یک باریکه‌ی الکترونی دارای انرژی، به درون محیط نفوذ می‌کند و تعداد زیادی زوج الکترون حفره ایجاد می‌کند، که مجدداً باز ترکیب می‌شوند و فوتون‌هایی گسیل می‌دارند. در روش اپتیکی، از یک باریکه‌ی لیزری که از یک نیمه‌رسانا گسیل می‌شود می‌توان برای وارون کردن جمعیت در ماده‌ی دیگر استفاده کرد.

عمل لیزری در سیلیسیم یا ژرمانیوم مشاهده نشده است. این نکته تعجب‌آور نیست، زیرا این مواد نیمه‌رساناهای با گاف انرژی غیر مستقیم هستند (بخش ۱۲-۶ را ملاحظه نمایید). در این عناصر، الکترون‌ها و حفره‌ها نمی‌توانند مستقیماً باز ترکیب شوند. زیرا قانون پایستگی اندازه حرکت نقض می‌شود. تمام موادی که در جدول ۲-۷ لیست شده‌اند ترکیبات گاف مستقیم هستند.

متصل شده است. بنابراین به نام لیزر چند پیوندی موسوم شده است. تأثیر این مواد جدید این است که راندمان لیزر را توسط عوامل زیر افزایش می‌دهد. (الف) محبوس کردن حامل‌ها در یک ناحیه‌ی فعال (ب) محبوس کردن نور در یک ناحیه‌ی فعال. برای اطلاع بیشتر به مرجع زیر مراجعه نمایید.

لیزرهای نیمه رسانا، مزایایی بسیاری نسبت به لیزرهای گازی دارند، اندازه‌ی آنها کوچک‌تر است، ساده‌ترند و فرکانس بالایی دارند. علاوه بر آن می‌توان آنها را تولید انبوه کرد و به سرعت به مدار الکتریکی وصل کرد. همچنین لیزرهای نیمه رسانا را می‌توان با تغییر گاف انرژی که مثلاً توسط فشار صورت می‌گیرد، کوک^۱ کرد. عیب این لیزرها این است که چون گذارها بین نوارها صورت می‌گیرد و نه بین ترازهای تیز اتمی، طول موج آنها کاملاً تک فام نیست. پدیده‌های دیگری نیز در جامدات هستند که در پهن شدگی خطوط طیفی آنها مؤثرند. اندازه‌ی کوچک لیزر نیمه رسانا باعث می‌شود که کیفیت باریکه نوری آن نسبتاً ضعیف باشد. علی‌رغم این محدودیت‌ها، لیزر نیمه رسانا یک دستگاه بسیار مهم است که برای توسعه دستگاه‌های اپتیکی - الکترونیکی بسیار مفید است.

جدول ۲-۷ بعضی از مواد لیزر نیمه رسانا

ماده	انرژی فوتون eV	طول موج μ	روش برانگیختگی یا پمپ کردن
ZnS	۳/۸۲	۰/۳۲	باریکه ی الکترونی
CdS	۲/۵۰	۰/۴۹	باریکه ی الکترونی، نوری
CdSe	۱/۸۲	۰/۶۸	باریکه ی الکترونی
CdTe	۱/۵۸	۰/۷۸	باریکه ی الکترونی
Ga(As _{1-x} P _x)	۱/۴۱-۱/۹۵	۰/۸۸-۰/۶۳	پیوند p-n
GaAs	۱/۴۷	۰/۸۴	پیوند p-n، باریکه ی الکترونی، نوری، بهمنی
InP	۱/۳۷	۰/۹۰	پیوند p-n، باریکه ی الکترونی
GaSb	۰/۸۲	۱/۵۰	پیوند p-n، باریکه ی الکترونی
InSb	۰/۲۳	۵/۲	پیوند p-n، باریکه ی الکترونی، نوری
PbS	۰/۲۹	۴/۲۶	پیوند p-n، باریکه ی الکترونی
PbTe	۰/۱۹	۶/۵	نوری

لیزر نیمه رسانای دیگر که بعداً اختراع شد و وسیله‌ی بسیار مفیدی است، لیزر اسپین واگرد رامان^۲ (SFR) است. حرکت الکترون‌ها در نوار رسانش InSb را در حضور یک میدان مغناطیسی قوی در نظر بگیرید. اثر میدان این است که اولاً باعث حرکت الکترون‌ها در یک مدار سیکلوترونی می‌شود (بخش ۷-۴) و ثانیاً گشتاورهای مغناطیسی اسپینی الکترون‌ها را در جهت‌هایی که موازی یا

1. tune
2. spin -flip Raman

خلاف جهت میدان است، قرار می‌دهد. تفاوت انرژی بین این دو تراز مساوی $\Delta E = g\mu_B B$ است که g ضریب لانده^۱، μ_B مگنتون بوهر^۲ و B میدان مغناطیسی است. جهت‌گیری گشتاورهای دو قطبی در یک میدان مغناطیسی به تفصیل در فصل ۹ (مغناطیس) و به ویژه در بخش ۶-۹، مورد بحث قرار گرفته است.

شکل ۲۰-۷ (الف)، عملکرد یک لیزر SFR را نشان می‌دهد. یک باریکه‌ی نوری با فرکانس ω_0 به سیستم برخورد می‌کند. الکترونی که در تراز پایینی از دو تراز اسپینی است، یک فوتون با انرژی $\hbar\omega$ جذب می‌کند و به تراز بالاتر E گذار انجام می‌دهد، پس از آن به سمت پایین و به طرف تراز بالایی از همان ترازهای دو گانه اسپینی که قبلاً قرار داشت، گذار انجام می‌دهد. نتیجه‌ی فرآیند این می‌شود که یک فوتون $\hbar\omega_0$ جذب می‌شود، یک فوتون $\hbar\omega_s$ شکل ۲۰-۷، (الف) فرایند پراکندگی اسپین - واگرد رامن که عامل لیزر SFR است. (ب) طیف تابش پراکنده از یک نمونه‌ی InSb پایین و بالای آستانه (با اجازه‌ی Shaw , Patel) گسیل می‌شود و الکترون اسپین خود را وارون می‌کند. از پایستگی انرژی می‌دانیم که فرکانس گسیل با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$\omega_s = \omega_0 - g\mu_B B \quad (7-55)$$

طرز کار لیزر، بر مبنای مدل فوق‌الذکر^۳ و شاو^۴ در InSb و مواد دیگر گزارش کردند (شکل ۲۰-۷ب). راندمان این لیزر در شرایط کاری پالس در حدود ۱٪ است. مزیت بزرگ لیزرهای SFR، کوک‌پذیری^۵ آن‌ها است. با تغییر B که کار نسبتاً ساده‌ای است، می‌توان ω_s را به طور پیوسته تغییر داد. پتل و شاو با استفاده از یک لیزر و سویچینگ Q به عنوان پمپ به یک کوک پیوسته‌ای در محدوده‌ی $13/0 - 10/9 \mu\text{A}$ در لیزر InSb دست یافتند. تغییرات B در محدوده‌ی $10 - 15 \text{ kG}$ بود. در تکامل‌های بعدی لیزر SFR، راندمانی به بزرگی ۵۰٪ در یک قدرت آستانه 50 mW و در شرایط طول موج پیوسته (CW) گزارش شده است.^۶ توجه کنید که در رابطه‌ی (۷-۵۵) محدوده‌ی کوک‌پذیری به طور خطی با g افزایش می‌یابد. بنابراین موادی مانند InSb که ضریب g بزرگ‌تری دارند، مطلوب‌ترند.

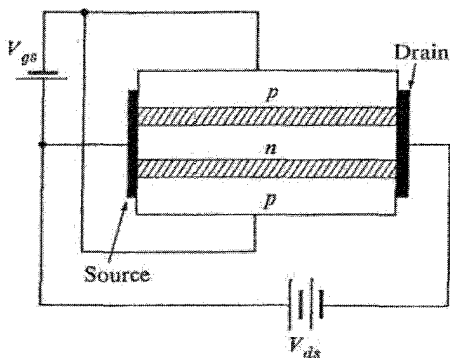
1. Lande Factor
2. magneton Bohr
3. Petel
4. shaw
5. tuneability
6. Bruek and Mooradian

۷-۸ ترانزیستور اثر میدان، لامپ نیمه رسانا و قطعات دیگر

علاوه بر چند موردی که تاکنون توصیف کردیم، دستگاه‌های نیمه رسانای مهم دیگری نیز وجود دارند. با توجه به این که امروزه رساناها، مهم‌ترین و کارآمدترین قطعات در تکنولوژی الکترونیک هستند، تعداد این دستگاه‌ها بسیار زیاد است و روز به روز افزایش می‌یابد. در این جا بحث ما مختصر است ولی خواننده‌ی علاقه‌مند را به منابعی که در پایان فصل آمده است ارجاع می‌دهیم.

ترانزیستورهای اثر میدان و سوقی^۱

گرچه ترانزیستور پیوندی ستون فقرات صنعت نیمه رسانا را تشکیل می‌دهد ترانزیستورهای دیگری هم هستند که بعضی از آن‌ها به خصوص برای مقاصد ویژه بسیار مناسب و مفید هستند. یکی از مهم‌ترین آن‌ها، ترانزیستور اثر میدان^۲ یا FET است که اولین بار به شکل نوین خود در سال ۱۹۵۲ توسط شاکلی^۳ پیشنهاد شد. این قطعه که در شکل ۷-۲۱ نشان داده شده است قطعه‌ی کوچکی از یک نیمه رسانا مثلاً سیلیسیوم است که شامل سه لایه‌ی n, p, n است که با آرایش مناسب ایجاد شده‌اند (قطعه‌ای با لایه‌های $n-p-n$ نیز می‌تواند استفاده شود). یک باتری به وسط لایه‌ی n متصل می‌شود و جریانی ایجاد می‌کند که موازی با سطح لایه است. سپس این جریان با یک میدان الکتریکی عرضی که توسط باتری دیگری ایجاد می‌شود مدوله می‌شود. با بر هم نهی یک سیگنال بر این میدان می‌توان سیگنال را در مقاومت بار مدار جریان تقویت کرد.



شکل ۷-۲۱ یک ترانزیستور اثر میدان (FET). نواحی هاشور زده نمایانگر تهی لایه و نواحی هاشور نرزه نمایانگر اتصال‌های اهمی هستند.

1. Field effect and drift transistor
2. Field - Effected Transistor (FET)
3. Shockley

اصول فیزیکی که در عملکرد FET نهفته است، به وجود تهی لایه‌ای که نواحی p و n را از هم جدا کرده‌اند (نواحی هاشور زده در شکل ۷-۲۱) مربوط می‌شود. از بخش ۳-۷ یادآوری می‌کنیم که تهی لایه در هر پیوندی که مربوط به پخش حامل‌های آزاد است، شکل می‌گیرند. اثر این لایه در وضعیت شکل ۷-۲۱ این است که عرض لایه‌ی رسانش (نوع n) که به نام کانال نیز موسوم است را کاهش و بدین ترتیب رسانایی قطعه را کاهش می‌دهد. زیرا تهی لایه (که حامل‌های آزاد ندارد) سهمی در فرایند رسانش ایفا نمی‌کند. اگر عرض هندسی لایه‌ی n را به w نشان دهیم. عرض کانال در غیاب میدان عرضی برای است با:

$$w_c = w - 2w_0 \quad (7-56)$$

که w_0 عرض هر تهی لایه و ضریب ۲ به خاطر وجود دو تا از این لایه‌ها است که مربوط به هر یک از پیوندها است. عرض w_0 با رابطه‌ی ۷-۳۲ (ب) بیان می‌شود.

$$w_0 = \left(\frac{2e\phi_0}{eN_d} \right)^{1/2} \quad (7-57)$$

که ولتاژ ϕ_0 معادل پیوند است. فرض کرده‌ایم $N_d \ll N_a$ باشد.

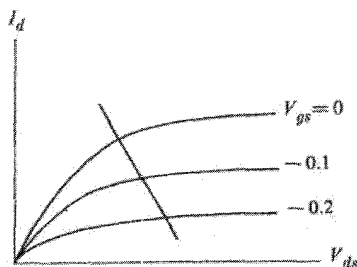
حال اثر میدان را بررسی می‌کنیم. این میدان با اتصال به یک باتری به گونه‌ای که پیوندهای p - n بایاس معکوس باشند (شکل ۷-۲۱) برقرار می‌گردد. نتیجه‌ی این بایاس، افزایش عرض تهی لایه، کاهش بیش‌تر عرض کانال و افزایش مقاومت است. بنابراین، این میدان به منزله‌ی یک درپچه عمل می‌کند که جریان الکترون‌های بین الکتروود منفی مدار جریان (چشمه) و الکتروود مثبت (چاهک) را کنترل می‌کند. هرچه پتانسیل بایاس معکوس عرضی بیش‌تر باشد، کانال باریک‌تر و در نتیجه جریان کوچک‌تر است. در واقع در پتانسیل‌هایی که به اندازه‌ی کافی بزرگ هستند، ممکن است تهی لایه‌ها آن قدر به طرف کانال حرکت کنند که کانال از بین برود و برای عبور جریان سدی ایجاد شود. ولتاژ لازم برای این توقف جریان را می‌توان با جایگزینی با در رابطه‌ی (۷-۵۷) و مساوی صفر قرار دادن در رابطه‌ی (۷-۵۶) به دست آورد. نتیجه چنین می‌شود.

$$V_p = \frac{eN_d w_i^2}{8\epsilon} \quad (7-58)$$

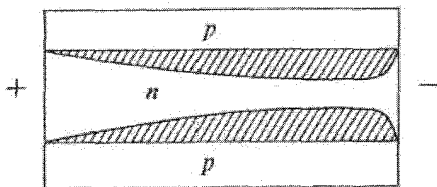
که فرض کرده‌ایم $V_p \gg \phi_0$ است، به طوری که ولتاژ معادل پیوند را بتوان حذف کرد.

منحنی مشخصه الکتریکی، یعنی نمودار جریان چاهک (I_d)، بر حسب ولتاژ چشمه چاهک (V_{ds})

برای یک ترانزیستور اثر میدان در شکل ۷-۲۲ نشان داده شده است. ملاحظه می‌شود که در ابتدا جریان اساساً به صورت اهمی افزایش می‌یابد سپس شروع به خم شدن می‌کند و بالاخره در مقادیر بالای ولتاژ، جریان اشباع می‌شود. برای درک آن، باید افت ولتاژ IR در امتداد طول کانال را بررسی کرد. در جریان‌های بالا این ولتاژ قابل ملاحظه است و اثر آن این است که ناحیه‌ی نزدیک چاهک مثبت‌تر از ناحیه‌ی نزدیک چشمه می‌شود. به این ترتیب یک ولتاژ داخلی دریاچه به وجود می‌آید که سبب می‌شود همان‌طور که شکل ۷-۲۳ نشان می‌دهد، تهی لایه به ویژه در نزدیکی چاهک متورم شود و کانال را باریک کند.



شکل ۷-۲۲ مشخصه‌های الکتریکی یک FET. منحنی‌ها نمایانگر مشخصه‌ها در ولتاژهای متفاوت دریاچه می‌باشند. (واحدها اختیاری هستند). خط مستقیم عملکرد تقویت کننده را نشان می‌دهد.



شکل ۷-۲۳ برآمدگی تهی لایه نزدیک چاهک

این ولتاژ داخلی که حتی در غیاب ولتاژ خارجی وجود دارد، جریان را محدود می‌کند و هنگامی که مقدار آن به اندازه‌ی کافی بزرگ باشد با بستن کانال در چاهک، باعث اشباع جریان می‌شود. جریان به واسطه‌ی پدیده‌ی فوق کاملاً صفر نمی‌شود زیرا در این صورت افت ولتاژ IR نیز صفر می‌شود و پدیده‌ی نازک شدن کانال به وقوع نمی‌پیوندد.

تقویت کننده‌ی FET در ناحیه‌ی قطع کار می‌کند. سیگنال فرودی، با ولتاژ دریاچه بر هم نهاده می‌شود و باعث می‌شود و ولتاژ دریاچه تغییر کند (خط مستقیم در شکل ۷-۲۲) و سیگنال خروجی

نیز در مقاومت بار قطع می‌شود. تحلیل تئوری نشان می‌دهد، جریان در این ناحیه از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$I_d = A \left(\frac{V_{gs}}{V_p} - 1 \right)^2 \quad (۷-۵۹)$$

که ولتاژ بایاس چشمه - دریچه است. بدین ترتیب پارامتر رسانایی متقابل $g_m = \frac{\partial I_d}{\partial V_g}$ به صورت زیر بیان می‌گردد.

$$g_m = \frac{2A}{V_p} \left(\frac{V_{gs}}{V_p} - 1 \right) \sim (V_{gs} - V_p) \quad (۷-۶۰ \text{ الف})$$

$$g_m \sim I_d^{\frac{1}{2}} \quad (۷-۶۰ \text{ ب})$$

برای این که یک قطعه الکترونیکی به سیگنال حساس باشد و ولتاژ عملیاتی تا حد ممکن پایین باشد، آلایش در کانال n را در مقایسه با ناحیه‌ی p کوچک می‌کنند. در نتیجه حتی یک تغییر کوچک V_{gs} ، تغییر بزرگی در مدار جریان ایجاد می‌کند. (توجه کنید که هیچ‌گونه جریان عرضی در FET جریان نمی‌یابد زیرا پیوندها بایاس معکوس شده‌اند. ارتباط‌های الکترونی در شکل ۷-۲۱ را ملاحظه نمایید.)

مزیت اولیه‌ی ترانزیستور اثر میدان بر ترانزیستور پیوندی این است که عمل تقویت در ترانزیستور اثر میدان توسط جریانی از حامل‌های اکثریت صورت می‌گیرد ولی در ترانزیستور پیوندی این کار توسط جریانی از حامل‌های اقلیت انجام می‌شود و در نتیجه به اغتشاش کوچکی از این حامل‌ها بسیار حساس است. تغییر دما یا تابش تشعشعات اتمی می‌تواند باعث این اغتشاشات گردد.

از قطعه‌ای که راجع به آن صحبت شد، گاهی اوقات به عنوان پیوند FET یاد می‌شود و این بخاطر تمایز آن با قطعه‌ی مشابهی است که به نام MOS یا ترانزیستور اثر میدان MOS موسوم است. این ترانزیستور بر اساس اصول مشابه با FET کار می‌کند، به جز این که به جای لایه‌ی خارجی p دو لایه‌ی نازک عایق مانند SiO_2 قرار می‌گیرد. این لایه روی سطح کانال نشانده می‌شود. یک لایه نازک سوم که این بار یک فلز است روی لایه‌ی عایق نشانده می‌شود و ولتاژ گیت^۱ به این لایه وصل می‌شود. سه لایه رسوب داده شده شامل: یک لایه فلز، یک لایه عایق (یا اکسید) و یک لایه نیمه رسانا است؛ بنابراین به نام MOS^۲ موسوم شده است. گرچه گیت به لحاظ الکتریکی به کانال

متصل نیست، مدولاسیون در قطعه‌ی MOSFET از طریق میدان عرضی که از لایه‌ی عایق عبور می‌کند، انجام می‌گیرد.

ترانزیستور دیگری که به خصوص در فرکانس بالا کار می‌کند، ترانزیستور سوقی^۱ است که طراحی آن مشابه ترانزیستور پیوندی معمولی است به جز این که پایه به طور یکنواخت آلاینده نشده است؛ بلکه میزان آلاینس متغیر است. به طوری که آلاینس در نزدیکی گسیلنده بیش‌ترین مقدار خود را دارد و تقریباً به طور نمایی کاهش می‌یابد و در نزدیکی پیوند گسیلنده مقدار کمی دارد. اثر این نایکنواختی آلاینس این است که در غیاب اتصال‌های الکتریکی، حامل‌های پایه به سمت جمع‌کننده پخش می‌شوند و در این فرآیند یک میدان الکتریکی برقرار می‌شود تا به همان شکلی که در بخش ۱۷-۶ بحث شد، جریان حامل‌ها را متوازن کند. وقتی ترانزیستور به مدار متصل و کار می‌کند، حامل‌های اقلیت که از گسیلنده به درون پایه تزریق می‌شوند، با میدانی مواجه می‌شوند که قطبیت آن طوری است که به سرعت حامل‌ها را به سمت جمع‌کننده جارو می‌کند. در ترانزیستور معمولی جریان حامل‌های اقلیت در ناحیه‌ی پایه توسط عمل پخش کنترل و هدایت می‌شود. در ترانزیستور سوقی، جریان حامل‌ها توسط یک میدان الکتریکی کنترل و هدایت می‌شود (به همین دلیل نام سوقی بر آن نهاده شده است)، و توسط آلاینس مناسب می‌توان چنان میدان بزرگی ایجاد کرد که زمان گذار و یا معادل آن عرض پایه را به نحو قابل ملاحظه‌ای کاهش دهد. اگر پایه باریک باشد، محدوده‌ی فرکانسی کار ترانزیستور افزایش می‌یابد. (بخش ۴-۷ و معادله‌ی ۴۱-۷ را ملاحظه نمایید).

ترانزیستورهایی که در فرکانس‌های بالاتر از گیگاهرتز کار می‌کنند توسط این تکنیک ساخته شده‌اند.

قطعات میکروموج

علاوه بر دیودگان، قطعات دیگری نیز هستند که در ناحیه‌ی میکروموج کار می‌کنند. برای مثال یک پیوند می‌تواند به عنوان «ورکتور» (عنصر بار اکتانس متغیر)^۲ به کار رود. پیوند یک واکتایی خازنی^۳ دارد که مربوط به ناحیه‌ی با بار فضایی است و به طور غیر خطی به ولتاژ اعمال شده،

1. drift transistor
2. varactor (variable - reactance element)
3. capacitance

بستگی دارد (بخش ۲-۷ را ملاحظه نمایید). بنابراین ورنکتور را می‌توان به عنوان یک قطعه‌ی سویچینگ یا مدولاسیون برای نوسانگر هماهنگ و مبدل فرکانس به کار برد. زیرا فرکانس ولتاژ کنترل آن از فرکانس سیگنال خیلی کمتر است. قطعه‌ی دیگر میکروموج دیود IMPATT (زمان تماس و گذار)^۱ است که خواص بهمنی و زمان گذار را برای تولید رسانایی دیفرانسیلی منفی^۲ (NDC) در فرکانس‌های میکروموج به کار می‌برد. بنابراین از این قطعه می‌توان به عنوان یک نوسانگر یا تقویت کننده استفاده کرد.

نیمه رساناها را همچنین می‌توان به عنوان مولدهای فراصوتی - که طرز کار آن‌ها شبیه transducer است - و تقویت‌های فراصوتی به کار برد. مثلاً ناحیه‌ی میدان زیاد در دیودگان آن قدر بزرگ است که باعث شود یون‌های شبکه نوسان کنند و از این خاصیت می‌توان برای تولید امواج صوتی در ناحیه‌ی میکروموج استفاده کرد.

فوتودیودها و قطعات وابسته

کاربرد عمده‌ی دیگر نیمه رساناها استفاده‌ی آن‌ها در آشکار سازهای تابش است. اغلب این قطعات بر اساس پدیده فوتورسانش (بخش ۱۳-۶) ساخته شده‌اند. تابشی که می‌خواهیم آشکار کنیم بر یک نمونه‌ی نیمه‌رسانا می‌تابانیم، تابش باعث برانگیختن الکترون‌ها از نوار ظرفیت به نوار رسانش می‌شود و بنابراین زوج‌های الکترون - حفره تولید می‌کند. این حامل‌ها را می‌توان از طریق جرائنی که در نمونه ایجاد می‌کنند، آشکار کرد. این جریان که متناسب با شدت تابش است به عنوان یک مقیاس الکتریکی اندازه‌گیری تابش فرودی به کار می‌رود. فوتورسانده‌ی CdS به عنوان نورسنج در دوربین‌ها به کار می‌رود. گاف انرژی آن $2/\text{eV}$ و به تابش با طول موج‌های μm $0.5 \leq \lambda$ که انرژی فوتون‌های آن حداقل مساوی گاف انرژی باشد، حساس است.

آشکارسازهای فوتورسانش، چندین مزیت نسبت به آشکارسازهای حرارتی نظیر ترموپیل^۳ و بولومتر^۴ دارند. از جمله این که زمان پاسخ آن‌ها خیلی کوتاه‌تر است. همین‌طور یک بولومتر انتگرال شدت روی تمام طول موج‌ها را اندازه می‌گیرد؛ در حالی که آشکارساز فوتورسانش فقط

1. impact and transit time
2. Negative Differential Conductivity
3. Thermopile
4. Bolomete

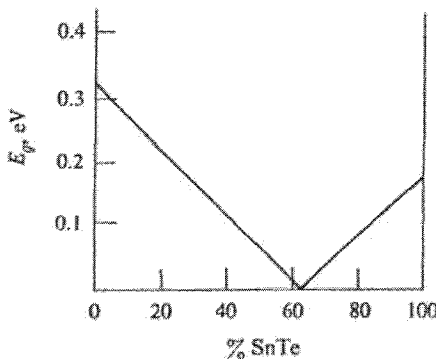
فوتون‌هایی را که انرژی آن‌ها بزرگ‌تر از گاف انرژی است اندازه می‌گیرد. بنابراین تا حدودی می‌توان طیف را آنالیز کرد. در یک آشکارساز فوتورسانش که خوب طراحی شده باشد، باید رسانندگی تاریک (σ_0 در بخش ۱۳-۶) کوچک باشد، به طوری که تغییر نسبی در اثر تابش قابل ملاحظه و به سادگی قابل آشکارسازی باشد. لازمه‌ی این امر، یک گاف انرژی بزرگ است به طوری که برانگیختگی حامل‌ها از گاف در دمای اتاق خیلی کم باشد. علاوه بر آن نمونه باید نسبتاً خالص باشد، به طوری که حامل‌ها به طور حرارتی از ترازهای ناخالصی برانگیخته نشوند. همین‌طور، یک فوتو آشکارساز خوب باید بهره‌ی بالایی داشته باشد و یا تعداد الکترون‌هایی که در اثر جذب فوتون‌ها تولید می‌شوند، زیاد باشد. این تعداد اغلب بزرگ‌تر از واحد است زیرا اگر زمان باز ترکیب الکترون - حفره طولانی باشد و حفره‌ها در دام نقایص بلوری بیفتند، الکترون اصلی از نمونه خارج شده و به مدار بیرونی وارد می‌شود. الکترون دیگری از کاتد فراخوانده می‌شود تا به همراه حفره‌ی به دام افتاده، به لحاظ الکتریکی توازن ایجاد نماید. و سپس این الکترون تازه وارد نیز در طول نمونه جارو می‌شود و به عنوان فوتوالکترون دیگری به ثبت می‌رسد. بنابراین اگر زمان باز ترکیب خیلی بزرگ‌تر از زمان گذار باشد، به ازای هر فوتون چندین الکترون به ثبت می‌رسد و بهره خیلی بزرگ می‌شود. یک بار دیگر نقش تأثیر گذار ناخالص‌ها در کارکرد قطعات نیمه‌رسانا مشخص می‌گردد.

گرچه در این جا فقط به صورت صریح راجع به فوتوالکترون‌ها در ناحیه‌ی نور مرئی صحبت کردیم، نوع مشابهی از مواد به عنوان آشکارسازهای فروسرخ به کار می‌روند. پژوهش این زمینه در دهه‌های اخیر توجه ویژه‌ای به خود معطوف داشته است. زیرا در این ناحیه گرچه تابش نامرئی است ولی حتی در دمای اتاق نیز مقدار زیادی از این نوع تابش از اجسام منتشر می‌شود. آشکارسازهای فروسرخ در زمینه‌های تحقیقاتی و در ارتباط با اسپکتروسکوپی فروسرخ دور بسیار مفید هستند.

یک آشکارساز نوری فروسرخ باید چندین ویژگی داشته باشد. اول این که گاف انرژی آن باید به قدر کافی باریک باشد تا حتی فوتون‌های فروسرخ کم انرژی نیز در طول گاف برانگیخته شوند. برای کمینه کردن رسانندگی تاریک، نمونه باید نسبتاً خالص باشد. آشکارسازهای نوری فروسرخ را تا دماهایی که به اندازه‌ی کافی از دمای اتاق پایین‌ترند، سرد می‌کنند تا تحریک‌هایی را که یا در طول گاف و یا به واسطه‌ی ناخالصی‌ها به وجود می‌آیند خاموش کنند.

بعضی از ترکیب‌های سرب مانند PbS، PbSe، PbTe به طور وسیعی به عنوان آشکارسازهای نوری تا طول موج حدود 5μ استفاده شده‌اند. همچنین از InSb و InAs که با خلوص بالا می‌توان آن‌ها را تولید کرد، برای ساخت آشکارسازهای نوری استفاده شده است. گاف انرژی در InSb حدود 0.18eV است که برای طول‌موج‌های تا $7/3\mu$ مفید است و گاف انرژی در حدود 0.35eV است که برای طول‌موج‌های تا $3/5\mu$ قابل استفاده است.

قابلیت آشکارسازی این آشکارسازها را می‌توان با به کار بردن موادی که گاف کوچک‌تری دارند، افزایش داد. به روش‌های گوناگون می‌توان به گاف کوچک رسید؛ یکی از این روش‌ها، آلیاژ ساختن یک نیمه فلز با یک نیمه رسانا است. شکل ۲۴-۷ کوک کردن گاف در نتیجه‌ی آلیاژ کردن PbTe با SnTe را نشان می‌دهد. گاف به طور پیوسته بین صفر و 0.33eV تغییر می‌کند.



شکل ۲۴-۷ گاف انرژی بر حسب درصد ترکیب SnTe در PbTe-SnTe در دمای اتاق (After Kimmock, et al)

در ناحیه‌ی IR با طول موج‌های خیلی بلند، راحت‌تر است که تابش را توسط برانگیختگی حامل‌ها از ناخالصی‌ها آشکار کرد. این حامل‌ها بعداً توسط جریان‌های فوتورسانندگی آشکار می‌گردند. این قطعات تحت عنوان فوتورساندهای خارجی^۱ توصیف می‌شوند که از فوتورساندهای ذاتی^۲ متمایز گردند. ژرمانیوم که به سادگی می‌توان آن را با خلوص مناسب تهیه کرد معمولاً به این منظور به کار می‌رود؛ ترازهای انرژی بسیاری از انواع ناخالصی‌ها که در ژرمانیوم وجود دارد به طور مفصل مطالعه شده‌اند. از بخش ۵-۶ یادآوری می‌کنیم که ترازهای ناخالصی معمولاً در

1 . Extrinsic Photoconductors

2 . Intrinsic Photoconductors

حدود $1\text{eV}/0.1$ از نوارها فاصله دارند. این واقعیت به کمک مطالعات تجربی مانند اندازه گیری های اپتیکی (بخش ۱۴-۶) تأیید شده است. با استفاده از عناصر ستون III و V جدول تناوبی عناصر در ژرمانیوم، می توان آشکارسازهای خارجی خوب و قابل قبولی تولید کرد که محدود طول موج های ۱۰ تا ۱۰۰ را می پوشانند.

وسایل آشکارسازهای نوری که تاکنون بحث شدند، همه از نوع کپه ای بودند. به این معنی که در آنها از نمونه های همگن استفاده می شود. آشکارسازهای نوری پیوندی نیز ساخته شده اند. گروه مهمی از آنها بر مبنای اثر فوتوولتاییک^۱ کار می کنند. نور به یک پیوند p-n برخورد می کند و در فرکانس های زیاد، زوج های الکترون - حفره توسط برانگیختگی گاف ایجاد می شوند. حامل هایی که در تهیه لایه پیوند (ناحیه ای که نور به طرف آن تغییر جهت می دهد)، ایجاد می شوند، سریعاً توسط میدان الکتریکی قوی پیوند جارو می شوند. الکترون ها به طرف ناحیه n و حفره ها به طرف ناحیه p جارو می شوند. این جریان بار، باعث ایجاد یک جریان الکتریکی لحظه ای در مدار می شود که تحت شرایط مدار باز، ایجاد یک ولتاژ در دو سر ترمینال می کند و این ولتاژ به عنوان عاملی برای اندازه گیری شدت تابش فرودی به کار می رود. بنابراین فوتوسل به عنوان یک آشکار ساز نوری کار می کند.

وقتی مدار بسته می شود، یک جریان پیوسته برقرار می شود. با مراجعه به معادلات پیوند در بخش ۲-۷، می توان رابطه ی ولتاژ جریان را به دست آورد. جریان کل در مدار برابر است با:

$$I = I_0(e^{eV/kBT} - 1) - I_s \quad (7-61)$$

که I_s جریان مدار اتصال کوتاه و جریانی است که مربوط به حامل های تولید شده توسط تابش می باشد. میدان پیوند این حامل ها را جارو می کند. مقدار این جریان را می توان به صورت $I_s = e\eta p$ نوشت که η کارایی کوانتومی^۲ و p شار فوتونی است. اولین جمله طرف راست در معادله ی (۷-۶۱) همان جریان پیوندی آشنا در معادله ی (۷-۷) است و همان طور که در بخش ۲-۷ بحث شد مربوط به تزریق حامل های اقلیت است و اعم از این که پیوند مورد تابش قرار گیرد یا نه، این جمله وجود دارد. جریانی را که در اثر تابش القا می شود مساوی $-I_s$ می گیریم، زیرا در خلاف جهت جریان حاصل از پیوند بایاس مستقیم است (چرا؟). معادله ی (۷-۶۱) نشان می دهد که ولتاژ

مدار باز ($I=0$) به صورت زیر نوشته می شود.

$$V_{oc} = \frac{k_B T}{e} \log\left(\frac{I_s + I_0}{I_s}\right) \quad (7-62)$$

این قطعه‌ی فوتولتائیک، فوتودیود^۱ نام دارد و می‌تواند انرژی تابش فرودی به انرژی الکتریکی تبدیل کند. بیشینه قدرت خروجی آن به $\frac{V_{oc}}{I_s} \approx 0.75$ است.

سلول‌های خورشیدی^۲، باتری‌های فوتولتائیک مفیدی هستند که تابش خورشیدی را به انرژی الکتریکی تبدیل می‌کنند. گرچه این باتری‌ها ساخته شده و مورد استفاده قرار گرفته‌اند ولی راندمان آن‌ها کم است. مشکل در این جا است که تابش خورشیدی دامنه‌ی وسیعی از طول موج‌ها را می‌پوشاند. بیش‌ترین شدت طیف در نزدیکی $\lambda = 0.7 \mu\text{m}$ است، ولی مقدار زیادی از انرژی تابشی، پایین و بالای این طول موج قرار دارد. یک دیود با گاف عریض مثلاً در حدود ۲eV در تبدیل انرژی خورشیدی در قله‌ی طول موج کارایی خوبی دارد ولی تمام انرژی فرسوخ را تلف می‌کند. متقابلاً یک دیود با گاف باریک مثلاً حدود ۰.۵eV تمام فوتون‌های فرودی را جذب می‌کند ولی بیش‌تر انرژی در ناحیه‌های فرسوخ نزدیک، مری و فرابنفش را تلف می‌کند. زیرا فقط کسری از انرژی جذب شده که برای برانگیختگی نوار - نوار لازم است به صورت انرژی الکتریکی مفید قابل استحصال است. بنابراین بایستی گاف مناسبی را انتخاب کرد که بتواند به طور میانگین این شرایط متفاوت را ارضا کند، بیشینه‌ی راندمان نظری برای GaAs (که مناسبترین نیمه رسانا است) در حدود ۲۴٪ است. سلول‌های خورشیدی GaAs با راندمان ۱۱٪ ساخته شده‌اند. در مورد سیلیسیوم راندمان نظری حدود ۲۰٪ است و سلول‌های با راندمان تا ۱۴٪ ساخته شده‌اند.

لامپ نیمه رسانا

یک پیوند p-n نیمه رسانا، که به نحو مطلوبی بایاس شده می‌تواند به عنوان یک گسیلنده‌ی نور (یعنی لامپ نیمه رسانا) عمل کند. یک دیود گسیلنده‌ی نور^۳ (LED) مزیت‌هایی نسبت به لامپ‌های معمولی دارد. از جمله قدرت گسیل بر واحد حجم آن خیلی بیش‌تر و هزینه‌ی ساخت آن خیلی کمتر است. همین طور LED را خیلی سریع‌تر از لامپ‌های معمولی می‌توان مدوله کرد. طراحی اولیه‌ی یک LED شامل یک پیوند p-n بایاس مستقیم نظیر لیزر نیمه‌رسانا می‌باشد (شکل

1 . Photo diode

2 . Solar Cell

3 . Light - Emitting Diode(LED)

۱۸-۷ را ملاحظه نمایید). ولی پایین تر از آستانه‌ی پایداری کار می‌کند و نور گسیل شده از آن یک تابش ناهمدوس است. همان طور که در بخش ۷-۷ توضیح داده شد، الکترون‌ها از ناحیه‌ی n خارج می‌شوند و با عبور از تهی لایه به داخل ناحیه‌ی p می‌روند و در آن جا با حامل‌های اقلیت (حفره‌ها) باز ترکیب می‌شوند و تابشی از دیود گسیل می‌دارند. به طور همزمان حفره‌ها از ناحیه‌ی p به ناحیه‌ی n می‌روند، با الکترون‌ها باز ترکیب می‌شوند و مجدداً در تابش گسیل شده، سهم می‌گردند.

چندین عامل بر عملکرد LED به عنوان یک وسیله الکترو لومینانس تأثیر می‌گذارد. عمده‌ترین آن‌ها گاف انرژی است که در واقع طول موج تابش را تعیین می‌کند. بهترین ماده برای LED، نیمه رسانای GaAs است که گاف انرژی آن 1.42eV است و تابشی در طول موج $\lambda = 9.0\mu$ (در ناحیه‌ی فروسرخ) گسیل می‌دارد. GaP که گاف انرژی آن 2.25eV است در ناحیه‌ی مرئی (قرمز پررنگ) گسیل می‌کند.

یک عامل مهم دیگر به اصطلاح کارآیی کوانتومی داخلی^۱ LED است. یک زوج الکترون - حفره ممکن است در خلال چندین مرحله‌ی میانی به طور تابشی^۲ یا غیر تابشی باز ترکیب شوند که در آن‌ها بالاخره انرژی به شکل گرما تلف می‌شود. در یک قطعه‌ی با راندمان خوب فرآیند تابشی باید فرآیند غالب باشد به طوری که قسمت عمده‌ی انرژی به نور تبدیل گردد. راندمان کوانتومی نسبت گذارهای تابشی به غیر تابشی است. تلفات دیگر مانند تلفات گرمای ژول باید کمینه گردد.

ساختار نواری ماده تأثیر مهمی بر راندمان کوانتومی دارد. از بخش ۱۲-۶ یادآوری می‌کنیم که در نیمه رساناهای گاف مستقیم مانند GaAs که هر دو نوار رسانش و ظرفیت در مبدأ ($k=0$) بیشینه می‌شوند، باز ترکیب تابشی و برانگیختگی خیلی قوی هستند. در نیمه رساناهای گاف غیر مستقیم مانند Ge و Si، باز ترکیب فقط توسط مداخله‌ی فونون‌ها صورت می‌گیرد و این امر احتمال گذار را کاهش می‌دهد (گرچه باز ترکیب و تابش انجام می‌شوند). مطلب فوق این نکته را که چرا GaAs برای لامپ نیمه‌رسانا بر Si برتری دارد، توضیح می‌دهد. راندمان کل وسیله‌ای که از GaP (که یک ماده با گاف غیر مستقیم است) ساخته می‌شود فقط در حدود ۱٪ است. (راندمان کل راباید از راندمان کوانتومی متمایز دانست، راندمان کل تمام عوامل را به حساب می‌آورد. قسمت پایین را ملاحظه نمایید).

1. internal quantum efficiency

2. Radiatively

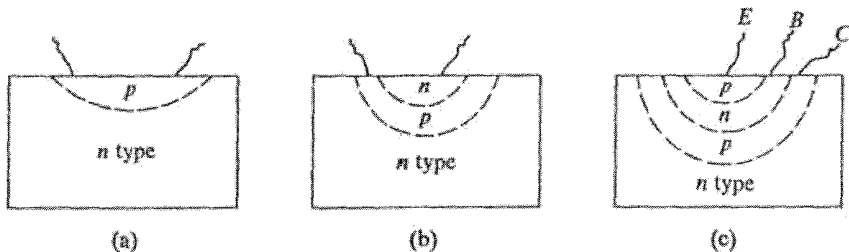
همان طور که گفتیم GaAs بهترین ماده‌ی شناخته شده برای لامپ‌های نیمه‌رسانا است. ولی اشکال آن این است که تابش گسیل شده‌ی آن در ناحیه‌ی فروسرخ است نه در ناحیه‌ی نامریی؛ زیرا گاف انرژی آن کوچک است. با آلیاژ کردن GaAs با نیمه رساناهای دیگر مانند GaP و AlAs می‌توان این گاف را عریض تر کرد. ولی از آن جا که این مواد دارای گاف غیرمستقیم‌اند، نسبت آن‌ها باید کم باشد و گرنه ماده به یک دیود با گاف غیر مستقیم تبدیل خواهد شد. پژوهش‌گران موفق شده‌اند با آلیاژ کردن نیمه رسانهای GaAs و AlAs لامپی بسازند که نور قرمز با طول موج $\lambda = 620 \mu\text{m}$ گسیل کند. یک عامل مهم در بررسی راندمان کل، به ویژه در GaAs بازتاب داخلی تابش در سطح است (هنگامی که نور می‌خواهد از سطح جسم جامد خارج شود). ضریب شکست GaAs نسبتاً زیاد است. ($n=3/4$) و تابش‌هایی که زاویه‌ی تابش فرودی آن‌ها بر سطح $\sin^{-1} > 1/n$ باشد، بازتابیده و به دیود برمی‌گردند و سرانجام انرژی خود را به صورت گرما تلف می‌کنند. با در نظر گرفتن این عوامل مختلف، راندمان کل یعنی نسبت انرژی تابشی به انرژی الکتریکی حاصل از جریان خروجی در لامپ GaAs کمتر از ۱۰٪ است. تابش معمولاً از یک پنجره که در اتصال فلزی طرف n پیوند باز می‌شود خارج می‌گردد. لامپ‌های نیمه رسانا اغلب در وسایل نمایش گر استفاده می‌شوند.

شمارنده‌های حالت جامد

کاربرد نیمه رساناها در آشکارسازی ذرات در فیزیک انرژی‌های بالا بسیار ارزشمند است. وقتی یک ذره‌ی پرانرژی مانند الکترون، پروتون، ذره‌ی α ، پرتو γ یا پرتو X به یک بلور نیمه‌رسانا مانند سیلیسیم یا ژرمانیوم برخورد کند، باعث می‌شود تعداد بسیار زیادی زوج الکترون - حفره تولید شود که می‌توان آن‌ها را توسط دستگاه‌های فوتورسانش مانند آشکارسازهای نوری آشکار کرد. با تعیین نسبت انرژی ذرات فرودی (که معمولاً چندین MeV است) به انرژی لازم برای ایجاد زوج الکترون - حفره (که در حدود ۳eV است) می‌توان تعداد زوج الکترون - حفره‌ها را برآورد کرد. پلاس جریان فوتورسانش متناسب با انرژی ذره‌ی متوقف شده است و به سادگی می‌توان از یک نیمه رسانا برای تعیین این انرژی استفاده کرد.

۷-۹ مدارهای مجتمع و میکروالکترونیک

یکی از مزیت‌های ترانزیستور بر تقویت کننده‌های لامپی ترمیونی اندازه‌ی بسیار کوچک آن است. عناصر مداری بسیار کوچک مانند مقاومت‌ها، خازن‌ها و ترانزیستورها را می‌توان با تکنیک‌های خاص ساخت. علاوه بر آن این میکروعنصرها را می‌توان بر روی یک سطح، که زیر لایه نامیده می‌شود نشانند و لایه‌های فلزی بین آن‌ها را نیز روی همان سطح نشانند که این منجر به یک مدار مجتمع (IC) می‌شود که قادر به اجرا اعمال خیلی پیچیده است. اهمیت موضوع میکروالکترونیک وقتی به خوبی درک می‌شود که توجه کنیم توسعه و تکامل وسایل پیچیده مانند تلویزیون، کامپیوتر، و ماشین حساب بدون مدارهای مجتمع بسیار مشکل و تقریباً غیر ممکن است.



شکل ۷-۲۵. (الف) میکرومقاومت، (ب) میکروخازن، (ج) میکروترانزیستور خطوط موجی شکل
سیم‌های رابط و حروف در شکل (ج) نمایانگر گسیلنده، پایه و جمع‌کننده می‌باشند.

شکل ۷-۲۵ سه عنصر مداری را نشان می‌دهد که از مواد نیمه رسانا ساخته شده‌اند. شکل ۷-۲۵ (الف) یک مقاومت است که مقدار آن با میزان آرایش لایه‌ی p تعیین می‌گردد. شکل ۷-۲۵ (ب) یک خازن است که از یک پیوند p-n ساخته شده است. خواص خازنی چنین پیوندی را با مراجعه به بخش ۳-۷ می‌توان درک کرد. یادآوری می‌کنیم یک تهی دو لایه^۱ شکل می‌گیرد. کسری از این لایه در ناحیه‌ی n بار مثبت می‌گیرد، در حالی که قسمتی که در ناحیه‌ی p است به طور منفی باردار شده است. بار کل دو قسمت به لحاظ بزرگی مساوی است. این توزیع بار مثبت - منفی است که باعث خاصیت خازنی پیوند می‌شود. در هر کدام از دو لایه، بار کل بر واحد سطح پیوند مساوی $|Q| = eN_d w_n$ است. اگر از رابطه‌ی (۷-۳۲) استفاده کنیم، خواهیم داشت:

$$|Q| = \left[\frac{2\epsilon\epsilon_0 N_d N_a}{N_d + N_a} \right]^{1/2}$$

وقتی یک ولتاژ بایاس دو سر پیوند اعمال گردد، در معادله‌ی فوق به جای باید را قرارداد (برای بایاس مستقیم مثبت است). بنابراین

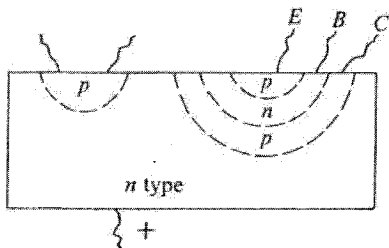
$$|Q| = \left[\frac{\gamma e e (\phi_0 - V_0) N_d N_a}{N_d + N_a} \right]^{1/2} \quad (7-63)$$

و اگر ولتاژ V_0 به اندازه‌ی مقدار جزئی تغییر کند، بار نیز تغییر می‌کند و ظرفیت دیفرانسیلی با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$C = \left| \frac{dQ}{dv_0} \right| = \frac{1}{\gamma} \left[\frac{\gamma e e}{(\phi_0 - V_0)} \frac{N_d N_a}{N_d + N_a} \right]^{1/2} \quad (7-64)$$

همان طور که انتظار می‌رود، ظرفیت خازن به میزان آرایش بستگی دارد؛ وقتی آرایش زیاد باشد، ظرفیت زیاد است و بالعکس. همین طور برای یک ولتاژ بایاس معکوس بزرگ $C \sim (-V_0)^{-1/2}$ است که به طور تجربی در پیوندها تأیید شده است. شکل ۷-۲۵ (ج) یک FET است و توضیح بیش تری لازم ندارد زیرا در بخش ۷-۸ بیان شد.

یادآوری می‌کنیم که در یک مدار مجتمع، همان طور که شکل ۷-۲۶ برای یک مقاومت و یک ترانزیستور پیوندی نشان می‌دهد عناصر روی یک زیرلایه‌ی Si یا تراشه‌ی^۱ نشانده می‌شوند. واضح است که به منظور عملکرد درست قطعه، دو لایه عنصر باید به لحاظ الکتریکی از همدیگر عایق شده باشند یعنی هیچ گونه رسانندگی از طریق زیرلایه‌ی نوع n نباید صورت گیرد. به این منظور زیرلایه را با یک پتانسیل زیاد بایاس می‌کنند به طوری که پیوند مقاومت - زیرلایه و پیوند ترانزیستور - زیرلایه هر دو بایاس معکوس باشند و در نتیجه تنها یک جریان الکتریکی قابل چشم پوشی بتواند بین دو عنصر جریان یابد.



شکل ۷-۲۶ یک میکرومقاومت و میکروترانزیستور روی یک زیرلایه‌ی مشترک پتانسیل مثبت برای ایزوله کردن عناصر است.

و سرانجام راجع به آلایش‌های مختلف که روی زیر لایه نشانده می‌شوند، بحث می‌کنیم. روش سنتی ساخت پیوند p-n این است که از یک قطعه‌ی میله‌ای ژرمانیوم آغاز می‌کنند. یک طرف آن را با یک فلز سه ظرفیتی آلیاژ می‌کنند. سپس بلور ژرمانیوم را تا دمای چند صد درجه حرارت می‌دهند تا این که فلز ذوب شود و در ژرمانیوم حل شود. سپس تمام نمونه را تا دمای اتاق سرد می‌کنند و می‌گذارند Ge با پذیرنده‌های کافی مجدداً بلوری شود و یک ناحیه‌ی p در یک طرف نمونه شکل بگیرد.

ولی این تکنیک آن قدر دقیق نیست که بتوان از آن در مدارهای مجتمع استفاده کرد. زیرا عرض لایه‌ها در مدارهای مجتمع خیلی کوچک است و نیاز به کنترل بسیار زیاد و تکنیک‌های دقیق دارد. در زیر به چندین روش موجود اشاره می‌کنیم.

۱) پخش کنترل شده^۱ یک تراشه از ماده‌ی زیرلایه را داخل یک اتاقک قرار می‌دهند و غلظت یک‌نواختی از ناخالصی‌های مناسب را به حالت گاز در اطراف آن نگه می‌دارند. با افزایش دمای سیستم، ناخالصی‌ها به داخل تراشه پخش می‌شوند. عمق نفوذ^۲ به دما، زمان فرآیند و طبیعت ناخالصی بستگی دارد (بخش ۴-۱۱). با کنترل این متغیرها می‌توان به عمق نفوذ مناسب دست یافت. [مقاومت در شکل ۲۰-۷ الف را می‌توان به این روش ساخت].

اگر یک لایه‌ی جدید و متفاوت مورد نیاز باشد، (همان طور که در ترانزیستور این طور است)، لایه‌ی جدید را می‌توان روی لایه‌ی قبلی ولی با عمق کمتر پخش نمود. این تکنیک یک اشکال دارد، و آن این است که در لایه‌ی جدید، هم ناخالصی‌های لایه‌ی قبلی وجود دارد. زیرا پخش ناخالصی‌های جدید در لایه‌ی رویی، ناخالصی‌های قبلی را خارج نمی‌کند. اگر این فرآیند برای چندین لایه تکرار شود، لایه‌های مختلف با غلظت‌های متفاوت ناخالصی به دست می‌آید و در نتیجه رسانایی رو به تزاید می‌رود برای اجتناب از این امر، یک تکنیک جدید که روش رشد بر آراستی^۳ توسعه یافته است.

۲) رشد بر آراستی- با قرار دادن یک تراشه در یک اتاقک با سیستم برهم کنش‌گازی لایه‌ای از ناخالصی مورد نظر (Si یا Ge) از محیط‌گازی جدا شده و مستقیماً روی تراشه انباشته می‌شود. این عمل لایه‌ی نشانی به قدری آهسته صورت می‌گیرد که پیوستگی بلوری بین تراشه و لایه‌های جدید

حفظ می شود.

(۳) یون نشانی^۱ - روش سوم که به طور فزاینده‌ای مورد استفاده قرار گرفته است یون نشانی است. این تکنیک ناخالصی‌های مورد نظر بعد از شتاب دار کردن در یک شتاب‌دهنده استاتیک به طرف سطح نیمه رسانا پرتاب می شوند. عمق نفوذ به پتانسیل شتاب‌دهی بستگی دارد. با تغییر این عمق می توان محدوده‌ی وسیعی از پروفایل ناخالصی‌ها را تهیه کرد. پتانسیل‌هایی که بدین منظور استفاده می شود از مرتبه‌ی kV است و عمق‌ها نوعاً در حدود 100 \AA است.^۲

با به کار بردن این تکنیک‌ها می توان مدارهایی با اجزاء بسیار کوچک ساخت. مثلاً یک تراشه سیلیسیم به مساحت 2 mm^2 شامل بیش از 300 عنصر است. مطمئناً در آینده قطعات مدارها میناتور می شوند. در سال‌های اخیر، این شاخه از علوم توسعه سریعی داشته است و در حدود ۳۰٪ تجارت امریکا بواسطه‌ی فروش قطعات و مدارهای مجتمع الکترونیکی بوده است.

مزیت مدارهای مجتمع بر مدارهای معمولی به قرار زیر است: (۱) کاهش قابل ملاحظه‌ی حجم که بویژه در وسایلی مانند کامپیوتر خیلی مهم است. (۲) قابل اعتماد بودن (۳) کاهش قابل ملاحظه‌ی قیمت. عیب اصلی ICها این است که اگر یک قسمتی از آن، حتی فقط یک عنصر آن صدمه ببیند و خراب شود، تمام مدار مجتمع غیر قابل استفاده می شود و باید تعویض گردد.

تأثیر پدیده‌ی IC را در آموزش مهندسی آینده می توان با این جمله‌ی بیفورت^۳ توصیف کرد: تا قبل از اختراع مدارهای مجتمع، لازم بود مهندسی الکترونیک با طراحی مدارهای پایه آشنا باشند. حالا دیگر این امر خیلی مهم نیست زیرا محدوده‌ی وسیعی از مدارای مجتمع به سرعت در دسترس قرار گرفته‌اند. مهندسی فارغ شده‌اند تا به کل سیستم پردازند. دیگر نیازی نیست معماران نگران این باشند که تک تک آجرها از چه ساخته شده‌اند.

1. Ion implantation

۲- یک مقاله‌ی خواندنی در مورد روش‌های یونی نشانی شامل روش‌های تجربی و تصاویر مختلف را در مرجع زیر بیابید.

F.F. Morehead, Jr. and B.I. Crowder, Scientific American, 228, April 1973

نکته‌ی مهم در این روش این است که بعد از لایه نشانی، نمونه حرارت دهی (anneal) می شود تا جایجایی‌های اتم‌های مهمان و تهی جاهای تولید شده در اثر برخورد یون‌های فرودی در اتم‌های مهمان از بین برود. مکانیسم این کار در بخش ۳-۱۱ بحث شده است.

3. Beeforth

خلاصه

پیوند p-n و یکسوسازی

هنگامی که یک پیوند p-n شکل می گیرد، حامل های بار (الکترون ها و حفره ها) در طول پیوند پخش می شوند. الکترون ها از طرف n به طرف p پیوند و حفره ها در خلاف جهت الکترون ها جریان می یابند. به دلیل جریان یافتن بارها، طرف p یک پتانسیل تماس منفی ϕ_0 نسبت به طرف n کسب می کند. مقدار ϕ_0 برابر است با

$$\phi_0 = \frac{k_B T}{e} \log \left(\frac{N_d N_a}{n_i^2} \right)$$

که N_d و N_a به ترتیب چگالی اتم های بخشنده و پذیرنده در دو طرف پیوند هستند. پیوند به عنوان یک یکسو کننده عمل می کند. رابطه ی بین ولتاژ جریان به شکل زیر است:

$$I = I_0 (e^{eV_0/k_B T} - 1)$$

که V_0 ولتاژ بایاس است. وقتی این ولتاژ در جهت مستقیم باشد $V_0 > 0$ و $e^{eV_0/k_B T} \gg 1$ است. بنابراین:

$$I \cong I_0 e^{eV_0/k_B T}$$

جریان زیاد است و سریعاً با ولتاژ افزایش می یابد. ولی برای بایاس معکوس که $V_0 < 0$ و $e^{eV_0/k_B T} \ll 1$ است، داریم:

$$I = -I_0$$

حالا جریان کم و مستقل از ولتاژ است.

ترانزیستور پیوندی

یک ترانزیستور پیوندی ساختاری است مرکب از دو پیوند که پشت به پشت به همدیگر اتصال دارند. یکی از آن ها که گسیلنده نام دارد، مستقیم بایاس شده و دیگری که جمع کننده نام دارد، بایاس معکوس دارد. گسیلنده، حامل های اقلیت را به طرف پایه تزریق می کند، حامل ها در عرض پایه پخش می شوند و به جمع کننده می رسند. هنگامی که یک سیگنال الکتریکی به گسیلنده اعمال می گردد پالس مربوط به حامل ها از پایه و جمع کننده می گذرد. و سیگنال تقویت شده از یک مقاومت بار که در مدار جمع کننده قرار داده شده، برداشته می شود. بهره ی ولتاژ برابر است با:

$$\frac{dV_l}{dV_e} = \frac{\alpha R_l I_e}{k_B T / e}$$

بهره را می‌توان با افزایش پارامتر α افزایش داد. این کار را می‌توان با افزایش راندمان تزریق و کاهش ضخامت لایه‌ی پایه نیز انجام داد.

دیود تونل

هنگامی که آلایش در پیوند p-n خیلی زیاد است، عرض پیوند خیلی کوچک می‌شود و امکان تونل زدن حامل‌ها از عرض گاف انرژی میسر می‌گردد. اگر پیوند در جهت مستقیم بایاس شده باشد، ناحیه‌ای با رسانایی دیفرانسیلی منفی (NDC) حاصل می‌شود. این NDC برای طراحی تقویت کننده‌های الکتریکی و نوسانگرها در ناحیه‌ی میکروموج مناسب است.

دیودگان

هنگامی که یک میدان الکتریکی قوی بر یک نمونه‌ی GaAs یا نمونه‌های دیگری با ساختار نواری مشابه با GaAs اعمال گردد، باز هم ناحیه‌ی NDC ایجاد می‌گردد. از این خاصیت می‌توان برای طراحی تقویت کننده‌های میکروموج و نوسانگرها استفاده کرد.

دو مد متفاوت نوسان امکان‌پذیر است. در مد گان، نمونه به دو ناحیه تقسیم می‌شود یک ناحیه با میدان الکتریکی خیلی زیاد که حوزه‌ی گان نامیده می‌شود و ناحیه‌ای با میدان الکتریکی خیلی پایین که بقیه حجم نمونه است. فرکانس نوسان مد گان مساوی فرکانس زمان گذار است.

$$v_0 = \frac{V_d}{L}$$

که v_d سرعت سوق الکترون و L طول نمونه است.

در مد دیگر که مد LSA است، با اعمال یک سیگنال که فرکانس آن بزرگ‌تر از v_0 باشد، می‌توان از شکل‌گیری حوزه جلوگیری کرد. در این مد، دیود به منزله‌ی یک عنصر با مشخصه‌ی NDC واقعی عمل می‌کند.

لیزر نیمه رسانا

در نیمه رساناها می‌توان با وارون کردن جمعیت نوارهای ظرفیت و رسانش به عمل لیزری رسید.

این وارن سازی برای نخستین بار در یک پیوند p-n که به شدت آلائیده شده بود میسر گردید. ولی روش‌های دیگر نیز ممکن است. فرکانس تابش هم‌دوس گسیل شده نزدیک به فرکانس لبه‌ی بنیادی نیمه رسانا، یعنی $\frac{E_g}{h}$ است. عمل لیزری فقط در نیمه رساناهای گاف مستقیم میسر است (به دلیل اصل پایستگی اندازه حرکت).

وسایل و قطعات دیگر نیمه رسانا

قطعات دیگر نیمه رسانا نیز هستند که مهم‌ترین آن‌ها عبارتند از آشکارسازهای نوری یا فروسرخ که در آن شدت تابش توسط اندازه‌گیری جریان فوتورسانش در یک نمونه‌ی نیمه رسانا تعیین می‌گردد و ترانزیستورهای اثر میدان (FET). هر دوی این قطعات مزایایی بر ترانزیستورهای پیوندی دارند.

References

General references

- W. R. Beam, 1965, Electronics of Solids, New York: Mc GrawHill
- T. H. Beeforth and H. J. Goldsmid, 1970, Physics of Solid State Devices, London: Pion Ltd.
- D. F. Dunster, 1969, Semiconductors for Engineers, London: Business Books Lts.
- J. K. Jonscher, 1965, Principles of Semiconductor Device Operation, London: Bell and Sons
- J. H. Leck, 1967, Theory of Semiconductor Junction Devieces, New York: Pergamon Press
- J. P. McKelvey, 1966, Solid State and Semiconductor Physics, New York:Harper and Row
- M. J. Morand, 1964, Introduction to Semiconductor Dervices, Reading,Mass: Addison – Wesley
- A. Nussbaum, 1964, Semiconductor Device Physics, Englewood Cliffs, N. J.: Prentice Hall
- J. F. Pierce, 1967, Semiconductor Junction Devices, Merrill Books, Inc.
- E. Spenke, 1958, Electronic Semiconductors, New York: Mc GrawHill
- S. M. Sze, 1969, Physics of Semiconductor Devices, New York: John Wiley
- L. V. Valdes, 1961, Physical Theory of the Transistor, New York: McGrawHill
- A. van Ziel, 1968, Solid State Physical Electronics, second edition, Englewood Clifis, N.J.: PrenticeHall

Microwave devices; the Gunn diode

- H. A. Watson, editor, 1964, Microwave Semiconductor Devices and their Circuit Applications, New York: Mc GrawHill
- See also books by Dunster, van der Ziel, and Sze listed above under eneral References

Semiconducotr lasers

- A. G. Milnes and D. L. Feucht, 1972, Heterojunctions and Metal – Semiconductor Junctions, New York: Academic Press
- J. I. Pankove, 1971, Optical Processes in Semiconductors, Englewood Cliffs, N. J.: Prentice-Hall
- A. E. Siegman, 1971, An Introduction to Lasers and Masers, New York: McGraw-Hill
- A. Yariv, 1967, Quatum Electronics, New York: John Wiley

Integrated circuits

- R. M. Burger and R. P. Donovan, editors, 1968, Fundamentals of Silicon Integrated Device Technology, Volume 2, Englewood Cliffs, N. J.: Prentice –Hall
- K. J. Dean, 1967, Interated Electronices, London: Chapman and Hall
- J. Eimbinder, 1968, Linear Integrated Circuitis: Theory and Applications, New York: Jhon Wiley
- D. K. Lynn and C. S. Meyer, 1967 Analysis and Design of Integrated Circuits, New York: McGrawHiss

- S. Schartz, editor, 1967 Integrated Circuit Technology, New York: McGrawHill
R. M. Warner and J. N. Fordenwalt, editors, 1965, Integrated circuit Design,
Principles and Fabrication, New Youk: McGrawHill

پرسش‌ها

- ۱- موقعیت تراز فرمی در یک پیوند در حال تعادل p-n را به طور کیفی نشان دهید. از یک شکل شبیه به شکل ۲-۷ استفاده نمایید.
- ۲- در به دست آوردن معادله یکسو سازی در بخش ۲-۷ یک تقریب منظور کردیم و آن این که تمام ولتاژ بایاس در دوسر بایاس ظاهر می‌شود. آیا این تقریب برای بایاس مستقیم یا معکوس هم برقرار است؟ توضیح دهید.
- ۳- یک پیوند در حال تعادل فلز-نیمه‌رسانا را توصیف کنید.
- ۴- فرض کنید که پیوند در حال تعادل p-n را با یک تکه سیم فلزی اتصال کوتاه کنیم. آیا پتانسیل تماس پیوند یک جریان الکتریکی در مدار ایجاد می‌کند؟ توضیح دهید. برای کل مدار یک دیاگرام نوار-انرژی مناسب رسم کنید.
- ۵- موقعیت ترازهای فرمی را در یک پیوند p-n بایاس شده به طور کیفی نشان دهید.
- ۶- در یک ترانزیستور p-n-p هنگامی که حفره‌ها در درون پایه پخش می‌شوند، کسر معینی از آن‌ها با الکترون‌ها باز ترکیب و ناپدید می‌شوند. آیا این واقعیت که Si یک نیمه رسانای گاف غیر مستقیم است کارکرد ترانزیستور سیلیسیوم را بهبود می‌بخشد یا مانع کار آن می‌شود؟
- ۷- فرض کنید که اختلاف انرژی بین انتهای دره‌های مرکزی و ثانویه در GaAs به تدریج کاهش یابد تا ناپدید شود آیا انتظار دارید اثر گان در این محدوده مشاهده گردد.
- ۸- با آلیاژ کردن GaAs با فسفر و تولید GaAsP طول موج تابش گسیل از یک لیزر GaAs از 9000 \AA به 7000 \AA کاهش می‌یابد. توضیح دهید چرا؟

مسائل

۱- معادله‌ی (۶-۷) را برای جریان حفره‌ها در یک پیوند p-n با یاس مستقیم به دست آورید.

۲- جریان اشباع برای یک پیوند p-n در دمای اتاق 2×10^{-6} آمپر است. منحنی نمایش جریان بر حسب ولتاژ را در محدوده‌ی ۵- تا ۱ ولت رسم نمایید. مقاومت دیفرانسیلی در ولتاژ با یاس معکوس یک ولت و با یاس مستقیم ۰/۲۵ ولت را بیابید و نتیجه را با هم مقایسه نمایید.

۳- با حل معادله پواسن (رابطه‌ی ۳۱-۷)، معادله‌ی (۳۲-۷) را برای شرایط مرزی مناسب به دست آورید.

۴- الف) پتانسیل تماس برای یک پیوند p-n در ژرمانیوم را در دمای اتاق تعیین کنید، چگالی حامل‌های بخشنده را 10^{18} cm^{-3} و چگالی حامل‌های پذیرنده را $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ بگیرید. فرض کنید ناخالصی‌ها کاملاً یونیده هستند.

ب) عرض تهی لایه پیوند را محاسبه نمایید.

ج) میدان الکتریکی در مرکز پیوند را محاسبه نمایید.

د) تهی دو لایه که مانند یک خازن عمل می‌کند، شامل نواحی تهی در طرف‌های مقابل پیوند است که بارهای مساوی و مخالف دارند. ظرفیت بر واحد پیوند این خازن را محاسبه نمایید.

۵- مسأله ۴ را برای سیلیسیوم که ثابت دی الکتریک آن $\epsilon_0 = 12$ است محاسبه نمایید.

۶- با استفاده از معادله یکسو کننده، مقاومت دیفرانسیلی یک پیوند p-n ژرمانیوم (مسأله ۴) به مساحت 1 mm^2 را تحت شرایط با یاس مستقیم ۰/۲۵ ولت محاسبه نمایید. زمان باز ترکیب را $\tau_e = \tau_h = 10^{-6} \text{ s}$ بگیرید جواب را با مقاومت یک نمونه‌ی ذاتی با طولی مساوی با تهی لایه پیوند مقایسه نمایید.

۷- دیاگرام نوار-انرژی را برای ترانزیستور p-n-p در حال تعادل رسم کنید. منحنی نمایش چگالی حفره‌ها را بر حسب مکان در طول ساختار ماده رسم نمایید.

۸- مسأله ۷ را برای با یاس مناسب اعمال شده به ترانزیستور تکرار نمایید.

۹- معادله‌ی (۸۳-۷) را برای بهره‌ی ولتاژ در یک ترانزیستور پیوندی به دست آورید.

۱۰- معادله‌ی (۳۹-۷) را برای بهره‌ی توان در یک ترانزیستور پیوندی به دست آورید.

۱۱- طرز کار یک ترانزیستور p-n-p را توضیح دهید و عبارت‌هایی برای بهره‌های ولتاژ و توان در چنین ساختاری به دست آورید.

۱۲- توضیحاتی که Sze (۱۹۶۹) برای طرز کار ترانزیستور اثر میدان ارائه کرد، مطالعه کنید. فرآیندهای فیزیکی و مشخصه‌های مربوط به این قطعه را خلاصه نمایید.

۱۳- آرایش لازم برای کارکرد یک دیود تونل GaAs را برآورد کنید n_d را مساوی n_a بگیرد و فرض کنید وقتی فاصله‌ی افقی گاف انرژی 75 A° شود، تونل زنی قابل ملاحظه می‌گردد. می‌توانید از نتایجی که در بخش ۳-۷ به دست آمد، استفاده کنید.

۱۴- الف) با استفاده از معادله‌ی پیوستگی و معادله‌ی پواسن نشان دهید که بار جایگزیده‌ی اضافی در یک نیمه رسانا بر حسب زمان بر طبق رابطه‌ی $\Delta\rho(t) = \Delta\rho(0)e^{-t/\tau_D}$ کاهش می‌یابد که، $\tau_D = \frac{\epsilon}{\sigma}$ زمان و اهلش دی‌الکتریک و $\Delta\rho(0)$ چگالی بارهای اضافی اولیه است.

ب) τ_D را برای GaAs در میدان پایین برای یک چگالی حامل‌های 10^{21} m^{-3} محاسبه نمایید.

۱۵- یک دستگاه مختصات کارتزین رسم کنید که محور طول‌های آن حاصل ضرب n_0L و محور عرض‌ها حاصل ضرب vL باشد. نواحی مختلف در صفحه را که متناظر با مد گان و مد LSA در GaAs است، مشخص نمایید.

۱۶- رابطه‌ی (۶۱-۷) برای جریان آستانه در یک لیزر تزریقی را به دست آورید.

۱۷- عمل لیزری در یک نیمه رسانای لیزری ممکن است تحت تأثیر چندین عامل مانند دما، فشار، میدان مغناطیسی و غیره قرار گیرد. این آثار در فصل ۱۰ کتاب (Pankove ۱۹۷۱) آمده است. این فصل را بخوانید و خلاصه‌ای از آن تهیه نمایید.

۱۸- علاوه بر تکنیک‌های تزریقی در پیوند p-n، روش‌های مختلف دیگری برای ایجاد وارونی جمعیت در لیزرهای نیمه رسانا به کار گرفته شده است. مروری بر این روش‌ها در کتاب (Pankove ۱۹۷۱) آمده است این مطلب را بخوانید و خلاصه‌ای از آن را که شامل دیاگرام‌ها و نحوه‌ی انجام آزمایش‌ها باشد، ارائه دهید.

فصل هشتم

خواص دی الکتریک و اپتیکی جامدات

- ۸-۱ مقدمه
- ۸-۲ مروری بر فرمول‌های بنیادی
- ۸-۳ ثابت دی الکتریک و قطبش پذیری؛ میدان موضعی
- ۸-۴ چشمه‌های قطبش پذیری
- ۸-۵ قطبش پذیری دو قطبی
- ۸-۶ پاشندگی دو قطبی
- ۸-۷ قطبیدگی دو قطبی در جامدات
- ۸-۸ قطبش پذیری یونی
- ۸-۹ قطبش پذیری الکتریکی
- ۸-۱۰ پیزوالکتریسیته
- ۸-۱۱ فروالکتریسیته

در این فصل راجع به خواص اپتیکی و دی الکتریک جامدات و فازهای دیگر مواد بحث می کنیم. این خواص در گستره وسیعی از فرکانس ها، از استاتیک تا ناحیه فرابنفش گسترش دارد، و اطلاعات ارزش مندی در مورد خواص فیزیکی و ساختار ماده ارایه می دهند.

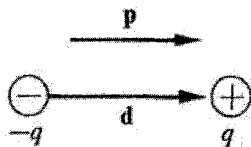
بعد از یک مرور مقدماتی، ثابت دی الکتریک را به خواص قطبیدگی مولکول های تشکیل دهنده ی جسم ارتباط می دهیم. سپس منابع مختلف قطبش مولکولی، نظیر سهم های دو قطبی، یونی و الکتریکی را بررسی می کنیم. سرانجام دو خاصیت مهم: پیزوالکتریسیته و فروالکتریسیته را بررسی می نماییم. هر دو این خواص به قطبش پذیری یونی مربوط هستند.

۸-۲ مروری بر فرمول های بنیادی

در این بخش مروری خواهیم داشت بر فرمول های اساسی که در بخش های بعدی مورد استفاده قرار می گیرند. مهم ترین مفهوم در این بخش دو قطبی الکتریکی و گشتاور آن است. یک دو قطبی الکتریکی از دو بار مساوی و مختلف علامه q و $-q$ مطابق شکل ۸-۱ تشکیل یافته است. گشتاور این دو قطبی به صورت زیر تعریف می شود:

$$p=qd \quad (۸-۱)$$

که d بردار فاصله ی بین بار منفی و بار مثبت است.^۱ بنابراین گشتاور دو قطبی الکتریکی برابر است با یکی از بارها ضرب در فاصله ی جدایی آن ها.



شکل ۸-۱ یک دو قطبی الکتریکی

دو قطبی الکتریکی، یک میدان الکتریکی ایجاد می کند که با محاسبه ی میدان حاصل از هر کدام از بارها بر اساس قانون کولن و جمع آن ها می توان آن را محاسبه کرد. نتیجه به صورت زیر

۱- استفاده از علامت p برای گشتاور دو قطبی، نباید باعث اشتباه با اندازه حرکت خطی شود. زیرا اندازه ی حرکت خطی اساساً در این فصل مطرح نمی شود.

می شود:

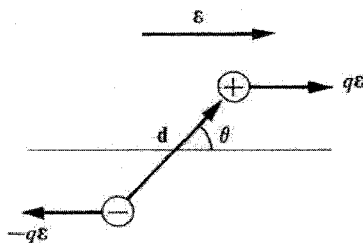
$$\varepsilon = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{r^3(p \cdot r) - r^2 p}{r^5} \quad (۸-۲)$$

که میدان را بر حسب بردار r محاسبه می نماید. r برداری است که دو قطبی را به نقطه‌ی محاسبه‌ی میدان، متصل می کند. و p گشتاور دو قطبی الکتریکی است، در به دست آوردن این عبارت فرض کرده‌ایم $d \gg r$ است یعنی عبارت (۸-۲) فقط برای نقاط دور از خود دو قطبی معتبر است. در اتم‌ها و مولکول‌ها این شرط به خوبی برقرار است، زیرا d از مرتبه‌ی بزرگی قطر اتمی و خیلی کوچک است.

هنگامی که یک دو قطبی در یک میدان الکتریکی خارجی قرار گیرد، با میدان برهم کنش می کند. میدان، یک گشتاور نیرو بر دو قطبی وارد می کند که با رابطه‌ی زیر بیان می شود.

$$\tau = p \times \varepsilon \quad (۸-۳)$$

که ε میدان اعمال شده است (شکل ۸-۲). بزرگی گشتاور نیرو مساوی $\tau = p \varepsilon \sin \theta$ است که θ زاویه‌ی بین جهت‌های میدان و گشتاور است و جهت τ طوری است که می خواهد گشتاور را در امتداد میدان قرار دهد. این تمایل به هم جهت کردن گشتاور با میدان خارجی خاصیت مهمی است که پیوسته در بحث‌های بعدی مورد استفاده قرار می گیرد.



شکل ۸-۲ گشتاور وارد بر یک دو قطبی در یک میدان الکتریکی. بردارهای $\hbar \varepsilon$ و $-\hbar \varepsilon$ نمایانگر بروهای وارد بر هر یک از بارهای نقطه‌ای دو قطبی هستند.

روش معادل دیگر برای بیان برهم کنش میدان با دو قطبی این است که این برهم کنش بر حسب انرژی پتانسیل به صورت زیر بیان گردد.

$$V = -p \cdot \varepsilon = -p\varepsilon \cos\theta \quad (۸-۴)$$

که V انرژی پتانسیل دو قطبی است. ملاحظه می کنیم که انرژی به زاویه θ بستگی دارد و بین $-p\varepsilon$ (وقتی که دو قطبی در امتداد میدان است) و $p\varepsilon$ (هنگامی که دو قطبی در خلاف جهت میدان قرار دارد)، تغییر می کند. از آن جا که انرژی وقتی کمینه است که دو قطبی موازی با میدان شود، نتیجه می شود که این همان جهت مرجح است؛ یعنی دو قطبی تمایل دارد خود را با میدان هم جهت کند. البته این مشابه همان نتیجه ای است که در بالا بر اساس بررسی گشتاور نیرو به آن رسیدیم.

در بحث مواد دی الکتریک، معمولاً راجع به P که بردار قطبش مواد است، بحث می کنیم. این بردار به صورت گشتاور دو قطبی الکتریکی بر واحد حجم تعریف می شود. اگر تعداد مولکولها بر واحد حجم N و گشتاور دو قطبی هر یک p باشد، قطبش با رابطه ی زیر بیان می گردد.^۱

$$P = N p \quad (۸-۵)$$

که فرض کرده ایم گشتاورهای مولکولی در یک جهت قرار دارند. هنگامی که محیطی قطبیده شود، خواص الکترومغناطیس آن تغییر می کند، این نکته با معادله ی زیر بیان می شود.

$$D = \varepsilon_0 \varepsilon + P \quad (۸-۶)$$

که D بردار جابه جایی، ε میدان الکتریکی در محیط است. به خوبی می دانیم که بردار D فقط به چشمه های خارجی ایجاد کننده ی میدان خارجی بستگی دارد و تحت تأثیر قطبش محیط قرار نمی گیرد.^۲ در نتیجه میدان خارجی ε_0 یعنی میدان خارجی دی الکتریک در رابطه ی زیر صدق می کند.

$$D = \varepsilon_0 \varepsilon \quad (۸-۷)$$

اگر این رابطه را با رابطه ی (۸-۶) مقایسه کنیم، درمی یابیم:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 - \frac{1}{\varepsilon_0} P \quad (۸-۸)$$

که نشان می دهد تأثیر قطبش این است که میدان داخل محیط دی الکتریک را تغییر می دهد. در

۱- در این فصل چگالی را به N (و نه n) نشان می دهیم و آن تعداد مولکولها یا اتمها بر واحد حجم است.

۲- مرجع زیر را ملاحظه نمایید.

حالت کلی میدان را کاهش می‌دهد.

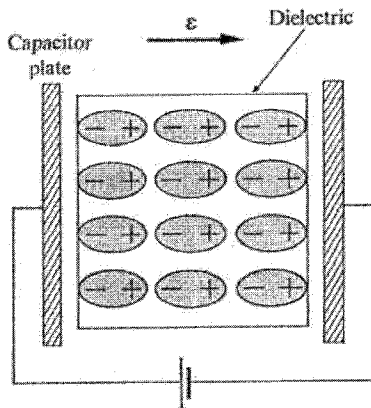
معادله (۸-۶) معمولاً به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$D = \epsilon \mathcal{E} = \epsilon_0 \epsilon_r \mathcal{E} \quad (۸-۹)$$

که ϵ_r ثابت دی‌الکتریک نسبی است، و نشان دهنده‌ی خواص محیط دی‌الکتریک است.

$$\epsilon_r = \frac{\epsilon}{\epsilon_0} \quad (۸-۱۰)$$

ϵ_r تمام خواص اپتیکی و دی‌الکتریکی مواد را شامل می‌شود، و در واقع بسیاری از مطالب این فصل راجع به محاسبه‌ی ϵ_r تحت شرایط گوناگون است. با اندازه‌گیری ثابت دی‌الکتریک محیط می‌توان اطلاعات زیادی راجع به محیط به دست آورد. از این به بعد ثابت دی‌الکتریک نسبی را برای سادگی ثابت دی‌الکتریک می‌نامیم. زیرا در واقع به ثابت دی‌الکتریک واقعی $\epsilon_r = \epsilon_0 \epsilon_r$ نیاز داریم.



شکل ۳-۸ آزمایشی برای اندازه‌گیری ثابت دی‌الکتریک. به قطبیدگی مولکول‌ها در جسم جامد توجه کنید.

شکل ۳-۸ روش ساده‌ای برای اندازه‌گیری ثابت دی‌الکتریک ارائه می‌دهد. صفحات خازن به یک باتری وصل می‌شود و آن را باردار می‌کند. وقتی هیچ ماده‌ی دی‌الکتریک بین صفحات خازن نیست، میدان الکتریکی که توسط بارها ایجاد می‌شود ϵ_0 است که این میدان را می‌توان با اندازه‌گیری اختلاف پتانسیل V_0 دو سر خازن و استفاده از رابطه‌ی زیر محاسبه نمود.

$$\epsilon_0 = \frac{V_0}{L} \quad (۸-۱۱)$$

که L فاصله‌ی بین صفحات خازن است. حال اگر یک بره دی الکتریک بین صفحات قرار گیرد، میدان ϵ_0 باعث قطبیده شدن محیط می‌شود، یعنی گشتاورهای دو قطبی در امتداد میدان قرار می‌گیرند و در نتیجه مقدار جدید میدان ϵ خواهد شد. این میدان جدید را می‌توان با اندازه‌گیری اختلاف پتانسیل جدید V توسط یک ولت متر و استفاده از رابطه‌ی زیر تعیین کرد.

$$\epsilon = \frac{V}{L} \quad (۸-۱۲)$$

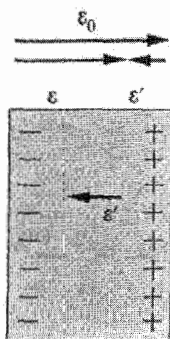
ثابت دی الکتریک بر حسب میدان‌های ϵ_0 و ϵ به صورت زیر بین می‌شود.

$$\epsilon_r = \frac{\epsilon_0}{\epsilon} \quad (۸-۱۳)$$

که از مقایسه روابط (۸-۹) و (۸-۱۰) به دست آمده است. در نتیجه خواهیم داشت:

$$\epsilon_r = \frac{V_0}{V} \quad (۸-۱۴)$$

که از روابط (۸-۱۱) و (۸-۱۲) استفاده کرده‌ایم. بنابراین می‌توان با اندازه‌گیری اختلاف پتانسیل دو سر خازن با و بدون حضور دی الکتریک ثابت دی الکتریک را اندازه‌گیری کرد.



شکل ۸-۴ میدان ϵ مربوط به بارهای قطبشی در خلاف جهت میدان خارجی ϵ_0 است. میدان منتهی می‌شود.

شکل ۸-۴ نشان می‌دهد که چرا قطبش محیط میدان الکتریکی را کاهش می‌دهد. اثر قطبش این است که بارهای قطبشی خالصی در دو وجه دی الکتریک ایجاد کند. (بارهای مثبت در طرف

راست و بارهای منفی در طرف چپ) بارهای دو قطبی داخل محیط همدیگر را خنثی می‌کنند. این بارها، میدان الکتریکی خود را تولید می‌کنند که جهت آن به طرف چپ، و بنابراین در خلاف جهت میدان خارجی ϵ_0 است. هنگامی که این میدان قطبشی با میدان خارجی ϵ جمع برداری شود، میدان منتهی ϵ می‌شود که $\epsilon_0 < \epsilon$ است. اگر این نتیجه را با رابطه‌ی (۸-۱۲) ترکیب کنیم به یک نتیجه‌ی مفید می‌رسیم: ثابت دی‌الکتریک محیط‌های دی‌الکتریک همیشه بزرگ‌تر از یک است.^۱

۳-۸ ثابت دی‌الکتریک و قطبش پذیری؛ میدان موضعی

از آن جا که قطبیدگی یک محیط، یعنی آرایش گشتاورهای مولکولی آن، توسط میدان ایجاد می‌شود، منطقی است که فرض کنیم، گشتاورهای مولکولی متناسب با میدان هستند. بنابراین می‌توان نوشت:

$$p = \alpha \epsilon \quad (۸-۱۵)$$

که ثابت، قطبش‌پذیری مولکول نامیده می‌شود. انتظار می‌رود که رابطه‌ی (۸-۱۵) به جز در شرایطی که میدان خیلی بزرگ است، درست باشد. در چنین شرایط باید جملات دیگری به رابطه‌ی (۸-۱۵) اضافه شود تا بتوان p را به صورت سری تیلور بر حسب ϵ بسط داد. معادله‌ی (۸-۱۵) را می‌توان به صورت تقریب جمله‌ی اول آن بسط در نظر گرفت. (جملات مرتبه‌های بالاتر به آثار غیرخطی منجر می‌شوند)

حال قطبش P را می‌توان به این صورت نوشت:

$$p = N \alpha \epsilon \quad (۸-۱۶)$$

که با جایگزینی در رابطه‌ی (۸-۶) رابطه‌ی زیر به دست می‌آید.

$$D = \epsilon_0 \epsilon + N \alpha \epsilon = \epsilon_0 \left(1 + \frac{N \alpha}{\epsilon_0} \right) \epsilon \quad (۸-۱۷)$$

از مقایسه این رابطه با رابطه‌ی (۸-۹) خواهیم داشت:

$$\epsilon_r = 1 + \left(\frac{N \alpha}{\epsilon_0} \right) \quad (۸-۱۸)$$

۱- این نتیجه‌گیری الزاماً در فرکانس‌های بالا درست نیست. بخش ۹-۸ را ملاحظه نمایید.

که ثابت دی الکتریک را بر حسب قطبش پذیری بیان می کند. این یک رابطه مفیدی است، زیرا کمیت ماکروسکوپی ϵ_r را بر حسب کمیت میکروسکوپی α بیان می کند. بنابراین یک رابطه بین دو توصیف مختلف از مواد دی الکتریک ارائه می دهد.

پذیرفتاری الکتریکی χ^1 یک محیط به صورت رابطه زیر تعریف می شود.

$$P = \epsilon_0 \chi \epsilon \quad (۸-۱۹)$$

که قطبش را به میدان مربوط می کند. از مقایسه این معادله با رابطه ی (۸-۱۶)، درمی یابیم که پذیرفتاری و قطبش با رابطه ی زیر به همدیگر مربوط اند.

$$\chi = \frac{N\alpha}{\epsilon_0} \quad (۸-۲۰)$$

و بنابراین معادله ی (۸-۱۸) را می توان به صورت زیر نوشت:

$$\epsilon_r = 1 + \chi \quad (۸-۲۱)$$

بنابراین اختلاف ثابت دی الکتریک یک محیط و ثابت دی الکتریک خلاء برابر با پذیرفتاری الکتریکی آن محیط است.^۲ اگر چندین محیط گازی حضور داشته باشند در این صورت ضریب α در رابطه ی (۸-۲۰) با عبارتی $\sum_i N_i \alpha_i$ جایگزین گردد.

با در نظر گرفتن رابطه ی $N = \frac{\rho N_A}{M}$ که چگالی، M جرم مولی و N_A عدد آووگادرو است، معادله ی (۸-۱۸) را می توان بر حسب چگالی محیط بازنویسی کرد.

$$\epsilon_r = 1 + \left(\frac{\rho N_A}{\epsilon_0} \right) \alpha \quad (۸-۲۲)$$

که بیان می کند، ϵ_r به طور خطی با چگالی افزایش می یابد. این عبارت در گازها که چگالی را می توان در محدوده ی وسیعی تغییر داد، برقرار است. از این واقعیت برای استنتاج رابطه ی (۸-۱۹) و به ویژه رابطه ی (۸-۱۵) استفاده کردیم.

1. Electric Susceptibility

۲- محیط های دی الکتریک واقعی، ناهمسان گردند یعنی مقدار ϵ یا به جهت میدان بستگی دارد. بنابراین پارامترهای ϵ و کمیت های تانسوری مرتبه ی دو هستند. ولی در این جا به منظور تمرکز بر خواص فیزیکی از این ناهمسان گردی صرف نظر می کنیم و دی الکتریک را به صورت یک محیط همسان گرد در نظر می گیریم که در این صورت ثابت دی الکتریک یک کمیت اسکالر و تک مقدار خواهد بود.

آزمایش‌های تجربی نشان می‌دهند که معادلات (۱۸-۸) یا (۲۲-۸) در مایعات و جامدات یعنی سیستم‌های فیزیکی چگال برقرار نیستند. این نکته در این جا برای ما خیلی مهم است زیرا ما به توصیف مواد جامد علاقه‌مند هستیم. بنابراین می‌باید به دنبال عبارتی بهتر از رابطه‌ی (۱۸-۸) برای ثابت دی‌الکتریک باشیم. ریشه‌ی مشکل در رابطه‌ی (۱۵-۸) نهفته است. این رابطه بیان می‌کند که میدانی که بر مولکول اثر می‌کند و آن را قطبیده می‌کند، مساوی میدان ϵ است؛ ولی آزمایش‌های دقیق‌تر نشان می‌دهند که الزاما این طور نیست. در واقع میدان قطبیده^۱ با متفاوت است. بنابراین معادله‌ی (۱۵-۸) را باید جایگزین معادله زیر نمود.

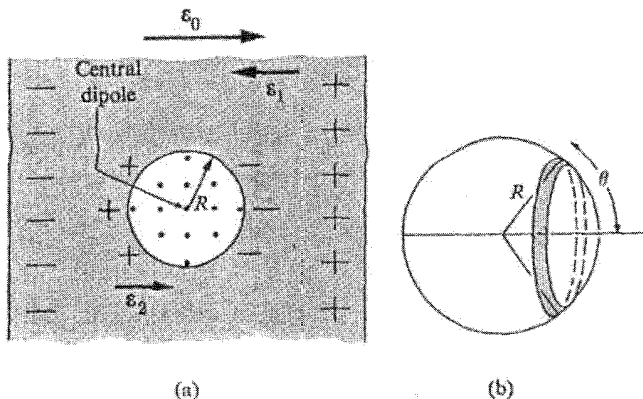
$$p = \alpha \epsilon_{loc} \quad (۲۳-۸)$$

که ϵ_{loc} طبق تعریف، میدان قطبنده است، که میدان موضعی نیز نامیده می‌شود.

برای محاسبه‌ی ϵ_{loc} می‌باید میدان کلی را که بر یک دو قطبی معین اثر می‌کند، محاسبه نماییم. لورنتس این کار را به صورت زیر انجام داد: فرض می‌شود، دو قطبی توسط یک کاوک کروی به شعاع R احاطه شده باشد (R آن قدر بزرگ در نظر گرفته می‌شود که از دید دو قطبی، ماتریس خارج آن به صورت یک محیط پیوسته به نظر برسد (شکل ۵-۸)). ولی برهم کنش دو قطبی مورد نظر با دو قطبی‌های دیگری که در داخل کاواک قرار دارند باید به طور میکروسکوپی در نظر گرفته شود، زیرا طبیعت ناپیوسته‌ی محیط نزدیک به دو قطبی‌ها باید به حساب آید. بنابراین میدان موضعی که روی دو قطبی مرکزی اثر می‌کند، از جمع زیر به دست می‌آید.

$$\epsilon_{loc} = \epsilon_0 + \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3 \quad (۲۴-۸)$$

که ϵ_0 میدان خارجی، ϵ_1 میدان مربوط به بارهای قطبشی‌ای که در سطح خارجی نمونه قرار می‌گیرند، ϵ_2 میدان مربوط به بارهای قطبشی‌ای که در سطح کره‌ی لورنتس قرار می‌گیرند و ϵ_3 میدان مربوط به دو قطبی‌هایی است که درون کره قرار دارند. توجه کنید که قسمتی از محیط که بین کره و سطح خارجی قرار می‌گیرد هیچ سهمی در میدان ندارد زیرا بارهای قطبشی در این حجم یکدیگر را خنثی می‌کنند و در نتیجه بار خالص این ناحیه صفر است.



شکل ۸-۵ الف) روش محاسبه‌ی میدان موضعی، ب) روشی برای محاسبه‌ی ϵ_2 ، میدان مربوط به بارهای قطبشی روی سطح کره‌ی لورنتس.

حال میدان‌های مختلفی را که در رابطه‌ی (۸-۲۴) ظاهر می‌گردد محاسبه می‌کنیم.

ϵ_1 : این میدان که مربوط به بارهای قطبشی در سطح خارجی است، میدان واقطبش^۱ هم نامیده می‌شود، زیرا با میدان خارجی مخالفت می‌کند. مقدار این میدان به شکل هندسی سطح بستگی دارد و برای حالت ساده‌ی یک کره‌ی متناهی به صورت زیر بیان می‌شود.

$$\epsilon_1 = -\frac{1}{\epsilon_0} P \quad (8-25)$$

که با استفاده از قانون گوس می‌توان آن را اثبات کرد. میدان‌های قطبشی برای اشکال هندسی دیگر را می‌توانید در کتاب کتیل و همین‌طور در بخش مسائل ملاحظه نمایید.

ϵ_2 : بارهای قطبشی روی سطح کاواک لورنتس را می‌توان به شکل توزیع پیوسته به چگالی $-P \cos\theta$ در نظر گرفت (یادآوری می‌کنیم که کاواک بزرگ است). میدان مربوط به این بارها در نقطه‌ای که در مرکز کره واقع است، طبق قانون کولن به صورت زیر بیان می‌شود.

$$\epsilon_2 = \int_0^\pi \left(\frac{-P \cos\theta}{4\pi\epsilon_0 R^2} \right) \cos\theta (2\pi R^2 \sin\theta d\theta) \quad (8-26)$$

ضریب اضافی $\cos\theta$ وارد شده است زیرا فقط می‌خواهیم مؤلفه میدان در امتداد جهت P را محاسبه نماییم (مؤلفه‌های دیگر به دلیل تقارن صفر می‌شوند). ضریب $\int_0^\pi \sin\theta \, d\theta$ $2\pi R^2$ المان سطحی روی سطح کره است. انتگرال گیری از رابطه‌ی (۸-۲۶) منجر به نتیجه‌ی ساده‌ی زیر می‌شود.

$$\varepsilon_p = \frac{1}{3\varepsilon_0} P \quad (8-27)$$

این میدان در همان جهت میدان خارجی است.

ε_p : این میدان مربوط به دو قطبی‌های دیگر کاواک است. می‌توان با جمع میدان‌های دو قطبی‌های منفرد و با استفاده از رابطه‌ی (۸-۲) آن را محاسبه کرد. نتیجه‌ی حاصل به ساختار بلوری جامد مورد مطالعه بستگی دارد. ولی برای حالت مربوط به یک ساختار مکعبی می‌توان نشان داد که جمع صفر می‌شود؛ بنابراین همان طور که در بخش مسائل آمده است؛

$$\varepsilon_p = 0 \quad (8-28)$$

در ساختارهای دیگر، میدان دو قطبی ε_p ممکن است صفر نشود که در این صورت باید در بقیه‌ی بحث به حساب آید.

حال اگر میدان‌های مختلف را در رابطه‌ی (۸-۲۴) جایگزین نماییم، خواهیم داشت:

$$\varepsilon_{loc} = \varepsilon_0 - \frac{2P}{3\varepsilon_0} \quad (8-29)$$

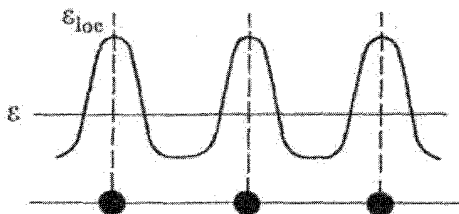
که میدان قطبشی را بر حسب میدان خارجی و قطبش می‌دهد.

حال اگر مقدار ε_{loc} از رابطه‌ی فوق را با ε که از رابطه‌ی (۸-۸) به دست می‌آید، مقایسه کنیم، درمی‌یابیم:

$$\varepsilon_{loc} = \varepsilon_0 + \frac{2P}{3\varepsilon_0} \quad (8-30)$$

همان طور که انتظار داشتیم ε_{loc} با ε تفاوت دارد. در واقع ε_{loc} بزرگ‌تر از ε است، بنابراین مولکول‌ها بیش‌تر از آن چه بحث قبلی ما نشان می‌دهد، قطبیده هستند. معادله (۸-۳۰) به نام رابطه‌ی لورنتس موسوم است. اختلاف بین ε که میدان ماکسول نامیده می‌شود و میدان لورنتس

ϵ_{loc} ، را می توان به صورت زیر توضیح داد. میدان ϵ یک کمیت ماکروسکوپی است و یک میدان میانگین است. میانگین گیری روی تعداد زیادی مولکول گرفته می شود (شکل ۸-۶). این همان میدانی است که در معادلات ماکسول وارد می شود و برای توصیف ماکروسکوپی محیط های دی الکتریک به کار می رود. در وضعیت موجود، میدان ϵ در طول محیط دی الکتریک ثابت است.



شکل ۸-۶ اختلاف بین میدان ماکسول ϵ و میدان موضعی ϵ_{loc} . دایره های سیاه نمایانگر مولکولها هستند.

از طرف دیگر میدان لورنتس ϵ_{loc} ، یک میدان میکروسکوپی است که در محیط دی الکتریک به شدت کم و زیاد می شود. همان طور که شکل نشان می دهد، این میدان در جایگاه های مولکولی خیلی بزرگ است، بنابراین مولکولها خیلی بیش از آن چه در میدان میانگین ϵ باید قطبیده باشند، قطبیده هستند. حال ثابت دی الکتریک را محاسبه می نماییم. بر طبق روابط (۸-۲۳) و (۸-۱۶) قطبش از رابطه ی زیر به دست می آید:

$$P = N\alpha \epsilon_{loc} \quad (۸-۳۱)$$

که وقتی با رابطه ی (۸-۳۰) ترکیب گردد، نتیجه ی زیر حاصل می شود:

$$P = \left(\frac{N\alpha}{1 - \frac{N\alpha}{\epsilon_0}} \right) \epsilon \quad (۸-۳۲)$$

این رابطه ی بین P و ϵ جایگزین رابطه ی قبلی (رابطه ی ۸-۱۶) می شود توجه کنید که مخرج کمتر از یک است و سهمی در افزایش قطبش دارد. این سهم مربوط به تصحیح میدان موضعی است. اگر نتیجه ی (۸-۳۲) در روابط (۸-۱۶) و (۸-۱۷) جایگزین گردد، عبارت زیر برای ثابت دی الکتریک حاصل می شود:

$$\epsilon_r = \frac{1 + \frac{N\alpha}{\epsilon_0}}{1 - \frac{N\alpha}{\epsilon_0}} \quad (۸-۳۳)$$

و این همان رابطه‌ای است که به دنبال آن بودیم. این رابطه، تعمیم رابطه‌ی (۸-۱۸) است؛ هنگامی که تصحیح میدان موضعی به حساب آید.

در گازها که چگالی مولکولی N کوچک است، عبارت (۸-۳۳) به رابطه‌ی قبلی (که بدون تصحیح میدان است) تحویل می‌شود. در این مورد در مخرج کسر (۸-۳۳) مقدار $\frac{N\alpha}{3\epsilon_0} \ll 1$ است. از آن جا که N کوچک است، مخرج کسر (۸-۳۳) را می‌توان بر حسب توان بسط $\frac{N\alpha}{3\epsilon_0}$ داد و در تقریب مرتبه‌ی اول دقیقاً به رابطه‌ی (۸-۱۸) تحویل می‌شود. انتظار این مطلب را داشتیم زیرا به ازای یک N کوچک، قطبش N نیز کوچک است که طبق رابطه‌ی (۸-۲۷) به این معنی است که میدان موضعی کم و بیش همان میدان میانگین خواهد شد. ولی در مایعات و جامدات قطبش کوچک نیست و معادله‌ی (۸-۳۳) در محدوده‌ی وسیع تری کاربرد دارد.

معادله‌ی (۸-۳۰) نیز به شکل زیر بازنویسی می‌شود.

$$\frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} = \frac{N\alpha}{3\epsilon_0} \quad (۸-۳۴)$$

که به رابطه‌ی کلازیوس - ماسوتی^۱ موسوم است. این معادله را به صورت زیر نیز می‌توان نوشت.

$$\frac{M}{\rho} \left(\frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} \right) = \frac{N_A \alpha}{3\epsilon_0} \quad (۸-۳۵)$$

که نشان می‌دهد قطبش‌پذیری α را می‌توان از کمیت‌های قابل اندازه‌گیری M ، ρ و ϵ_r به دست آورد. عبارت طرف راست (و طرف چپ) به نام قطبش‌پذیری مولی^۲ موسوم است.

۸-۴ چشمه‌های قطبش‌پذیری

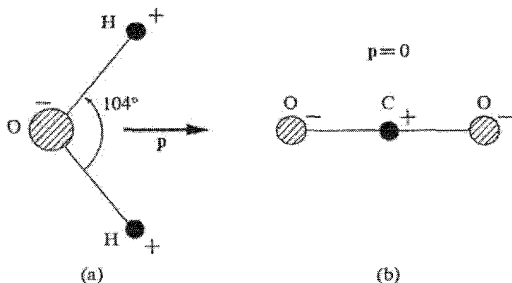
حال به طور دقیق‌تر فرآیندهای فیزیکی را که منجر به قطبش‌پذیری می‌شود بررسی می‌کنیم. اساساً قطبش‌پذیری نتیجه‌ای از این واقعیت است که مولکول‌ها سنگ بنای همه‌ی مواد هستند و از بارهای مثبت (هسته‌ها) و بارهای منفی (الکترون‌ها) تشکیل یافته‌اند.

اگر یک میدان الکتریکی بر یک مولکول اعمال گردد، بارهای مثبت در امتداد میدان و بارهای

1. Clausius - Mosotti relation

2. dipolar molecule

منفی در خلاف جهت میدان جابه جا می شوند. بنابراین اعمال میدان باعث می شود که بارهای مخالف از همدیگر جدا شوند، یعنی مولکول قطبیده می شود. بسته به ساختار مولکول های تشکیل دهنده ی جسم جامد، انواع مختلف فرآیندهای قطبیدگی می تواند وجود داشته باشد. اگر مولکول یک گشتاور دو قطبی الکتریکی دائمی داشته باشد، یعنی حتی در غیاب میدان الکتریکی نیز گشتاور داشته باشد، مولکول دو قطبی^۱ نامیده می شود و مواد متشکل از این مولکول ها نیز مواد دو قطبی نام دارند.



شکل ۷-۸ الف) مولکول آب و گشتاور دائمی آن،

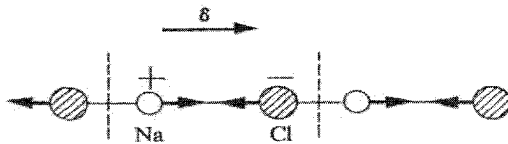
$p=1/4\text{debye}$ (واحد گشتاور دبی است 10^{-29}Coul-m debye) ب) مولکول CO_2

مثالی از یک مولکول قطبی، مولکول آب است (شکل ۷-۸ الف). گشتاورهای دو قطبی دو پیوند OH به طور برداری با هم جمع می شوند و یک گشتاور دو قطبی خالص غیر صفر را تشکیل می دهند. بعضی از مولکول ها غیر قطبی اند و هیچ گشتاور دائمی ندارند. مولکول CO_2 مثالی از این مولکول ها است (شکل ۷-۸ ب). گشتاورهای دو پیوند CO همدیگر را خنثی می کنند زیرا مولکول به شکل یک خط مستقیم است و گشتاورهای آن در خلاف جهت یکدیگرند. در نتیجه گشتاور دو قطبی خالص مولکول صفر می شود.

مولکول آب یک گشتاور دو قطبی دائمی دارد؛ زیرا دو پیوند OH در امتداد یک خط راست قرار نمی گیرند (بر خلاف پیوندهای CO در مولکول CO_2). بنابراین گشتاور به آرایش هندسی مولکول بستگی دارد، و با اندازه گیری گشتاورها می توان اطلاعاتی راجع به ساختار مولکولی به دست آورد.

علی رغم این واقعیت که مولکول‌های منفرد در مواد قطبی، گشتاورهای دائمی دارند، در غیاب میدان الکتریکی خارجی، این گشتاورها به طور کاتوره‌ای توزیع شده‌اند و اثر همدیگر را خنثی می‌کنند و قطبش کل و خالص ماده مساوی صفر است. ولی هنگامی که یک میدان مغناطیسی به ماده اعمال گردد، همان طور که در بخش ۲-۸ بیان شد، گشتاورهای دو قطبی به سمت میدان تغییر جهت می‌دهند و در نتیجه یک قطبش خالص غیر صفر ایجاد می‌شود. این فرآیند منجر به یک قطبش پذیری دو قطبی می‌شود که در بخش ۵-۸ محاسبه خواهد شد.

اگر مولکول شامل پیوندهای یونی باشد، اعمال میدان سبب کشیده شدن طول پیوند می‌شود. این پدیده در NaCl رخ می‌دهد، زیرا اعمال میدان سبب جابه‌جایی یون مثبت Na^+ به طرف راست و یون منفی Cl^- به طرف چپ (شکل ۸-۸) می‌شود و در نتیجه طول پیوند گسترش می‌یابد. اثر این تغییر طول، ایجاد یک گشتاور دو قطبی خالص بر یاخته‌ی واحد است که قبلاً وجود نداشت. از آن جا که قطبش در این جا مربوط به جابه‌جایی نسبی یون‌های باردار مخالف است، از آن به عنوان قطبش پذیری یونی یاد می‌کنیم.

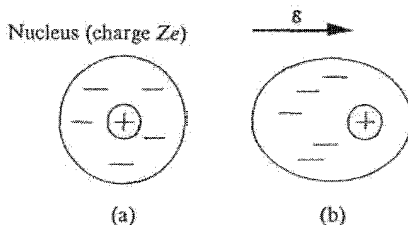


شکل ۸-۸ قطبش یونی در NaCl . میدان، یون‌های Na^+ و Cl^- را در دو جهت مخالف از یکدیگر جدا می‌کنند و سبب تغییر طول پیوند می‌شود.

در هر جایی که ماده یا یونی باشد (مانند NaCl) یا قطبی (مانند H_2O)، قطبش‌پذیری یونی وجود دارد؛ زیرا در هر یک از این دسته مواد، پیوندهای یونی وجود دارند. ولی در موادی که چنین پیوندهایی وجود ندارد مانند Si و Ge قطبش‌پذیری یونی هم به وجود نمی‌آید.

نوع سوم قطبش‌پذیری از این ناشی می‌شود که در اثر اعمال میدان الکتریکی، یون‌های منفرد و یا اتم‌های داخل یک مولکول خودشان قطبیده می‌شوند. در مورد NaCl ، هر کدام از یون‌های Na^+ و Cl^- قطبیده هستند. یون‌های منفی قطبیده هستند زیرا همان طور که شکل ۹-۸ نشان می‌دهد الکترون‌ها در لایه‌های مختلف خود نسبت به هسته به طرف چپ جابه‌جا شده‌اند. این اثر را قطبش الکترونی می‌نامند. قطبش الکترون حتی در یک اتم خنثی نیز رخ می‌دهد که باز هم دلیل

آن جابه جایی نسبی الکترون‌های مداری است.



شکل ۸-۹ قطبش اتمی (الف) اتم ناقطبیده (ب) اتم قطبیده بواسطه وجود میدان.

بنابراین در حالت کلی برای قطبش پذیری کل را می‌توان به صورت جمع زیر نوشت:

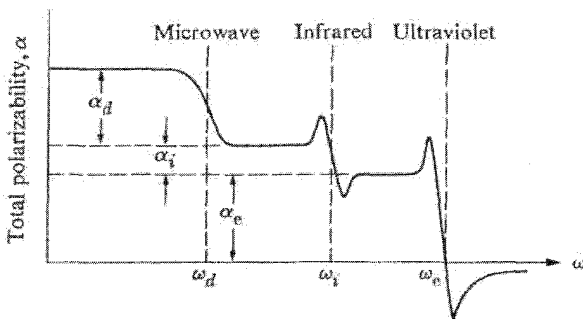
$$\alpha = \alpha_e + \alpha_i + \alpha_d \quad (۸-۳۶)$$

که α_e ، α_i و α_d به ترتیب قطبش پذیری‌های الکترونی، یونی و دو قطبی هستند. سهم قطبش پذیری الکترونی در همه‌ی انواع ماده وجود دارد. ولی حضور دو جمله‌ی دیگر بستگی به ماده‌ی مورد مطالعه دارد. جمله‌ی α_i در مواد یونی حضور دارد. ولی در یک ماده‌ی دو قطبی هر سه سهم فوق حضور دارند. در بلورهای کووالان مانند Si و Ge که غیر یونی و غیر قطبی‌اند، قطبش پذیری تماماً طبیعت الکترونی دارد.

همان گونه که در باقیمانده‌ی این بخش خواهیم دید، قطبش پذیری‌های مختلف را می‌توان از همدیگر تفکیک کرد زیرا سهم هر کدام مشخصه‌ی خود را دارند که آن را از انواع دیگر متمایز می‌کند. مثلاً قطبش پذیری دو قطبی بستگی شدیدی به دما نشان می‌دهد در حالی که دو سهم دیگر اساساً مستقل از دما هستند.

تفاوت مهم دیگر بین قطبش پذیری‌های مختلف وقتی ظاهر می‌گردد که رفتار قطبش پذیری ac را بررسی کنیم. این قطبش پذیری در اثر اعمال یک میدان الکتریکی متناوب القا می‌گردد. بستگی نوعی قطبش پذیری ac به فرکانس در محدوده‌ی وسیعی از فرکانس‌ها (از استاتیک تا ناحیه‌ی فرابنفش) در شکل ۸-۱۰ نشان داده شده است. همان طور که در این شکل می‌توان دید، در محدوده‌ی فرکانسی $\omega = 0$ تا $\omega = \omega_d$ معمولاً در ناحیه‌ی میکروموج (است)، قطبش پذیری اساساً ثابت است. در همسایگی ω_d قطبش پذیری به میزان قابل ملاحظه‌ای کاهش می‌یابد. در واقع

این مقدار دقیقاً متناظر است با سهم قطبش پذیری دو قطبی α_d . دلیل ظاهر نشدن α_d در محدوده‌ی فرکانسی $\omega > \omega_d$ این است که حالا میدان سریع‌تر از آن حرکت می‌کند که دو قطبی بتواند آن را دنبال کند، بنابراین دو قطبی اساساً ساکن باقی می‌ماند.



شکل ۱۰-۸ قطبش‌پذیری α بر حسب فرکانس ω برای یک ماده‌ی آلیبده

در محدوده‌ی فرکانسی بین ω_d و ω_i ، قطبش‌پذیری بدون تغییر می‌ماند و سپس در فرکانس‌های بالاتر به شدت سقوط می‌کند. فرکانس ω_i در ناحیه‌ی فرو سرخ قرار می‌گیرد که متناظر با فرکانس عرضی فونون‌های اپتیکی بلور ω_i است (بخش ۱۲-۳). برای محدوده‌ی فرکانسی $\omega_i > \omega$ یونها با جرم‌های سنگینشان دیگر قادر به پیروی از نوسانات سریع میدان نیستند و در نتیجه همان‌طور که شکل ۱۰-۸ نشان می‌دهد، قطبش‌پذیری یونی α_i صفر می‌شود.

بنابراین در محدوده‌ی فرکانسی بالای فرو سرخ، فقط قطبش‌پذیری الکترونی مؤثر باقی می‌ماند، زیرا الکترون‌ها که خیلی سبک هستند هنوز هم می‌توانند از نوسانات میدان پیروی کنند. این محدوده شامل نواحی مرئی و فرابنفش است. ولی در فرکانس‌های بالاتر (بالای فرکانس الکترونی ω_e) سهم قطبش‌پذیری الکترونی صفر می‌شود زیرا حتی الکترون‌ها هم سنگین‌تر از آنند که از نوسانهای خیلی سریع میدان پیروی کنند.

بنابراین ملاحظه می‌شود با افزایش فرکانس از استاتیک تا ناحیه‌ی اپتیکی، ثابت دی‌الکتریک مواد به طور قابل ملاحظه‌ای کاهش می‌یابد مثلاً ثابت دی‌الکتریک آب در فرکانس صفر مساوی ۸۱ است در حالی که در فرکانس اپتیکی فقط ۱/۸ است.

فرکانس‌های ω_d و ω_i ، که به ترتیب قطبش‌پذیری‌های دو قطبی و یونی را مشخص می‌کنند، به ماده‌ی مورد بررسی بستگی دارند و از یک ماده به ماده‌ی دیگر تغییر می‌کنند. ولی مرتبه‌ی بزرگی

آن‌ها به ترتیب در نواحی میکروموج و فرسرخ باقی می ماند. بنابراین با اندازه گیری ماده در فرکانس‌های مختلف می توان قطبش پذیری‌های مختلف را معین کرد.

حال قطبش پذیری‌های مختلف را محاسبه می کنیم و نشان می دهیم چگونه با اندازه گیری آن‌ها می توان اطلاعاتی راجع به ساختار میکروسکوپی داخلی یک ماده معین به دست آورد.

۵-۸ قطبش پذیری دو قطبی

حال می توانیم با به کار بردن فرمول‌های بخش ۲-۸ و همین طور بعضی از فرمول‌های مقدماتی مکانیک آماری عبارتی برای قطبش پذیری دو قطبی که قطبش پذیری سمتی نیز نامیده می شود، به دست آوریم. فرض می کنیم یک میدان الکتریکی بر یک سیستم دو قطبی که دو قطبی‌های آن آزادانه می توانند بچرخند (مانند آن چه که در گازها و مایعات است) اعمال گردد. قبل از آن که میدان اعمال گردد، دو قطبی‌های به طور کاتوره‌ای جهت گیری می شوند در نتیجه قطبش میانگین صفر است، ولی حضور میدان الکتریکی باعث آرایش دو قطبی‌ها می شود و یک قطبش خالص در جهت میدان به وجود می آید. این همان قطبشی است که می خواهیم محاسبه نماییم.

فرض کنید میدان در امتداد محور x ها اعمال گردد. طبق رابطه‌ی (۴-۸) انرژی پتانسیل دو قطبی مورد نظر برابر است با

$$V = -p \cdot \varepsilon = -p \varepsilon \cos\theta \quad (۳۷-۸)$$

زاویه‌ای است که دو قطبی با محور x ها می سازد (شکل ۱۱-۸). حالا دیگر دو قطبی‌ها به طور کاتوره‌ای سمت گیری نشده‌اند. احتمال یافتن یک دو قطبی در امتداد با تابع توزیع زیر داده می شود.

$$f = e^{-v/kT} = e^{p \cos\theta/kT} \quad (۳۸-۸)$$

این عبارت، ضریب بولتزمن است که در مکانیک آماری کاملاً شناخته شده است و در آن به جای انرژی پتانسیل، انرژی سمت گیری (رابطه‌ی ۳۷-۸) قرار گرفته است. این تابع توزیع که در شکل (۱۱-۸ب) نشان داده شده است، بیان می کند که احتمال آن که دو قطبی در امتداد میدان ($\theta \approx 0$) قرار گیرد بیش از سایر جهات است؛ و این مطلب با تصویری که قبلاً ارائه نمودیم، سازگاری دارد.

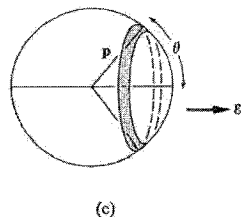
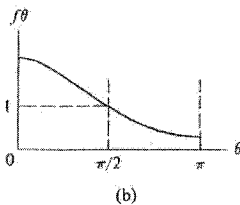
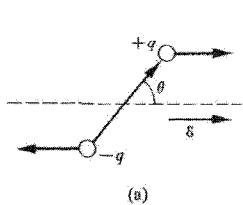
مقدار میانگین P_x ، مولفه x گشتاور دو قطبی با عبارت زیر بیان می شود.

$$\bar{p}_x = \frac{\int P_x f(\theta) d\Omega}{\int f(\theta) d\Omega} \quad (\lambda-39)$$

که انتگرال روی زاویه فضای $d\Omega$ گرفته شده و المان این زاویه فضای است. با انتگرال گیری روی تمام محدوده زاویه فضای (شکل ۱۱-۸ ج) تمام جهت ها و تمام سمت گیری های ممکن دو قطبی را به حساب می آوریم. تابع $f(\theta)$ همان تابع توزیع است که بستگی آن به θ مشخص شده است. مخرج کسر به این منظور آورده شده است که این تابع توزیع هنجار شود. برای محاسبه رابطه (۳۹-۸) از فرمول های $P_x = P \cos\theta$ و $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$ استفاده می کنیم. (ضریب 2π از انتگرال گیری روی ϕ زاویه سمتی ناشی می شود)، $f(\theta)$ را از رابطه (۳۸-۸) و حدود انتگرال را از $\theta=0$ تا $\theta=\pi$ گرفته می شود.

$$\bar{p}_x = \int_0^\pi P \cos\theta e^{p \varepsilon \cos\theta / kT} 2\pi \sin\theta d\theta \int_0^\pi e^{p \varepsilon \cos\theta / kT} 2\pi \sin\theta d\theta$$

که پس از محاسبه انتگرال رابطه زیر به دست می آید.^۱



۱- در محاسبه \bar{p}_x از نکات زیر استفاده شده است: اگر انتگرال مخرج را به z نشان دهیم، انتگرال صورت به صورت زیر

در می آید. یعنی مشتق نسبت به کمیت $\frac{p\varepsilon}{kT}$

$$\bar{p}_x = \frac{\frac{\partial z}{\partial(\frac{p\varepsilon}{kT})}}{z} = \frac{\partial}{\partial(\frac{p\varepsilon}{kT})} \log z$$

بنابراین با محاسبه z و لگاریتم گرفتن از آن و ادامه ی انتگرال گیری مقدار \bar{p}_x به دست می آید. مقدراری که برای z به دست می آید برابر است با

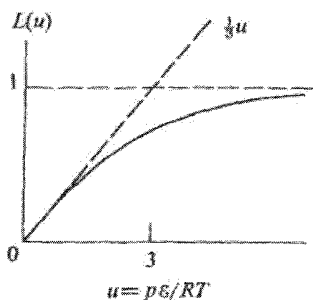
$$z = \frac{4\pi \sinh(\frac{p\varepsilon}{kT})}{(\frac{p\varepsilon}{kT})}$$

شکل ۸-۱۱ الف) جهت گیری گشتاور نیرویی که میدان بر دو قطبی اعمال می‌کند. ب) تابع توزیع $f(\theta)$ بر حسب زاویه سمتی. ج) انتگرال روی زاویه‌ی فضایی‌ای که سمت گیری دو قطبی را مشخص می‌کند. قسمت سایه زده نمایانگر المان پوسته‌ی کروی است که سمت‌گیری دو قطبی را مشخص می‌کند.

$$p_x = pL(u) \quad (۸-۴۰)$$

$$L(u) = \cot h(u) - \frac{1}{u}, \quad u = \frac{p\varepsilon}{kT} \quad (۸-۴۱)$$

تابع $L(u)$ تابع لانژوین نامیده می‌شود و در شکل (۸-۱۲) رسم شده است.



شکل ۸-۱۲ تابع لانژوین $L(u)$ بر حسب u

تابع لانژوین در نزدیکی مبدأ به طور خطی افزایش می‌یابد. می‌توان نشان داد که $L(u) = \frac{1}{3}u$. با افزایش u ، تابع $L(u)$ ، با آهنگی یکنواخت به افزایش ادامه می‌دهد و سرانجام وقتی $u \rightarrow \infty$ تابع به سمت عدد یک میل می‌کند. گشتاور دو قطبی p_x به صورت تابعی از $\frac{p\varepsilon}{kT}$ شبیه شکل ۸-۱۲ است، به جز این که محور عمودی در ضریب p شده است. بنابراین برای مقادیر کوچک میدان، P_x به طور خطی افزایش می‌یابد. در حالی که در میدان‌های خیلی بالا P_x در مقدار بیشینه‌ی p اشباع می‌شود. این امر نشان می‌دهد که در میدان‌های خیلی بالا، بارهای دو قطبی دقیقاً در امتداد میدان قرار می‌گیرند و این یک نتیجه‌ی قابل قبول است. در اغلب موارد تجربی، نسبت $u = \frac{p\varepsilon}{kT}$ خیلی کوچک است. مثلاً اگر $\text{Coul.m} \approx 10^{-29}$ ، $\varepsilon = 10^6 \text{V/m}$ و $T = 300 \text{K}$ باشد، خواهیم داشت $u \approx 10^{-4}$ که واقعاً خیلی کوچک‌تر از یک است. بنابراین در تقریب میدان پایین

$$\bar{p}_x = \frac{p}{3kT} \varepsilon \quad (۸-۴۲)$$

یعنی گشتاور دو قطبی خالص با میدان نسبت مستقیم و با دما نسبت عکس دارد. نتیجه‌ی (۸-۴۲) را می‌توان از بحث فیزیکی زیر نیز به دست آورد. همان طور که می‌دانیم اثر میدان هم ردیف کردن دو قطبی‌ها است در حالی که دما با این امر مخالفت می‌کند و جهت دو قطبی‌ها را کاتوره‌ای می‌کند. بنابراین می‌توان نوشت:

$$\bar{p}_x \approx p \frac{\text{انرژی سمتی}}{\text{انرژی گرمایی}}$$

اگر مقادیر انرژی سمتی ($p\varepsilon$) و انرژی گرمایی ($\approx kT$) را جایگزین نماییم، خواهیم داشت:

$$\bar{p}_x = p \frac{p\varepsilon}{kT} = \frac{p^2 \varepsilon}{kT}$$

که شبیه رابطه‌ی (۸-۴۲) است، به جز ضریب $\frac{1}{3}$ که آن هم از مرتبه‌ی یک است. بنابراین ملاحظه می‌شود که در تقریب میدان پایین، انرژی سمتی خیلی کمتر از انرژی گرمایی است و در نتیجه گشتاور دو قطبی خالص \bar{p}_x فقط کسر کوچکی از مقدار بیشینه‌ی p است. از طرف دیگر در میدان‌های بالا انرژی سمتی بر انرژی گرمایی غالب می‌شود و در نتیجه گشتاور دو قطبی خالص P_x خیلی نزدیک به بیشینه‌ی خود است؛ یعنی $\bar{p}_x \approx p$. بر اساس معادله‌ی (۸-۴۲) قطبش‌پذیری دو قطبی با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$\alpha_d = \frac{p^2}{3kT} \quad (۸-۴۳)$$

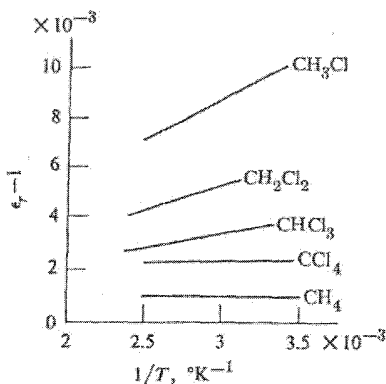
با جایگزین کردن رابطه‌ی فوق در رابطه‌ی کلازیوس - ماسوتی، خواهیم داشت

$$\frac{M}{\rho} \left(\frac{\varepsilon_r - 1}{\varepsilon_r + 2} \right) = \frac{N_A}{3\varepsilon_0} \left(\alpha_{ei} + \frac{p^2}{3kT} \right) \quad (۸-۴۴)$$

که قطبش‌پذیری مرکب مربوط به سهم‌های الکتریکی و یونی است. همان گونه که در بخش بعدی خواهیم دید، این قطبش‌پذیری اساساً مستقل از دما است. اگر قطبش‌پذیری مولی

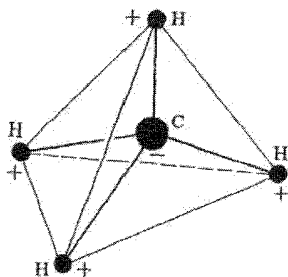
$\frac{1}{T}$ رسم کنیم، خط راستی حاصل می‌شود که شیب آن متناسب با P^2 و عرض از مبدا آن با α_{ei} متناسب است. رسم این گراف منجر به تعیین گشتاور دو قطبی مولکولی و قطبش‌پذیری غیردو قطبی می‌شود، که هر دو کمیت‌های بسیار مفیدی هستند. چنین گرافی در شکل ۸-۱۳ برای چندین ماده‌ی گازی نشان داده شده است. رفتار خطی که در

معادله‌ی (۸-۴۴) پیش بینی می‌شود به طور تجربی تأیید می‌شود.



شکل ۸-۱۳ پذیرفتاری کل $\chi = \epsilon_r - 1$ بر حسب $\frac{1}{T}$ برای چندین ماده‌ی گازی. (برای این مواد گازی مخرج در طرف چپ رابطه‌ی (۸-۴۴) مساوی $\epsilon_r + 2 \approx 3$ است)

شکل ۸-۱۳ نشان می‌دهد که مولکول‌های CH_3Cl ، CH_2Cl_2 و CHCl_3 همگی قطبی هستند در حالی که مولکول‌های CH_4 و CCl_4 که منحنی آن‌ها افقی است، غیرقطبی‌اند (گشتاور دایمی ندارند). به سادگی می‌توان دریافت که چرا مولکول متان غیر قطبی است. همان‌طور که شکل ۸-۱۴ نشان می‌دهد ساختار متان به گونه‌ای است که اتم‌های هیدروژن در گوشه‌ها و اتم کربن در مرکز یک چهاروجهی منظم قرار دارند. چهار پیوند، کربن را به اتم‌های هیدروژن ارتباط می‌دهد. گرچه هر کدام از این پیوندها یک گشتاور دو قطبی الکتریکی دارند؛ به دلیل آرایش متقارن پیوندها، جمع کل گشتاور دو قطبی مولکول‌ها صفر می‌شود. ولی اگر به جای یکی از اتم‌های هیدروژن، یک اتم کلر جایگزین و مولکول CH_3Cl حاصل شود، دیگر تقارن برقرار نیست و یک گشتاور دایمی ایجاد می‌شود.



شکل ۸-۱۴ ساختار هندسی مولکول متانول (CH_4)

گشتاورهای دو قطبی مولکول‌های مختلف که به روش فوق اندازه‌گیری شده‌اند در جدول ۸-۱ آمده است. گشتاورها بر حسب واحد دبی بیان شده‌اند که مساوی 10^{-29} Coul.m است. این واحد میکروسکوپی متناظر با دو قطبی‌ای به بار $(\approx \frac{e}{176})$ Coul $= 10^{-19}$ و طول $(1 \text{ } ^\circ\text{A})$ 10^{-11} m است. از آن جا که فواصل مولکولی از مرتبه‌ی آنگستروم و بار آنها نیز از مرتبه‌ی e است، گشتاورهای مولکولی معمولاً از مرتبه‌ی بزرگی واحد دبی هستند.

جدول ۸-۱: گشتاورهای دو قطبی دایمی بعضی از مولکول‌های قطبی

ماده	گشتاور دو قطبی	ماده	گشتاور دو قطبی
HF	۱/۹۱	NH _۳	۱/۵
HCl	۱/۱	CH _۲ Cl	۱/۹۷
HBr	۰/۸	CH _۳ Cl	۱/۵۹
HI	۰/۳۸	CHCl _۳	۰/۹۵
NO	۰/۱	H _۲ O	۱/۹
CO	۰/۱	H _۲ S	۱/۱
NaI	۴/۹	SO _۲	۱/۶
KCl	۶/۳		

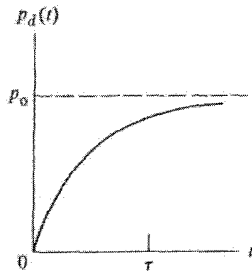
۸-۶ پاشندگی دوقطبی

حال راجع به قطبش‌پذیری دو قطبی ac بحث می‌کنیم. هنگامی که یک میدان الکتریکی نوسان می‌کند، دو قطبی‌های سیستم می‌خواهند که از نوسانات میدان پیروی کنند. با تغییر جهت میدان در هر دوره تناوب، گشتاورها نیز جهت خود را تغییر می‌دهند. به خاطر برخورد دوقطبی‌ها بامولکول‌های دیگر سیستم بر آنها یک نیروی اصطکاک وارد می‌شود. در نتیجه مقداری انرژی از میدان جذب می‌شود که می‌توان از آن به عنوان تلفات دی‌الکتریک یاد کرد. این انرژی بالاخره به شکل گرما ظاهر می‌گردد و سبب افزایش دمای ماده می‌شود. بنابراین با مطالعه‌ی قطبش‌پذیری ac و تلفات دی‌الکتریک می‌توان اطلاعاتی راجع به اندرکنش بین مولکول‌ها در محیط به دست آورد.

معادله‌ای که برای توصیف حرکت قطبیدگی دو قطبی استفاده می‌کنیم به صورت زیر است:

$$\frac{dp_a(t)}{dt} = \frac{1}{\tau} [p_{as}(t) - p_a(t)] \quad (۸-۴۵)$$

که $p_d(t)$ گشتاور دو قطبی واقعی در لحظه‌ی t است در حالی که $p_{ds}(t)$ مقدار اشباع (یا مقدار تعادلی) گشتاور است و مقداری است که اگر میدان برای مدتی طولانی در مقدار لحظه‌ای خود می‌ماند، گشتاور $p_d(t)$ به آن می‌رسید. فرض کردیم که آهنگ افزایش $p_d(t)$ متناسب با اختلاف این گشتاور با مقدار تعادلی خودش است. کمیت τ زمان و اهلش و یا زمان برخورد نامیده می‌شود. حال معنی رابطه‌ی (۸-۴۵) را در یک وضعیت خیلی ساده بیان می‌کنیم. فرض کنید که در لحظه‌ی $t=0$ یک میدان استاتیک اعمال گردد. در این حالت $p_{ds}(t) = \alpha_d \varepsilon = p_0$ گشتاور دایمی مولکول است)، زیرا پس از اعمال میدان برای مدتی طولانی گشتاور به این مقدار می‌رسد. α_d قطبش پذیری استاتیک است که از بخش ۵-۸ محاسبه شده است.



شکل ۸-۱۵ گشتاور دو قطبی لحظه‌ای $p_d(t)$ بر حسب زمان در یک میدان استاتیک.

حال معادله‌ی (۸-۴۵) را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$\frac{dp_d}{dt} + \frac{p_d(t)}{\tau} = \frac{p_0}{\tau} \quad (۸-۴۶)$$

که یک معادله‌ی دیفرانسیل خطی مرتبه‌ی اول است و به سادگی قابل حل است، حل آن به صورت زیر است:

$$p_d(t) = p_0(1 - e^{-t/\tau}) \quad (۸-۴۷)$$

بنابراین گشتاور به صورت نمایی به سمت مقدار تعادل خود افزایش می‌یابد. (شکل ۸-۱۵). این رفتار شبیه به افزایش جریان در یک مدار جریان مستقیم R-L (با ثابت زمانی τ) است (در لحظات اولیه‌ای که باتری به مدار وصل می‌شود).

فرض کنید که برای یک مدت نسبتاً طولانی محیط در یک میدان استاتیک قرار بگیرد تا گشتاور

به مقدار تعادل خود p_0 برسد و این میدان ناگهان در لحظه $t=0$ قطع شود. با به کار بردن معادله‌ی (۸-۴۵)، مقدار p_{ds} را مساوی صفر می‌گیریم، زیرا مقدار تعادل آن صفر است. حل معادله به صورت زیر در خواهد آمد:

$$p_d(t) = p_0 e^{-t/\tau} \quad (۸-۴۸)$$

که نشان می‌دهد، گشتاور از قطبش صفر به طور نمایی به مقدار تعادلی واهلش می‌یابد. آهنگ واهلش توسط زمان واهلش τ تعیین می‌شود. وضعیت در این جا شبیه کاهش جریان در یک مدار R-L با ثابت زمانی τ ، در لحظاتی است که مدار باز شده است.

حالا معادله‌ی (۸-۴۵) را در مورد یک میدان ac به کار می‌بریم:

$$\varepsilon(t) = Ae^{-i\omega t} \quad (۸-۴۹)$$

گشتاور تعادل به رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$p_{ds}(t) = \alpha_d(o) \varepsilon(t) = \alpha_d(o) Ae^{-i\omega t} \quad (۸-۵۰)$$

که $\alpha_d(o)$ قطبش‌پذیری دوقطبی است که در بخش ۸-۵ راجع به آن بحث شد. اگر میدان برای مدت زمان متمادی (یعنی $t > \tau$) مساوی $\varepsilon(t)$ باقی می‌ماند، $p_d(t)$ به مقداری می‌رسید که در عبارت (۸-۵۰) بیان شده است. معادله‌ی (۸-۴۵) به صورت زیر تحویل می‌شود:

$$\frac{dp_d(t)}{dt} + \frac{p_d(t)}{\tau} = \frac{\alpha_d(o)}{\tau} \varepsilon(t) \quad (۸-۵۱)$$

از آن جا که جمله شامل مشتق در طرف راست، به طور هماهنگ بر حسب زمان تغییر می‌کند (رابطه‌ی ۸-۴۹)، حل آن به صورت زیر است:

$$p_d(t) = \alpha_d(\omega) \varepsilon(t) = \alpha_d(\omega) Ae^{-i\omega t} \quad (۸-۵۲)$$

که طبق تعریف، $\alpha_d(\omega)$ قطبش‌پذیری ac است. با جایگزینی این جواب در معادله‌ی (۸-۵۱)، به سادگی خواهیم داشت:

$$\alpha_d(\omega) = \frac{\alpha_d(o)}{1 - i\omega\tau} \quad (۸-۵۳)$$

ملاحظه می‌شود که حالا قطبش‌پذیری ac یک کمیت مختلط است و دیگر قطبش بامیدان هم فاز

نیست. همان طور که به زودی خواهیم دید این امر منجر به جذب انرژی می شود.

برای به دست آوردن عبارت مربوط به ثابت دی الکتریک $\epsilon_r(\omega)$ می توان نوشت:

$$\epsilon_r(\omega) = 1 + \chi_e(\omega) + \chi_d(\omega)$$

که $\chi_e(\omega)$ و $\chi_d(\omega)$ به ترتیب پذیرفتاری های الکتریکی و دوقطبی هستند. برای سادگی فرض کرده ایم که سهم های یونی آن قدر کوچک هستند که از آن ها چشم پوشی می شود. در ناحیه ی فرکانسی که پاشندگی دوقطبی قابل ملاحظه است یعنی ناحیه ی میکروموج پذیرفتاری الکتریکی ثابت است. زیرا الکترون ها آن قدر سبکند که بتوانند به طور لحظه ای به میدان پاسخ دهند. بنابراین می توان معادله ی فوق را به صورت زیر نوشت:

$$\epsilon_r(\omega) = n^2 + \chi_d(\omega) \quad (۸-۵۴)$$

که $n^2 = 1 + \chi_e$ ثابت دی الکتریکی اپتیکی و n ضریب شکست است.

سهم پذیرفتاری دوقطبی $n^2 - \epsilon_r(\omega) = \chi_d(\omega)$ به طور لحظه ای از میدان پیروی نمی کند و همان طور که قطبش پذیری مختلط در رابطه ی (۸-۵۳) بیان می کند، یک اختلاف فاز وجود دارد. از آن جا که χ_d با α_d متناسب است (شکل ۲۰-۸ را ملاحظه نمایید) نتیجه می شود که $\chi_d(\omega)$ همان شکل مختلط $\alpha_d(\omega)$ در رابطه ی (۸-۵۳) را دارد. می توان معادله ی (۸-۵۴) را به شکل زیر نوشت.

$$\epsilon_r(\omega) = n^2 + \frac{\epsilon_r(0) - n^2}{1 - i\omega\tau} \quad (۸-۵۵)$$

صورت کسر مقدار استاتیک پذیرفتاری دوقطبی را می دهد، یعنی $\chi_d(0) = \epsilon_r(0) - n^2$ معادله ی (۸-۵۵) همان عبارتی است که برای ثابت دی الکتریک جست و جو می کردیم. این کمیت به طور روشن به فرکانس وابسته است، و نشان می دهد که محیط پاشنده است.

این ثابت دی الکتریک را که یک کمیت مختلط است می توان به صورت زیر نوشت:

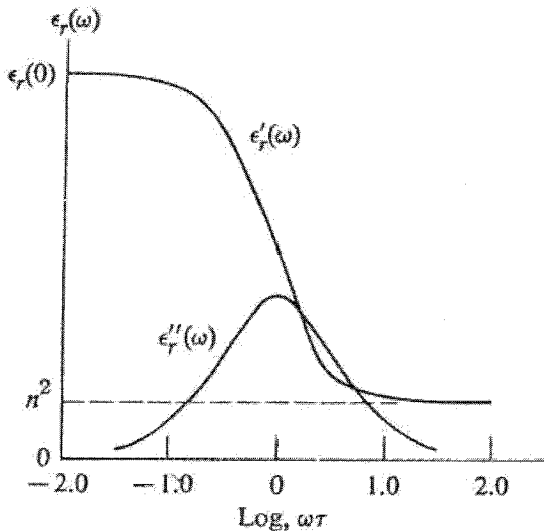
$$\epsilon_r(\omega) = \epsilon_r'(\omega) + i\epsilon_r''(\omega) \quad (۸-۵۶)$$

که قسمت های حقیقی و موهومی آن عبارتند از:

$$\epsilon_r' = n^2 + \frac{\epsilon_r(0) - n^2}{1 + \omega^2\tau^2} \quad (۸-۵۷) \text{ الف}$$

$$\hat{\epsilon}_r = n^2 + \frac{\epsilon_r(0) - n^2}{1 + \omega^2 \tau^2} \omega \tau \quad (ب) ۸-۵۷$$

که به معادله‌ی دی‌موسوم است.



شکل ۸-۱۶ قسمت‌های حقیقی و موهومی $\epsilon'_r(\omega)$ و $\epsilon''_r(\omega)$ بر حسب $\log(\omega\tau)$ برای یک ماده‌ی قطبی

مؤلفه‌های ثابت دی‌الکتریک بر حسب $\log(\omega\tau)$ در شکل ۸-۱۶ رسم شده‌اند. توجه کنید که قسمت حقیقی $\epsilon'_r(\omega)$ برای تمام فرکانس‌هایی که $\omega \ll \frac{1}{\tau}$ باشد مقداری ثابت و مساوی با $\epsilon_r(0)$ است (کمیت $\frac{1}{\tau}$ را فرکانس برخورد می‌نامند). این محدوده‌ی فرکانسی معمولاً همه‌ی فرکانس‌های تا ناحیه‌ی میکروموج را می‌پوشاند. با افزایش فرکانس و رسیدن به $\omega \gg \frac{1}{\tau}$ قسمت حقیقی $\epsilon'_r(\omega)$ کاهش می‌یابد و سرانجام به مقدار n^2 که ثابت دی‌الکتریک فرکانس بالا است می‌رسد. این نکته عبارت‌های بخش ۸-۵ را تأیید می‌کند.

شکل ۸-۱۶ همین طور نشان می‌دهد که قسمت موهومی $\epsilon''_r(\omega)$ در فرکانس $\omega = \frac{1}{\tau}$ به یک مقدار بیشینه می‌رسد و با تغییر فرکانس، مقدار $\epsilon''_r(\omega)$ کاهش می‌یابد. هنگامی که رابطه‌ی زیر برقرار گردد، منحنی به نصف مقدار بیشینه‌ی خود کاهش می‌یابد.

$$\omega\tau = \frac{1 + \omega^2 \tau^2}{\epsilon}$$

از حل آن دو مقدار $\omega = \frac{1}{\tau}$ و $\omega = \frac{1}{\tau} \sqrt{2}$ به دست می آید که به ترتیب متناظرند با فرکانس های پایین و بالای منحنی $\epsilon''_r(\omega)$. در محدوده ی فرکانسی که بیش از یک مرتبه ی بزرگی تغییر می کند، و حول فرکانس برخورد $\frac{1}{\tau}$ قرار دارد، تابع $\epsilon''_r(\omega)$ قابل ملاحظه است. آهنگ تلفات انرژی در سیستم را می توان به روش زیر محاسبه نمود: چگالی جریان قطبشی برابر است با

$$J = \frac{dP}{dt} \quad (۸-۵۸)$$

بنابراین آهنگ گرمای ژول بر واحد حجم با رابطه ی زیر بیان می شود.

$$Q = J\epsilon \quad (۸-۵۹)$$

بردار قطبش بر حسب ثابت دی الکتریک با رابطه ی زیر بیان می شود.

$$P(t) = \epsilon_0 \left[(\epsilon'_r(\omega) - 1) + i\epsilon''_r(\omega) \right] \epsilon(t) \quad (۸-۶۰)$$

که می توان آن را به صورت زیر نوشت.

$$P(t) = \epsilon_0 \epsilon_r^* (\omega) e^{i\theta} \epsilon(t) \quad (۸-۶۱)$$

$$\epsilon_r^* (\omega) = \left[(\epsilon_0(\omega) - 1)^2 + \epsilon''_r{}^2(\omega) \right]^{1/2} \quad \text{که}$$

و θ زاویه ای که تانژانت آن برابر است با

$$\text{tag}\theta = \frac{\epsilon''_r(\omega)}{\epsilon'_r(\omega) - 1} \quad (۸-۶۲)$$

از رابطه ی (۸-۶۱) معلوم می شود که قطبش نسبت به میدان تأخیر فاز دارد و به اندازه ی زاویه ی θ از میدان عقب تر است. (یادآوری می کنیم که $\epsilon(t) \sim e^{-i\omega t}$): حال بر طبق روابط (۸-۵۸) و (۸-۶۱) چگالی جریان قطبشی را می توان چنین نوشت.

$$J = -i\omega\epsilon_0\epsilon_r^*(\omega)e^{i\theta}\epsilon(t) \quad (۸-۶۳)$$

$$= \omega\epsilon_0\epsilon_r^*(\omega)e^{i(\theta-\pi/2)}\epsilon(t)$$

که به اندازه‌ی زاویه‌ی $\theta' = (-\theta + \frac{\pi}{2})$ از میدان جلوتر و نسبت به آن تقدم فاز دارد (شکل را رسم کنید). حال اگر این مقدار را در رابطه‌ی (۸-۵۹) جایگزین و زمان میانگین را محاسبه نماییم، خواهیم داشت:

$$Q = \frac{1}{\gamma} |J| |\epsilon| \cos\theta' \quad (۸-۸۴)$$

$$= \frac{1}{\gamma} \epsilon_0 \omega \epsilon_0^*(\omega) \sin\theta' |\epsilon|^2$$

$$= \frac{1}{\gamma} \epsilon_0 \omega \epsilon_r^{''*}(\omega) |\epsilon|^2$$

که در رابطه‌ی اخیر از رابطه‌ی (۸-۶۲) استفاده کرده‌ایم. توجه کنید که آهنگ تلفات متناسب با $\omega \epsilon_r^{''}(\omega)$ و اساساً متناسب با $\epsilon_r^{''}(\omega)$ است. بنابراین در نزدیکی فرکانس برخورد آهنگ تلفات بیش‌ترین مقدار را دارد.

همان‌طور که ملاحظه شد، با اندازه‌گیری ثابت دی‌الکتریک قادر خواهیم بود زمان واهلش را تعیین کنیم. این زمان به اندرکنش بین مولکول دوقطبی و شاره‌ای که در آن می‌چرخد بستگی دارد. دبی نشان داد که وقتی محیط احاطه شده‌ای مانند یک شاره‌ی چسبنده را بررسی می‌کنیم، زمان واهلش برای یک مولکول کروی با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$\tau = \frac{4\pi\eta R^3}{kT} \quad (۸-۶۵)$$

که η چسبندگی شاره و R شعاع مولکول است. برای آب در دمای اتاق $\eta = 0.01$ poise و $R \approx 2 \text{ \AA}$ است که منجر به $2/5 \times 10^{-11}$ s می‌شود و در سازگاری تقریبی با تجربه است.

با کاهش دما، زمان τ افزایش می‌یابد، زیرا هم T در مخرج کسر است و هم با کاهش دما چسبندگی افزایش می‌یابد. مثلاً زمان واهلش یخ در دمای 20°C از مرتبه‌ی 10^{-7} است که پنج مرتبه‌ی بزرگی از مقدار آن در دمای اتاق بزرگ‌تر است. زمان واهلش برای چند مایع ساده در دمای اتاق در جدول ۲-۸ آمده است.

جدول ۲-۸: زمان واهلش در دمای ۲۰°C

ماده	τ
آب	$9/5 \times 10^{-11}$
الکل	۱۳
کلروفرم	۷/۵
استن	۰/۳۳
کلروبنزن	۰/۱۲
تولئون	۰/۷۵

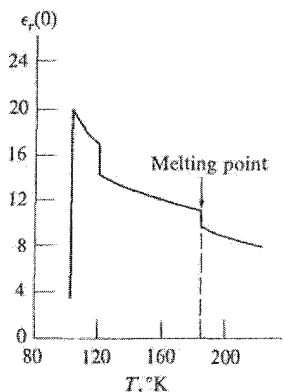
زمان واهلش برای جامدات خیلی بزرگ تر از مایعات است، زیرا همان طور که در بخش ۷-۸ خواهیم دید، گشتاورهای دوقطبی در جامدات در برابر چرخش خیلی مقاوم ترند.

۷-۸ قطبیدگی دوقطبی در جامدات

رابطه‌ی (۴۳-۸) را برای قطبش‌پذیری دوقطبی بر مبنای مدلی به دست آوردیم که در آن گشتاورهای دوقطبی مولکولی به جز در برخورد های نادری که با محیط اطراف انجام می‌دهند، می‌تواند آزادانه و به طور پیوسته دوران کنند. چنین مدلی را در گازها و مایعات می‌توان به کار برد. ولی آن را در جامدات نمی‌توان به کار برد. زیرا در جامدات گشتاورهای مولکولی آزادانه دوران نمی‌کنند. بلکه مقید به چند جهت گسسته هستند که توسط اندرکنش آن‌ها با دوقطبی‌های همسایه تعیین می‌گردند. یک دوقطبی ممکن است بین این جهت‌های گسسته جلو و عقب بجهد. چگونگی این حرکت نیز به دما و میدان بستگی دارد، ولی کاملاً روشن نیست که قطبش‌پذیری به دست آمده از عبارتی شبیه (۴۳-۸) پیروی کند. پس رفتار واقعی قطبش‌پذیری دوقطبی در جامدات چیست؟

جواب سؤال فوق به نوع جسم جامد و محدوده‌ی دمایی دارد. در بعضی از جامدات به نظر می‌رسد که گشتاورهای دوقطبی برآستی در جهات‌های خود منجمد شده‌اند و تحت تأثیر میدان قرار نمی‌گیرند. در این جامدات قطبش‌پذیری دوقطبی کلاً صفر می‌شود. ولی در جامدات دیگر اعمال میدان الکتریکی باعث انجام گذارهایی بین جهت‌های فوق می‌شود به گونه‌ای که یک قطبش‌پذیری خالص نتیجه می‌شود. سپس می‌توان نشان داد که قطبش‌پذیری، اساساً همان رفتار معادله‌ی (۴۳-۸) را دارد.

به عنوان یک مثال، سولفید هیدروژن H_2S را در نظر می‌گیریم. نقطه‌ی ذوب این ماده 188 K است. همان طور که شکل ۱۷-۸ نشان می‌دهد با کاهش دما ثابت دی‌الکتریک افزایش می‌یابد و در حالت مایع نیز این افزایش ادامه می‌یابد تا نمونه به دمای 103 K برسد. در این دما، ثابت دی‌الکتریک ناگهان از ۲۰ به ۳ افت می‌کند و در زیر این دما ثابت می‌ماند. گرچه در محدوده‌ی دماهای پایین $T < T_0$ به نظر می‌رسد که دو قطبی‌ها منجمد شده‌اند، در دماهای میانی $T_0 < T < T_m$ ، حتی اگر ماده در حالت جامد باشد، دو قطبی‌ها می‌توانند قطبیده شوند. حال می‌خواهیم این توانایی قطبیده شدن را درک نماییم.

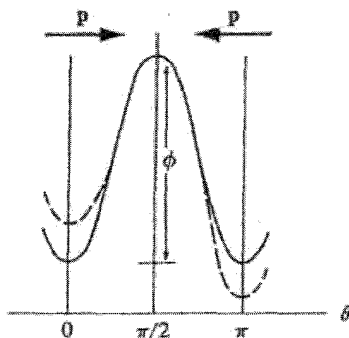


شکل ۱۷-۸ ثابت دی‌الکتریک استاتیک $r(0)$ برای حساب دما

(After Smyth and Walls)

مدل زیر را که علی‌رغم ساده‌سازی آن، مفاهیم بنیادی موجود را به نمایش می‌گذارد در نظر می‌گیریم. فرض می‌کنیم که هر دو قطبی شبکه فقط دو جهت ممکن داشته باشد، یا به طرف راست و یا به طرف چپ. در منحنی پتانسیل که در شکل ۱۸-۸ نشان داده شده است، انرژی پتانسیل بر حسب زاویه‌ی جهت دو قطبی رسم شده است. انتهای دیوار پتانسیل متناظر با دو جهت ممکن است. به دلیل ارتفاع انرژی پتانسیل موجود، جهت‌های میانی ممنوع هستند. در غیاب یک میدان خارجی احتمال این که دو قطبی به سمت راست یا چپ جهت‌گیری شود، مساوی است در نتیجه در این حالت تعادل، قطبش خالص صفر می‌شود. ولی وقتی یک میدان الکتریکی در جهت راست اعمال گردد، همان طور که با خطوط خط‌چین در شکل ۱۸-۸ نشان داده شده است، چاه طرف راست به اندازه‌ی مقدار $+eP$ پایین می‌آید. این مقدار متناظر با یک جهت دو قطبی موازی با

میدان، (جهت $\theta=0$ در رابطه ی ۵-۸) است. در همان زمان چاه طرف چپ به اندازه ی مقدار ϵp افزایش می یابد که متناظر با $\theta=\pi$ است. حالا دیگر دو چاه معادل نیستند و از آن جا که چاه طرف چپ بالاتر قرار دارد، جمعیت کمتری در خود جای می دهد و بنابراین یک قطبش خالص ایجاد می شود.



شکل ۱۸-۸ پتانسیل یک دو قطبی در یک جسم جامد بر حسب زاویه ی سمتی θ . ارتفاع سد، انرژی فعالسازی^۱ نامیده می شود. منحنی توپر وضعیت در غیاب میدان و منحنی خط چین وضعیت در حضور میدان را نشان می دهد.

اگر احتمال سمت گیری به چپ را به w نشان دهیم، نتیجه می شود که

$$\frac{w}{1-w} = e^{-\gamma p \epsilon / kT} \quad (۸-۶۶)$$

که جمله ی طرف راست ضریب بولتزمن است و متناظر با اختلاف پتانسیل $\gamma p \epsilon$ است. $(1-w)$ احتمال سمت گیری به راست است). با حل معادله بر حسب w خواهیم داشت:

$$w = \frac{e^{-\gamma p \epsilon / kT}}{1 + e^{-\gamma p \epsilon / kT}}$$

که با شرط $p \epsilon \ll kT$ که معمولاً برقرار است به معادله ی زیر تحویل می شود.

$$w = \frac{1}{\gamma} e^{-\gamma p \epsilon / kT} \quad (۸-۶۷)$$

گشتاور خالص در امتداد جهت میدان (محور x ها) برابر است با

$$\bar{p}_x = p(1 - w) - pw = p(1 - 2w) \quad (۸-۶۸)$$

که با استفاده از رابطه‌ی ۸-۶۷ به معادله‌ی زیر منجر می‌شود.

$$\bar{p}_x = p(1 - e^{-2p\varepsilon/kT}) \quad (۸-۶۹)$$

اگر جمله‌ی نهایی را بسط دهیم و فقط جمله‌ی مرتبه‌ی اول را منظور کنیم (با توجه به این که $p\varepsilon \ll kT$ است می‌توان این تقریب را منظور کرد)، خواهیم داشت:

$$p_x = \frac{2p^2 \varepsilon}{kT} \quad (۸-۷۰)$$

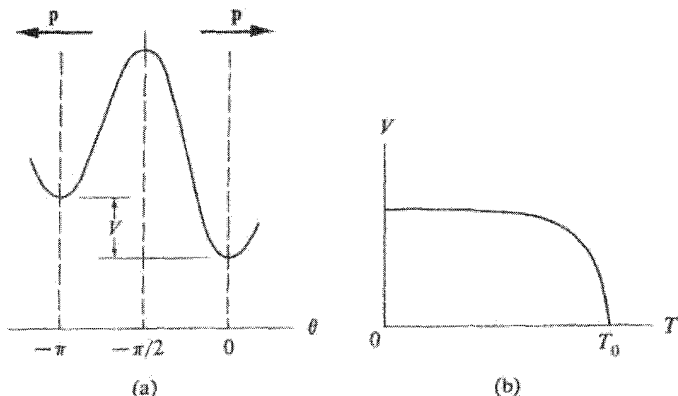
که منجر به قطبش پذیری دوقطبی می‌شود.

$$\alpha_d = \frac{2p^2}{kT} \quad (۸-۷۱)$$

این رابطه، به جز ضریب عددی آن، شبیه نتیجه‌ی (۸-۴۳) است که بر مبنای مدل چرخش پیوسته به دست آمده بود.

مدل دو سمتی لااقل به لحاظ اصولی، کاهش قطبش‌پذیری دوقطبی بر حسب دما در H_2S را توضیح می‌دهد. (شکل ۸-۱۷) در دماهای پایین میدان قادر به جهت دادن به تمام دوقطبی‌ها به طرف راست هست ولی با افزایش دما، دوقطبی‌ها آسان‌تر می‌توانند جهت خود را عوض کنند (انرژی لازم توسط برانگیختگی گرمایی تأمین می‌شود) و قطبش‌پذیری از بین می‌رود.

مدلی که برای توصیف جامدات به کار بردیم، انجماد دوقطبی‌های مولکولی در دماهای $T < T_0 = 103^\circ K$ در شکل ۸-۱۷ را توضیح نمی‌دهد، ولی می‌توان با تغییر اندکی در مدل، این انجماد را توضیح داد. فرض کنید که منحنی پتانسیل بر حسب زاویه‌ی سمتی مانند شکل ۸-۱۹ (ب) باشد. در این جا نیز دو احتمال سمت‌گیری هست، ولی سمت‌گیری به طرف راست مرجع است؛ زیرا پتانسیل آن به اندازه‌ی V از پتانسیل به سمت‌گیری، طرف چپ کمتر است. اگر $V \gg kT$ باشد، تمام دوقطبی‌ها در غیاب میدان به سمت راست سمت‌گیری می‌شوند. حتی وقتی که میدان اعمال می‌شود دوقطبی‌ها در جهت‌های اولیه‌ی خود منجمد می‌مانند و از میدان تأثیر نمی‌پذیرند. (به جز در میدان‌های خیلی قوی).



شکل ۱۹-۸ (الف) انرژی پتانسیل بر حسب زاویه ی سمتی θ در یک سدپتانسیل نامتقارن (ب) تغییرات پتانسیل بر حسب دما

برای توجیه رفتار H_2S ، پتانسیل باید به همان حالتی که در شکل ۱۹-۸ (ب) نشان داده شده است به دما بستگی داشته باشد. در دماهای پایین پتانسیل ثابت است ولی وقتی T به T_0 می رسد و از آن می گذرد، پتانسیل صفر می شود.^۱ در این حالت از قطبش در زیر دمای گذار T_0 جلوگیری می شود ولی در محدوده ی $T > T_0$ قطبش ممکن می گردد.

مدلی که در ارتباط باشک ۱۸-۸ استفاده کردیم را می توان برای مطالعه ی پاشندگی دی الکتریکی در جامدات نیز به کار برد. بنابراین فرکانس جهش^۲، را می توان به صورت زیر نوشت:

$$v = v_D e^{-\theta / kT} \quad (۸-۷۲)$$

که v_D از مرتبه ی فرکانس دبی، 10^{13} Hz و θ انرژی فعال سازی است.^۳ (شکل ۱۸-۸ را ملاحظه نمایید). بنابراین زمان واهلش (پریود جهش) برابر است با

۱- بستگی پتانسیل به دما، که در شکل نشان داده شده است آن قدر که در ابتدا به نظر می رسید، عجیب نیست. در واقع این پتانسیل یک اندرکنش تعاونی و اشتراکی و مربوط به همه ی دوقطبی های ماده است. با افزایش دما، دوقطبی های بیش تر و بیش تری قادر به وارون کردن جهت خود می شوند و دوقطبی های کمتر و کمتری در سمت گیری اولیه هستند که پتانسیل بازدارنده را ایجاد نمایند.

2. Jumping frequency

۳- افزایش نمایی γ بر حسب دما که در رابطه ی ۷۲-۸ آمده است مربوط به این واقعیت است که گشتاورها فقط در صورتی قادرند جهت خود را وارون کنند که یون (یا یون های) مربوط به اندازه ی کافی انرژی داشته باشند تا از سد پتانسیل θ در شکل ۱۸-۸ بگذرند.

$$\tau \cong \frac{1}{v_D} e^{\phi / kT} \quad (۸-۷۳)$$

که از این رابطه به همراه معادله‌ی پاشندگی (۸-۵۷) برای توصیف پاشندگی در جامدات استفاده خواهیم کرد.

۸-۸ قطبش پذیری یونی

حال به قطبش پذیری یونی می‌پردازیم. قبلاً این مطلب را در بخش ۱۲-۳ و در ارتباط با خواص اپتیکی ارتعاشات شبکه مطالعه کردیم. بنابراین در این جا از نتایج آن بخش استفاده می‌کنیم و بحث مختصری راجع به رابطه‌ی آن‌ها با هدف اخیر خواهیم داشت. در آن جا یافتیم که بستگی ثابت دی‌الکتریک به فرکانس به صورت رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$\epsilon_r(\omega) = \epsilon_r(\infty) + \frac{\epsilon_r(0) - \epsilon_r(\infty)}{1 - (\omega^2 / \omega_t^2)} \quad (۸-۷۴)$$

که ω_t فرکانس فونون اپتیکی و $\epsilon_r(0)$ و $\epsilon_r(\infty)$ به ترتیب ثابت دی‌الکتریک استاتیکی و ثابت دی‌الکتریک در فرکانس‌های خیلی بالا می‌باشند. ($\omega \gg \omega_t$).

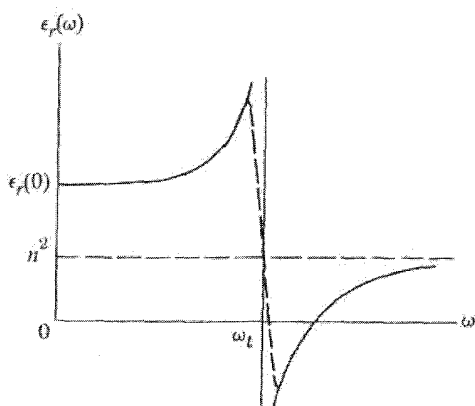
اولین جمله در طرف راست رابطه‌ی (۸-۷۴) فقط شامل قطبش‌پذیری الکتریکی است، که در ناحیه‌ی فروسرخ مقدار ثابتی است. رابطه‌ی فوق در ناحیه‌ی فروسرخ بسیار مفید است. دومین جمله‌ی طرف راست قطبش‌پذیری ac است. کمیت $[\epsilon_r(0) - \epsilon_r(\infty)]$ پذیرفتاری یونی استاتیکی است و بستگی آن به فرکانس با استفاده از معادلات حرکت یون‌ها در بخش ۱۲-۳ نشان داده شد. از تصحیح میدان در رابطه‌ی (۸-۷۴) صرف‌نظر کردیم، زیرا در محاسبه‌ی ثابت دی‌الکتریک پذیرفتاری‌های الکترونی و یونی را اضافه کرده‌ایم.

با یادآوری این که $\epsilon_r(\infty) = n^2$ که n ضریب شکست اپتیکی است، معادله‌ی (۸-۷۴) را به شکل زیر می‌توان بازویسی کرد. نتیجه چنین می‌شود.

$$\epsilon_r(\omega) = n^2 + \frac{\epsilon_r(0) - n^2}{1 - (\omega^2 / \omega_t^2)} \quad (۸-۷۵)$$

نمودار تغییرات ثابت دی‌الکتریک $\epsilon_r(\omega)$ بر حسب ω در شکل ۸-۲۰ رسم شده است. برای

$\epsilon_r(\omega) = \epsilon_r(0)$ یعنی ثابت دی الکتریک مساوی ثابت دی الکتریک استاتیک می شود. یعنی $\omega \ll \omega_L$ که این انتظار را داشتیم، زیرا در فرکانس های پایین، یونها قادرند به طور لحظه ای به میدان ac پاسخ دهند. ولی در محدوده $\omega \gg \omega_L$ ، سهم یونی صفر می شود زیرا حالا میدان خیلی سریع تر از آن نوسان می کند که یون های سنگین بتوانند جریان یابند. بنابراین $\epsilon_r(\omega) \approx n^2$.



شکل ۲۰-۸ ثابت دی الکتریک $\epsilon_r(\omega)$ بر حسب ω ، که پاشندگی در ناحیه ی فرسرخ مربوط به فونون های اپتیکی در یک بلور یونی را نشان می دهد. منحنی خط چین و اگرایی مربوط به برخوردهای یونی را تصحیح می کند.

ثابت دی الکتریک اپتیکی n^2 ، به طور قابل ملاحظه ای از ثابت دی الکتریک استاتیک $\epsilon_r(0)$ کوچک تر است که این مربوط به عدم حضور سهم یونی است. مثلاً در NaCl، $n^2 = 2.25$ در حالی که $\epsilon_r(0) = 5.62$ است. جدول ۳-۸ این نکته را برای چند بلور هالورن قلیایی نشان می دهد.

جدول ۳-۸: ثابت های دی الکتریک استاتیک و اپتیکی برای چند بلور یونی

$\epsilon_r(\infty) = n^2$	$\epsilon_r(0)$	ماده
۱/۹۰	۹/۲۷	LiF
۲/۷	۱۱/۰	LiC
۲/۳۲	۵/۶۲	NaCl
۲/۱۷	۴/۶۴	KCl
۲/۱۸	۵/۱۰	RbCl

با توجه به شکل ۲۰-۸ ملاحظه می‌کنیم در نزدیکی فرکانس فونون اپتیکی ω_i ، ماده پاشندگی بزرگی از خود بروز می‌دهد. همان طور که در بخش ۱۲-۳ بحث شد، این منجر به جذب و بازتاب شدید اپتیکی در ناحیه‌ی فروسرخ می‌شود.

همین طور از شکل ۲۰-۸ ملاحظه می‌کنیم ثابت دی‌الکتریک در $\omega = \omega_i$ واگرا می‌شود. این واگرایی به پذیرفتاری یونی نسبت داده می‌شود و همان طور که انتظار می‌رود وقتی فرکانس سیگنال مساوی با فرکانس طبیعی سیستم یعنی ω_i شود، شرط تشدید برقرار می‌شود و پاسخ سیستم بی‌نهایت بزرگ خواهد بود. البته به دلیل برخورد با یونها در عمل چنین واگرایی‌ای مشاهده نمی‌شود. این برخوردها از چندین مکانیسم ناشی می‌شوند که سبب پراکندگی فونون‌های اپتیکی در بلور می‌شوند. همان طور که در بخش ۹-۳ بحث کردیم، تعدادی از این مکانیسم‌ها عبارتند از: اندرکنش ناهماهنگ، پراکندگی توسط نقایص بلوری و غیره. همان طور که قسمت خط‌چین منحنی شکل ۲۰-۸ نشان می‌دهد؛ تأثیر برخوردها این است که مقدار ثابت دی‌الکتریک متناهی می‌شود به طوری که گرچه هنوز هم در نزدیکی فرکانس تشدید ثابت دی‌الکتریک خیلی بزرگ است، ولی واگرایی آن برطرف شده است.

۹-۸ قطبش‌پذیری الکتریکی

حالا که راجع به قطبش‌پذیری‌های یونی و دوقطبی بحث کرده‌ایم، می‌خواهیم راجع به قطبش‌پذیری الکترونی و پاشندگی صحبت کنیم. ابتدا یک بررسی کلاسیکی خواهیم داشت و سپس بحث کوانتومی به دنبال خواهد آمد.

بررسی کلاسیکی

برای یافتن قطبش‌پذیری استاتیک فرض می‌کنیم که الکترون‌ها، به صورت کراه‌ای دور اتم را احاطه کرده‌اند. این کره به طور یکنواخت بار منفی دارد از قوانین الکترواستاتیک می‌توان نشان داد که در اثر اعمال یک میدان الکتریکی \mathcal{E} به این اتم، هسته از مرکز اتم به اندازه‌ی مقدار زیر جابه‌جا می‌شود.

$$x = \left(\frac{4\pi e R^3}{Ze} \right) \mathcal{E} \quad (۸-۷۶)$$

که R شعاع کره (شعاع اتمی) و Ze بار هسته است (مسائل بخش را ملاحظه نمایید). بنابراین اتم قطبیده می شود و گشتاور دو قطبی $p = Zex$ القا می گردد و قطبش پذیری الکترونی α_e برابر است با

$$\alpha_e = 4\pi\epsilon_0 R^3 \quad (۸-۷۷)$$

اگر مقدار نوعی $m = 10^{-10}$ را جایگزین نماییم خواهیم داشت:

$\text{farad-m}^2 \approx 10^{-41}$ که از همان مرتبه ی بزرگی قطبش پذیری های واقعی است که در جدول ۸-۴ آمده است.

جدول ۸-۴: قطبش پذیری های الکترونی برای بعضی از گازهای بی اثر و قلبایی های یونیده (با لایه های بسته الکترونی) و یون های هالوژنه (بر حسب واحد $\text{farad-m}^2 \cdot 10^{-20}$)

گازهای بی اثر	قلبایی های یونیده	هالوژن های با لایه های بسته اتمی
He ۰/۱۸	Li ⁺ ۰/۰۱۸	F ⁻ ۰/۷۶
Ne ۰/۳۵	Na ⁺ ۰/۲۰	Cl ⁻ ۲/۶۵
Ar ۱/۷۴	K ⁺ ۰/۸۶	Br ⁻ ۳/۶۷
Kr ۲/۲	Rb ۱/۳۴	I ⁻ ۵/۵
Xe ۳/۶	Cs ۲/۲۰	

برای یافتن قطبش پذیری ac، فرض می کنیم، یک نیروی بازدارنده، مربوط به فرکانس تشدید ω_0 بر الکترونها ی اتم وارد می شود. ^۱ وقتی میدان ac در امتداد محور xها قطبیده باشد، معادله ی مناسب حرکت الکترون به صورت زیر می شود.

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} + m \omega_0^2 x = -eE \quad (۸-۷۸)$$

با فرض این که میدان ac به صورت $E = E_0 e^{-i\omega t}$ است، می توان معادله ی فوق را بر حسب x و قطبش حل کرد. قطبش پذیری به صورت زیر در می آید:

۱- گرچه یک الکترون بر طبق قانون کولن با هسته ی اتم اندرکنش دارد. الکترون های دیگر همچون پرده ای هسته را می پوشانند در نتیجه یک نیروی شبه هماهنگ بین الکترون و هسته به وجود می آید.

$$\alpha_e(\omega) = \frac{e^2/m}{\omega_0^2 - \omega^2} \quad (۸-۷۹)$$

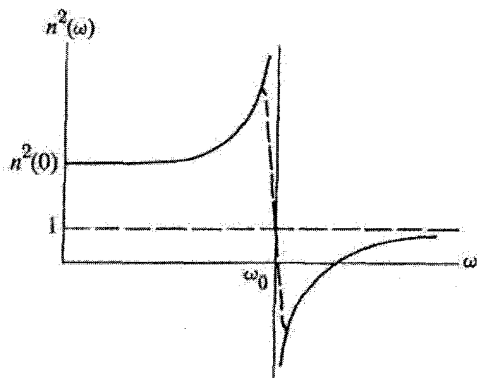
اگر Z الکترون بر اتم و N اتم بر واحد حجم داشته باشیم، پذیرفتاری برابر است با:

$$\chi_e(\omega) = \frac{NZe^2/\epsilon_0 m}{\omega_0^2 - \omega^2} \quad (۸-۸۰)$$

و ضریب شکست با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$n^2(\omega) = 1 + \frac{NZe^2/\epsilon_0 m}{\omega_0^2 - \omega^2}$$

منحنی تابع $n^2(\omega)$ بر حسب ω در شکل ۸-۲۱ رسم شده است. این منحنی پاشندگی شدیدی در فرکانس تشدید ω_0 نشان می‌دهد. چنین رفتاری نوعاً در همه‌ی سیستم‌های تشدید وجود دارد و بازتاب این واقعیت است که وقتی شرط همخوانی فرکانس ارضا شود یعنی $\omega \approx \omega_0$ است، اندرکنش شدیدی بین میدان و سیستم وجود دارد. همان طور که در بخش ۴-۱۱ نشان دادیم، واگرایی آزاردهنده در $\omega = \omega_0$ را می‌توان با منظور کردن برخورد در معادله‌ی (۸-۷۸) برطرف کرد. (در واقع اگر ω را مساوی صفر قرار دهیم، یعنی اگر الکترون‌ها را مانند ذرات آزاد در نظر بگیریم، نتیجه‌ای که از روابط فوق به دست می‌آید شبیه نتیجه‌ای است که در بخش ۴-۱۱ به دست آوردیم). در فرکانس‌های بالا یعنی $\omega \gg \omega_0$ ، برای یک محیط خلأ $n^2(\omega) \rightarrow 1$ زیرا در چنین فرکانس‌های بالایی الکترون نمی‌تواند از نوسان‌های سریع میدان پیروی نماید.



شکل ۸-۲۱ مربع ضریب شکست، $n^2(\omega)$ بر حسب فرکانس. پاشندگی در ناحیه‌ی فرابنفش که مربوط به حرکت الکترون‌ها است در شکل نشان داده شده است.

نظریه ی کوانتومی

حرکت الکترون درون اتم از قوانین کوانتومی پیروی می کند، بنابراین برای بررسی دقیق قطبش پذیری الکترونی لازم است از مکانیک کوانتومی استفاده شود. (مرور مختصری از مکانیک کوانتومی در پیوست آخر کتاب آمده است). فرض کنید که طیف انرژی یک اتم فقط شامل دو تراز باشد: حالت پایه ی E_0 و تراز برانگیخته E_1 . می توان نشان داد (Van Vleck ۱۹۳۲) که قطبش پذیری از رابطه ی زیر به دست می آید.

$$\alpha_e(\omega) = \frac{e^2}{m} \frac{f_{10}}{\omega_1^2 - \omega^2} \quad (۸-۸۲)$$

که $\omega_{10} = (E_1 - E_0) / \hbar$ فرکانس انیشتین برای دو تراز E_1 و E_0 است. f_{10} کمیتی است که جفت شدگی بین دو تابع موج ψ_1 و ψ_0 را با میدان الکتریکی فرودی بیان می کند.

f_{10} به نام قدرت نوسان گر موسوم است و معمولاً از مرتبه ی بزرگی واحد است. نتیجه ی کوانتومی ۸-۸۲ (کاملاً شبیه عبارت کلاسیک (۸-۷۹) است. قطبش پذیری استاتیک $\alpha_e(0) = (e^2 f_{10} / m \omega_{10}^2)$ در رابطه ی (۸-۸۲) را نیز می توان مشابه α_e در رابطه ی (۸-۷۷) در نظر گرفت.

در یک اتم که شامل تعداد زیادی تراز برانگیخته است، عبارت (۸-۸۲) را می توان به صورت زیر تعمیم داد.

$$\alpha_e(\omega) = \frac{e^2}{m} \sum_{j \neq 0} \frac{f_j}{\omega_j^2 - \omega^2} \quad (۸-۸۳)$$

که $\omega_{j0} = (E_j - E_0) / \hbar$ و اندیس j مربوط به تراز برانگیخته ی j ام است. حالا سیستم تعدادی فرکانس تشدید دارد و در نزدیکی هر کدام از آن ها پاشندگی قوی ظاهر می گردد. حال می توان ملاحظه کرد که چرا $\alpha_e(\omega)$

مستقل از دما است. از آن جا که $E_j - E_0$ نوعاً از مرتبه چند الکترون ولت است، انرژی گرمایی kT خیلی کوچک تر از آن است که بتواند الکترون ها را به ترازهای بالاتر برانگیخته نماید؛ بنابراین در غیاب میدان همه ی الکترون ها در تراز پایه قرار می گیرند از این تراز در رابطه ی (۸-۸۳) به عنوان تراز اولیه استفاده شده است.

گذارهای بین نواری در جامدات

عبارت (۸-۸۳) برای $\alpha_c(\omega)$ ، برای یک اتم منفرد و منزوی کاربرد دارد. بنابراین برای بررسی دی الکتریکی گازها مفید است زیرا یک گاز را می توان به عنوان مجموعه ای از اتم های مستقل در نظر گرفت. بهر جهت رابطه ی (۸-۸۳) را نمی توان برای جامدات به کار برد زیرا طیف انرژی جامدات به جای ترازهای گسسته، از نوارهای پیوسته تشکیل شده است، و حالت های الکترونی به جای اوربیتال های اتمی جای گزیده با توابع ناجای گزیده ی بلوخ نمایش داده می شوند (بخش ۲-۵ را ملاحظه نمایید).

بررسی کوانتومی که منجر به رابطه ی (۸-۸۳) گردید را نیز می توان به گونه ای تغییر داد که عبارت مناسب برای فلزات به دست آید. برای سهولت بحث را با ϵ_r'' که مؤلفه ی موهومی ثابت دی الکتریک است آغاز می کنیم. همان طور که در بخش ۱۱-۴ بحث شد، ϵ_r'' نمایان گر جذب امواج EM توسط سیستم است. می توان نشان داد (Green Way ۱۹۶۸) که ϵ_r'' با رابطه ی زیر بیان می شود.

$$\epsilon_r''(\omega) = \frac{A}{\omega^2} \int ds \frac{f_{cv}(k)}{\nabla[E_c(k) - E_v(k)]} \quad (۸-۸۴)$$

$E_c(k)$ و $E_v(k)$ به ترتیب انرژی نوارهای ظرفیت و رسانش هستند. k بردار موج الکترونی است که فوتون جذب می کند و از نوار ظرفیت به نوار رسانش گذار انجام می دهد. انتگرال (۸-۸۴) روی پربند سطح در منطقه برلیون که انرژی پایسته است گرفته شده است.

$$E_c(k) - E_v(k) = \hbar\omega \quad (۸-۸۵)$$

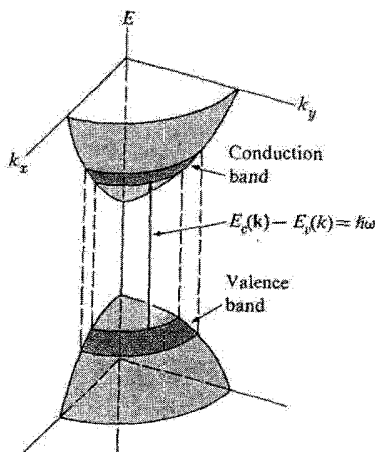
[پایستگی اندازه حرکت نیز برقرار است زیرا همان طور که معادله ی (۸-۸۴) نشان می دهد، مقدار k در هر دو نوار یکسان است. اندازه حرکت فوتون، کوچک و قابل چشم پوشی است (بخش ۴-۳ را ملاحظه نمایید)]. کمیت $f_{cv}(k)$ قدرت نوسان گر نوار به نوار است (معادله ی ۸-۸۲).

شکل ۲۲-۸ کاربرد رابطه ی (۸-۸۴) را برای رسانای نوار مستقیم نشان می دهد. ناحیه انتگرال ناحیه ای است حول مرکز که قسمتی از آن در شکل نشان داده شده است. ثابت می شود (بخش

مسائل را ملاحظه نمایید) که $E_c(k) - E_v(k) = \frac{E_g t \hbar^2 k^2}{2\mu}$ که گاف انرژی و $\mu = \frac{m_e m_h}{m_e + m_h}$

جرم کاهش یافته ی الکترون - حفره است. با جای گزینی این مقادیر در رابطه ی (۸-۸۴) و ادامه انتگرال گیری خواهیم داشت:

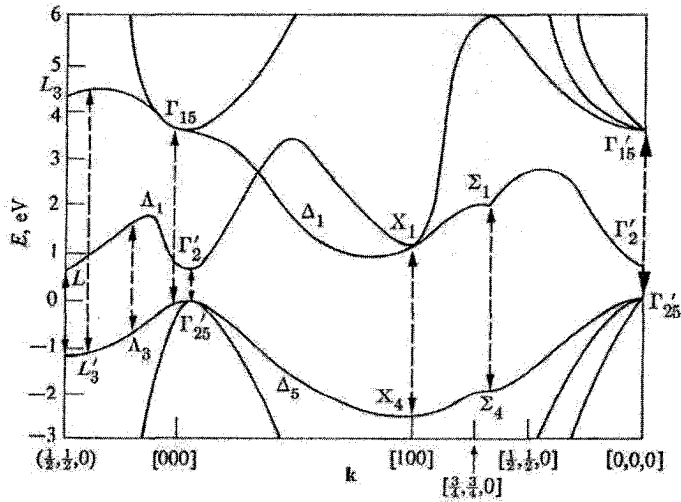
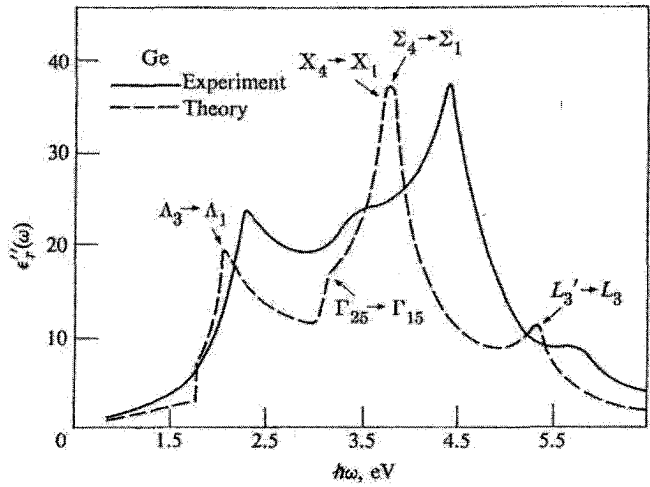
$$\epsilon_r''(\omega) = \frac{B}{\omega^2} (\hbar\omega - E_g)^{1/2} \quad (۸-۸۶)$$



شکل ۸-۲۲ حالت‌های مختلف در فضای k که شامل فرآیند جذب در فرکانس نوری ω است.

که $B = \pi \left(\frac{\mu}{\hbar}\right)^3 / 4 f_{cv} A$. این رابطه برای $E_g < \hbar\omega$ معتبر است (برای $E_g > \hbar\omega$ همانطور که در بخش ۱۲-۶ بحث شد $\epsilon_r''(\omega) = 0$ و نشان می‌دهد که در نزدیکی لبه‌ی جذب، $\epsilon_r''(\omega)$ به طور سهمی وار بر حسب افزایش می‌یابد یعنی همان طور که در بخش ۱۲-۶ بیان شد $\epsilon_r''(\omega) \approx (\hbar\omega - E_g)^{1/2}$).

اگر رابطه‌ی (۸-۸۴) را برای نوارهایی با اشکال پیچیده‌تر به کار بریم، ممکن است انتگرال بسیار پیچیده شود. در حالت کلی انتگرال شامل چندین قسمت مجزا در منطقه‌ی برلیون است که هر کدام معادله‌ی (۸-۸۵) را برآورده می‌کنند. ولی بیش‌ترین سهم مربوط به آن نقاطی از منطقه‌ی برلیون است که در آنها $E_v(k)$ و $E_c(k)$ شیب یکسانی دارند زیرا چنین نقاطی که به نام نقاط بحرانی موسوم‌اند در انتگرالده‌ی معادله (۸-۸۵) تکینگی ایجاد می‌کنند. تغییرات $\epsilon_r''(\omega)$ برحسب $\hbar\omega$ برای G_e در شکل (۸-۲۳) رسم شده است. ارتباط شانه‌های مختلف منحنی با نقاط بحرانی که مسئول مقادیر زیاد جذب هستند، در شکل نشان داده شده است. مطالعه‌ی جذب اپتیکی برای تعیین ساختار نواری و به خصوص مشخص کردن نقاط بحرانی مختلف در منطقه‌ی برلیون مفید است.



شکل ۲۳-۸ الف) ثابت دی الکتریک موهومی $\epsilon_r''(\omega)$ بر حسب انرژی فوتون $(\hbar\omega)$ برای Ge (ب) ساختار نواری Ge. پیکان‌های خطچین نقاط بحرانی مختلف را نشان می‌دهند. (After. phillips 1966)

مؤلفه‌ی حقیقی ثابت دی الکتریک $\epsilon_r'(\omega)$ جنبه‌های قطبیدگی سیستم الکترونی (بخش ۱۱-۴) را توصیف می‌کند. گرچه ϵ_r' و ϵ_r'' پدیده‌های مجزای فیزیکی را توصیف می‌کنند، ولی در واقع به لحاظ ریاضی با قضیه‌ی مهمی معروف به رابطه کرامرز - کرونیگ با هم‌دیگر مربوط هستند. (Brown, ۱۹۶۷) در حالت خاص ثابت دی الکتریک را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\epsilon_r(\omega) = \epsilon_r'(\omega) = 1 + \frac{\gamma}{\pi} R \int_0^{\infty} \frac{\epsilon_r''(\omega')}{\omega - \omega'} d\omega' \quad (۸-۸۷)$$

P مبین این است که جزء اصلی انتگرال گرفته می‌شود. بنابراین با جایگزینی ϵ_r'' از رابطه‌ی (۸-۸۴) و ادامه انتگرال بر حسب فرکانس می‌توان $\epsilon_r(\omega)$ را محاسبه کرد. $\epsilon_r(\omega)$ نیز مانند $\epsilon_r''(\omega)$ مستقیماً به ساختار نواری جسم جامد بستگی دارد. باید توجه داشت که ارتباط متقابل مهمی بین $\epsilon_r(\omega)$ و گاف انرژی جسم جامد وجود دارد زیرا به ازای $\hbar\omega < E_g$ داریم؛ $\epsilon_r''(\omega) = 0$ بنابراین معادله‌ی ۸-۸۷ را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$\epsilon_r(\omega) = 1 + \frac{\gamma}{\pi} R \int_0^{\infty} \frac{\epsilon_r''(\omega')}{\omega} d\omega' \quad (۸-۸۸)$$

که $\omega_0 = \frac{E_g}{\hbar}$ فرکانس لبه‌ی جذب است. واضح است که به دلیل وجود عامل ω^{-1} در انتگرالده هر چه گاف کوچک‌تر باشد، ω_0 نیز کوچک‌تر و $\epsilon_r(\omega)$ بزرگ‌تر خواهد بود. این مطلب توضیح می‌دهد

که چرا برای Ge که $E_g = 1 \text{ eV}$ است، $\epsilon_r(\omega) = 16$ در حالی که برای NaCl که $E_g = 7 \text{ eV}$ است، $\epsilon_r(\omega) = 16$ می‌باشد.

قطبش‌پذیری الکترونی بین نواری و ثابت دی‌الکترونیک مربوط به آن مسئول خواص اپتیکی جامدات در ناحیه‌ی مرئی و فرابنفش، به ویژه در عایق‌ها و نیمه‌رساناها است. زیرا در محدوده‌ی فرکانس‌های بالا فقط این قطبش‌پذیری مؤثر است. در عایق‌ها و نیمه‌رساناها جذب اکسیژن هم عامل مهمی در خواص اپتیکی آن‌ها است. (بخش ۱۴-۶). همان‌طور که اشاره شد، نقاط بحرانی، نقش مهم و ویژه‌ای در توجیه داده‌های میکروسکوپی مربوط به گذار بین نواری دارد. از آن‌جا که این نقاط معمولاً در نقاط متقارن یا در امتداد جهت‌های متقارن در منطقه‌ی برلیون رخ می‌دهند، داشتن اطلاعاتی راجع به اختلاف انرژی بین نواری $E_c(k) - E_v(k)$ مشخصه‌های متقارن این نقاط (یعنی موقعیت آن‌ها در منطقه‌ی برلیون) در مشخص کردن ساختار نواری جامدات بسیار مفید است. اگر چه اختلال انرژی را می‌توان از منحنی $\epsilon_r''(\omega)$ بر حسب ω تعیین کرد (مثلاً شکل ۸-۲۳) دقت این امر به خاطر جذب ضمیمه مربوط به نواحی غیر بحرانی منطقه‌ی برلیون محدود است. در سالهای اخیر یک تکنیک خاص که به نام اسپکتروسکوپی مدولاسیون موسوم است،

برای غلبه بر این مشکل توسعه یافته است. این تکنیک، یک روش تجربی برای به دست آوردن مشتق اول (یا مرتبه‌های بالاتر) $\frac{d\epsilon_r''(\omega)}{d\omega}$ به صورت تابعی از ω به دست می‌دهد. به سادگی ملاحظه می‌شود که در منحنی مشتق خیلی ساده‌تر از خود منحنی می‌توان نقاط بحرانی را قرار داد. از نظر تجربی این کار را می‌توان با برهم کنش یک پریشیدگی وابسته به زمان که بر حسب فرکانس مدولاسیون ω_d تغییر می‌کند، بر سیگنال اصلی و اندازه‌گیری تغییر نسبی

ثابت دی‌الکتریک $\epsilon_r'' / \Delta\epsilon_r''$ (که توسط پریشیدگی القا می‌شود)، انجام داد. انواع مختلف پریشیدگی مانند پریشیدگی دما و پریشیدگی هیدرواستاتیک استفاده شده‌اند. مشخصه‌ی تقارنی نقطه‌ی بحرانی با اعمال یک بردار پریشیدگی مانند یک میدان الکتریکی یا یک تانسور پریشیدگی مانند فشار یک محوری تعیین می‌گردد. برای یک مرور مختصر به:

J.E. Fischer and D.E. Aspner, "Comments on Solid State Physics", IV, 131, IV, 159

و برای یک بررسی کلی به

Cordona, 1968, Modulation Spectroscopy New York, Academic Press

مراجعه نمایید.

۱۰-۸ پییزو الکتریسته

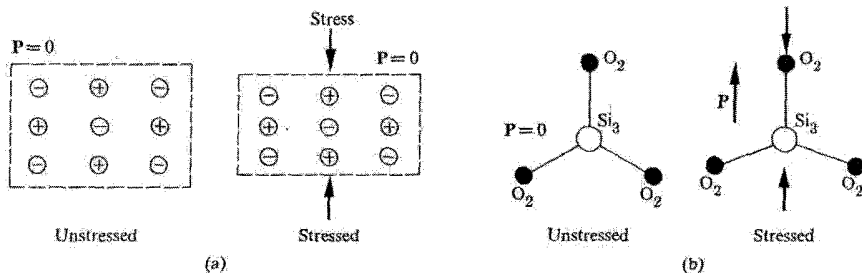
در این بخش و بخش بعدی به پدیده‌ای می‌پردازیم که مربوط به قطبش‌پذیری است. عبارت پییزوالکتریسته مربوط به این واقعیت است که وقتی بر یک بلور کرنش اعمال گردد، یک میدان الکتریکی در دو سر ماده بلوری ایجاد می‌شود. در نتیجه‌ی این میدان یک اختلاف پتانسیل در دو سر نمونه ایجاد می‌شود، که با اندازه‌گیری آن می‌توان میدان را اندازه‌گیری کرد. عکس این پدیده (اعمال یک میدان الکتریکی، ایجاد کرنش می‌کند) نیز مشاهده شده است. (این پدیده در سال ۱۸۸۰ کشف شد).

اثر پییزو الکتریک بسیار کوچک است. اگر یک میدان الکتریکی به شدت 1000 V/Cm بر یک بلور کوارتز اعمال گردد، کرنشی که ایجاد می‌کند فقط از مرتبه‌ی 10^{-7} است. یعنی یک میله‌ی یک سانتی‌متری تغییر طولی در حدود 10^{-7} A پیدا می‌کند. متقابلاً حتی کرنش‌های کوچک می‌توانند میدان‌های الکتریکی خیلی بزرگ ایجاد نمایند.

از اثر پییزوالکتریک اغلب برای تبدیل انرژی الکتریکی به انرژی مکانیکی و بر عکس استفاده

می‌شود، یعنی ماده به منزله‌ی یک حساس‌گر^۱ عمل می‌کند اعمال یک سیگنال الکتریکی به انتهای یک میله‌ی کوآرتز باعث ایجاد یک کرنش مکانیکی می‌شود که آن هم منجر به انتشار یک موج مکانیکی (مثلاً یک موج صوتی) در طول میله می‌شود. (اگر لازم باشد می‌توان مجدداً انرژی مکانیکی را در انتهای میله به انرژی الکتریکی تبدیل کرد). کوآرتز معروف‌ترین ماده پیزوالکتریک است و بیش‌تر از بقیه مواد در حساس‌گرها به کار می‌رود.

منشأ میکروسکوپی پیزوالکتریسته در جابه‌جایی بارهای یونی درون بلور نهفته است. در غیاب کرنش، توزیع بارها در جایگاه‌های شبکه‌ای خود متقارن است، بنابراین میدان الکتریکی صفر است. ولی وقتی بر یک بلور کرنش اعمال گردد، بارها جابه‌جا می‌شوند. در نتیجه، توزیع بار دیگر متقارن نیست و یک قطبیدگی خالص به همراه یک میدان الکتریکی گسترش می‌یابد. این همان میدانی است که در اثر پیزوالکتریک عمل می‌کند.



شکل ۲۴-۸ (الف) بلورهای با مرکز وارونی اثر پیزوالکتریک نشان نمی‌دهند

(ب) منشاء اثر پیزوالکتریک: بلور مرکز وارونی ندارد.

یک ماده در صورتی پیزوالکتریک است که یاخته‌ی واحد آن مرکز وارونی نداشته باشد. شکل ۲۴-۸ (الف) این مطلب را نشان می‌دهد و معلوم می‌کند اگر مرکز وارونی وجود داشته باشد، حتی بعد از اعمال کرنش هم توزیع بار متقارن می‌ماند و در نتیجه قطبش صفر باقی می‌ماند. ولی اگر همچون شکل ۲۴-۸ (ب) مرکز وارونی وجود نداشته باشد، کرنش سبب ایجاد قطبیدگی می‌شود. حال می‌توان فهمید چرا هیچ کدام از بلورهای با شبکه‌ی مکعبی پیزوالکتریسته از خود بروز نمی‌دهند.

از ۳۲ طبقه‌ی بلوری، ۲۰ تای آنها بدون تقارن مرکزی است و این‌ها هستند که کاندید مواد پیزوالکتریک هستند. ولی عدم تقارن وارونی برای وجود پیزوالکتریسیته کافی نیست و فقط تعداد بسیار کمی از موادی که بعضی از آنها در جدول ۵-۸ آمده است) این پدیده را بروز می‌دهند.

جدول ۵-۸: تعدادی از بلورهای پیزوالکتریک (بر حسب کاهش ضریب پیزو الکتریک)

بلور	فرمول شیمیایی	قدرت نسبی
نمک راسل	$\text{NaKC}_4\text{H}_4\text{O}_6, 4\text{H}_2\text{O}$	خیلی قوی
ADP	$\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$	قوی
KDP	KH_2PO_4	متوسط
کوارتز α	SiO_2	ضعیف

علاوه بر کاربرد بلورهای پیزوالکتریک در حساس گرها، از آنها در خطوط تأخیری استفاده می‌شود. هنگامی که یک سیگنال الکتریکی در یک بلور کوارتز به موج مکانیکی تبدیل می‌شود، سیگنال در داخل میله کوارتز با سرعت صوت حرکت می‌کند که چون بسیار کوچک‌تر از سرعت نور است منجر به یک تأخیر قابل ملاحظه در سیگنال می‌شود. از پیزوالکتریک‌ها و بلورهای الکتروپتیکی در تکنولوژی لیزر و اپتیک مدرن استفاده‌ی بسیاری می‌شود. مثلاً می‌توان طول کاواک یک لیزر را با اعمال یک ولتاژ به بلور پیزوالکتریک که در یکی از دو انتهای آن واقع است به طور پیوسته تغییر داد.

۱۱-۸ فروالکتریسیته^۱

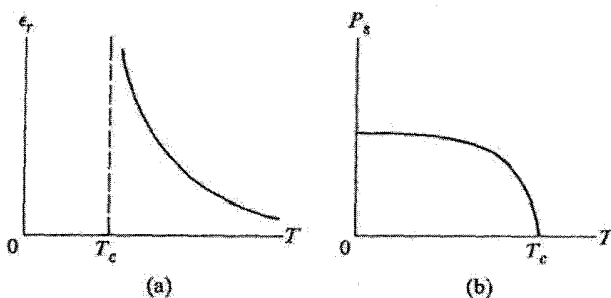
اغلب گفته می‌شود که پذیرفتاری یونی به تغییرات دما حساس نیست. گرچه این در اکثر مواد درست است، ولی نوعی از مواد هستند که از این قاعده پیروی نمی‌کنند. این مواد فروالکتریک نامیده می‌شوند. در این مواد ثابت دی‌الکتریک طبق رابطه‌ی زیر با دما تغییر می‌کند.

$$\epsilon_r = B + \frac{C}{T - T_c} \quad T > T_c \quad (۸-۸۹)$$

که C و B ثابت‌های مستقل از دما هستند. این رابطه به نام قانون کوری-وایس^۱ موسوم است. پارامترهای C و T_c به ترتیب ثابت کوری^۲ و دمای کوری^۳ نامیده می‌شوند.

این رفتار در محدوده‌ی دمایی $T > T_c$ اعتبار دارد. در محدوده‌ی $T < T_c$ ، ماده به طور خودبه‌خودی قطبیده می‌شود یعنی بدون اعمال یک میدان الکتریکی، قطبیدگی الکتریکی گسترش می‌یابد. (این پدیده مانسته‌ی مغناطیدگی خودبه‌خودی است که در مواد فرومغناطیس به وقوع می‌پیوندد.)

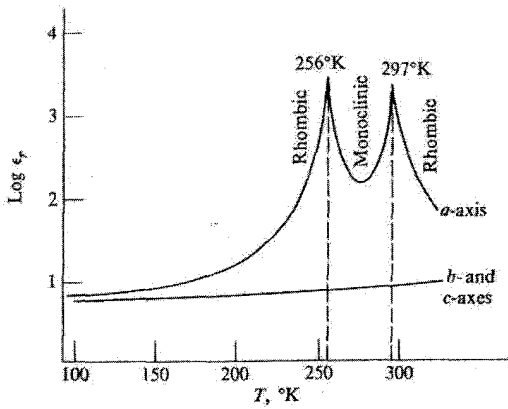
در دمای T_c یک گذار فاز^۴ رخ می‌دهد. در بالای دمای گذار ماده در فاز پارالکتریک^۵ است که در آن دو قطبی‌های اولیه در یاخته‌های واحد مختلف به طور کاتوره‌ای جهت‌گیری شده‌اند. ثابت دی الکتریک با رابطه‌ی (۸۹-۸) بیان می‌شود که در شکل ۲۵-۸ (الف) نشان داده شده است.



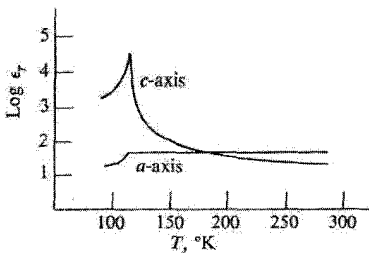
شکل ۲۵-۸ (الف) ثابت دی الکتریک ϵ_r بر حسب T در یک ماده فروالکتریک (ب) قطبیدگی خودبه‌خودی P_s بر حسب T در یک ماده فروالکتریک

در زیر دمای گذار، دو قطبی‌های اولیه با هم اندرکنش می‌کنند و این منجر به یک میدان داخلی می‌شود که دو قطبی را مرتب می‌کند. جهت‌های این میدان و قطبش مربوط آن در امتداد یک جهت مرجح در بلور قرار می‌گیرند. شکل ۲۵-۸ (ب) تغییرات قطبش خودبه‌خودی P_s نسبت به دما را برای $T < T_c$ نشان می‌دهد. با کاهش دما، این قطبش به تدریج افزایش می‌یابد.

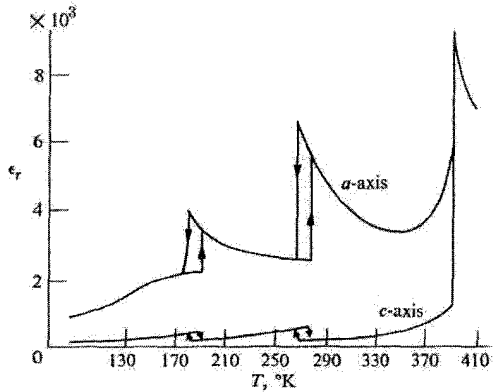
1. Curie - Weiss law
2. Curie Constant
3. Temperatytic Curie
4. Phase Transition
5. Paraelectric



(a)



(b)



(c)

شکل ۲۶-۸ (الف). منحنی $\text{Log } \epsilon_r$ بر حسب T برای نمک راسل در امتداد محورهای a ، b و c (After Halblutzel).
 (ب) منحنی $\log \epsilon_r$ بر حسب T برای KDP در امتداد محورهای a و c (After Busch).
 (ج) منحنی ϵ_r بر حسب T برای BaTiO_3 (After Merz)

جمله‌ی دوم در رابطه‌ی (۸۹-۸) معمولاً از جمله‌ی اول خیلی بزرگ‌تر است. بنابراین گرچه مقدار نوعی B در حدود ۵ است ($B \approx 5$). در نزدیکی نقطه‌ی گذار ϵ مساوی یا حتی بزرگ‌تر از ۱۰۰۰ است. بنابراین می‌توان از B صرف نظر کرد و با تقریب خوبی نوشت:

$$\epsilon_r = \frac{C}{T - T_c} \quad (۸-۹۰)$$

سه گروه عمده مواد فروالکتریک وجود دارد: گروه راسل، گروه KDP (فسفات دو هیدروژنی پتاسیم) و گروه پروکسیت^۱ ها که سر گروه آن‌ها تیتانات باریوم^۳ است. داده‌های مربوط به این مواد در جدول ۸-۶ و تغییرات دمایی ثابت دی الکتریک آن‌ها در شکل ۲۶-۸ آمده است. به مقدار بسیار بزرگ ثابت دی الکتریک در تیتانات باریوم توجه کنید که در نزدیکی دمای گذار، $\epsilon_r \approx 10^5$ است.

جدول ۸-۶: داده‌های فروالکتریک

بلور	ترکیب شیمیایی	$T_c(^{\circ}\text{K})$	$C(^{\circ}\text{K})$	$P_s(\text{Coul}/\text{M}^2)$
گروه نمک راسل	$\text{NaK}(\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_6)_1 4\text{H}_2\text{O}$	بالتر از ۲۹۷ و پائین تر از ۲۵۵	۱۷۸	۲۶۷×10^{-5} (در ۲۷۸°K)
	$\text{LiNH}_4(\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_6)_1 \text{H}_2\text{O}$	۱۰۶		۲۲۰ (در ۹۵°K)
گروه KDP	KH_2PO_4	۱۲۳	۳۱۰۰	۵۳۳۰ (در ۹۶°K)
	KD_2PO_4	۲۱۳		۹۰۰۰
	RbH_2PO_4	۱۴۷		۵۶۰۰ (در ۹۰°K)
	CsH_2AsO_4	۱۴۳		-
پروکسیت‌ها	BaTiO_3	۳۹۳	$1/7 \times 10^5$	۲۶۰۰۰ (در ۲۹۶°K)
	SrTiO_3	۳۲		۳۰۰۰ (در ۴°K)
	WO_3	۲۲۳		-

1. Potassium dihydroyen Phosphate
2. Provkites
3. Titanate Barium

مدل میکروسکوپی

حال به منشأ میکروسکوپی فروالکتریسته می پردازیم. روشن ترین توضیح این است که یک ماده ی قطبی در نظر بگیریم و از تصحیح میدان منطقه ای لورنتس (که از رابطه ی ۸-۳۰ به دست آمد) استفاده کنیم. ثابت دی الکتریک به صورت زیر به دست می آید.

$$\epsilon_r = \frac{1 + \chi}{1 - \chi} \quad (8-91)$$

اگر مقدار $\chi = \chi_d$ را قرار می دهیم (یعنی از سهم های یونی و الکتریکی صرف نظر نماییم)، که برای مواد قطبی فرض مناسبی است و سپس χ_d را از رابطه ی (۸-۴۳) جایگزین نماییم خواهیم داشت:

$$\epsilon_r = \frac{T+C}{T-T_c} \quad (8-92)$$

که $C = \frac{\gamma N p^2}{9 \epsilon_0 k}$ و $T_c = \frac{\gamma N p^2}{9 \epsilon_0 k}$ است. اگر از T در صورت کسر صرف نظر کنیم، معادله ی (۸-۹۲) همان شکل رابطه ی (۸-۹۰) را پیدا خواهد کرد. مدل دوقطبی پیش بینی می کند که با کاهش T و رسیدن آن به T_c ، ثابت دی الکتریک ϵ_r و اگر می شود و انتظار می رود سیستم ناپایدار شود و گذار به فاز فروالکتریک صورت پذیرد. از واگرایی ϵ_r در T_c به عنوان فاجعه ی قطبیدگی یاد می شود.

علی رغم این واقعیت که به نظر می رسد مدل قطبی، پدیده ی فروالکتریسته را توجیه نماید، ولی این مدل برای توجیه همه مشاهدات تجربی کافی نیست. مثلاً این مدل برای آب که در آن $T_c = 110^\circ \text{K}$ و $N \approx \frac{1}{3} \times 10^{29} \text{ m}^{-3}$ و $p = 62/0 \text{ debye}$ است، پیش بینی می کند که آب باید در $T_c = 110^\circ \text{K}$ فروالکتریک شود. ولی واقعیت این است که آب حتی در دماهای پایین تر از نقطه ی انجماد هرگز فروالکتریک نمی شود. واقعیت دیگری که به شکست مدل قطبی منجر می شود این است که این مدل پیش بینی می کند که همه ی مواد قطبی در دماهای خیلی پایین فروالکتریک می شوند. ولی در عوض تمام فروالکتریک های شناخته شده طبیعتاً غیرقطبی اند. بنابراین به دنبال توجیه دیگری برای

پدیده‌ی فروالکتریسته باشیم.

فروالکتریسته به قطبش پذیری یونی مربوط است. برای ملاحظه‌ی این واقعیت یک ماده‌ی یونی را بررسی می‌کنیم. ثابت دی الکتریک ϵ_c برابر است با

$$\epsilon_r(\omega) = n^2 + \frac{A}{\omega_t^2 - \omega^2} \quad (۸-۹۳)$$

که از رابطه‌ی (۸-۷۴) استفاده کردیم و مقدار ثابت $\omega_t^2 \chi_i(0)$ را به A نشان داده‌ایم. بنابراین ثابت دی الکتریک استاتیکی به صورت زیر خواهد بود:

$$\epsilon(0) = n^2 + \frac{A}{\omega_t^2} \quad (۸-۹۴)$$

این عبارت نشان می‌دهد که با کاهش مقدار $\epsilon_r(0)$ افزایش می‌یابد و در واقع اگر $\omega_t \rightarrow 0$ ثابت دی الکتریک $\epsilon_r(0)$ واگرا می‌شود.

ولی چرا ω_t باید کاهش یابد. حال نشان می‌دهیم که منظور کردن میدان موضعی، منجر به کاهش در مقدار این فرکانس می‌شود. بر طبق معادلات (۳-۸۳) و (۳-۸۴) حرکت عرضی یاخته‌ی واحد از رابطه‌ی زیر پیروی می‌کند.

$$\mu \frac{d^2 u}{dt^2} + \gamma \beta u = 0 \quad (۸-۹۵)$$

که μ جرم کاهش یافته‌ی یاخته‌ی واحد، u جابه‌جایی نسبی بین یونها و β ثابت نیروی بین یونها است^۱ (بخش ۶-۳ را ملاحظه نمایید). این عبارت منجر به یک مد نوسانی به فرکانس زیر می‌شود.

$$\omega_t = \frac{\gamma \alpha}{\mu} \quad (۸-۹۶)$$

که فرکانس طول موج بلند فونون‌های اپتیکی است.

اگر میدان موضعی را منظور کنیم، لازم است در معادله‌ی حرکت (۸-۹۵) تغییری داده شود، زیرا متناظر با جابه‌جایی u ، یک قطبش $P = Ne^* u$ وجود دارد و بنابراین میدان الکتریکی لورنتس برابر است با

۱- به منظور اجتناب از اشتباه با قطبش‌پذیری در این جا ثابت نیرو را به نشان داده‌ایم.

$$\varepsilon = \frac{p}{\gamma \varepsilon_0} = \frac{Ne^* u}{\gamma \varepsilon_0} \quad (۸-۹۷)$$

که u^* بار مؤثر یون است. حالا به واسطه‌ی این میدان یک نیروی الکتریکی بر یاخته‌ی واحد اثر می‌کند که برابر است با $\gamma \varepsilon^* e$ و معادله‌ی حرکت (۸-۵۹) را به صورت زیر تغییر می‌دهد.

$$\mu \frac{d^2 u}{dt^2} + \gamma \beta u = \gamma e^* \varepsilon$$

اگر را از معادله‌ی (۸-۹۷) جای‌گزین و معادله را مرتب کنیم، خواهیم داشت.

$$\mu \frac{d^2 u}{dt^2} + \left(\gamma \beta - \frac{\gamma Ne^*}{\gamma \varepsilon_0} \right) u = 0$$

که معادله‌ی یک نوسان‌گر هماهنگ به فرکانس است به طوری که:

$$\omega_t^* = \frac{\gamma \beta}{\mu} - \frac{\gamma Ne^*}{\gamma \varepsilon_0 \mu}$$

با استفاده از معادله‌ی (۸-۹۶) خواهیم داشت:

$$\omega_t^* = \omega_t - \frac{\gamma Ne^*}{\gamma \varepsilon_0 \mu} \quad (۸-۹۸)$$

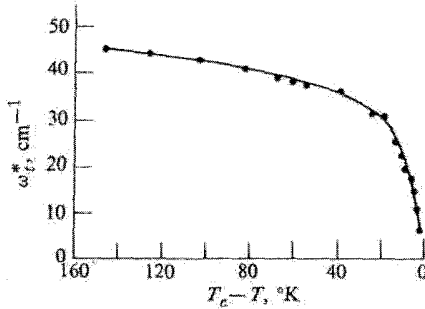
فرکانس ω_t از ω_t^* کوچک‌تر است. ω_t با صرف نظر کردن از میدان موضعی به دست آمده است. درک علت این کاهش فرکانس ساده است. وقتی شبکه جابه‌جا می‌شود، یک میدان موضعی در بعضی از جهت‌ها مانند جهت u ایجاد می‌شود. اثر این میدان کاهش نیروی بازدارنده و در نتیجه کاهش فرکانس نوسان‌گر است. منشأ ثابت نیروی β ، نیروهای کشسان کوتاه برد بین یونهاست در حالی که میدان موضعی، مربوط به نیروهای کولنی بین این یونهاست که بلندبرد هستند.

حال می‌توان عبارت (۸-۹۴) برای ثابت دی‌الکتریک را با رابطه‌ی زیر جایگزین نمود

$$\varepsilon_r(\omega) = n^2 + \frac{A}{\omega_t^2} \quad (۸-۹۹)$$

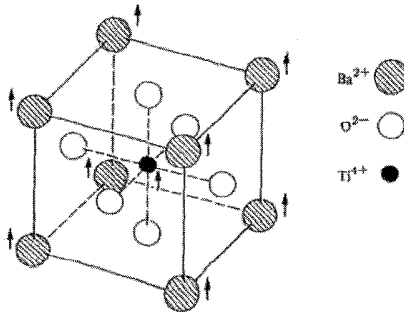
اثر میدان موضعی افزایش ثابت دی‌الکتریک است. اگر جمله‌ی دوم طرف راست معادله‌ی

(۸-۹۸) آن قدر بزرگ باشد که جمله‌ی اول را خنثی کند، در آن صورت $\omega_e^* \rightarrow 0$ و ثابت دی الکتریک نامتناهی خواهد شد. در واقع وقتی چنین اتفاقی بیفتد، سیستم ناپایدار می‌شود و به منظور ممانعت از واگرایی به فاز فروالکتریک گذار می‌کند. بنابراین سیستم با یک گذار خود به خودی به یک ساختار بلوری پایدارتر تبدیل می‌شود. معلوم شده است که در واقع همه‌ی گذارهای فروالکتریک این چنین‌اند.



شکل ۸-۲۷ فرکانس عرضی ω_e^* بر حسب $(T_c - T)$ در سولفویید آنتیموان (SbSI)
(After Perry and Agrawal, Solid State Conn. 8, 225, 1970)

شکل ۸-۲۷ کاهش فرکانس فونون را وقتی دما به دمای کوری نزدیک می‌شود نشان می‌دهد. توجه کنید که در اینجا فرکانس در حدود $\nu = 3 \times 10^4 \text{ Hz}$ ($\lambda \approx 10 \text{ Cm}$) است که به طور قابل ملاحظه‌ای از فرکانس فونون اپتیکی (10^{13} Hz) کوچک‌تر است.



شکل ۸-۲۸ ساختار BaTiO_3 در فاز مکعبی (بالای Tc)

به عنوان یک مثال واقعی از تبدیل ساختار فروالکتریک، به ساختار $BaTiO_3$ در شکل ۲۸-۸ اشاره می‌کنیم. ساختار این ماده در بالای نقطه‌ی کوری مکعبی است ولی با کاهش دما به پایین تراز T_c همانطور که در شکل نشان داده شده است، یون‌های Ba^{2+} و Ti^{4+} جابه‌جا می‌شوند و ساختار مکعبی کمی فشرده می‌شود. اگر چه جابه‌جایی کوچک و فقط در حدود 0.15\AA است، برای ایجاد و مشاهده قطبیدگی کافی است. به خاطر این جابه‌جایی نسبت به ساختار داخلی است که این مدل به نام مدل جابه‌جایی موسوم است.

مشاهده کردیم که محاسبه‌ی لورنتس برای میدان موضعی اگر بر مواد قطبی به کار رود، گمراه کننده است؛ با این همه از روش مشابهی برای محاسبه‌ی این میدان وقتی که مربوط به قطبیدگی یونی است، استفاده کرده‌ایم. در این جا هیچ تناقضی نیست زیرا چندین سال قبل، اونساگر^۱ نشان داد تا زمانی که روش لورنتس برای محاسبه‌ی میدان‌های مربوط به قطبش‌پذیری‌های الکترونی و یونی معتبر است، آن را نمی‌توان برای محاسبه‌ی میدان مربوط به قطبش‌پذیری جهت‌دار به کار برد.

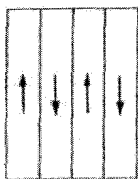
اونساگر نشان داد که میدان موضعی واقعی مربوط به قطبش‌پذیری دو قطبی خیلی کوچک‌تر از آن است که از روش لورنتس به دست می‌آید. زیاد ارزیابی کردن قطبش‌پذیری منجر به نتیجه‌گیری اشتباه در مورد فروالکتریسیته می‌شود. بحث مفصلی راجع به این نکته توسط فروهلیخ^۲ ارائه شده است. فروالکتریسیته نیز مانند پیزوالکتریسیته فقط در بلورهای بدون مرکز وارونی رخ می‌دهد. ولی شرط لازم برای فروالکتریسیته مؤکدتر و مشکل‌تر است و لازمه‌ی آن وجود یک محور قطبی مرجح است. فقط ۱۰ دسته‌ی بلوری وجود دارد که درجه‌ی تقارن آن‌ها آن‌قدر کم است که فروالکتریسیته می‌تواند در آن‌ها به وجود آید.

حوزه‌های فروالکتریک

ماده‌ای که در فاز فروالکتریک خود است، قطبیدگی خودبه‌خودی دارد، ولی جهت قطبش در همه‌ی قسمت‌های نمونه یکسان نیست. ماده به تعدادی حوزه کوچک تقسیم می‌شود که در هر یک از آن‌ها قطبش مقدار ثابتی است. ولی جهت قطبش حوزه‌های مختلف متفاوت است؛ به

1. Onsager
2. Frohlich (1958)

طوری که قطبش خالص کل نمونه در وضعیت تعادل صفر است (شکل ۲۹-۸).



شکل ۲۹-۸ ساختار حوزه در یک نمونه‌ی فروالکتریک ناقطبیده

وقتی یک میدان خارجی بر نمونه اعمال گردد، حوزه‌هایی که قطبش آن‌ها با میدان موازی است رشد می‌کنند و بزرگ می‌شوند، در حالی که حوزه‌هایی با قطبش مخالف با میدان، کوچک می‌شوند. این فرایند انبساط و انقباض با افزایش میدان ادامه می‌یابد، تا این که در میدانی که به اندازه‌ی کافی بزرگ است، تمام نمونه قطبیده و جهت قطبش آن موازی با میدان می‌شود. در مورد مفهوم حوزه و حلقه‌ی هیستریزیس در بحث مربوط به مواد فرومغناطیس (بخش ۱۱-۹) به تفصیل بحث خواهیم کرد.

خلاصه

ثابت دی الکتریک و قطبش پذیری مولکولی

ثابت دی الکتریک با معادله‌ی زیر تعریف می‌شود.

$$D = \epsilon \epsilon$$

که D جابه‌جایی الکتریکی میدان میانگین درون دی الکتریک است. رابطه‌ی بین قطبش P و بردار جابه‌جایی D به صورت زیر است.

$$D = \epsilon_0 \epsilon + P$$

قطبش P از قطبیدگی مولکول‌ها ناشی می‌شود و با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$P = Np$$

که N چگالی مولکول‌ها و P گشتاور دوقطبی هر کدام از این مولکول‌ها است. گشتاور دوقطبی با میدان متناسب است و با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$P = \alpha \epsilon$$

که α قطبش‌پذیری مولکولی است. با جای‌گزینی این رابطه در معادله فوق، ثابت دی الکتریک نسبی را می‌توان بر حسب قطبش‌پذیری بیان کرد.

$$\epsilon_r = 1 + \left(\frac{N\alpha}{\epsilon_0} \right)$$

این نتیجه که تصحیح میدان موضعی را نادیده می‌گیرد برای گازها به خوبی برقرار است. ولی در جامدات و مایعات تصحیح میدان موضعی قابل ملاحظه است و باید منظور گردد. در این صورت میدان موضعی به صورت زیر است.

$$\epsilon_{loc} = \epsilon + \frac{1}{3}(-\epsilon_0)P$$

که منجر به رابطه‌ی کلوزیوس-موسوتی منجر می‌شود.

$$\frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} = \frac{N\alpha}{3\epsilon_0}$$

قطبش پذیری دو قطبی

در حالت کلی، قطبش پذیری مولکولی، نتیجه‌ی جمعی سهم قطبش پذیری‌های دو قطبی، یونی و الکترونی است. بررسی آماری قطبیدگی دو قطبی به عبارت زیر برای قطبش پذیری دو قطبی منجر می‌شود.

$$\alpha_d = \frac{p^2}{3kT}$$

α_d با عکس دما متناسب است. ثابت دی الکتریک برابر است با

$$\epsilon_r = 1 + \frac{N\alpha_{ei}}{\epsilon_0} + \frac{Np^2}{3\epsilon_0 KT}$$

با رسم منحنی تغییرات ϵ_r بر حسب می‌توان هر دو کمیت گشتاور دایمی p و قطبش پذیری الکترونی - یونی α_{ei} را تعیین کرد. با این اطلاعات می‌توان ساختار هندسی مولکول‌ها را مشخص کرد.

قطبش پذیری دو قطبی α_c را می‌توان با این فرض که دو قطبی‌ها به طور لحظه‌ای از میدان پیروی نمی‌کنند، بلکه یک زمان واهلش معین τ وجود دارد محاسبه نمود. ثابت دی الکتریک وابسته به فرکانس به صورت زیر به دست می‌آید.

$$\epsilon_r(\omega) = n^2 + \frac{\epsilon_r(0) - n^2}{1 - i\omega\tau}$$

که n ضریب شکست اپتیکی و $\epsilon_r(0)$ ثابت دی الکتریک استاتیکی است. با افزایش فرکانس از محدوده‌ی $\frac{1}{\tau} \ll \omega$ تا محدوده‌ی $\frac{1}{\tau} \gg \omega$ ، سهم دو قطبی از مقدار $[\epsilon_r(0) - n^2]$ به صفر کاهش می‌یابد، زیرا در فرکانس‌های زیاد دو قطبی‌ها دیگر از میدان پیرونی نمی‌کنند. قسمت موهومی ثابت دی الکتریک به انرژی جذب شده توسط دی الکتریک از میدان بستگی دارد.

قطبش پذیری یونی

بلورهای یونی در ناحیه‌ی فروسرخ پاشندگی دارند که این در نتیجه‌ی برهم کنش شدید موج الکترومغناطیسی با فونون‌های اپتیکی ماده است.

$$\epsilon_r(\omega) = n^2 + \frac{\epsilon_r(0) - n^2}{1 - (\omega^2 / \omega_t^2)}$$

$\omega \gg \omega_t$ فرکانس فونون اپتیکی است. همچنانکه ω از محدوده $\omega_t \ll \omega$ به محدوده $\omega_t \gg \omega$ تغییر می‌کند، سهم یونی از $[\epsilon_r(0) - n^2]$ به صفر کاهش می‌یابد، زیرا در فرکانس‌های بالا، یونها دیگر از میدان پیروی نمی‌کنند.

قطبش‌پذیری الکترونی

یک بررسی کلاسیکی ساده شده از قطبش‌پذیری الکترونی به رابطه‌ی زیر منتهی می‌شود.

$$\alpha_e = 4\pi\epsilon_0 R^3$$

که R شعاع اتمی است. با در نظر گرفتن الکترون به عنوان یک ذره‌ی کلاسیک که توسط یک نیروی هماهنگ به بقیه‌ی اتم مقید است، قطبش‌پذیری کلاسیکی α_e به صورت زیر به دست می‌آید.

$$\alpha_e(\omega) = \frac{e}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2}$$

که فرکانس طبیعی نوسان الکترون مقید است. این بررسی منجر به یک ثابت دی‌الکتریک اپتیکی می‌شود که با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$n^2(\omega) = 1 + \frac{NZe^2}{\epsilon_0 m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2}$$

بررسی کوانتومی نیز به نتیجه‌ی مشابهی منجر می‌گردد.

در جامدات خواص دی‌الکتریک و اپتیکی مستقیماً به ساختار نوار انرژی ماده بستگی دارد.

پیزوالکتریسیته

در بلورهای یونی بدون مرکز تقارن، اعمال کرنش مکانیکی بر ماده، یک میدان الکتریکی داخلی

ایجاد می کند و برعکس. این خاصیت در حساس گرها که (وسایلی که انرژی الکتریکی را به انرژی الکتریکی و بالعکس تبدیل می کنند)، بسیار مفید است.

فروالکتریسیته

یک ماده فروالکتریسیته ماده ای است که در پایین تر از دمای بحرانی، قطبیدگی خودبه خودی بروز می دهد. بالای دمای کوری، ثابت دی الکتریک با قانون کوری - وایس بیان می شود.

$$\epsilon_r = B + \frac{C}{T - T_c}$$

خاصیت فروالکتریک را می توان با مدل جابه جایی توضیح داد: با رسیدن دمای ماده به T_c و بالاتر، یکی از مدهای فونون اپتیکی خیلی نرم می شود (که این امر مربوط به تصحیح میدان موضعی است) یعنی $\epsilon_r \rightarrow \infty$ که سبب ایجاد یک گذار فاز ساختاری می شود و قطبش خودبه خودی به وجود می آید.

References

General references

- J. Birks, editor, 1959 - 1961 , etc., Progress in Dielectrics (series), New York: John Wiley: Academic Press
- C. J. F. Bottcher, 1952, Theory of Electric Polarization, Amsterdam. :Elsevier
- F. C. Brown, 1967, The Physics of Solids, New York: Benjamin
- W. F. Brown, Jr., 1956 Encyclopedia of Physics, Volume 17, New York: Springer Verlag
- H. Frohlich, 1958, Theory of Dielectrics, second edition, Oxford: Oxford University Press
- J. C. Stater, 1967, Insulators, Semiconductors and Metals, New York: McGraw-Hill
- C. P. Smyth, 1955, Dielectric Behavior and Structure, New York: McGraw-Hill
- J. H. Van Vleck, 1932, Theory of Electric and Magnetic susceptibilities, Oxford: Oxford University Press
- A. R. Von Hippel, 1954, Dielectrics and Waves, New York: John Wiley

Dipolar polarizability

- P. Debye, 1945, Polar Molecules, New York: Dover See also books cited under General References by Bottcher, Brinks, Frohlich, and Smyth
- Electronic interband transitions, excitation
- P. Debye, 1945, polar Molecules, New York: Dover see also books cited under General References by Bottcher, Brinks, Frohlich, and Smyth

Electronic interband transitions, excitation

- M. Cordona, 1968, "Electronic Optical Properties of Solids," in Solid State Physics, Nuclear Physics and Particle Physics, I. Saavedra, editor, New York: Benjamin
- D. L. Greenway and G. Harbeke, 1968, Optical Properties and Band Structure of Semiconductors, New York: Pergamon Press
- R. S. Knox, 1963, "Theory of Excitons," in Solid State Physics, Supplement, 5 New York: Academic Press
- H. R. Phillips and H. Ehrenreich, 1967, "Ultraviolet Optical Properties," in

Semiconductors and Semimetals, R. K. Willardson and A. C. Beer, editors, New York: Academic Press

Note: Other relevant review articles in this volume are by M. cordona, E. J. Johnson,

J. O. Dimmock, H. Y. Fan, B. O. Seraphin, and H. E. Benet.

J. C. Philips, 1966, "The Fundamental Optical Spectra of Solids," in Solid State Physics, volume 18, New York: Academic Press

F. Wooten, 1972, Optical Properties of Solids, New York: Academic Press
Piezoelectricity and ferroelectricity

J. C. Burfoot, 1967, Ferroelectrics, New York: Van Nostrand

W. G. Cady, 1947, Piezoelectricity, New York: McGraw- Hill

W. Cochran, 1960, "Crystal Stability and the theory of Electricity," in Advances in Physics, Volume 9, p. 387; *ibid.*, Volume 10, p. 401 (1961)

P. W. Forsbergh, 1956, "Piezoelectricity, Electrostriction and Ferroelectricity," in Encyclopedia of Physics, Volume 17

پرسش‌ها

- ۱- فرض کنید A و B دو اتم متفاوت هستند. با استفاده از بحث تقارن تعیین کنید کدام یک از انواع مولکول‌های زیر دو قطبی‌اند: AA ، AB ، ABA (در امتداد یک خط مستقیم)، ABA (آرایش مثلثی)، AB_3 (آرایش صفحه‌ای که A در مرکز مثلث است)، AB_4 (آرایش چهاروجهی). برای هر کدام مثالی ارائه دهید.
- ۲- ثابت دی‌الکتریک استاتیک آب 81 و ضریب شکست آن $1/33$ است. میزان درصد سهم قطبش‌پذیری یونی چه قدر است؟
- ۳- برای یک اتم نوعی، میدان لازم برای جابه‌جایی هسته به میزان 1% شعاع آن را تخمین بزنید (به معادله‌ی $79-8$ مراجعه نمایید).
- ۴- از نظر فیزیکی توضیح دهید چرا قطبش‌پذیری یونی نسبتاً غیرحساس به دما است؟ آیا انتظار دارد تغییر اندکی در دما منجر به افزایش قطبش‌پذیری شود یا کاهش آن؟ توضیح دهید.
- ۵- با مراجعه به جدول $4-6$ ملاحظه می‌شود قطبش‌پذیری یون‌های قلیایی به طور قابل ملاحظه‌ای کمتر از یون‌های هالوژنی است. یک توضیح کیفی و فیزیکی برای این واقعیت ارائه دهید.
- ۶- در بررسی کلاسیکی از قطبش‌پذیری الکترونی ac ، فرض کردیم نیروی بازگرداننده وارد بر الکترون به شکل نیروی هماهنگ باشد. چگونه این دیدگاه را توجیه می‌کنید که نیروی مربوط به هسته شکل کولنی دارد که بسیار متفاوت از شکل هماهنگ است. عبارتی برای فرکانس طبیعی ω_0 بر حسب خواص اتم ارائه دهید.
- ۷- اگر در معادله‌ی $(85-8)$ ، ω_0 را مساوی صفر قرار دهیم، همان ثابت دی‌الکتریک الکترونی به دست می‌آید که از بخش $11-4$ به دست آمد. توضیح دهید چرا؟
- ۸- فرض کنید یک باریکه‌ی نوری از یک نیمه‌رسانا بگذرد، یا توسط الکترون‌هایی جذب شود و آن‌ها را از نوار ظرفیت به نوار رسانایی برانگیخته نماید (جذب بنیادی) و یا توسط اکسیژن‌ها جذب شود. یک روش الکترونیکی و آزمایشگاهی برای تعیین این که کدامیک از این دو مکانیسم موثر و عملی است، بیان کنید.

مسائل

۱- با استفاده از قانون کولن، عبارت (۲-۸) را برای یک دو قطبی الکتریکی به دست آورید. فرض $d \ll r$ کنید.

۲- الف) معادله‌ی (۳-۸) را به دست آورید. یعنی نشان دهید که گشتاور نیروی وارد بر یک دو قطبی p که در میدان یکنواخت ϵ قرار دارد برابر است با

$$\tau = p \times \epsilon$$

ب) معادله‌ی (۴-۸) را به دست آورید. یعنی نشان دهید انرژی پتانسیل یک دو قطبی که در میدان الکتریکی قرار دارد برابر است با

$$V = - p \epsilon \cos\theta$$

که θ زاویه‌ی بین دو قطبی و میدان است.

۳- گشتاور دو قطبی برای یک توزیع کلی بار به صورت جمع زیر تعریف می‌شود.

$$P = \sum q_i r_i$$

که q_i و r_i به ترتیب بار و موقعیت بار i ام است و جمع روی همه‌ی بارهای موجود گرفته شده است. انتخاب مبدا اختیاری است.

الف) نشان دهید برای حالت دوبار مساوی و مخالف، عبارت فوق به رابطه‌ی (۱-۸) تحویل می‌شود (یک مبدا اختیاری در نظر بگیرید)

ب) ثابت کنید که اگر سیستم بار در مجموع از نظر الکتریکی خنثی باشد، گشتاور دو قطبی مستقل از انتخاب مبدأ خواهد بود.

۴- گشتاور دو قطبی توزیع بارهای زیر را تعیین کنید: دوبار $1/5$ میکروکولنی که در نقاط (۳ و ۰) و (۵ و ۰) قرار دارند. مختصات بر حسب سانتی متر است.

۵- فاصله‌ی بین صفحات خازن مسطحی به ابعاد $4 \times 5 \text{ Cm}^2$ مساوی یک سانتی متر است که با میکا به ثابت دی الکتریک $\epsilon_r = 6$ پر شده است. خازن به یک باتری به ولتاژ 100 V متصل است. مقادیر زیر را محاسبه نمایید.

الف) ظرفیت خازن

(ب) بار آزاد صفحات

(ج) چگالی سطحی بار مربوط به بارهای قطبشی

(د) میدان درون میکا (اگر ورقه‌ی میکا را بیرون بکشیم میدان چه قدر خواهد بود)؟

۶- ثابت کنید هنگامی که یک مولکول توسط میدان \mathcal{E} قطبیده شود، یک انرژی پتانسیل درمولکول ذخیره می‌شود. مقدار این انرژی مساوی $\frac{1}{2} \alpha \mathcal{E}^2$ است که α قطبش‌پذیری مولکولی است.مقدار این انرژی برای اتم آرگون در میدان $\frac{10^3 \text{ Volt}}{m}$ چقدر است. قطبش‌پذیری اتم آرگون مساوی $10^{-4} \text{ farad-m}^2$ است.

۷- الف) نشان دهید چگالی بار سطحی بارهای قطبشی در سطح خارجی یک دی‌الکتریک با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$\sigma_p = p \cdot n$$

که n بردار یکه‌ی عمود بر سطح است.

(ب) معادله‌ی (۸-۲۵) را اثبات کنید. یعنی نشان دهید که میدان واقطبیده‌ی در یک بره نامتناهی، که در آن میدان عمود بر بره است با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$\epsilon_1 = -\frac{1}{\epsilon_0} P$$

(ج) میدان و امغناطیدگی ϵ_1 به شکل هندسی نمونه بستگی دارد. وقتی شکل نمونه آن چنان باشد که قطبیدگی درون آن یکنواخت باشد، ضریب واقطبیده‌ی L به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\epsilon_1 = -\frac{1}{\epsilon_0} P$$

نشان دهید ضریب واقطبیده‌ی برای یک بره نامتناهی که میدان عمود بر بره است مساوی یک است. در حالتی که برای بره‌ای که میدان موازی با وجه آن است، $L=0$ است. همین طور نشان دهید که برای یک کره $\frac{1}{3}$ و برای یک استوانه بسته به این که میدان موازی یا عمود بر محوراستوانه باشد L به ترتیب مساوی صفر یا $\frac{1}{2}$ است.

۸- الف) معادله‌ی (۸-۲۸) را اثبات کنید، نشان دهید میدان ϵ_3 مربوط به دوقطبی‌های داخل یک کاواک کروی در یک بلور مکعبی صفر می‌شود.

ب) فرض کنید که کاواک لورنتس طوری انتخاب شده است که یک شکل مکعبی داشته باشد. میدان ϵ_3 مربوط به بارهای روی سطح این کاواک را محاسبه نمایید.

ج) آیا این انتخاب جدید کاواک، میدان موضعی را تغییر می‌دهد؟ توضیح دهید. پاسخ شما، میدان ϵ_3 مربوط به دوقطبی‌های داخل کاواک را محاسبه می‌نماید (می‌توانید کاواک را به شکل مکعب در نظر بگیرید).

۹- میدان ϵ_3 در معادله‌ی (۸-۲۴) مربوط به دوقطبی داخل یک کاواک به تقارن بلور بستگی دارد. و در حالت کلی در یک بلور غیر مکعبی صفر نمی‌شود. فرض کنید که این میدان به شکل زیر باشد:

$$\epsilon_3 = \frac{b}{\epsilon_0} P$$

که b مقدار ثابتی است. ثابت دی‌الکتریک ϵ_1 را در چنین ماده‌ای محاسبه نمایید.

۱۰- نشان دهید که معادله‌ی (۸-۳۳) در مواد گازی (موادی که در آن‌ها $\frac{N}{\epsilon_0} P$ خیلی کوچک است) به معادله‌ی (۸-۱۸) تحویل می‌شود.

۱۱- با انجام انتگرال‌گیری‌های لازم، معادله‌ی (۸-۴۰) را به دست آورید.

۱۲- الف) تابع لانژوین $L(u)$ در معادله‌ی (۸-۴۱) را بر حسب توان‌های u تا توان سوم u بسط دهید و نشان دهید.

$$L(u) = \frac{u}{3} - \frac{u^3}{45} + \dots, \quad u \ll 1$$

ب) در دمای اتاق، میدان لازم برای ایجاد قطبش در آب، به میزان ۱۰٪ مقدار اشباع آن، را محاسبه نمایید.

۱۳- الف) با استفاده از شکل ۸-۱۳ و جدول ۸-۱ چگالی مولکولی CH_2Cl_2 ، CHCl_3 و CH_3Cl که مقادیر اندازه‌گیری در شکل مربوط به آن‌ها است را محاسبه نمایید.

ب) قطبش پذیری الکترونی - یونی α_{ei} را برای هر کدام از این مواد محاسبه نمایید.

۱۴- با کاهش دما از 500K به 300K قطبش پذیری مولی آب از 4×10^{-5} به $6/8 \times 10^{-5} \text{ m}^3$ افزایش می یابد. گشتاور دائمی مولکول آب را محاسبه نمایید.

۱۵- $\epsilon_r''(\omega)$ و $\epsilon_r'(\omega)$ (قسمت های حقیقی و موهومی ثابت دی الکتریک) را برای آب در دمای اتاق محاسبه نمایید. این مقادیر را بر حسب تا فرکانس 10^{12} Hz رسم کنید. (از کاغذ گراف نیمه لگاریتمی استفاده کنید).

۱۶- جذب در مواد دوقطبی را بر حسب ثابت دی الکتریک موهومی $\epsilon_r''(\omega)$ بیان کردیم. همین طور فرکانس بر حسب آن چه که اصطلاحاً زاویه ی تلفات δ نامیده و به صورت زیر تعریف می شود، بیان شد.

$$\tan \delta = \frac{\epsilon_r''}{\epsilon_r'}$$

که δ تانژانت تلفات نامیده می شود.

الف) نشان دهید بردار جابه جایی الکتریکی برابر است با

$$D = \epsilon_0 \left[\epsilon_r' \epsilon + \epsilon_r'' \epsilon \right] e^{i\sigma}$$

ب) تانژانت تلفات را به صورت تابعی از فرکانس محاسبه و نتیجه را بر حسب $\tau\omega$ رسم کنید.

ج) نشان دهید توانی که یک دی الکتریک جذب می کند (بر واحد حجم) برابر است با

$$Q = -\frac{1}{2} \epsilon_0 \epsilon_r'' \omega \tan \delta \epsilon^2$$

تانژانت تلفات δ \tan را بر حسب نسبت انرژی از دست رفته به انرژی ذخیره شده در دی الکتریک، بیان نمایید.

د) تانژانت تلفات در آب را در دمای اتاق و در فرکانس 10 GHz محاسبه نمایید و همچنین انرژی از دست رفته بر واحد حجم را محاسبه نمایید. شدت میدان را $5 \frac{\text{Volt}}{\text{m}}$ بگیرید.

۱۷- با فرض این که پیروید جهش بر حسب دما بصورت نمایی کاهش می یابد (به رابطه ی ۷۳-۸

مراجعه نمایید) توضیح دهید قسمت حقیقی و موهومی ثابت دی الکتریک (ϵ_r' و ϵ_r'') بر حسب دما چگونه تغییر می کنند. نتیجه را بر حسب $\frac{1}{T}$ رسم کنید. (فرض کنید تمام کمیت ها به جز T مستقل از دما هستند.) تاثرات تلفات بر حسب دما افزایش می یابد یا کاهش؟ توضیح دهید.

۱۸- در به دست آوردن رابطه ی (۷۴-۸) برای ثابت دی الکتریک که شامل قطبش پذیری یونی است، فرض کردیم یون ها هیچ برخوردی انجام نمی دهند و هیچ تلفاتی در حین حرکت خود ندارند. یک مکانیسم برخورد به زمان τ را در نظر بگیرید آن را توجیه کنید و ثابت دی الکتریک را بر حسب ω رسم کنید. نتیجه را با شکل ۲۰-۸ مقایسه کنید.

۱۹- ثابت دی الکتریک استاتیک بلور NaCl مساوی $\epsilon_r(0) = 5/6$ و ضریب شکست اپتیکی آن $n = 1/5$ است

الف) دلیل اختلاف بین $\epsilon_r(0)$ و n^2 چیست؟

ب) درصد سهم قطبش پذیری یونی را محاسبه نمایید.

ج) از فونون های اپتیکی برای NaCl که در جدول ۳-۳ آمده است، استفاده کنید و منحنی نمایش ثابت دی الکتریک را بر حسب فرکانس در محدوده ی فرکانسی $\omega \pm 0/1$ تا $10\omega \pm$ رسم کنید.

۲۰- با استفاده از داده های مسأله قبل و جدول ۴-۸ نزدیک ترین فاصله ی بین اتم های Na و Cl را محاسبه نمایید. ثابت شبکه را برای NaCl محاسبه کنید و نتیجه را با مقداری که در جدول ۲-۱ آمده است، مقایسه کنید (سدیم کلراید ساختار fcc دارد).

۲۱- با فرض این که بار الکترون اتم هیدروژن به طور یکنواخت در کره ای به شعاع بوهر توزیع شده است، قطبش پذیری استاتیک اتم هیدروژن را محاسبه نمایید همین طور فرکانس طبیعی الکترون ω_0 را محاسبه نمایید.

۲۲- نشان دهید عبارت (۸۰-۸) به یک پذیرفتاری استاتیک، مساوی به آن چه در رابطه ی (۷۷-۸) داده شده است، منجر می شود. از مباحث الکترواستاتیک مقدماتی برای یافتن ω_0 بر حسب مشخصه های اتمی استفاده کنید.

فصل نهم

مغناطیس و تشدید مغناطیسی

- ۹-۱ مقدمه
- ۹-۲ مروری بر فرمول‌های بنیادی
- ۹-۳ پذیرفتاری مغناطیسی
- ۹-۴ طبقه بندی مواد
- ۹-۵ دیامغناطیس لائروین
- ۹-۶ پارامغناطیس
- ۹-۷ مغناطیس در فلزات
- ۹-۸ فرومغناطیس در عایق‌ها
- ۹-۹ آنتی فرومغناطیس و فری مغناطیس
- ۹-۱۰ فرومغناطیس در فلزات
- ۹-۱۱ حوزه‌های فرومغناطیسی
- ۹-۱۲ تشدید پارامغناطیسی؛ میزر
- ۹-۱۳ تشدید مغناطیسی هسته‌ای
- ۹-۱۴ تشدید فرومغناطیس؛ امواج اسپین

خواص مغناطیسی مواد، توجه فیزیک دان‌ها، شیمی دان‌ها و مهندسين را برای سالیان متمادی به خود معطوف داشته است. به خصوص در دوران اخیر، این خواص از آن جهت مورد علاقه قرار گرفتند که اطلاعاتی راجع به اجزاء تشکیل دهنده‌ی مواد و برهم کنش بین آن‌ها به دست می‌دهد. این اطلاعات نه تنها برای فیزیک دان‌ها بلکه برای دیگر دانشمندان و مهندسين نیز جالب توجه است. مواد مغناطیسی کاربردهای تکنولوژیکی وسیعی دارند. این کاربردها؛ از هسته‌های ترانسفورماتورها در ماشین‌های الکتریکی تا نوارها و حافظه‌های مغناطیسی در کامپیوترها گسترش دارد.

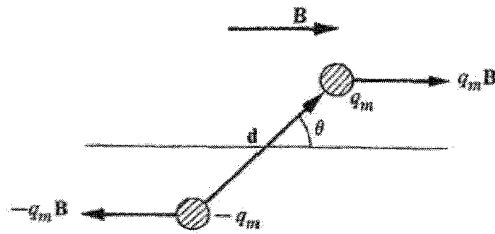
در این فصل بعد از مروری مقدماتی، ابتدا بحثی راجع به رفتار مغناطیسی اتم‌های مستقل آزاد خواهیم داشت و سپس خواص مغناطیسی الکترون‌های رسانش را بررسی می‌کنیم. پس از آن راجع به فلزات و عایق‌های فرومغناطیس و با تأکید بر میدان مغناطیسی داخلی که عامل فرومغناطیس است، صحبت می‌کنیم. همچنین موارد عملی حوزه‌های مغناطیسی و نقش آن‌ها در فرآیند مغناطش را مطالعه می‌کنیم. سپس به انواع مختلف تشدیدهای مغناطیسی می‌پردازیم. بر خلاف مطالعات قبلی که فقط اطلاعاتی از طبیعت استاتیکی مواد به دست می‌داد. این فصل از این جهت بسیار مهم است که اطلاعاتی راجع به جنبه‌های دینامیکی گشتاورهای مغناطیسی ارائه می‌دهد. این فصل با بحث راجع به امواج اسپین، مدهای برانگیخته در یک سیستم اسپین خاتمه می‌یابد.

۹-۲ مروری بر فرمول‌های پایه

در این بخش مروری خواهیم داشت بر فرمول‌های پایه که در این فصل مورد استفاده قرار می‌گیرند. اغلب این فرمول‌ها برای خواننده کتاب آشنا است و آن‌ها را در فیزیک عمومی مطالعه کرده است. ابتدا با مفهوم بنیادی گشتاور دوقطبی مغناطیسی شروع می‌کنیم. دوقطبی مغناطیسی q_m و q_m که مساوی و مخالف یکدیگرند را در نظر می‌گیریم. این‌ها یک دوقطبی را تشکیل می‌دهند که گشتاور آن با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$\mu_m = q_m d \quad (9-1)$$

d برداری است که بارهای مثبت و منفی را به هم متصل می‌کند (شکل ۹-۱). به تشابه بین این تعریف و تعریف گشتاور دوقطبی الکتریکی (رابطه‌ی ۸-۱) توجه کنید. این تشابه مکرراً در بحث ما پیش می‌آید.



شکل ۹-۱ دوقطبی مغناطیسی و گشتاوری که توسط یک میدان مغناطیسی بر آن اعمال می‌شود.

اگر این دوقطبی در یک میدان مغناطیسی با اندوکسیون B قرار گیرد، بر بار نیروی

$$F = q_m B \quad (9-2)$$

اعمال می‌شود و بر دوقطبی (که ترکیبی است از دو بار مخالف) گشتاور نیروی زیر اثر می‌کند.

$$\tau = \mu_m \times B \quad (9-3)$$

تأثیر این گشتاور، چرخاندن دوقطبی و هم جهت کردن آن با میدان مغناطیسی است. این پدیده مانسته‌ی هم جهت شدن دوقطبی الکتریکی در یک میدان الکتریکی است. دوقطبی در اثر چرخش، انرژی پتانسیلی به دست می‌آورد که به جهت گیری آن بستگی دارد و با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

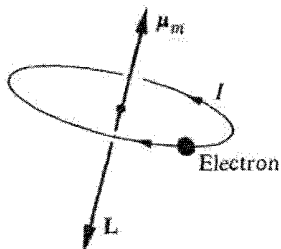
$$V = -\mu_m \cdot B = -\mu_m B \cos\theta \quad (9-4)$$

که θ زاویه‌ی بین میدان و جهت دوقطبی است. کمینه انرژی $\mu_m B$ در $\theta=0$ رخ می‌دهد که دوقطبی در امتداد میدان قرار می‌گیرد. بیشینه انرژی در $\theta=\pi$ حاصل می‌شود که دوقطبی در خلاف جهت میدان قرار می‌گیرد.

ما دوقطبی را بر حسب بارهای مغناطیسی تعریف کردیم ولی در واقع چنین بارهایی وجود ندارند. تمام خواص مغناطیسی مواد به دوران بارهای الکتریکی نسبت داده می‌شود. از فیزیک عمومی یادآوری می‌کنیم که یک حلقه جریان الکتریکی مانند یک گشتاور دوقطبی الکتریکی عمل می‌کند.

$$\mu_m = IA \quad (9-5)$$

که I جریان الکتریکی و A مساحت حلقه است. جهت μ_m (که یک بردار است) عمود بر صفحه‌ی حلقه است و جهت آن به گونه‌ای است که ناظر ایستاده در امتداد μ_B ، جریان الکتریکی را در جهت ساعت گرد ملاحظه می‌نماید (شکل ۲-۹).



شکل ۲-۹ گشتاور دوقطبی مغناطیسی m مربوط به یک حلقه‌ی جریان: I نمایان‌گر جریان الکتریکی است. بردار L اندازه حرکت زاویه‌ای الکترونی است که جریان را تولید می‌کند.

حلقه‌های جریان در یک اتم از الکترون‌های چرخان تشکیل شده‌اند. در این حالت می‌توان رابطه‌ی ساده‌ای بین μ_m و اندازه حرکت زاویه‌ای الکترون L برقرار نمود. داریم:

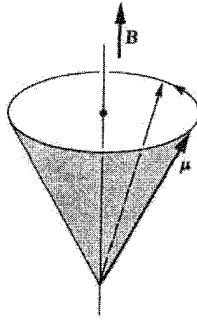
$I = e\left(\frac{\omega}{2\pi}\right)$ ، $A = \pi r^2$ و $L = mr^2$ که سرعت زاویه‌ای می‌توان نشان داد که

$$\mu_m = \left(-\frac{e}{2m}\right)L \quad (9-6)$$

علامت منفی نشان می‌دهد که μ_m در خلاف جهت L است. ضرب μ_m و L را به هم مربوط می‌کند، نسبت ژیرومغناطیسی نامیده می‌شود. سودمندی رابطه‌ی (۹-۶) از این واقعیت ناشی می‌شود که μ_m بر حسب L بیان می‌شود که کمیت آشنایی در مکانیک کوانتومی است (ضمیمه را ملاحظه نمایید) الکترون علاوه بر حرکت دورانی مداری، بدور محور خود نیز می‌چرخد که به این حرکت اسپینی گویند. بنابراین یک گشتاور مغناطیسی مربوط به اسپین وجود دارد که این گشتاور را می‌توان به اندازه‌ی حرکت زاویه‌ای اسپینی S مرتبط ساخت. این رابطه به صورت زیر است:

$$\mu_m = \left(-\frac{e}{\gamma m}\right)S \quad (9-7)$$

که نشان می‌دهد نسبت ژیرومغناطیسی $\left(-\frac{e}{\gamma m}\right)$ ، دوبرابر مقدار حاصل از حرکت مداری ۹-۶ است. استخراج کلاسیکی این رابطه را نمی‌توان برای اسپین به کار برد زیرا این حرکت یک ماهیت کاملاً کوانتومی دارد.



شکل ۹-۳ حرکت تقدیمی گشتاور دوقطبی در یک اندوکسیون مغناطیسی B

حال به بررسی دینامیکی یک دوقطبی کلاسیک در یک میدان مغناطیسی می‌پردازیم. معادله‌ی حرکت به صورت زیر است:

$$\frac{dL}{dT} = \tau \quad (9-8)$$

که τ گشتاور نیرو است.

اگر τ را از رابطه‌ی (۹-۳) و L را از رابطه‌ی (۹-۶) جایگزین نماییم، خواهیم داشت:

$$\frac{d\mu}{dt} = - \left(\frac{e}{\gamma m} \right) \mu \cdot B \quad (9-9)$$

برای اختصار، اندیس μ را حذف می‌کنیم زیرا این اشتباهی ایجاد نمی‌کند. این رابطه بیان‌گر یک حرکت تقدیمی با فرکانس ω_L است که به نام فرکانس لارمور معروف است (شکل ۹-۳ را ملاحظه نمایید).

$$\omega_L = \frac{eB}{\gamma m} \quad (9-10)$$

این دوقطبی به دور بردار میدان حرکت تقدیمی انجام می‌دهد ولی همواره با آن زاویه‌ی ثابتی می‌سازد. برای یک الکترون در $\frac{v}{c} \ll 1$ ، مقدار فرکانس لارمور برابر است با:

$$\omega_L \approx 1.0 \text{ GHz}$$

به نظر می‌رسد بیان فوق در مورد حرکت تقدیمی لارمور باعث ایجاد تردید در فرضیه‌ی قبلی مان می‌شود که می‌گوید: دوقطبی تمایل دارد خودش را با میدان هم جهت کند. ولی در حرکت

تقدیمی، دوقطبی فقط به دور B می چرخد بدون این که به جهت میدان نزدیک تر شود. در یک حرکت تقدیمی خالص هیچ گونه هم جهتی صورت نمی گیرد. بهر جهت در وضعیت هایی که عملاً رخ می دهد این حرکت تقدیمی معمولاً با تعدادی برخورد همراه است که در خلال آن دوقطبی انرژی از دست می دهد. بدین ترتیب دوقطبی تدریجاً به جهت B نزدیک می شود تا این که بالاخره کاملاً در جهت میدان قرار می گیرد. این فرآیند مغناطیدگی تدریجی، واهلش نامیده می شود. در بخش ۹-۱۲ این بحث را با تفصیل بیش تری می گیریم.

انرژی پتانسیل دوقطبی، معادله ی (۹-۴) را نیز می توان به صورت زیر نوشت:

$$E = + \frac{e}{\gamma m} L_z B \quad (9-11)$$

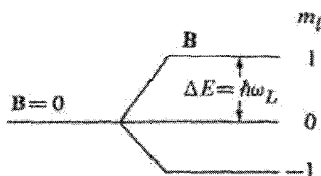
که از رابطه ی (۹-۶) استفاده شده است. در این جا B را در جهت محور Z ها گرفته ایم و L_z مؤلفه ی Z اندازه حرکت زاویه ای است. یادآوری می کنیم که بر مبنای مکانیک کوانتومی (بخش ۴-۱) $L_z = m_l \hbar$ کوانتیده است. m_l عدد صحیحی است که مقادیر ۱، ۰، -۱، ...، -۱، +۱، -۱ را دارد. l عدد کوانتومی مداری برای اندازه حرکت زاویه ای الکترون است. بنابراین معادله (۹-۱۱) را به صورت زیر هم می توان نوشت:

$$E = \left(\frac{eh}{\gamma m} \right) B m_l$$

نسبت $\mu_B \equiv \left(\frac{eh}{2m} \right)$ ، مگنتون بوهر نامیده می شود و مقدار عددی آن 10^{-24} J.m/Wb است. بنابراین می توان نوشت:

$$E = \mu_B B m_l \quad (9-12)$$

با نسبت دادن مقادیر مختلف مجاز به m_l ، مقادیر مجاز انرژی الکترون (در حضور میدان مغناطیسی) به دست می آید. برای $l=1$ ، عدد کوانتومی m_l مقادیر ۱، ۰ و -۱ را اختیار می کند که متناظر با سه تراز انرژی است. این ترازها در شکل ۹-۴ نشان داده شده اند.



شکل ۹-۴ شکافتگی تراز اتمی در اثر اعمال یک میدان مغناطیسی برای $l=1$ (اثر زیمان)

شکافتگی تراز اتمی به وسیله میدان مغناطیسی به شکلی که توصیف شد، شکافتگی زیمان نامیده می‌شود. فاصله‌ی بین هر دو تراز مجاز یکسان است و با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود:

$$\Delta E = \mu_B B \quad (9-13)$$

توجه کنید که پایین‌ترین تراز، $m_l = -1$ ، متناظر است با آن جهت‌گیری که L در خلاف جهت B ، و بنابراین μ موازی با B است؛ که این با تصویر کلاسیکی در توافق است. همین‌طور، بالاترین تراز، $m_l = +1$ ، متناظر با آن جهت‌گیری است که در آن μ در خلاف جهت میدان است.

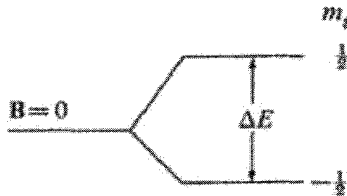
با توجه به اسپین الکترون، انرژی زیمان (رابطه‌ی ۹-۱۲) به صورت زیر بیان می‌شود:

$$E = 2\mu_B B m_s \quad (9-14)$$

که ضریب ۲ از این واقعیت ناشی می‌شود که نسبت ژیرومغناطیسی اسپینی دو برابر مقدار کلاسیک آن است. از آن‌جا که اعداد کوانتومی اسپینی $s = 21$ است، مقادیر مجاز $\frac{1}{2}$ ، $-\frac{1}{2}$ می‌باشند. شکافتگی زیمان مربوط به آن، فقط از دو خط که در شکل ۹-۵ نشان داده شده است تشکیل می‌شود. اختلاف در انرژی بین دو تراز برابر است با

$$\Delta E = 2\mu_B B \quad (9-15)$$

که دو برابر شکافتگی مداری است.



شکل ۹-۵ اثر زیمان برای مورد اسپین

آموخته است که ارتباط و تناظری بین توصیف‌های کلاسیکی و کوانتومی حرکت دوقطبی در میدان مغناطیسی برقرار نماییم. برای حالت مداری، انرژی شکافتگی $\Delta E = \mu_B B$ و نیز مساوی با $\hbar \omega_L$ است. ω_L فرکانس لارمور است که با رابطه‌ی (۹-۱۰) بیان می‌شود. بنابراین فرکانس کوانتومی برای گذار بین ترازهای زیمان مساوی فرکانس لارمور کلاسیکی است. تناظر مشابهی

برای اسپین اعمال می‌گردد که فرکانس لارمور و جدا شدگی زیمان هر دو، دوبرابر بزرگ‌ترند.

در این بخش اندازه حرکت‌های زاویه‌ای اسپینی و مداری جداگانه بررسی شدند، ولی وقتی که یک الکترون هر دو نوع اندازه حرکت را داراست، (که عمدتاً چنین است)، برهم‌کنشی بین آن‌ها هست و باید هر دو به طور همزمان بررسی شوند. این وضعیت و خاصیت مغناطیسی مربوط به آن در بخش ۶-۹ بحث خواهد شد.

۳-۹ پذیرفتاری مغناطیسی

یک میدان مغناطیسی را می‌توان با یکی از دو بردار زیر توصیف کرد: اندوکسیون مغناطیسی B یا شدت میدان مغناطیسی H . در خلاء این دو بردار به صورت زیر بهم مربوط‌اند.

$$B = \mu_0 H \quad (9-16)$$

که $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ H/m}$ تراوایی مغناطیسی خلاء است.

وقتی یک ماده‌ی مغناطیسی در میدان مغناطیسی قرار گیرد؛ ماده مغناطیده می‌شود. این مغناطیدگی با بردار مغناطش M ، که گشتاور دوقطبی واحد حجم است، توصیف می‌شود. اندوکسیون مغناطیسی داخل ماده با عبارت زیر بیان می‌شود.

$$B = \mu_0 H + \mu_0 M \quad (9-17)$$

اندوکسیون متشکل از دو جزء است: جزء $\mu_0 H$ که توسط چشمه‌های خارجی تولید می‌شود و جزء $\mu_0 M$ که مربوط به مغناطیدگی ماده است.

از آن جا که مغناطش توسط میدان القا می‌شود، می‌توان فرض کرد که M متناسب با H است، یعنی

$$M = \chi H \quad (9-18)$$

ثابت تناسب، χ پذیرفتاری مغناطیسی محیط^۱ نامیده می‌شود. اگر این عبارت M را در رابطه

۱- پذیرفتای مغناطیسی هیچ رابطه‌ی فیزیکی با پذیرفتاری الکتریکی که در بخش ۲-۸ ظاهر شد ندارد، گرچه علامت مشابهی برای هر دو به کار می‌رود. به هر جهت از آن جا که پذیرفتاری الکتریکی در این بخش ظاهر نمی‌شود، اشتباهی هم رخ نمی‌دهد.

(۹-۱۷) قرار دهیم.

$$B = \mu_0 (1 + \chi) H \quad (9-19)$$

بنابراین بردارهای B و H با یکدیگر متناسب اند.

$$B = \mu H \quad (9-20)$$

و ثابت تناسب، تراوایی محیط نامیده می شود:

$$\mu = \mu_0 (1 + \chi) \quad (9-21)$$

اغلب مناسب تر است که تراوایی نسبی μ_r به کار رود که به صورت $\mu_r = \frac{\mu}{\mu_0}$ تعریف می شود. بنابراین

$$\mu_r = 1 + \chi \quad (9-22)$$

رابطه ای است که تراوایی و پذیرفتاری محیط را به هم مربوط می کند.^۱

نتیجه ای که در این جا گرفته شد به خوبی متناظر و موازی با نتیجه ای است که در بخش ۳-۸ در مورد خاصیت الکتریکی مواد به دست آمد و رابطه ی (۹-۲۲) مانسته ی رابطه ی (۸-۲۱) است. در نوشتن رابطه ی (۹-۱۸) فرض کردیم $\mu_r = 1 + \chi$ متناسب با میدان خارجی H است و به همین دلیل از چیزهایی نظیر میدان و امگناطش، تصحیح میدان منطقه ای و غیره صرف نظر کرده ایم، که در مورد خواص الکتریکی باید این کمیت ها منظور شوند. در مغناطیس می توان از این کمیت ها و ضرایب صرف نظر کرد زیرا M در مقایسه با H خیلی کوچک است. (نوعاً $\frac{M}{H} \approx 10^{-5}$ است) ولی در مورد خواص الکتریکی $\chi \approx 1$ است. وقتی راجع به مواد مغناطیسی که در آن ها M کاملاً بزرگ است بحث می کنیم، دیگر نمی توان از مقادیر فوق صرف نظر کرد و همان گونه که در بخش ۹-۱۱ ملاحظه خواهد شد، این مقادیر باید منظور شوند.

۱- در بحث ما فرض شده است که محیط به لحاظ الکتریکی همگن است. ولی بلورهای واقعی ناهمگن اند، و پذیرفتاری و تراوایی آن ها با یک تانسور مرتبه دوم بیان می شود. به جهت به منظور اجتناب از پیچیدگی های ریاضی در این بررسی از آثار مربوط به ناهمگنی صرف نظر می کنیم.

۴-۹ طبقه بندی مواد

مواد را با توجه به علامت و بزرگی پذیرفتاری آن‌ها، می‌توان در سه دسته طبقه بندی کرد. موادی که در آن‌ها χ مثبت است، یعنی M موازی با H است، پارامغناطیس نامیده می‌شوند. موادی که در آن‌ها χ منفی است و M در خلاف جهت H است به نام دیامغناطیس خوانده می‌شوند. پذیرفتاری مغناطیسی بعضی از مواد در جدول ۹-۱ آمده است. به کوچکی مقدار χ توجه نمایید.

(۱) مواد پارامغناطیس بهترین مثال برای مواد پارامغناطیس، یون‌های عناصر واسطه و یون‌های عناصر خاکی نادر هستند. این یون‌ها، لایه‌های اتمی کامل نشده دارند و همین لایه‌ها مسئول رفتار پارامغناطیسی این موادند.

(۲) مواد دیامغناطیس بلورهای یونی و کووالان دیامغناطیس هستند. این مواد اتم‌ها یا یون‌هایی با لایه‌های کامل دارند و خاصیت دیامغناطیسی آن‌ها مربوط به این واقعیت است که اعمال میدان مغناطیسی، حرکت مداری آن‌ها را آشفته می‌کند.

(۳) مواد فرومغناطیس پذیرفتاری مغناطیسی مواد فرومغناطیس خیلی بزرگ است (10^5 Cm^{-3}). یک ماده مغناطیسی در زیر دمای معینی به طور لحظه‌ای مغناطیده می‌شود. مثال‌هایی از فلزات فرومغناطیس، Fe ، Co ، Ni و آلیاژهای آن‌ها هستند. راجع به این مواد و پدیده‌های جالبی که این مواد از خود نشان می‌دهند، بعداً در این فصل بیان خواهیم کرد.

جدول ۹-۱: پذیرفتاری مغناطیسی (بر cm^{-3})

مواد	χ
پارامغناطیس	
Al	$+220 \times 10^{-5}$
Mn	+۹۸
W	+۳۶
دیامغناطیس	
Cu	$-1/0 \times 10^{-5}$
Au	-۳/۶
Hg	-۳/۲
آب	-۹/۰
H	$-0/2 \times 10^{-8}$

۹-۵ دیامغناطیسی لانژوین

حال به این واقعیت می‌پردازیم که اثر اعمال یک میدان مغناطیسی بر حرکت مداری یک الکترون به گونه‌ای است که یک پذیرفتاری دیامغناطیسی ایجاد می‌کند. الکترونی را در نظر می‌گیریم که در یک مدار دایروی بدور هسته‌ی خود می‌چرخد. همان گونه که در شکل ۶-۹ (الف) نشان داده شده است یک میدان مغناطیسی عمود بر صفحه‌ی کاغذ بر آن اعمال می‌شود. قبل از اعمال میدان، بر طبق قانون دوم نیوتن داریم:

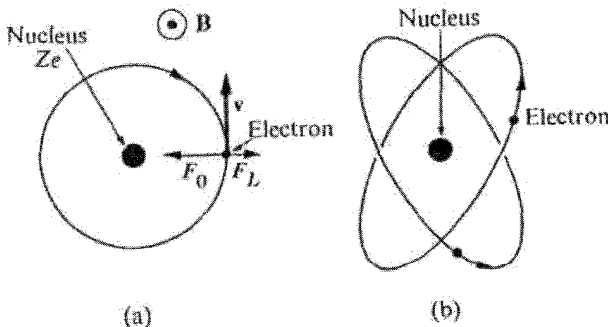
$$F_0 = m\omega_0^2 r \quad (9-23)$$

که F_0 نیروی جاذبه‌ی کولنی بین هسته و الکترون و ω_0 سرعت زاویه‌ای است. گشتاور مغناطیسی الکترون برابر است با

$$\mu_0 = IA = \frac{e}{\gamma} \omega_0 r^2 \quad (9-24)$$

که r شعاع مدار الکترون است. این گشتاور موازی با میدان است و جهت چرخش آن در شکل نشان داده شده است.

هنگامی که یک میدان مغناطیسی اعمال می‌شود یک نیروی اضافی بر الکترون عمل می‌کند که نیروی لورنتس $e(\mathbf{v} \times \mathbf{B})$ است. برای حالتی که در شکل ۶-۹ نشان داده شده است، تأثیر این نیرو، ایجاد یک نیروی شعاعی بطرف خارج است که با رابطه‌ی $eB r \omega$ بیان می‌شود.



شکل ۶-۹ منشأ اتمی دیامغناطیسی. (الف) نیروی لورنتس F_L در خلاف جهت نیروی کولنی F_0 است؛ v سرعت الکترون است. (ب) طبیعت سه بعدی مدارهای الکترونی

بنابراین معادله‌ی (۹-۲۳) را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$F_0 = -eBr\omega = m\omega^2 r \quad (9-25)$$

حالا فرکانس زاویه‌ای با ω_0 متفاوت است و مقدار آن را می‌توان از این رابطه تعیین کرد. حل این معادله درجه دوم از ω ، در محدوده‌ی میدان‌های کوچک بارابله‌ی زیر بیان می‌شود.

$$\omega = \omega_0 - \frac{eB}{2m} \quad (9-26)$$

که نشان می‌دهد دوران الکترون آهسته شده است. این کاهش فرکانس باعث تغییری در گشتاور مغناطیسی می‌شود که بر طبق رابطه (۹-۲۴) برابر است با:

$$\Delta\mu = -\left(\frac{e^2 r^2}{4m}\right) B \quad (9-27)$$

از آن جا که گشتاور موازی با میدان کاهش یافته است، گشتاور القا شده در خلاف جهت میدان است یعنی پاسخ الکترون دیامغناطیس است. به سادگی می‌توان دریافت که اگر در ابتدا الکترونی انتخاب کرده بودیم که در جهت پادساعت گرد می‌چرخید، گشتاور اولیه در خلاف جهت محور Z ها یعنی منفی بود. میدان باعث افزایش سرعت الکترون می‌شد که نتیجه‌ی آن یک گشتاور منفی تر می‌شد. یعنی گشتاور القا شده باز هم منفی و دیامغناطیس است؛ و با رابطه (۹-۲۷) بیان می‌گردد. بنابراین در حالت کلی پاسخ یک الکترون مداری، پاسخ دیامغناطیسی است و در واقع می‌توان نشان داد که دیامغناطیس از قانون لنز پیروی می‌کند.

وقتی معادله‌ی (۹-۲۷) را بری یک اتم به کار بریم، لازم است تغییراتی در آن انجام شود. زیرا به جای این که الکترون در یک مدار دایروی بچرخد، بدور یک سطح کروی می‌چرخد. (شکل ۹-۶ را ملاحظه نمایید) بهرجهت تنها سطح مقطع عمود بر میدان در پاسخ فرکانس موثر است و بنابراین باید به جای r^2 در رابطه‌ی (۹-۲۷) مقدار $\frac{2}{3}r^2$ را قرار دهیم. که r جدید شعاع کره است. پس خواهیم داشت:

$$\Delta\mu = -\left(\frac{e^2 r^2}{6m}\right) B \quad (9-28)$$

حال به سادگی می‌توان پذیرفتاری مغناطیسی را محاسبه نماییم. با فرض این که اتم Z الکترون دارد و N اتم در واحد حجم وجود دارد، تراوایی

$$\chi = -\frac{\mu_0 e^2}{6m} (NZ \overline{r^2}) \quad (9-29)$$

که r^2 میانگین مربعی شعاع الکترون است. میانگین گیری روی تمام اوربیتال‌های اشتغال شده اتم انجام می‌شود. مقادیری که از این عبارت به دست می‌آید، از همان مرتبه‌ی بزرگی مقادیر اندازه‌گیری شده است. به ازای $N = 10^{-3} \text{ m}^{-3}$ ، $r^2 = 10^{-20} \text{ m}^2$ و $Z=10$ و مقادیر مناسب برای ضرایب ثابت در رابطه‌ی (۹-۲۹)، $\chi \approx 10^{-5}$ به دست می‌آید، که در توافق با مقادیری است که در جدول ۹-۲، لیست شده‌اند.

دیامغناطیس به روشن‌ترین وجهی در جامداتی که لایه‌های اتمی کاملاً پری دارند، مشاهده می‌شود. برای مثال می‌توان از بلورهای گازهای کامل و همچنین بلورهای یونی نام برد که پذیرفتاری مغناطیسی آن‌ها در جدول ۹-۲ آمده است.

جدول ۹-۲: پذیرفتاری دیامغناطیسی بر یون - گرم برای اتم‌های گاز نادر و یون‌هایی از ساختار لایه‌ای پرشده.

عنصر	χ	عنصر	χ
Hg	$-1/9 \times 10^{-6}$	Li ⁺	0.7×10^{-6}
Ne	$-7/6$	Na ⁺	$6/1$
Ar	-19	K ⁺	$14/6$
Kr	-29	Mg ²⁺	$4/3$
Xe	-44	Ca ²⁺	$10/7$
F ⁻	$-9/4$	Sr ²⁺	$18/0$
Cl ⁻	$-24/2$		
Br ⁻	$-34/5$		

در مورد بلورهای کووالان که آن‌ها نیز دیامغناطیس‌اند معادله‌ی (۹-۲۹) را فقط برای الکترون‌های داخل مغز یونی می‌توان به کار برد. الکترون‌هایی که پیوند را تشکیل می‌دهند، اوربیتال‌هایی دارند که به شکل دایره‌ای نیستند، بنابراین استنتاجی که منجر به رابطه‌ی (۹-۲۹) شد در این جا کاربردی ندارد. پذیرفتاری یک بلور کووالان را می‌توان به شکل زیر نوشت.

$$\chi = \chi_i + \lambda \quad (9-30)$$

که χ_i اثر الکترون‌های مغز (یون‌ها) و λ اثر الکترون‌های پیوندی را شامل می‌شود. مقدار λ را برای

یک پیوند خاص در یک ترکیب معین، به طور تجربی می‌توان تعیین کرد و از این مقدار در ترکیبات دیگری که این پیوند وجود دارد، استفاده کرد. هنگامی که در یک جسم جامد بعضی از لایه‌های اتمی ناکامل باشند، آن ماده علاوه بر سهم دیامغناطیس، یک سهم پارامغناطیس هم دارد. پذیرفتاری خالص، اختلاف این دو مقدار است. ولی از آن جا که پذیرفتاری پارامغناطیسی معمولاً بزرگ‌تر است، سهم دیامغناطیس را می‌پوشاند.

۶-۹ پارامغناطیس

اتمی که لایه‌های آن کاملاً پر نیست یک گشتاور مغناطیسی پارامغناطیسی دارد که از سهم حرکت‌های مداری و اسپینی الکترون‌هایش ناشی می‌شود. فعلاً این گشتاور را به عنوان یک کمیت معلوم می‌پذیریم و راجع به اثر میدان مغناطیسی بر چنین گشتاوری ابتدا کلاسیکی و سپس کوانتوم مکانیکی بحث می‌کنیم.

تئوری کلاسیکی

انرژی پتانسیل یک دوقطبی مغناطیسی در یک میدان مغناطیسی با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود (رابطه‌ی ۴-۹).

$$V = -\mu \cdot B$$

وقتی گشتاور دوقطبی موازی با میدان است انرژی کمینه است و گشتاور تمایل دارد در امتداد میدان قرار گیرد. دما باعث کاتوره‌ای شدن جهت دوقطبی‌ها می‌گردد. در اثر این دو فرآیند که در رقابت با یکدیگرند، مغناطش ایجاد می‌گردد. می‌توان این مسأله را به طور تحلیلی و مشابه همان روشی که برای مسأله قطبش الکتریکی دوقطبی استفاده شد (بخش ۵-۸) حل کرد که منجر به رابطه‌ی زیر می‌گردد.

$$\overline{\mu_z} = \mu L(\nu) \quad (۳۱-۹)$$

که $\overline{\mu_z}$ میانگین μ_z مؤلفه گشتاور دوقطبی در امتداد جهت میدان (که در امتداد محور z ها در نظر گرفته می‌شود) و $L(\nu)$ تابع لانژوین^۱ است.

۱- لانژوین فرمول ۳۱-۹ را برای مغناطش دوقطبی قبل از مانسته‌ی الکتریکی آن به دست آورد. سپس دبی بررسی او را با حالت الکتریکی تطبیق داد.

$$L(v) = \coth v - \frac{1}{v}, \quad v = \frac{\mu_B}{kT} \quad (9-32)$$

نمودار $\bar{\mu}_z$ بر حسب $\frac{\mu_B}{kT}$ در شکل ۹-۶ رسم شده است. ملاحظه می‌شود که در میدان‌های ضعیف، $\bar{\mu}_z$ با میدان مغناطیس کننده‌ی B متناسب است، ولی همچنان که مقدار B افزایش یابد، $\bar{\mu}_z$ شروع به اشباع شدن می‌کند و سرانجام به مقدار بیشینه‌ی μ می‌رسد و وقتی به این مقدار بیشینه می‌رسد که دوقطبی دقیقاً موازی با میدان قرار گیرد.

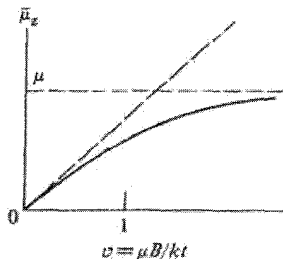
در اغلب وضعیت‌های عملی، نسبت $\frac{\mu_B}{kT}$ خیلی کوچک‌تر از یک است. برای $\mu = \mu_B$ ، $T = 100^\circ K$ و $B = 0.1 \frac{Wb}{m^2}$ این نسبت در حدود ۰/۰۰۱ است. بنابراین می‌توان تقریب تابع $L(v) \approx \frac{1}{3}v$ را به کار برد که منجر به رابطه‌ی زیر می‌گردد.

$$\bar{\mu}_z = \frac{\mu^2 B}{3kT} \quad (9-33)$$

مغناطش با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

که N چگالی اتمی است و پذیرفتاری به صورت زیر است.

$$\chi = \frac{N\mu_0\mu^2}{3kT} \quad (9-34)$$



شکل ۹-۷ میانگین مؤلفه گشتاور دوقطبی $\bar{\mu}_z$ بر حسب $v = \frac{\mu_B}{kT}$ ، خط منقطع نمایانگر تقریب میدان ضعیف است.

توجه کنید که رابطه‌ی فوق به همان شکل پذیرفتاری الکتریکی (رابطه‌ی ۸-۴۳) است. معادله‌ی ۹-۳۴ به نام قانون کوری موسوم است. اگر $N = 10^{26} m^{-3}$ و $T = 100^\circ K$ را جایگزین نماییم در می‌یابیم $\chi = 10^{-5}$ که با تجربه سازگار است. (جدول ۹-۱ را ملاحظه نمایید).

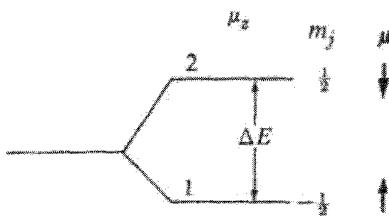
پذیرفتاری که با معادله‌ی (۹-۳۴) بیان می‌شود به پذیرفتاری پارامغناطیسی لانژوین نیز موسوم است. توجه کنید که χ با دما نسبت عکس دارد و این در تناقض با پذیرفتاری دیامغناطیس است که اساساً مستقل از دما است.

تئوری کوانتومی

گشتاور مغناطیسی μ را می‌توان بر حسب اندازه حرکت زاویه‌ای J به صورت زیر بیان کرد.

$$\mu = g \left(-\frac{e}{2m} \right) J \quad (9-35)$$

g مقدار ثابتی است که به ضریب لانده موسوم است و مقدار آن به جهت‌های نسبی اندازه‌ی حرکت زاویه‌ای اسپینی و مداری بستگی دارد. عبارت (۹-۳۵) به جز در ضریب g ، مشابه به عبارت کلاسیکی (۹-۶) است.



شکل ۹-۸ توصیف کوانتومی پذیرفتاری پارامغناطیس. پیکان‌های زیر μ ، جهت گشتاور دوقطبی برای ترازهای مختلف را نشان می‌دهند.

هنگامی که یک میدان مغناطیسی بر اتمی اعمال گردد، شکافتگی زیمان ایجاد می‌شود. (بخش ۹-۲). انرژی زیمان برابر است با

$$E = -\mu \cdot B = g\mu_B B m_j \quad (9-36)$$

اگر عدد کوانتومی اندازه حرکت زاویه‌ای ز مساوی ۲۱ باشد، مؤلفه‌ی m_j می‌تواند مقادیر $+21$ یا -21 را اختیار کند. (شکل ۹-۸). اختلاف در انرژی بین ترازها برابر است با

$$\Delta E = g\mu_B B \quad (9-37)$$

حالت پایینی $m_j = -\frac{1}{2}$ متناظر با گشتاور دوقطبی موازی با میدان است، درحالی که تراز بالایی متناظر با حالتی است که گشتاور دوقطبی در خلاف جهت میدان است.

مغناطش M با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$M = g\mu_B(N_1 - N_2) \quad (9-38)$$

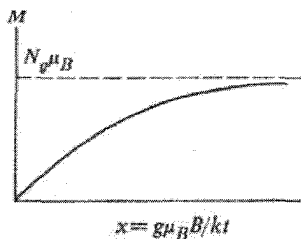
که $g\mu_B$ مؤلفه‌ی z گشتاور دوقطبی است هنگامی که کاملاً در جهت میدان قرار گیرد و N_1 و N_2 چگالی اتم‌ها در ترازهای پایینی و بالایی هستند. این دو چگالی توسط رابطه‌ی زیر به هم مربوط‌اند.

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-\frac{\Delta E}{kT}} \quad (9-39)$$

که جمله‌نمایی در طرف راست ضریب بولتزمن است. از آن جا که این چگالی‌ها در رابطه‌ی $N_1 + N_2 = N$ نیز صدق می‌کنند، (N چگالی کل است)، می‌توان از این دو معادله برای حل N_1 و N_2 استفاده کرد. وقتی چنین کنیم و نتایج را در رابطه‌ی (۹-۳۸) جایگزین نماییم، خواهیم داشت:

$$M = Ng\mu_B \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} = Ng\mu_B \tanh(x) \quad (9-40)$$

که $x = g\mu_B B/kT$



شکل ۹-۹ مغناطش M بر حسب $x = g\mu_B B/kT$ برای یک سیستم با $\frac{1}{2}$ j

مغناطش به صورت تابعی از میدان در شکل ۹-۹ رسم شده است. در میدان‌های ضعیف M با B متناسب است ولی در میدان‌های قوی‌تر، M شروع می‌کند به اشباع شدن و سرانجام وقتی تمام دوقطبی‌ها دقیقاً در امتداد میدان قرار گیرند، به مقدار بیشینه‌ی $Ng\mu_B$ می‌رسد. به طور کیفی این همان نتیجه‌ای است که قبلاً بر مبنای بررسی کلاسیکی به دست آمده است.

حال نگاه دقیق‌تری به فرآیند فیزیکی مغناطش در بررسی کوانتومی می‌افکنیم. برای $\frac{1}{2} = j$ ، دوقطبی فقط می‌تواند دو جهت داشته باشد. یکی موازی با میدان که متناظر با تراز پایینی و دیگری در خلاف جهت میدان که متناظر با تراز بالایی شکل ۸-۹ است. با افزایش میدان مغناطیسی، فضای

بین ترازها افزایش می‌یابد و دوقطبی از تراز بالایی به تراز پایینی فرو می‌افتد و این باعث ایجاد مغناطش می‌گردد.

در یک میدان ضعیف، نسبت $x \ll 1$ است و $\tanh x \simeq x$ که وقتی این مقادیر در رابطه‌ی (۹-۴۰) جایگزین گردد، منجر به پذیرفتاری

$$\chi = \frac{\mu_0 N (g\mu_B)^2}{kT} \quad (9-41)$$

می‌گردد. این همان نتیجه‌ی کلاسیکی است؛ به شرطی که فرض کنیم، گشتاور دوقطبی مؤثر اتم با رابطه‌ی $\mu_{\text{eff}} = \sqrt{3} g\mu_B$ بیان می‌گردد.

استنتاج کوانتومی بر اساس ساده‌ترین نوع شکافتگی زیمان است که تنها شامل دو تراز است. اگر j بزرگ‌تر از $\frac{1}{2}$ باشد، در حالت کلی تعداد ترازها برابر $(2j+1)$ می‌شود و منجر به پذیرفتاری زیر می‌گردد.

$$\chi = \frac{\mu_0 N \mu_{\text{eff}}^2}{3kT} \quad (9-42)$$

$$\mu_{\text{eff}} = p\mu_B \text{ و } p = [j(j+1)]^{-\frac{1}{2}} \quad (9-43)$$

عدد p ، تعداد مؤثر مگنتون‌های بوهر برای اتم می‌باشد. (نتیجه‌ی ۹-۴۲ را در بخش مسایل بررسی خواهیم کرد). بنابراین می‌توان دید که بررسی کوانتوم مکانیکی منجر به همان نتیجه‌ای می‌شود که از بررسی کلاسیکی به دست می‌آید.

منشأ اتمی مغناطیس

با بررسی حرکت‌های اسپینی و مداری و برهم‌کنش بین آن‌ها می‌توان منشأ مغناطیس را توضیح داد. اندازه‌ی حرکت زاویه‌ای مداری کل اتم به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$L = \sum_i L_i$$

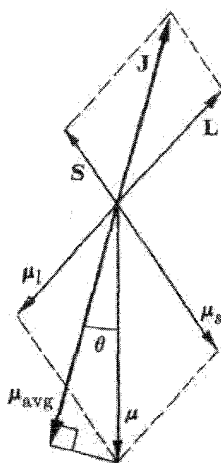
که جمع روی تمام الکترون‌ها گرفته شده است. به هر جهت از آن جا که جمع روی یک لایه‌ی کامل صفر است، باید جمع را فقط روی لایه ناکامل بگیریم. به طور مشابه اندازه حرکت زاویه‌ای اسپینی کل برابر است با:

$$S = \sum_i S_i$$

که باز هم جمع روی لایه‌ی ناکامل گرفته می‌شود. اندازه حرکت زاویه‌ای کل J با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$J = L + S \quad (9-24)$$

اندازه حرکت‌های L و S با همدیگر برهم‌کنش اسپین - مدار دارند [این برهم‌کنش فراتر از برهم‌کنش کولنی است و بین الکترون‌ها و هسته‌ها و بین خود الکترون‌ها وجود دارد]. [به خاطر وجود این برهم‌کنش، بردارهای L و S دیگر ثابت نیستند ولی اندازه حرکت زاویه‌ای کل J ثابت می‌ماند.^۱ بنابراین همان‌طور که شکل ۹-۱۰ نشان می‌دهد، بردارهای L و S در اطراف J حرکت تقدیمی دارند.



شکل ۹-۱۰ برهم‌کنش اسپین - مدار. استنتاج ضریب لاند

گشتاورهای دوقطبی $\mu_L = -\frac{e}{\gamma m} L$ و $\mu_S = -\frac{e}{m} S$ متناظر با اندازه حرکت‌های مداری و اسپینی و همچنین حرکت تقدیمی حول J می‌باشند. ولی آن‌طور که گشتاورهای خالص μ_L با L و μ_S با S موازی‌اند، گشتاور $\mu = \mu_L + \mu_S$ با J موازی نیست بلکه (به خاطر نسبت هندسی بزرگ‌تری که

۱- در واقع هر کدام از بردارهای L و S گشتاور نیرویی به یکدیگر اعمال می‌کنند که سبب حرکت تقدیمی می‌شود. ولی هیچ گشتاور نیرویی بر اندازه حرکت زاویه‌ای کل J وارد نمی‌شود بنابراین J حرکت تقدیمی ندارد و ثابت می‌ماند.

دارد) به طرف اسپین خم شده است. بردار μ با J زاویه θ را می سازد و این گشتاور نیز حول J حرکت تقدیمی دارد. از آن جا که فرکانس تقدیمی معمولاً زیاد است، فقط مؤلفه در امتداد J مشاهده می شود و میانگین مؤلفه μ دیگر صفر می شود. می توان نشان داد که:

$$\mu_{avg} = \mu \cos\theta = g \left(-\frac{e}{2m} \right) j$$

که:

$$g = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \quad (9-45)$$

و این همان ضریب g است که قبلاً از آن استفاده کردیم. برای یک حرکت مداری خالص، $s = 0$ و $l = j$ ، $g = 1$ است. در حالی که برای یک حرکت اسپینی خالص $l = 0$ و $s = j$ و $g = 2$ است. این مقادیر با آن چه در بخش ۲-۹ بحث شد سازگار است. μ که در آن بخش استفاده شد، مساوی μ_{avg} است که اندیس آن حذف شده است. اگر فقط تعداد اتم ها در لایه ی ناکامل و اندازه حرکت زاویه ای این لایه را بدانیم چگونه می توان l و s را برای یک اتم تعیین کرد. این کار را با پیروی از قاعده ی هوند به صورت زیر انجام می دهیم.

(i) برای عدد اسپینی s بیشینه ی مقداری را که اصل طرد مجاز می دارد اختیار می کنیم.

(ii) برای l نیز بیشینه ی مقداری که اصل طرد مجاز می دارد و در سازگاری با قاعده ی (i) است در نظر می گیریم.

(iii) اگر لایه کمتر از نصف پر باشد $l = |s - j|$ ، و اگر لایه بیش از نصف پر باشد $l = s + j$ خواهد شد.

این قواعد را برای اتم کربن به کار می بریم. فقط دو الکترون در زیر لایه ی $2p$ ، ($l=1$) وجود دارد که می تواند حداکثر شش الکترون را در خود جای دهد. برای تعیین اندازه حرکت زاویه ای می توان دو اسپین را موازی با یکدیگر و بدون نقض اصل طرد قرار داد که نتیجه ی آن می شود.

$s = 2 \times \frac{1}{2} = 1$ بیشینه ی l که با اصل طرد سازگار است $l = 1$ است (چرا؟). از آن جا که

زیر لایه کمتر از نصف پر است، $l = |s - j| = 0$. بنابراین اتم کربن در حالت پایه گشتاور مغناطیسی صفر دارد و خاصیت پارامغناطیس از خود بروز نمی دهد. ولی در اغلب حالت هایی که شامل لایه های ناکامل است، l مقداری غیر از صفر دارد و اتم خاصیت پارامغناطیس بروز می دهد.

یون‌های خاکی نادر

آزمایش‌هایی که روی یون‌های خاکی نادر در بلورها انجام شده است نشان می‌دهد که این یون‌ها از قانون کوری پیروی می‌کنند. تعداد متوسط مگنتون‌ها در توافق با تئوری برهم‌کنش اسپین - مدار می‌باشد. بنابراین در این یون‌ها اندازه حرکت زاویه‌ای L و S شدیداً جفت می‌شوند و گشتاور دوقطبی یون به راحتی به میدان خارجی پاسخ می‌دهد.

جدول ۳-۹: تعداد مؤثر مگنتون‌ها برای یون‌های خاکی نادر

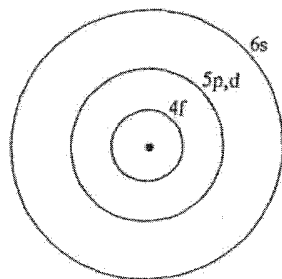
یون	حالت پایه	تئوری $p = g\sqrt{j(j+1)}$	مقدار تجربی p (معادله ۴۳-۹)
La^{3+}	1S_0	۰	دیا مغناطیس
Pr^{3+}	3H_4	۳/۵۸	۳/۶
Nd^{3+}	$^4I_{9/2}$	۳/۶۲	۳/۶
Dy^{3+}	$^6H_{15/2}$	۱۰/۶	۱۰/۶

این نتیجه شگفت‌انگیز نیست. در این یون‌ها (در جدول تناوبی از La تا Lu) لایه‌ی ۴f ناکامل است. لایه‌ی بیرونی ۵p کاملاً پُر است، در حالی که لایه‌های ۵d و ۶s که بیرونی‌ترند الکترون‌های خود را از دست داده‌اند تا بلور یونی ساخته شود (شکل ۱۱-۹). بنابراین تنها لایه‌ی ناکامل، لایه‌ی ۴f است، و این همان لایه‌ی است که در آن رفتار مغناطیسی رخ می‌دهد. از آن جا که الکترون‌های در این لایه در اعماق یون قرار گرفته‌اند و توسط لایه‌های خارجی ۵p و ۵d حفاظت می‌شوند؛ بنابراین به طور قابل ملاحظه‌ای از یون‌های دیگر بلور تأثیر نمی‌پذیرند. رفتار مغناطیسی آن‌ها خیلی شبیه به یک یون آزاد است. مقادیر نوعی برای برهم‌کنش‌های اسپین - مدار و میدان - بلور در این مواد به ترتیب 10^3 cm^{-1} و 10^2 cm^{-1} است.^۱

۱- دلیل دیگر این که چرا مدل یون آزاد برای یون‌های خاکی نادر به کار می‌رود این است که برهم‌کنش اسپین - مدار در این مواد خیلی قوی است زیرا این برهم‌کنش با عدد اتمی عنصر مورد نظر متناسب است و همه‌ی یون‌های خاکی تا در عدد اتمی (Z) بزرگ دارند.

یون‌های گروه آهن

جدول ۴-۹ نشان می‌دهد که یون‌های (فریک و فروس) گروه آهن از نظر مغناطیسی به گونه‌ای عمل می‌کنند که گویی $s \approx z$ است یعنی تنها گشتاور اسپینی می‌تواند در مغناطش سهم داشته باشد.



شکل ۱۱-۹ لایه‌های مختلف در یون‌های خاکی نادر. لایه‌ی ناکامل ۴f توسط لایه‌ی پنجم از اتم‌های دیگر محافظت شده‌است. (لایه‌ی ششم معمولاً یونیزه است)

به این مطلب می‌توان با بحث زیر پی برد. خواص مغناطیسی این گروه از عناصر مربوط به الکترون در لایه‌ی ناکامل ۳d است. از آن جا که الکترون‌ها در این لایه‌ی خارجی به شدت با یون‌های همسایه برهم کنش می‌کنند، حرکت مداری اساساً از بین می‌رود و خاموش می‌شود، و فقط گشتاور اسپینی در مغناطش مشارکت می‌کند. به بیان دیگر در این یون‌ها قدرت میدان بلور خیلی بیش‌تر از قدرت برهم کنش اسپین - مدار است. این درست بر خلاف وضعیتی است که در یون‌های خاکی نادر وجود دارد. مقادیر نوعی قدرت میدان بلور و برهم کنش اسپین - مدار در یون‌های گروه آهن به ترتیب 10^2 cm^{-1} و 10^4 cm^{-1} است.

جدول ۴-۹: یون‌های گروه آهن

مقدار تجربی p (معادله ۳۴-۹)	$p = 2\sqrt{S(S+1)}$	تئوری $p = g\sqrt{j(j+1)}$	حالت پایه	یون
دیامغناطیس	۰	۰	1s	K^+, Ca^{2+}
۱/۷	۱/۷۳	۱/۵۵	$^2D_{\frac{3}{2}}$	V^{2+}, Ti^{3+}
۲/۸	۲/۸۳	۱/۶۳	3F_2	V^{3+}
۳/۸	۳/۸۷	۰/۷۷	$^4F_{\frac{3}{2}}$	V^{4+}, Cr^{3+}, Mn^{2+}
۵/۹	۵/۹۲	۵/۹۲	$^6S_{\frac{5}{2}}$	Fe^{2+}, Mn^{2+}
۵/۴	۴/۹۰	۶/۷	5D_4	Fe^{2+}
۱/۹	۱/۷۳	۳/۵۵	$^2D_{\frac{5}{2}}$	$, Ca^{2+}$

۷-۹ مغناطیس در فلزات

اغلب فلزات پارامغناطیس‌اند، ولی تعداد اندکی فلز مهم وجود دارد که خاصیت فرومغناطیس دارند. در این بخش فقط فلزات پارامغناطیس را بررسی می‌کنیم و فلزات فرومغناطیس را به بخش ۱۰-۹ واگذار می‌کنیم. الکترون‌های رسانش در فلزات در دو خاصیت سهیم‌اند. یکی در خاصیت پارامغناطیس به واسطه‌ی اسپین آن‌ها و دیگری در خاصیت دیامغناطیس به خاطر حرکت‌های مداری که توسط میدان مغناطیسی القا می‌گردد. پذیرفتاری خالص الکترونی برابر اختلاف بین این دو سهم است.

پارامغناطیس اسپینی

پارامغناطیس اسپینی از این واقعیت ناشی می‌شود که هر کدام از الکترون‌های رسانش یک گشتاور مغناطیسی اسپینی دارند که تمایل دارد با میدان هم جهت شود. در محاسبه پذیرفتاری می‌توان از

نتیجه‌ی رابطه‌ی (۴۱-۹) و $s = \frac{1}{2}$ استفاده کرد که نتیجه می‌شود:

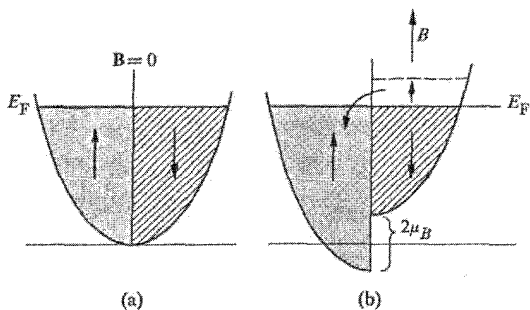
$$\chi = \frac{\mu_0 N \mu_B^2}{KT} \quad (9-46)$$

که $g=2$ در نظر گرفته شده است زیرا یک حرکت اسپینی خالص را بررسی می‌کنیم. این نشان می‌دهد که $\chi \approx \frac{1}{T}$ است.

آزمایش نشان می‌دهد که پذیرفتاری اسپینی در فلزات اساساً مستقل از دما است. همچنین مقادیر مشاهده شده به نحو قابل ملاحظه‌ای از مقادیر پیش بینی شده کوچک‌تر است. این واقعیت‌ها تردید در کاربست معادله‌ی (۹-۴۱) بر الکترون‌های ظرفیت را آشکار می‌کند.

منشأ این مشکل در این واقعیت نهفته است که معادله‌ی (۹-۴۱) بر پایه این فرض بنا شده است که الکترون‌های رسانش جایگزیده‌اند و از توزیع بولتزمن پیروی می‌کنند. ولی الکترون‌های رسانش جای‌گزیده نیستند و از تابع توزیع فرمی-دیراک پیروی می‌کنند (بخش ۶-۴ را ملاحظه نمایید).

بررسی مناسبی که این نکته را به حساب آورد در شکل ۱۲-۹ نمایش داده شده است. در غیاب میدان، اسپین نیمی از الکترون‌ها به طرف جهت مثبت محور z ‌ها است و اسپین نیمی دیگر در خلاف جهت آن است. در نتیجه مغناطش کل صفر است. هنگامی که یک میدان مغناطیسی در امتداد محور z ‌ها اعمال گردد، انرژی الکترون‌های با اسپین موازی با B به اندازه‌ی μ_B کم می‌شود در حالی که انرژی الکترون‌های با اسپین در جهت مخالف به اندازه‌ی همان مقدار افزایش می‌یابد. (شکل ۱۲-۹ب) این وضعیت از نظر انرژی ناپایدار است بنابراین بعضی از الکترون‌های نزدیک تراز فرمی شروع می‌کنند به انتقال از نیمه با اسپین مخالف به نیمه با اسپین موازی که این امر منجر به یک مغناطش می‌گردد. باید توجه داشت که تنها تعداد نسبتاً اندکی از الکترون‌های نزدیک سطح فرمی قادرند تا اسپین خود را معکوس کنند و در جهت میدان قرار گیرند. الکترون‌های دیگر که در اعماق توزیع فرمی قرار دارند به خاطر اصل طرد پائولی از این کار منع می‌شوند (مشابه این بحث را در بخش ۶-۴ ملاحظه نمایید)



شکل ۹-۱۲ (الف) وقتی $B=0$ است، دو نیمه توزیع فرمی - ویراک مساویند و بنابراین $M=0$ است (ب) وقتی میدان اعمال می‌گردد اسپین‌های نیمه‌ی پاد موازی معکوس می‌شوند و به نیمه‌ی اسپین موازی می‌روند که نتیجه‌ی آن یک مغناطش موازی خالص است.

حال می‌توانیم برآورد خوبی از پذیرفتاری مغناطیسی به دست آوریم. الکترون‌هایی که در فرآیند وارون کردن اسپین شرکت می‌کنند، بازه انرژی به ارتفاع حدود $\mu_B B$ (شکل ۹-۱۲) را اشغال می‌کنند. بنابراین چگالی آن‌ها با رابطه‌ی $N_{\text{eff}} = \frac{1}{2} g(E_F) \mu_B B$ بیان می‌شود که $g(E_F)$ چگالی حالت‌های تراز انرژی فرمی است [ضریب $\frac{1}{2}$ به این دلیل وارد شده است که $g(E_F)$ همان گونه که در بخش ۹-۱۱ تعریف شد شامل هر دو جهت اسپین است در حالی که در شرایط موجود فقط یک جهت اسپین در فرایند وارون شدن منظور شده است]. از آن جا که هر عمل وارون سازی اسپین، مغناطش را به اندازه‌ی $2\mu_B B$ (از $-\mu_B$ به μ_B) افزایش می‌دهد، نتیجه می‌شود که مغناطش خالص با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$g(E_F) B M \approx N_{\text{eff}} 2\mu_B = \frac{1}{2} g(E_F) \mu_B 2\mu_B = \mu_B^2$$

که منجر به پذیرفتاری پارامغناطیس می‌شود.

$$\chi_P \approx \mu_0 \mu_B^2 g(E_F) \quad (9-47)$$

پذیرفتاری توسط چگالی حالت‌ها در تراز فرمی تعیین می‌شود؛ و کمیت $g(E_F)$ که در پدیده‌های ترابری خیلی مهم است (بخش ۹-۱۸)، در این جا نیز نقش عمده‌ای ایفا می‌کند. بنابراین با اندازه‌گیری می‌توان اطلاعاتی راجع به $g(E_F)$ به دست آورد. مطابق رابطه‌ی (۹-۴۷)، اساساً مستقل از دما است. این نکته را از این واقعیت می‌توان دریافت که دما تنها اثر کوچکی بر تابع توزیع فرمی-دیراک الکترون‌ها دارد و در نتیجه استنتاجی که منجر به رابطه‌ی (۹-۴۷) گردید،

معتبر باقی می ماند.

اگر رابطه‌ی (۹-۴۷) را بر یک نوار از نوع نوار استاندارد اعمال کنیم، خواهیم داشت

$$g(E_F) = \frac{2N}{2E_F} \quad (۹-۴۷)$$

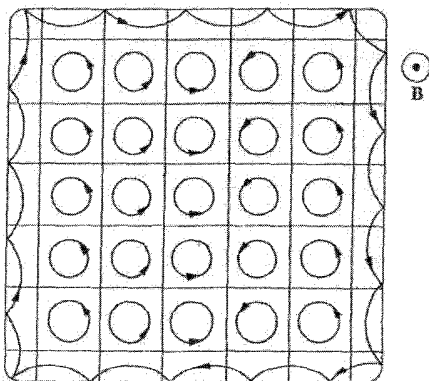
و (۴-۳۴) را ملاحظه نمایید. و معادله به صورت زیر در می آید:

$$\chi_p \cong \frac{2}{\gamma} \chi \frac{T}{T_F} \quad (۹-۴۸)$$

که χ پذیرفتاری کلاسیک (از رابطه‌ی ۹-۴۶) و T_F دمای فرمی ($E_F = kT_F$) است. از آن جا که T_F خیلی بزرگ، (اغب 30000 K و یا بیش تر) ملاحظه می شود که χ_p به اندازه‌ی ضریبی در حدود 10^2 از χ کوچک تر است که این با تجربه سازگار است. استثنائات در فلزات واسطه، پذیرفتاری پارامغناطیس بزرگ است، زیرا $g(E_F)$ بزرگ است، که این به خاطر کوچک بودن ارتفاع نوار $3d$ است.

دیامغناطیس

همان گونه که در شکل ۱۳-۹ نشان داده شده است، الکترون‌های رسانش در حرکت سیکلوترونی خود که در حضور میدان مغناطیسی صورت می گیرد، اثر دیامغناطیس از خود بروز می دهند. هر حلقه‌ای که الکترون طی می کند، معادل یک گشتاور دو قطبی مغناطیسی است که جهت آن خلاف جهت میدان است.



شکل ۱۳-۹ اثر دیامغناطیسی حرکت سیکلوترونی در فلزات. در مرزها، الکترون‌ها تمایل دارند اثر الکترون‌های توده (Bulk) جسم را حذف کنند.

بررسی کلاسیکی نشان می‌دهد که سهم دیامغناطیس کل تمام الکترون‌ها صفر است. تأثیر حلقه‌های الکترونی بسته با اثر الکترون‌هایی که در خلاف جهت در امتداد مرزها حرکت می‌کنند حذف می‌شود^۱

بررسی کوانتومی (که بسیار پیچیده است؛ Martin, 1967 را ملاحظه نمایید) نشان می‌دهد که یک سهم دیامغناطیسی وجود دارد که صفر نمی‌شود و مساوی است با یک سوم پذیرفتاری پارامغناطیسی اسپینی که با رابطه‌ی (۹-۴۸) بیان می‌شود. بنابراین پاسخ خالص و نهایی، یک پاسخ پارامغناطیسی است.

جدول ۵-۹: پذیرفتاری‌های بعضی از فلزات دو ظرفیتی و چندظرفیتی در دمای اتاق

عنصر	χ_{tot} (تجربی)	χ_{core}	تجربی $\chi_{electron} = \chi_{tot} - \chi_{core}$	تئوری $\chi_{electron} = \chi_{spin} + \chi_{orbit}$
K	-۰/۴۷	-۰/۳۱	-۰/۷۶	-۰/۳۵
Rb	-۰/۳۳	-۰/۴۶	-۰/۷۹	-۰/۳۳
Cu	-۰/۷۶	-۰/۲۰	۱/۲۴	-۰/۶۵
Ag	-۲/۱	-۳/۰	۰/۹	۰/۶
Au	-۲/۹	-۴/۳	۱/۴	۰/۶
Mg	-۰/۹۵	-۰/۲۲	۱/۲	-۰/۶۵
Ca	۱/۷	-۰/۴۳	۲/۱	-۰/۵

در مقایسه‌ی نتایج تئوری با تجربه، می‌باید اثر مغناطیس مغزهای یونی^۲ را نیز که با استفاده از بخش ۵-۹ محاسبه می‌شود، در نظر گرفت. جدول ۵-۹ نتایج این مقایسه را برای چند عنصر فلزی بیان می‌کند.

۱- توجه کنید که مساحت حلقه در مرز مساوی با مساحت کل تمام حلقه‌های داخلی است. از آن جا که گشتاور مغناطیسی یک حلقه جریان متناسب با مساحت حلقه است نتیجه می‌شود که گشتاور حلقه‌ی سطح، گشتاور حلقه‌های داخلی را حذف می‌کند. این واقعیت که بر طبق الکتروپنایمیک کلاسیک پذیرفتاری مغناطیسی کل برای هر بار و جریان الکتریکی صفر است، به قضیه‌ی وِن لیوون (Van Leeuwen) موسوم است. برای اثبات آن به کتاب زیر مراجعه نمایید.

The Theorg of Electric and Magnetic Susceptibility, J. H. Van Vleck 1932

2. ioncore

۸-۹ فرومغناطیس در عایق‌ها

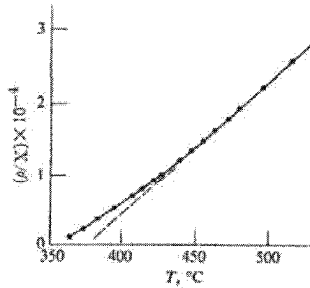
فرومغناطیس، پدیده‌ی مربوط به مغناطش خودبه‌خودی است. بهترین مثال برای مواد فرومغناطیسی، فلزات واسطه‌ی Fe، Co و Ni هستند. ولی عناصر و آلیاژهایی، شامل عناصر واسطه یا خاکی‌های نادر نیز خاصیت فرومغناطیس از خود بروز می‌دهند. از فلزات خاکی نادر Gd و Dy و بعضی اکسیدهای فلزی عناصر واسطه مانند CrO_2 (که عایق‌اند) تحت شرایط مناسب، فرومغناطیس می‌شوند.

در مواد فرومغناطیس، کسر قابل توجهی از گشتاورهای مغناطیسی مولکولی در جهت مرجحی از بلور به دنبال هم قرار می‌گیرند. این واقعیت که پدیده‌ی فرومغناطیس محدود به عناصر واسطه و خاکی‌های نادر است، مبین این است که این پدیده به لایه‌های پر نشده‌ی ۳d و ۴f در این مواد مربوط است.

پدیده‌ی فرومغناطیس فقط در دماهای پایین‌تر از دمای معینی ظاهر می‌گردد. این دما دمای گذار فرومغناطیسی و یا به بیان ساده‌تر دمای کوری نامیده می‌شود. این دما به نوع ماده فرومغناطیس بستگی دارد ولی همان‌طور که از جدول ۶-۹ ملاحظه می‌شود، مرتبه‌ی بزرگی این دما در حدود $1000^\circ K$ است. بنابراین ناحیه‌ی فرومغناطیسی اغلب شامل تمام ناحیه‌ی دماهای معمولی می‌باشد. بالای دمای کوری، گشتاورهای مغناطیسی به‌طور کاتوره‌ای جهت‌گیری می‌شوند؛ در نتیجه مغناطش کل صفر می‌شود. در این ناحیه ماده پارامغناطیس می‌شود و پذیرفتاری آن با رابطه‌ی زیر بیان می‌گردد.

$$\chi = \frac{C}{T - T_f} \quad (9-49)$$

که به قانون کوری - وایس موسوم است. ثابت C، ثابت کوری و T_f دمای کوری نامیده می‌شوند. عبارت (۹-۴۹) شبیه پذیرفتاری لانژوین (رابطه‌ی ۳۴-۹) است. به جز این که مبدأ دما از صفر به T_f انتقال پیدا کرده است. کارایی قانون کوری - وایس برای Ni در شکل ۱۴-۹ نشان داده شده است. فقط در نزدیکی نقطه‌ی کوری، انحراف قابل ملاحظه‌ای از این قانون مشاهده می‌شود.



شکل ۹-۱۴ عکس پذیرفتاری (بر گرم) برای نیکل (یک ماده فرومغناطیسی) در نزدیکی نقطه‌ی کوری (۳۵۸°C). کمیت ρ چگالی جرمی است. منحنی خط چین بیرون یابی منحنی در ناحیه‌ی دماهای بالا است.

جدول ۹-۶: دمای کوری و مغناطش اشباع برای مواد فرومغناطیسی^۱
(n_B تعداد مگنتون‌ها بر واحد فرمول در $^\circ K$ است)

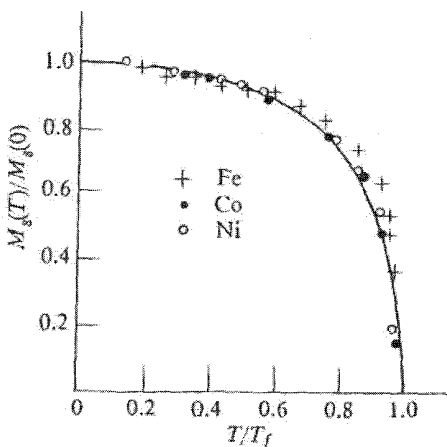
n_B در $^\circ K$	M_s در $^\circ K$	T_f در $^\circ K$	ماده
۲/۲۲	$1/76 \times 10^6$	۱۰۴۳	Fe
۱/۷۲	۱/۴۵	۱۰۴۳	Co
۰/۵۴	۰/۵	۶۳۱	Gd
۷/۱۰	۲۰/۰۱	۲۸۹	Ni
۱۰/۱	۲/۹۲	۱۰۵	Dy
-	-	۵۱۵	CrO _۲
۲/۰۳	-	۴۱۰	MnOFe _۲ O _۳
۵/۰	-	۴۸۰	FeOFe _۲ O _۳
۵/۰	۰/۲	۱۳۰	Y _۳ Fe _۵ O _{۱۲} (YIG)

ادله‌ی (۹-۴۹) پیش بینی می‌کند اگر دما کم و به T_f نزدیک شود، یک واگرایی در χ به وجود می‌آید. و این نشان دهنده یک گذار به فاز فرومغناطیس است.

در ناحیه‌ی دماهای $T < T_f$ ، مغناطش خودبه‌خودی همان مغناطش اشباع می‌شود. با کاهش دما،

۱- دماهای این جدول، دماهای گذار فرومغناطیسی واقعی هستند، که کمی پایین‌تر از مقادیر مربوط به قانون کوری در ناحیه‌ی پارامغناطیس هستند. این قانون در نزدیکی نقطه‌ی گذار به خوبی برقرار نیست.

مغناطش افزایش می یابد (شکل ۹-۱۵) و در دمای $T = 0^\circ K$ به بیشینه می رسد. بنابراین با کاهش دما دوقطبی های بیش تری در جهت مغناطش قرار می گیرد. مقادیر مغناطش اشباع برای مواد مختلف در جدول ۹-۶ آمده است.



شکل ۹-۱۵ نسبت مغناطش اشباع در دمای T به همان مغناطش در دمای $0^\circ K$ ، یعنی $\frac{M_s(T)}{M_s(0)}$ بر حسب T/T_f برای Fe، Co، و Ni. منحنی پیوسته از تئوری وایس، معادله ۹-۵۵ به دست آمده است.

فرومغناطیس هم در فلزات و هم در عایق ها ظاهر می شود. برای سهولت در این جا ابتدا بررسی عایق ها را انجام می دهیم و بحث خود را محدود به این مواد می کنیم. زاجع به فلزات فرومغناطیس در بخش ۹-۱۰ بحث می کنیم.

تئوری میدان مولکولی

در ناحیه ی فرومغناطیس، گشتاورهای مغناطیسی به طور خود به خودی مغناطیده هستند. این امر حاکی از حضور یک میدان داخلی است که این مغناطش را تولید می کند. تئوری وایس را دنبال می کنیم و فرض می کنیم میدان متناسب با مغناطش باشد.

$$H_w = \lambda M \quad (9-50)$$

که λ باید خیلی بزرگی و در حدود 10^4 باشد. منشأ چنین میدان بزرگ H_w بعداً در همین بخش مورد بحث قرار می گیرد. ولی فعلاً آن را به عنوان میدانی در نظر می گیریم که برای به دنبال هم قرار دادن مولکول ها به کار می رود. البته سرانجام این به عنوان نتیجه ای از برهم کنش بین

مولکول‌ها تلقی می‌گردد و از آن به عنوان میدان مولکولی یاد می‌شود.

از رابطه‌ی (۹-۴۰) می‌توانیم برای محاسبه‌ی مغناطش تولید شده توسط میدان H_w استفاده کنیم.

برای سادگی فرض می‌کنیم $\frac{1}{p} = z$ است و رابطه‌ی (۹-۴۰) را می‌نویسیم.

$$M = Ng\mu_B \tanh\left(\frac{\mu_0 g \mu_B \lambda M}{kT}\right) \quad (9-51)$$

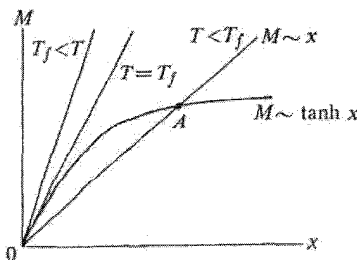
که میدان تماماً مربوط به میدان داخلی (رابطه‌ی ۹-۳۰) می‌باشد. این یک تابع غیر جبری^۱ از M می‌باشد که می‌توان آن را به روش ترسیمی حل کرد. آرگومان تابع هیپربولیک را به x نمایش می‌دهیم، به طوری که

$$M = \frac{kT}{\mu_0 g \mu_B \lambda} x \quad (9-52)$$

معادله (۹-۵۱)، حالا به صورت زیر در می‌آید:

$$M = Ng\mu_B \tanh x \quad (9-53)$$

این دو معادله را می‌توان با رسم آن‌ها به صورت منحنی M بر حسب x و به طور همزمان حل نمود و نقاط تقاطع را پیدا کرد. شکل (۹-۱۶) منحنی هیپربولیک مربوط به معادله‌ی (۹-۵۳) را نشان می‌دهد و خط راست مربوط به رابطه‌ی (۹-۵۲) است: این خط برای چندین دما رسم شده است. برای دماهای کمتر از یک مقدار بحرانی دو منحنی در نقطه‌ای مانند A یکدیگر را قطع می‌کنند که این نقطه نمایان‌گر مغناطش خودبه‌خودی متناهی است. بنابراین میدان مولکولی (۹-۵۰) واقعا منجر به فرومغناطیس می‌شود. نقطه‌ی تقاطع دیگر در مبدأ است و نشان‌دهنده‌ی حالت نامغناطیسه است ولی این حالت به لحاظ انرژی ناپایدار است.



شکل ۹-۱۶ منحنی $M \sim x$ که خطی است مستقیم و منحنی $M \sim \tanh x$ بر حسب x نقطه‌ی تقاطع

A نشان دهنده‌ی مغناطش خودبه‌خودی یعنی یک حالت فرومغناطیسی است.

دمای بحرانی دمایی است که در آن خط راست رابطه‌ی ۹-۴۵ در مبدأ بر منحنی هیپربولیک مماس می‌شود. با در نظر گرفتن تقریب که برای x های کوچک برقرار است، و مساوی گرفتن M در دو معادله (۹-۵۲) و (۹-۵۳) نتیجه‌ی زیر به دست می‌آید.

$$\lambda = \frac{kT_f}{\mu_0 N (g\mu_B)^2} \quad (9-54)$$

که ثابت وایس λ را به دمای کوری T_f ارتباط می‌دهد؛ و از آن جا که T_f یک کمیت قابل اندازه‌گیری است، روشی برای تعیین λ به دست می‌آید. اگر مقادیر $T_f = 10^3 \text{ ok}$ و $N = 10^{29} \text{ m}^{-3}$ همین طور مقادیر مناسبی برای ثابت‌های دیگر جایگزین نماییم، درمی‌یابیم $\lambda \approx 10^4$ که این با آن چه قبلاً بیان شد سازگار است.

از شکل ۹-۱۶ معلوم می‌شود که بیشینه‌ی مغناطش $M(0) = Ng\mu_B$ است که به ازای مقدار $T \rightarrow 0^{\circ}K$ به دست می‌آید. معادله‌ی (۹-۵۱) را نیز می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\frac{M}{M(0)} = \tanh\left(\frac{T}{T_f}\right) \quad (9-55)$$

که از رابطه‌ی (۹-۵۴) استفاده کردیم. بنابراین اگر مغناطش کاهش یافته، $\frac{M}{M(0)}$ را بر حسب دمای کاهش یافته $\frac{T}{T_f}$ رسم کنیم، یک منحنی جهانی به دست می‌آید که برای همه‌ی مواد با مقدار یکسان λ صادق است. این مطلب در شکل ۹-۱۵ تأیید می‌شود.

میدان مولکولی نیز منجر به قانون کوری - وایس در ناحیه‌ی پارامغناطیس $T > T_f$ می‌شود. میدان کل حالا برابر است با:

$$H_{\text{tot}} = H + H_w$$

که H میدان اعمال شده و H_w میدان مولکولی است. اگر از رابطه‌ی (۹-۴۰) استفاده کنیم و فرض کنیم که میدان کل کوچک است، خواهیم داشت:

$$M = M(0) \frac{\mu_0 g \mu_B}{kT} (H + \lambda M)$$

به کمک رابطه‌ی (۹-۴۵) می‌توان نوشت:

$$M = \left(\frac{T_f}{\lambda}\right) \frac{1}{T - T_f} H$$

پذیرفتاری با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود:

$$\chi = \frac{C}{T - T_f}$$

که $C = \frac{T_f}{\lambda} = \mu_0 N (g\mu_B)^2 / k$ است. این همان شکل قانون کوری - وایس است.

منشأ فیزیکی میدان مولکولی

وجود میدان مولکولی دلیل بر این است که گشتاورهای مغناطیسی همسایه با یکدیگر برهم کنش دارند و این برهم کنش وابسته به اسپین^۱ است. انرژی بین دو گشتاور را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$V_{ex} = -J \cdot s_1 \cdot s_2 \quad (9-56)$$

که s_1 و s_2 ، اسپین‌ها هستند و J ثابت تبادل نام دارد. انرژی V_{ex} انرژی تبدالی نامیده می‌شود. برای این که برهم کنش فوق به فرومغناطیس منجر شود، ثابت J باید مثبت باشد، زیرا انرژی حالت اسپین‌های موازی ($s_1 = s_2$) مساوی $-J \cdot s^2$ است، در حالی که در حالت اسپین‌های پادموازی ($s_1 = -s_2$)، مقدار انرژی $J \cdot s^2$ است، در نتیجه فقط در صورتی که $J > 0$ باشد، $-J \cdot s^2$ کوچک‌تر از $J \cdot s^2$ است.

ثابت تبدالی J و ثابت وایس λ بهم مربوط‌اند. اگر فرض کنیم که دو قطبی فقط با نزدیک‌ترین همسایگانش برهم کنش تبدالی دارد (ثابت J' با افزایش فاصله‌ی بین دو قطبی‌ها به سرعت کاهش می‌یابد)، انرژی تبدالی کل برای دو قطبی‌ها $-zJ' s^2$ است که z تعداد همسایگان نزدیک است. این معادل با یک میدان مغناطیسی مولکولی H_W است که با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$zJ' s^2 = (gS\mu_B)(\mu_0 H_W) \quad (9-57)$$

1. Spin dependent

۲- بردارهای S_1 و S_2 با رابطه‌های $S_1 = s_1 \hbar$ و $S_2 = s_2 \hbar$ به اندازه حرکت زاویه‌ای واقعی مربوط‌اند. بنابراین S یک بردار بدون بعد و در همان جهت S است و طول آن $(s_1^2 + s_2^2)^{1/2}$ است که s عدد کوانتومی اندازه حرکت زاویه‌ای است. تعریف بردارهای اسپینی بدون بعد برای سادگی در این جا ارائه شده است.

که $g\mu_B$ مقدار گشتاور مغناطیسی است. طبق رابطه‌ی (۹-۵۰) بیشینه مقدار H_W مساوی $\lambda M(0) = \lambda N g \mu_B$ است، که وقتی در رابطه‌ی (۹-۵۷) قرار گیرد نتیجه می‌شود:

$$J' = \frac{\mu_0 N (g\mu_B)^2}{z} \lambda \quad (9-58)$$

همان طور که انتظار می‌رود، J' متناسب با λ است و هر دو شدت میدان مولکولی را اندازه می‌گیرند و در نتیجه متناسب با دمای کوری هستند. با جای‌گزینی مقادیر مناسب برای ثابت‌های مختلف مقدار $J' \approx 0.1 \text{ eV}$ به دست می‌آید که یک مقدار نوعی برای انرژی تبادل بین دو گشتاور همسایه در یک بلور فرومغناطیس است.

حال به منشأ انرژی برهم‌کنش، (رابطه‌ی ۹-۵۹) می‌پردازیم. طبیعی‌ترین پیشنهاد، برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی است که انرژی را به صورت زیر می‌دهد:

$$V_{12} \approx \mu_0 \frac{\mu_0^2}{r^3}$$

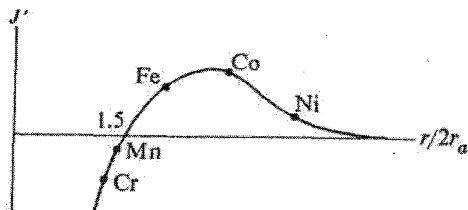
که r فاصله‌ی بین دوقطبی‌ها است. اگر مقدار نوعی r را جایگزین نماییم $V_{12} \approx 10^{-4} \text{ eV}$ به دست می‌آید، که در حدود سه مرتبه‌ی بزرگی کوچک‌تر از مقدار تجربی آن است. بنابراین برهم‌کنش دوقطبی-دوقطبی نمی‌تواند فرومغناطیس را توجیه کند و ما باید به دنبال برهم‌کنش دیگری باشیم که خیلی قوی‌تر باشد. رهیافت صحیح مسأله اولین بار توسط هایزنبرگ انجام شد. لازمی اصل طرد پائولی نیرویی است وابسته به اسپین، زیرا اصل طرد اسپین را شامل می‌شود. این نیرو یک نیروی تبادل قوی است؛ زیرا از همان مرتبه بزرگی نیروی کولنی است.^۱ برای مثال مولکول هیدروژن را در نظر بگیرید. در این مولکول، دو الکترون وجود دارد که در میدان کولنی دو هسته حرکت می‌کنند. دو احتمال برای ترتیب قرار گرفتن اسپین‌های این الکترون‌ها وجود دارد: یا اسپین‌ها موازی و یا این که پادموازی باشند. اگر اسپین‌ها موازی باشند، اصل طرد اقتضا می‌کند که الکترون‌ها از هم دور باشند. اگر اسپین‌ها پادموازی باشند، الکترون‌ها ممکن است به هم نزدیک شوند و توابع موج آن‌ها به نحو قابل ملاحظه‌ای همپوشی پیدا کنند. این دو آرایش اسپینی،

۱- دلیل استفاده از کلمه‌ی *تبادل* در مورد این نیروها این است که این نیروها از یک اصل کوانتومی پیروی می‌کند که بیان می‌کند الکترون‌ها را نمی‌توان از یکدیگر تمیز داد. بنابراین اگر هر دو الکترونی با هم جابه‌جا شوند خواص مشاهده‌پذیر سیستم تغییر نمی‌کند. این اصل اساساً معادل اصل طرد پائولی است.

انرژی‌های مختلفی دارند؛ وقتی الکترون‌ها به هم نزدیکند، به واسطه‌ی نیروی دافعه‌ی بزرگ کولنی بین آن‌ها انرژی افزایش می‌یابد. این مورد به تهایی حالت اسپین‌های موازی را مرجح می‌کند؛ ولی موارد دیگری هستند که مورد قبلی را جبران و حالت اسپین‌های پادموازی را مرجح می‌کنند. این که کدام حالت واقعا وجود دارد بستگی به این دارد که کدامیک از موارد فوق غالب است. در مولکول هیدروژن، حالت پایه متناظر با آرایش پادموازی، یعنی حالت غیرمغناطیسی است. ولی در مواد فرومغناطیس حالت عکس غالب است و آرایش موازی انرژی کمتری دارد. نکته این است که اصل طرد به یک نیروی وابسته به اسپین بین گشتاورهای مغناطیسی منجر می‌شود، که شدت این نیرو اساسا توسط برهم‌کنش کولنی بیان می‌گردد.

$$V_{12} \simeq \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

که خیلی قوی‌تر از برهم‌کنش دوقطبی - دوقطبی است. می‌توان نشان داد که از این رابطه مرتبه بزرگی درستی از برهم‌کنش‌ها به دست می‌آید. اسلیتر^۱ ملاکی برای وقوع پدیده‌ی فرومغناطیس پیشنهاد کرده است که فاکتور بحرانی یعنی نسبت $\frac{J'}{2r_a}$ است. r فاصله‌ی برهم‌کنش و r_a شعاع اتمی است. در شکل ۱۷-۹، J' بر حسب نسبت فوق برای فلزات مختلف واسطه رسم شده است. فقط در صورتی این نسبت بیش از ۱/۵ است که J' مثبت شود و مواد خاصیت فرومغناطیس نشان دهند. عناصر Fe، Ni و Co این ملاک را برآورده می‌کنند و فرومغناطیس اند ولی Mn و Cr که این ملاک را برآورده نمی‌کنند فرومغناطیس نیستند.

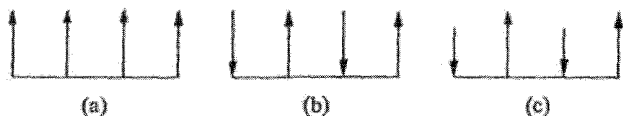


شکل ۱۷-۹ ثابت تبدالی J' بر حسب فاصله‌ی برهم‌کنش برای عناصر واسطه.

ملاک اسلیتر اهمیت لایه ۳d در ایجاد فرومغناطیس را مدنظر قرار می‌دهد. این واقعیت که شعاع این لایه کوچک است نقش بسیار مهمی در ظهور فرومغناطیس ایفا می‌کند. ملاک مشابهی برای لایه‌ی ۴f در عناصر خاکی نادر فرومغناطیس به کار می‌رود.

۹-۹ آنتی فرومغناطیس و فری مغناطیس

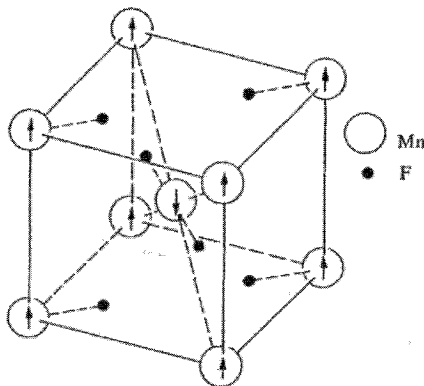
تنها نوع نظم مغناطیسی که تاکنون بررسی کرده‌ایم، نظم فرومغناطیسی است؛ که در آن، در حالت مغناطیدگی کامل تمام گشتاورهای مغناطیسی دقیقاً هم جهت می‌شوند (شکل ۱۸-۹ الف). ولی موادی هستند که نوع دیگری از نظم مغناطیسی را نشان می‌دهند. شکل ۱۸-۹ (ب)، آرایش آنتی فرومغناطیسی را نشان می‌دهد، که در آن دو قطبی‌ها گشتاورهای مساوی دارند ولی جهت آن‌ها در خلاف یکدیگر است. نوع دیگر نظم مغناطیسی، فری مغناطیس است که در شکل ۱۸-۹ (ج) نشان داده شده است. دو قطبی‌های همسایه در خلاف جهت یکدیگرند ولی از آن جا که در این حالت گشتاورهای مغناطیسی مساوی نیستند، تعادل کامل برقرار نیست و یک مغناطش خالص وجود دارد. آرایش‌های پیچیده‌ی دیگر نیز مشاهده شده‌اند، ولی سه نوعی که در شکل ۱۸-۹ نشان داده شده‌اند، در این جا برای منظور ما کافی است. حال مختصراً راجع به آرایش‌های آنتی فرومغناطیس و فری مغناطیس بحث می‌کنیم.



شکل ۱۸-۹ آرایش‌های مغناطیسی (الف) فرومغناطیس، (ب) آنتی فرومغناطیس، (ج) فری مغناطیس

آنتی فرومغناطیس

آنتی فرومغناطیس در بسیاری از ترکیباتی که شامل فلزات واسطه‌اند بروز می‌کند. شکل ۱۹-۹ یک بلور MnF_2 را نشان می‌دهد که یک بلور یونی است و الکترون‌هایی از اتم منگنز به اتم فلور منتقل شده‌اند. (با نمادگذاری شیمی $Mn^{2+}F^{2-}$). یون‌های منگنز مغناطیسی هستند زیرا لایه‌ی $3d$ آن‌ها ناکامل است و این یون‌ها، در یک ساختار bcc توزیع شده‌اند. ماده مورد نظر آنتی فرومغناطیس است. زیرا تمام یون‌هایی که در گوشه‌های مکعب هستند در یک جهت قرار گرفته‌اند در حالی که یون‌هایی که در مرکز مکعب هستند در خلاف جهت قرار دارند.

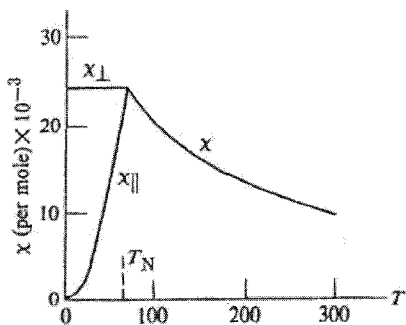


شکل ۹-۱۹ ساختار اسپینی MnF₂

فری مغناطیس هم مانند فرومغناطیس با افزایش دما در یک نقطه‌ی معین از بین می‌رود. نقطه‌ی گذار، دمای نیل، T_N نام دارد. بالای این نقطه، ماده پارامغناطیس است، و پذیرفتاری با فرمول زیر بیان می‌شود.

$$\chi = \frac{C}{T + T'_N} \quad (9-59)$$

T'_N و C ثابت‌هایی هستند که به ماده مورد نظر بستگی دارند. این رفتار در شکل ۹-۲۰ MnF_2 که دمای نیل آن $T = 72K$ است نشان داده شده است. توجه کنید که در این ماده برخلاف مواد فرومغناطیس، پذیرفتاری در نقطه‌ی گذار واگرا نمی‌شود.



شکل ۹-۲۰ پذیرفتاری χ بر حسب T برای MnF_2 که $T = 72K$ است. کمیت‌های T_{\perp} و T_{\parallel} پایین T_N به ترتیب پذیرفتاری‌های مربوط به میدان‌های موازی و عمود بر جهت اسپین خودبه‌خودی هستند.

دماهای T_N و T'_N برای بعضی از مواد در جدول ۷-۹ آمده است. این دماها را می توان به پارامترهایی که برهم کنش مغناطیسی مواد را مشخص می کنند، ارتباط داد. این کار را می توان با تعمیم تئوری میدان مولکولی برای وضعیت موجود و با معرفی دو ثابت وایس λ_1 و λ_2 انجام داد. λ_1 برهم کنش دوقطبی با دوقطبی های معادل دیگر و λ_2 برهم کنش با دوقطبی های در جهت مخالف (همسایه های نزدیک) را توصیف می کند. بنابراین می توان روابط زیر را نوشت:

$$T_N = \frac{C}{\gamma} (\lambda_1 - \lambda_2) \quad , \quad T'_N = \frac{C}{\gamma} (\lambda_1 + \lambda_2) \quad (9-60)$$

حال این سوال پیش می آید: از آن جا که در فاز آنتی فرومغناطیس، مغناطش کل $M=0$ است، چگونه می توان آن را از حالت غیر مغناطیسی که به طور کلی در آن هیچ نظم مغناطیسی وجود ندارد، تمیز داد؟ پاسخ را می توان بر مبنای تغییرات پذیرفتاری بر حسب دما داد. یک ماده پارامغناطیس از قانون کوری ($\chi \approx \frac{1}{T}$) پیروی می کند. در حالی که یک ماده آنتی فرومغناطیس رفتاری را بروز می دهد که در شکل ۲۰-۹ نشان داده شده است. همچنین می توان نظم مغناطیسی در مواد آنتی فرومغناطیس را به کمک پراش نوترون تحقیق کرد. پایین تر از دمای نیل دوقطبی ها آن اندازه نظم شبکه های مغناطیسی با اسپین های مخالف را نشان می دهند که منجر به بازتاب پراگ از باریکه ی نوترونی می شود.

جدول ۷-۹: داده های مربوط به آنتی فرومغناطیس

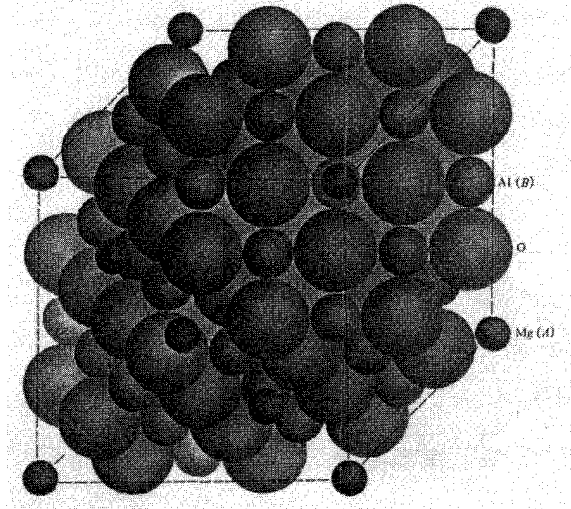
T'_N ($^{\circ}\text{K}$)	T_N ($^{\circ}\text{K}$)	ماده
۶۱۰	۱۱۶	MnO
۵۷۰	۱۹۸	FeO
۳۳۰	۲۹۱	CoO
~۲۰۰۰	۵۲۵	NiO
۵۲۸	۱۶۰	MnS
۶۹۰	۳۰۷	MnTe
۸۲	۶۷	Mn_2Fe_3
۴۸۵	۳۰۷	Cr_2O_3

فری مغناطیسی

مواد فری مغناطیسی که اغلب از آن‌ها به عنوان فریت‌ها نیز یاد می‌شود بلورهای اکسید یونی هستند که ترکیب شیمیایی آن‌ها به شکل XFe_2O_4 است که X یک فلز دوظرفیتی است. این مواد اغلب به ساختار اسپینل^۱ متبلور می‌شوند. (اسپینل در واقع ترکیب $MgAl_2O_4$ است که در شکل ۲۱-۹ نشان داده شده است.) آشناترین مثال از این گروه مگنتیت (سنگ معدن) است که فرمول شیمیایی آن Fe_2O_4 است. به بیان دقیق‌تر، ترکیب شیمیایی آن به صورت $(Fe^{2+}O^{2-})$ و $(Fe^{3+}O_3^{2-})$ است که نشان می‌دهد دو نوع یون آهن وجود دارد: فروس (با دو بار مثبت) و فریک (با سه بار مثبت). این ترکیب به ساختار اسپینل (شکل ۲۱-۹) متبلور می‌شود که یون‌های فروس به جای Mg و یون‌های فریک به جای Al قرار می‌گیرند. یاخته‌ی واحد ۵۶ یون دارد که ۲۴ تای آن‌ها یون‌های آهن و بقیه اکسیژن هستند. گشتاورهای مغناطیسی روی یون‌های آهن قرار دارند.

اگر یاخته‌ی واحد را با دقت بیش‌تری مطالعه کنیم، درمی‌یابیم که یون‌های Fe در یکی از دو وضعیت زیر قرار می‌گیرند. یک چهاروجهی که یون آهن با ۴ یون اکسیژن احاطه شده و یک هشت وجهی که یون آهن توسط ۶ یون اکسیژن احاطه گردیده است. از ۱۶ یون فریت در یاخته‌ی واحد، ۸ تای آن‌ها در یک وضعیت و ۸ تای دیگر در وضعیت دیگر قرار دارند. علاوه بر آن ساختار هشت وجهی گشتاورهایی دارد که در خلاف جهت گشتاورهای ساختار چهاروجهی قرار می‌گیرند. در نتیجه در یون‌های فریت، گشتاورها کاملاً همدیگر را خنثی می‌کنند. بنابراین گشتاور خالص تماماً از ۸ یون فروس ناشی می‌شود که رئوس هشت وجهی را اشغال کرده‌اند. هر کدام از این یون‌ها، شش تا الکترون $3d$ دارند که جهت اسپین آن‌ها به صورت $\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow$ است. بنابراین هر یون یک گشتاوری دارد که مساوی با چهار مگنتون بوهر است. از آن جا که به کمک اندازه‌گیری‌های پرتو x ، ضلع یاخته‌ی واحد مساوی 3.7\AA به دست می‌آید، نتیجه می‌شود که

$$\text{مغناطش اشباع مساوی } M_s = \frac{4\mu_B}{a} = 0.56 \times 10^6 \text{ A/m است.}$$



شکل ۹-۲۱ ساختار $MgAl_2O_4$. جایگاه‌های A و B به ترتیب توسط اتم‌های Mg و Al اشغال شده‌اند.
(After Azaroff)

ممکن است یون‌های فلزی دیگر به جای یون‌های فروس در Fe_3O_4 جای‌گزین گردند و ترکیبات دیگر فرومغناطیسی نتیجه شود. در این مورد برای مثال می‌توانیم Ni ، Mn ، Mg ، Zn و... را ذکر کنیم.

به لحاظ کاربردی فریت‌ها مفیدترین مواد مغناطیسی هستند؛ زیرا علاوه بر این که خواص مغناطیسی دارند؛ بر خلاف فلزات مغناطیسی عایق‌های الکتریکی خوبی نیز هستند.

۹-۱۰ فرومغناطیس در فلزات

مدلی را که برای بحث پیرامون فرومغناطیس در عایق‌ها استفاده کردیم نمی‌توان مستقیماً برای فلزات به کار برد. در این مدل فرض می‌شود که الکترون‌ها در اطراف جایگاه‌های شبکه‌ای خود جایگزیده‌اند، در حالی که در فلزات الکترون‌ها ناجای‌گزیده هستند و در تمام بلور گسترش دارند. طرحتی که برای توصیف خواص مغناطیسی چنین الکترون‌هایی به کار می‌رود مدل الکترون سیار^۱ نامیده می‌شود و اولین بار توسط استونر^۲ ارائه شد.

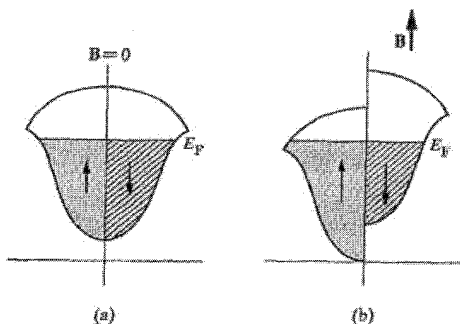
1. itinerant - electron model

2. Stoner

شکست مدل الکترون جای گزیده در توجیه خاصیت فرومغناطیس در فلزات را می توان به صورت زیر نشان داد. اگر این مدل کاربرد داشت، گشتاور مغناطیسی بر اتم مساوی $S\mu_B$ می شد که S یک عدد صحیح یا نیمه صحیح است. ولی این عدد برای Fe ، Ni و Co به ترتیب مساوی $2/22$ ، $1/72$ و $0/54$ به دست آمده است. حال بر اساس مدل سیار پیش می رویم. الکترون های مورد علاقه ی ما، نوار $3d$ را اشغال می کنند. این نوار با نوار $4s$ همپوشی دارد ولی نوار $4s$ سهمی در فرومغناطیس ندارد. بنابراین در این بحث آن را نادیده می گیریم.

شکل ۲۲-۹ (الف) این نوار را نشان می دهد که به دو زیر-نوار^۱ تقسیم شده و هر زیر-نوار نمایان گر دو جهت ممکن بالا یا پایین است. در حالت غیر مغناطیسی که همان حالتی است که شکل ۲۲-۹ (الف) نشان می دهد، دو زیر-نوار به طور مساوی اشغال شده اند که نتیجه ی آن مغناطش صفر است.

حال فرض می کنیم که یک برهم کنش تعادلی وجود دارد. این برهم کنش تمایل دارد گشتاورها را در جهت بالا ردیف کند. بنابراین الکترون ها از جهت پایین به جهت بالا می روند تا انرژی شان کاهش یابد. ولی وقتی این عمل صورت پذیرد، یک مغناطش خالص ایجاد می شود.



شکل ۲۲-۹ فرآیند مغناطش در مدل سیار

و انرژی های دو زیر-نوار دیگر برابر نخواهند بود. و همان طور که شکل ۲۲-۹ (ب) نشان می دهد زیر-نوار پایینی نسبت به زیر-نوار بالایی، بطرف بالا جابه جا می شود. مغناطش حاصل همان مغناطش اشباع است که در فرومغناطیس مشاهده می شود. مقدار این مغناطش بستگی به جابه جایی نسبی نوارها دارد، که این جابه جایی توسط قدرت برهم کنش تبادلی و شکل نوار تعیین می گردد.

حال این ایده را به صورت کمی بیان می‌کنیم. وقتی یک الکترون، جهت گشتاور خود را تغییر می‌دهد یک مقدار از انرژی تبدلی که مساوی با $\frac{1}{2}\mu_0\lambda M^2 = \frac{1}{2}(MH_W)M$ است را از

دست می‌دهد. H_W میدان مولکولی است. (ضریب $\frac{1}{2}$ به این دلیل وارد می‌شود که خود انرژی^۱ محاسبه شده است.) برای تغییر جهت یک الکترون $M = 2\mu_B$ است، زیرا الکترون گشتاورش را از $-\mu_B$ به $+\mu_B$ تغییر می‌دهد. بنابراین میزان از دست دادن انرژی برابر است با

$$\frac{1}{2}\mu_0\lambda(2\mu_B)^2 = 2\mu_0\lambda\mu_B^2$$

در ابتدا دیدیم که یک سیستم وقتی می‌تواند به پایین‌ترین انرژی برسد که تمام الکترون‌های با گشتاور پایین، گشتاور خود را تغییر جهت دهند به طوری که سیستم کاملاً در جهت بالا مغناطیده شود. ولی این تنها مورد مؤثر نیست زیرا همان‌طور که شکل ۲۲-۹ (ب) نشان می‌دهد، الکترون‌های انتقال یافته انرژی جنبشی کسب می‌کنند؛ و فاصله‌ی آن‌ها از انتهای نوار بیش‌تر می‌شود. بنابراین برای این که الکترونی انتقال یابد، میزان از دست دادن انرژی تبدلی‌اش باید بیش از میزان کسب انرژی جنبشی‌اش باشد. در بالا مقدار انرژی تبدلی از دست رفته را محاسبه کردیم، و می‌توانیم کسب انرژی جنبشی را به صورت زیر محاسبه نماییم. فرض کنید n الکترون در نزدیکی تراز فرمی از زیر-نوار پایین به زیر-نوار بالا انتقال یابد. محدوده‌ی جدید انرژی که در

بالای E_F در زیر-نوار بالا اشغال می‌شود با رابطه‌ی $n = \frac{1}{2}g(E_F)\Delta E$ بیان می‌شود که

چگالی حالت‌ها در تراز فرمی است. [ضریب $\frac{1}{2}$ به این دلیل وارد شده است که هر دو جهت

اسپین‌ها در تعریف $g(E_F)$ منظور شده است، در حالی که در این جا، فقط زیرنوار بالا را بررسی

می‌کنیم.] برای انتقال یک الکترون $n=1$ است، و بنابراین انرژی جنبشی با رابطه‌ی $\Delta E = \frac{2}{g(E)}$

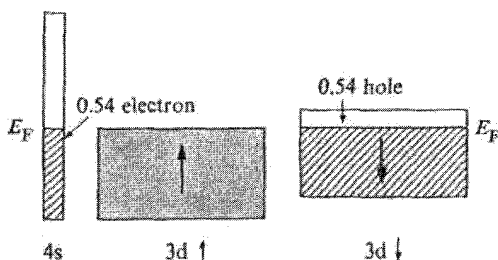
است. بنابراین شرط فرومغناطیس را می‌توان به صورت زیر بیان کرد

$$2\mu_0\lambda\mu_B^2 > \frac{2}{g(E_F)} \quad (۹-۶۱)$$

برای این که این رابطه برقرار باشد، باید ثابت تبدلی بزرگ باشد، و لازمه‌ی آن این است که شعاع لایه‌ی اتمی کوچک باشد (شکل ۱۷-۹ را ملاحظه نمایید). همین‌طور $g(E_F)$ باید بزرگ باشد،

که لازمی آن یک نوار باریک است. این شرایط با هم سازگارند زیرا هر چه شعاع لایه کوچکتر باشد، توابع موج همپوشی کمتری دارند و بنابراین نوارها باریکترند. این شرایط در نوار $3d$ مربوط به عناصر Fe ، Ni و Co و همین طور در نوار $4f$ مربوط به عناصر Gd و Dy برقرار است.

این واقعیت که اگر چگالی حالت‌های $g(E_F)$ بزرگ باشد، فرومغناطیس بهبود می‌یابد؛ در بررسی زیر آشکار می‌گردد. وقتی $g(E_F)$ بزرگ باشد، نوار می‌تواند تعداد زیادی الکترون را در محدوده انرژی کوچکی در خود جای دهد، بنابراین مقدار انرژی جنبشی کسب شده به خاطر تغییر جهت گشتاور الکترون‌ها، کم است. ولی وقتی $g(E_F)$ کوچک است، نوار اساساً تخت است، (مانند نوار $4s$)، و میزان کسب انرژی جنبشی کاملاً بزرگ است و این باعث حذف فرومغناطیس در چنین نواری می‌شود. شکل ۲۳-۹ تصویر نوار در حالت فرومغناطیس در N_1 را نشان می‌دهد.



شکل ۲۳-۹ اشغال نوارهای $4s$ و $3d$ در نیکل؛ به طور متوسط 0.54 الکترون بر اتم از نوار $3d$ به نوار $4s$ منتقل می‌شود.

در این جا مدل سیار را به طور ساده شده‌ای بیان کردیم بنابراین به شرط (۶۱-۹) باید به عنوان یک راهنمای نیمه کمی نگریست. مشکل اصلی در ساختن چنین مدلی این است که علی‌رغم مفید بودن مفهوم نوار، وقتی این مدل برای یک نوار باریک اعمال می‌گردد، نوار شکسته می‌شود. در چنین نوارهایی الکترون‌ها تمایل دارند تا حدودی در اطراف جایگاه‌های اتمی جای‌گزیده شوند و این به آن معنی است که ارتباط متقابل الکترون-الکترون نیز با اهمیت می‌شود. تاکنون چنین ارتباطی در مدل نواری معمولی کاملاً نادیده گرفته شده بود. این نکته به فرومغناطیس مربوط است زیرا هر دو نوار $3d$ و $4f$ ، نوارهای باریکی هستند. گرچه کارهای بسیاری روی این مدل انجام شده و پیشرفت‌های زیادی نیز به دست آمده، این مسأله اساساً حل نشده باقی مانده است.

۹-۱۱. حوزه‌های فرومغناطیسی

مواد فرومغناطیسی معمولاً در حالت طبیعی خود حتی در دماهای زیر دمای کوری و امغناطیده هستند. این مطلب را وایس اینگونه توضیح می‌دهد: مواد مغناطیسی به تعداد بسیار زیادی حوزه^۱ کوچک مغناطیسی تقسیم می‌شوند که هر کدام مغناطیده هستند. ولی جهت مغناطش در حوزه‌های مختلف به گونه‌ای است که تمایل به حذف یکدیگر دارند و این منجر به حذف مغناطش خالص می‌شود. گرچه ابتدا وایس این اصل را بر پایه تئوری فرمول بندی کرد ولی سپس تأیید تجربی شد. برای مشاهده‌ی ساختار حوزه‌ها در مواد فرومغناطیسی می‌توان سطح آن‌ها را به دقت پولیش داد و پودر ریز و نرمی از ذرات فرومغناطیسی را روی آن‌ها پخش کرد. ذرات در امتداد مرزهای حوزه‌ها جمع می‌شوند. شکل ۲۶-۹ نقش پودرها را برای یک بلور سیلیسیوم - آهن نشان می‌دهد. (با استفاده از میکروسکوپ قطبشی نیز می‌توان حوزه‌ها را مشاهده کرد؛ بخش پرسش‌ها در پایان این فصل را ملاحظه کنید).

شکل‌گیری حوزه‌ها و همین‌طور شکل آن‌ها بستگی به انرژی‌هایی دارد که در بلور مغناطیسی وجود دارند. فرض کنید مطابق شکل ۲۵-۹ (الف) تمام بلور در یک حالت مغناطیدگی یکنواخت باشد. این حالت پایین‌ترین حالت انرژی تبادلی را دارد، زیرا تمام اسپین‌های همسایه با یکدیگر موازیند. ولی این حالت مقدار زیادی انرژی مغناطواستاتیکی دارد. به خاطر مغناطیدگی، یک بار مغناطیسی مثبت در سطح پایینی وجود دارد. این بارها یک میدان مغناطیسی در خلاف جهت M ایجاد می‌کنند که میدان و امغناطیدگی B_d نامیده می‌شود. چون M و B_d در خلاف جهت یکدیگرند، مطابق رابطه‌ی (۴-۹)، یک انرژی مغناطواستاتیکی مثبت وجود دارد که چگالی آن با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$E_m = \frac{1}{2} M B_d \quad (۹-۶۲)$$

مقدار B_d به شکل سطح بستگی دارد و معمولاً به شکل $B_d - \mu_0 DM$ نوشته می‌شود که D ، ضریب و امغناطیدگی^۲ است. این ضریب برای یک نمونه‌ی تخت عدد بزرگی است و برای یک نمونه‌ی باریک و کشیده، کوچک است. برای نمونه‌ای به شکل یک قرص تخت نازک که عمود

1. domain

۲- برای نمونه‌هایی با شکل هندسی یکسان، ضریب و امغناطیدگی مانند ضریب واقطبیدگی است مساله ۷-۸ را ملاحظه

بر میدان است مساوی واحد است. انرژی مغناطوستاتیک از مرتبه $۱۰^۶ \text{ J/m}^۳$ است.

به منظور کاهش انرژی مغناطوستاتیک، نمونه به حوزه‌هایی تقسیم شده است. بر طبق رابطه‌ی ۹-۲۵ (ب) تقسیم به دو حوزه‌ی مخالف، سبب می‌شود انرژی مغناطوستاتیکی تقریباً نصف شود، زیرا میدان و امغناطیدگی درون نمونه به طور قابل ملاحظه‌ای کاهش می‌یابد. بیش تر این میدان در نواحی انتهایی نمونه محبوس شده است. (توجه کنید که ساختار بلور از حوزه‌های مغناطیسی تأثیر نمی‌پذیرد). اگر نمونه به حوزه‌های باز هم کوچک‌تری تقسیم شود، کاهش بیش‌تری در انرژی حاصل می‌شود، و می‌توان دید که این تقسیم کردن را می‌توان تا بی نهایت ادامه داد.



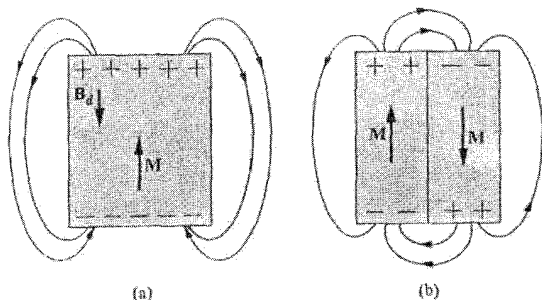
شکل ۹-۲۴ حوزه‌ها و دیوارهای حوزه‌ها در یک بلور فرومغناطیس Si - Fe

(From Walter J. Moore, *Serven Solid State*, New York: W. A. Benjamin 1967)

عوامل دیگری هستند که باید آن‌ها را بررسی کرد. مقداری انرژی لازم است تا دیوار ایجاد شود و دو حوزه را از هم جدا کند، زیرا جهت اسپین‌ها در آن ناحیه تغییر می‌کند. از رابطه‌ی (۹-۵۰) یادآوری می‌کنیم که انرژی تبدلی بین دو گشتاور همسایه برابر است با

$$E_{ex} = -J' s_{\uparrow} \cdot s_{\downarrow} = J' s^2 \cos\theta \quad (۹-۶۳)$$

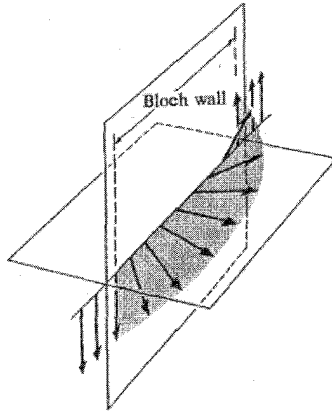
اگر دیوار به طور نامتناهی نازک باشد، در آن صورت برای دو گشتاور در طرفهای مقابل دیوار که پادموازی هستند، $\theta = \pi$ و $E_{ex} = J's^2$. هنگامی که این را برای واحد سطح برآورد کنیم، درمی یابیم که مقدار آن قابل ملاحظه است. علاوه بر آن هر چه تعداد حوزه‌ها بیش تر باشد، سطح کل حوزه‌ها بیش تر و انرژی تبدلی کل بیش تر می شود این واقعیت با انرژی مغناطوستاتیکی که بر تعداد محدودی از حوزه‌ها عمل می کند، مخالفت می کند.



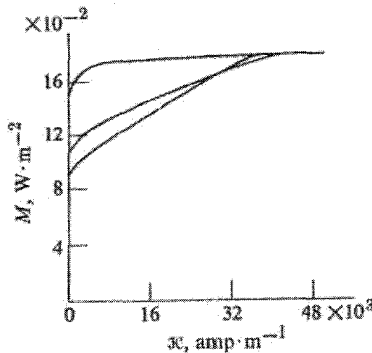
شکل ۲۵-۹ الف - یک ماده فرومغناطیس در حالت مغناطیدگی یکنواخت؛ B_0 میدان وامغناطیدگی مربوط به بارهای مغناطیسی سطحی را نشان می دهد. به خطوط میدان توجه کنید ب - یک ماده فرومغناطیس که دو حوزه ی فرومغناطیسی تقسیم شده است. توجه کنید که خطوط میدان حالا بیش تر در نواحی انتهایی محبوس اند.

دیواری که توصیف شد، دیوار بلوخ نام دارد. ضخامت آن به طور نامتناهی کوچک نیست، بلکه یک مقدار متناهی دارد، یعنی جهت اسپین در ناحیه ی گذار تدریجا تغییر می کند، (شکل ۲۶-۹). در این حالت تغییر جهت اسپین طی مراحل انجام می شود. بنابراین چرخش اسپین بین دو گشتاور همسایه بسیار کوچک است. این امر منجر به کاهش انرژی تبدلی مربوط به دیوار می شود. برای آهن، دیوار حدود 1000 A و انرژی آن در حدود 10^{-3} J/m^2 می باشد. در مورد دیوار بلوخ، عامل دیگری را باید ذکر کنیم که نقشی در تعیین ضخامت آن دارد. آزمایشات روی مواد فرومغناطیسی نشان می دهد که مغناطیده کردن یک ماده در یک جهت ساده تر از جهت دیگر است. شکل ۲۷-۹ نشان می دهد که آهن در جهت [۱۰۰] ساده تر از جهت [۱۱۱] مغناطیده می شود. جهت مطلوب تر جهت ساده^۱ و جهتی که کمتر مطلوب است، جهت سخت^۱ نامیده می شود. از آن جا که برای

مغناطیده کردن ماده در جهت سخت میدان بزرگ تری لازم است، مغناطیدگی انرژی بیشتری لازم است. اختلاف در انرژی بین جهت‌های ساده و سخت، انرژی عدم تقارن مغناطیسی^۲ نامیده می‌شود. این انرژی باعث کاهش ضخامت دیوار می‌شود زیرا هر چه دیوار ضخیم‌تر باشد، دوقطبی‌های بیشتری در امتداد جهت‌های سخت قرار می‌گیرند. بنابراین گرچه انرژی تبدیلی ترجیح می‌دهد، دیوار ضخیم باشد انرژی عدم تقارن یک دیوار نازک را ترجیح می‌دهد و تعادل وقتی حاصل می‌شود که جمع این دو جمله‌ی انرژی کمینه باشد.

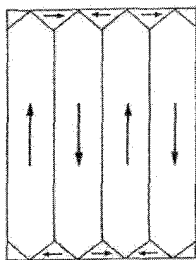


شکل ۹-۲۶ چرخش‌های متوالی جهت اسپین داخل دیوار بلوخ



شکل ۹-۲۷ منحنی مغناطیدگی برای تک بلور آهن

آزمایش‌های دقیق‌تر روی ساختار حوزه‌های مغناطیسی حضور حوزه‌های عرضی نزدیک انتهای نمونه را آشکار می‌کند. (شکل ۲۸-۹) این حوزه‌ها، حوزه بستار^۱ نامیده می‌شوند؛ و به این دلیل که اثر این حوزه‌ها ایجاد حلقه‌های بسته‌ی مغناطیسی است، باعث کاهش بیش‌تانرژی مغناطوستاتیک می‌شوند. حوزه‌های بستار کوچک هستند و باعث ایجاد جمله‌ی دیگر انرژی می‌شوند که انرژی مغناطوتنگش^۲ نام دارد. این نواحی که مغناطش آن‌ها در امتداد محور ساده^۳ نیست، به خاطر مغناطیدگی، یک تغییر شکل کشسان پیدا می‌کنند. این اثر مغناطوتنگش نامیده می‌شود. بزرگی این انرژی در حدود ۵۰ است. بنابراین برای این حوزه‌ها، یک انرژی کشسانی اضافه لازم است، و هر چه این حوزه‌ها بزرگ‌تر باشند، انرژی‌کشسانی بیش‌تر است؛ باز هم تعادلی بین این جمله و کاهش انرژی مغناطوستاتیک ایجاد می‌شود.

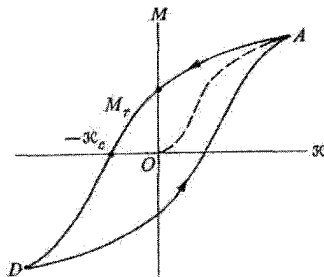


شکل ۲۸-۹ حوزه‌های بستار در نواحی انتهایی نمونه

فرآیند مغناطیدگی

همان‌طور که قبلاً بیان کردیم یک نمونه‌ی فرومغناطیس معمولاً در حالت وامغناطیده است. برای مغناطیده کردن آن باید یک میدان مغناطیسی اعمال گردد. پیشرفت فرآیند مغناطیدگی در اثر افزایش میدان خارجی در شکل ۲۹-۹ نشان داده شده است. مغناطش M ، با شروع از مبدأ، ابتدا آهسته ولی سپس با افزایش میدان سریعاً افزایش می‌یابد و سرانجام در نقطه‌ی A ، مغناطش M اشباع می‌گردد.

1. closure domain
2. magnetostrictin energy
3. easy axis



شکل ۲۹-۹ حلقه هیستریزیس برای یک ماده فرومغناطیس

حال اگر میدان کاهش یابد، منحنی جدید روی منحنی OA برنمی‌گردد، بلکه منحنی AD که در شکل نشان داده شده است را طی می‌کند. حتی وقتی که میدان به صفر کاهش می‌یابد، مغناطش M_r که مغناطش باقیمانده^۱ نام دارد، هنوز باقی می‌ماند. برای این که این مغناطش را کاملاً از بین ببریم یک میدان منفی $-H_c$ لازم است. این میدان، نیروی وادارنده^۲ نامیده می‌شود. در نمونه یک پسماند مغناطیسی مشاهده می‌شود و اگر میدان H به طور تناوبی تغییر کند، منحنی مغناطش شبیه شکل ۲۹-۹ (خط پر) خواهد شد که حلقه‌ی پسماند^۳ نامیده می‌شود. پسماند بر تلفات انرژی سیستم دلالت می‌کند. این تلفات متناسب با سطح حلقه است. این انرژی را می‌توان این گونه محاسبه کرد: اگر M به اندازه‌ی dM افزایش یابد، مقدار انرژی که توسط سیستم جذب می‌شود (انرژی بر واحد حجم) برابر است با $\mu_0 H dM$. اگر آن را روی یک حلقه‌ی بسته انتگرال بگیریم، مقدار کل تلفات انرژی به دست می‌آید.

$$E = \mu_0 \oint H dM$$

انتگرال فوق برابر سطح حلقه‌ی پسماند است.

تراوایی نسبی μ_r را قبلاً به صورت $\mu = 1 + \left(\frac{-M}{M}\right)$ تعریف کردیم (رابطه‌ی ۱۷-۹ را ملاحظه کنید). ولی در این ناحیه (همان طور که شکل ۲۹-۹ نشان می‌دهد، منحنی مغناطیدگی به نحو قابل ملاحظه‌ای از حالت خطی بودن خارج می‌شود) بهتر است تراوایی را به صورت زیر تعریف کنیم.

$$\mu_r = 1 + \left(\frac{dM}{dH}\right)$$

1. remenant magnetization
2. Coercive force
3. hysteresis loop

که البته به شکل منحنی مغناطیدگی مرتبط است. در مواد فرومغناطیسی این کمیت به بزرگی 10^5 است.

چگونه مغناطیدگی انجام می‌شود. از حالت وامغناطیده شروع می‌کنیم. همچنان که میدان افزایش می‌یابد، حوزه‌هایی که مغناطش آن‌ها موازی با میدان است به لحاظ انرژی از حوزه‌های دیگر مطلوب‌ترند؛ و بنابراین بیش‌تر از حوزه‌هایی که به لحاظ انرژی کمتر مطلوب‌اند، رشد می‌کنند. اگر میدان کوچک باشد، رشد حوزه‌ها بازگشت‌پذیر است، ولی برای میدان‌های بزرگ‌تر برگشت‌ناپذیر می‌شود و حتی اگر میدان کاملاً صفر شود نیز مقداری مغناطیدگی باقی می‌ماند. وقتی یک میدان بزرگ اعمال می‌گردد، نه تنها بیش‌ترین رشد انجام می‌شود، بلکه چند حوزه نامطلوب باقی مانده می‌چرخند به طوری که، در امتداد میدان قرار گیرند.^۱

ولی چگونه فرآیند رشد صورت می‌گیرد و چرا این فرآیند در شرایطی بازگشت‌پذیر و در شرایط دیگری بازگشت‌ناپذیر است. جواب این سوال ساده نیست و هنوز هم به طور کامل فهمیده نشده است. ولی با بیان نه چندان دقیق می‌توان گفت که در اثر حرکت دیوار بلوخ به سمت بیرون، یک حوزه‌ی مطلوب رشد می‌کند. هر چه میدان قوی‌تر باشد، حرکت بیش‌تر است. اگر میدان ضعیف باشد، به مجرد این که میدان حذف شود، دیوار به جای اول بر می‌گردد. ولی در میدان‌های قوی بازگشت به موقعیت اولیه امکان‌پذیر نیست، به ویژه اگر نمونه شامل مقدار قابل ملاحظه‌ای از ناخالصی‌ها و ناکاملی‌های دیگر بلوری باشد. این ناخالصی‌ها و ناکاملی‌ها از بازگشت کامل دیوار جلوگیری می‌کنند و تمایل دارند دیوار را در وضعیت نهایی خود نگه دارند. تجربه نشان می‌دهد هر چه نمونه ناکاملی بیش‌تری داشته باشد، گشتاور باقیمانده‌ی M_r بزرگ‌تر خواهد بود.

۱- یک نوع حوزه بنام حباب مغناطیسی (*magnetic bubble*) اخیراً کشف شده است. این حوزه پتانسیل بالایی در تکنولوژی کامپیوتر دارد. در لایه‌های نازکی از اورتوفریت‌ها مانند $Y_3 Fe_5 O_{12}$ اگر میدان عمود بر لایه‌ی نازک اعمال گردد، اندازه حوزه‌هایی مغناطش که در خلاف جهت میدان هستند کاهش می‌یابد تا این که در میدان‌های بالاتر، در استوانه‌های خیلی کوچکی در حدود چند میکرون منقبض می‌شوند که همان حباب‌هایی است که در بالا ذکر شد. حباب‌ها پایدار و متحرک هستند و یکدیگر رادفع می‌کنند. همین‌طور با اعمال یک میدان مغناطیسی مناسب که در صفحه‌ی فیلم است، می‌توان آن‌ها را حرکت داد.

در طراحی کامپیوتر می‌توان از این حباب‌ها به عنوان بیت‌های دیجیتالی استفاده کرد. لازم است که چگالی آن‌ها (تعداد بر سانتی مربع) و همین‌طور تحرک آن‌ها در لایه‌ی مغناطیسی زیاد باشد. مزیت آن‌ها در وسایل الکترومغناطیسی ذخیره سازی این است که در آن‌ها مشکلاتی مانند خرابی و خش برداشتن هب، کثیفی،... وجود ندارد همین‌طور این وسایل جدید عمر طولانی‌تری (حدود ۴۰ سال) خواهند داشت

به طور کلی مواد مغناطیسی دو نوع کاربرد دارند: (الف) آهنرباهای دائمی، (ب) هسته ترانسفورماتورها. برای آهنرباهای دائمی، مغناطش باقیمانده بزرگ و نیروی وادارنده‌ی بزرگ لازم است، که نتیجه‌ی آن مواد مغناطیسی سخت است که اغلب ناخالص، دارای کرنش زیاد و همین طور شامل تعداد زیادی مرز دانه هستند. برای هسته‌های ترانسفورماتور از مواد مغناطیسی نرم که H_c کم و تراوایی بزرگ دارند استفاده می‌شود. این مواد می‌باید خیلی خالص باشند، به دقت (و در غیاب اکسیژن) حرارت ببینند، و مغناطش آن‌ها در امتداد جهت ساده کاملاً جهت‌گیری شده باشد، به طوری که برای ترک دیوارهای بلوخ آزاد و بدون مانع باشند. جدول ۸-۹ داده‌هایی برای بعضی از مواد مغناطیسی سخت و یا نرم ارائه می‌دهد.

جدول ۸-۹: داده‌هایی مربوط به مواد مغناطیسی دائمی (سخت) و نرم

(After Hutchison and Baird, 1963, Engineering Solid, New York: Wiley)

مواد مغناطیسی که از پودر ساخته شده‌اند

$H_c, \text{amp. m}^{-1}$	$Br = \mu_0 Mr, \text{Web. m}^{-2}$	
	۰/۴	کبالت - فریت
۸	۰/۹۲	Fe - Co
۱۳	۰/۶	Fe - Co ferrite

مواد مغناطیسی دائمی که از آلیاژها ساخته شده‌اند

$4/7 \times 10^4$	۰/۷۳	آلنیکو ۱۱
۵/۴	۱/۲۷	آلنیکو ۵
۰/۴	۱/۰	فولاد - کربن
۲	۱/۰	فولاد - کبالت

مواد مغناطیسی نرم

$H_c, \text{amp. m}^{-1}$	$B_s, \text{Wb. m}^{-2} *$	$\mu_r(\text{max})$	
۹۰	۲/۱۶	۶۰۰۰	Fe (تجارتی)
۰/۹	۲/۱۶	۳۵۰۰۰۰	Fe
۴۰	۲/۰۱	۶۵۰۰	(%۴Si) Fe
۰/۳۴	۰/۸۰	۱۰ ^۶	supermalloy

۱۲-۹ تشدید پارامغناطیسی؛ میزر

در بحث راجع به آثار مغناطیسی، تاکنون توجه خود را فقط معطوف به وضعیت استاتیک کردیم: یک میدان استاتیک اعمال می‌گردد و مغناطش القایی مشاهده می‌شود، بعد از گذشت مدت زمانی سیستم به حالت تعادل نهایی خود می‌رسد. گرچه اطلاعات زیادی می‌توان بدین ترتیب به دست آورد ولی با استفاده از میدان مغناطیسی متناوب می‌توان به اطلاعات باز هم بیش‌تری دست یافت. همین‌طور می‌توان به اطلاعات دقیقی در مورد حالت مغناطیسی دوقطبی‌ها، برهم‌کنش بین دوقطبی‌ها و همین‌طور برهم‌کنش بین دوقطبی و شبکه دست یافت.

در این بخش فقط راجع به سیستم‌های پارامغناطیسی یعنی سیستم‌هایی که در آن‌ها برهم‌کنش بین دوقطبی‌ها ضعیف است بحث می‌کنیم. (سیستم‌های فرامغناطیسی در بخش ۱۴-۹ بررسی می‌شوند). چنان‌چه آرایش میدان مناسب باشد ممکن است در سیستم تشدید پارامغناطیسی ایجاد شود. این پدیده مربوط به حالتی است که فرکانس خارجی مساوی فرکانس لارمور سیستم باشد. از مطالعه‌ی وضعیت و شکل خطوط تشدید می‌توان به اطلاعات فوق دست یافت.

تشدید

ابتدا به توصیف ریاضی مطلب می‌پردازیم. بردار مغناطش M حالت مغناطیسی سیستم را نشان می‌دهد. وقتی یک میدان مغناطیسی اعمال گردد بردار M مطابق معادله زیر تغییر می‌کند.

$$\frac{dM}{dt} = -\gamma M \times B \quad (9-64)$$

که از رابطه‌ی (۹-۹) استفاده کرده‌ایم. γ نسبت ژیرومغناطیسی $\frac{g\mu_B}{\hbar}$ است. حال به نوع حرکت M به صورت تابعی از زمان توجه می‌کنیم. وقتی میدان B ثابت است، M حول B با فرکانس لارمور حرکت تقدیمی دارد. (بحث مربوطه در بخش ۲-۹ را یادآوری می‌کنیم).

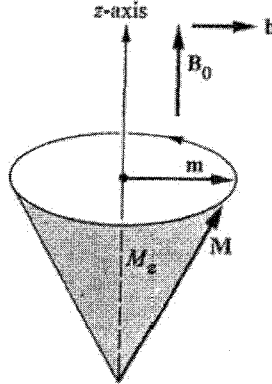
$$\omega_r = \gamma B \quad (9-65)$$

ولی اگر میدان متغیر باشد، حرکت پیچیده‌تر است.

۱- معادله‌ی ۹-۴۶ را از رابطه‌ی (۹-۹) به دست آوردیم. به این ترتیب که رابطه‌ی (۹-۹) را در N که چگالی دوقطبی‌ها، است ضرب کردیم.

فرض می‌کنیم میدان B ترکیبی از دو قسمت باشد، یک مؤلفه‌ی بزرگ استاتیکی در جهت Z ها، و یک مؤلفه‌ی کوچک عرضی متناوب b در صفحه‌ی XY . یعنی:

$$B = \hat{k}B_0 + b \quad (9-66)$$



شکل ۹-۳۰ آرایش میدان‌های مغناطیسی B_0 و b . حرکت تقدیمی بردار مغناطش در تشدید پارامغناطیسی

که \hat{k} بردار واحد در جهت Z است (شکل ۹-۳۰). چون b خیلی کوچک است، ممکن است در مرتبه‌ی صفرم از آن صرف نظر کردن و در نظر بگیریم M در اطراف محور Z ها با یک فرکانس لارمور حرکت تقدیمی دارد.

$$\omega_0 = \gamma B_0 \quad (9-67)$$

ولی b بر حرکت تأثیر می‌گذارد، که می‌توان با مراجعه به معادله‌ی حرکت (۹-۶۴) این تأثیر را مطالعه کرد. برای سادگی محاسبات را فقط برای مرتبه‌ی اول b انجام می‌دهیم. برای سهولت مغناطش M را به صورت زیر تجزیه می‌کنیم.

$$M = \hat{k}M_z + m \quad (9-68)$$

که M_z مؤلفه‌ی طولی، موازی با B_0 و m مؤلفه‌ی عرضی در صفحه‌ی XY است. فرض کرده‌ایم که مؤلفه‌ی عرضی خیلی کوچک‌تر از مؤلفه‌ی طولی است. اگر از معادلات (۹-۶۶) و (۹-۶۸) در رابطه‌ی (۹-۶۴) جای‌گزین کنیم خواهیم داشت:

$$\frac{dM_x}{dt} = -\gamma(m_y B_0 - M_z b_y) \quad (9-69 \text{ الف})$$

$$\frac{dm_y}{dt} = -\gamma(M_z b_x - m_x B_0) \quad (۹-۶۹)$$

$$\frac{dM_z}{dt} = -\gamma(m_x b_y - m_y b_x) = 0 \quad (۹-۶۹)$$

که از حل همزمان این سه معادله، سه مجهول m_x و m_y و M_z به دست می آیند.

در معادله (۹-۶۹ج)، کمیت $\frac{dM_z}{dt}$ مساوی صفر گرفته شده است زیرا از مرتبه‌ی دوم است؛ مثلاً جمله‌ی $m_x b_y$ حاصلضرب دو کمیت کوچک است. بنابراین در مرتبه‌ی اول، تصویر M_z یک مقدار ثابت مستقل از زمان است و معنی آن این است که بردار M حول محور z ها حرکت تقدیمی دارد.

حل کامل معادله بستگی به شکل میدان عرضی b دارد. فرض می کنیم که بر سیستم یک سیگنال متناوب قطبیده‌ی تخت با فرکانس ω_c وارد می شود، یعنی

$$b = b_0 e^{i\omega t} \quad (۹-۷۰)$$

که از نمادگذاری مختلط معمولی استفاده کرده ایم.^۱ انتظار می رود مغناطش عرضی نیز شکلی مشابه با این داشته باشد که سعی می کنیم، آن را حل کنیم.

$$m = m_0 e^{i\omega t} \quad (۹-۷۱)$$

که m_0 بردار دامنه‌ی مغناطش است. اگر رابطه‌ی (۹-۷۱) در معادلات (۹-۶۹الف) و (۹-۶۹ب) جایگزین گردد، به دو معادله همزمان که فقط بر حسب m_x و m_y هستند منجر می شود و حل آن‌ها به صورت زیر است (بخش مسائل را ملاحظه نمایید).

$$m_x = \frac{\gamma M_z}{\omega_0 - \omega} (\omega_0 b_x + i\omega b_y) \quad (۹-۷۲الف)$$

$$m_y = \frac{\gamma M_z}{\omega_0 - \omega} (-i\omega b_x + \omega_0 b_y) \quad (۹-۷۲ب)$$

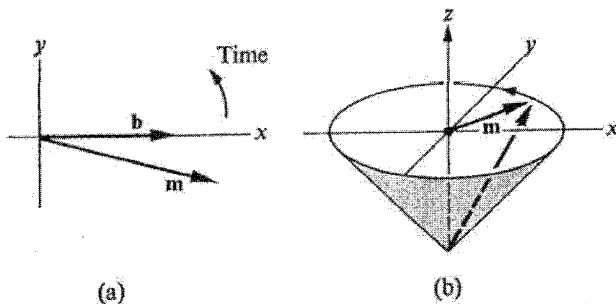
این دو معادله که مغناطش را بر حسب میدان اعمال شده بیان می کنند، را می توان تعیین پذیرفتاری استفاده کرد. به سادگی در می یابیم که

۱- در بحث قبلی راجع به پدیده‌های ارتعاشی، ضریب زمانی را به صورت e^{-it} به جای e^{it} به کار بردیم. گرچه اختلاف ریاضی بین این دو جمله ناچیز است، ولی برای هماهنگ کردن نتایج این بخش با قبل باید هر کجا هست علامت آن را منفی کرد.

$$\chi_{xx} = \chi_{yy} = \frac{\mu_0 \gamma \omega_0 M_z}{\omega_0 - \omega} \quad (۷۳-۹الف)$$

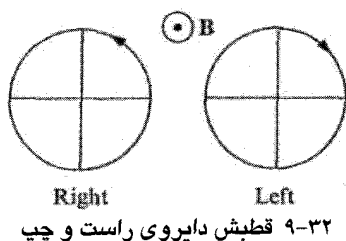
$$\chi_{yx} = -\chi_{xy} = -i \frac{\mu_0 \gamma \omega_0 M_z}{\omega_0 - \omega} \quad (۷۳-۹ب)$$

چندین نکته‌ی جالب در این نتایج هست: اول این که پذیرفتاری χ یک تانسور با مؤلفه‌های غیرقطری غیرصفر است. بنابراین مغناطش m در همان جهت b نیست، بلکه همان طور که شکل (۳۱-۹الف) نشان می‌دهد m از b عقب می‌افتد. اگر مسیر منحنی‌ای را که بردار مغناطش m به صورت تابعی از زمان ایجاد می‌کند دنبال کنیم، به یک بیضی مانند شکل (۳۱-۹ب) می‌رسیم که محور بزرگ آن در جهت میدان اعمال شده است. [این مطلب را می‌توان با قرار دادن $b_y = 0$ در رابطه‌ی (۷۲-۹) و توجه به رابطه‌ی فازی و دامنه‌های m_x و m_y نشان داد]. بنابراین بردار کل M حول B_0 حرکت تقدیمی دارد و یک مخروط بیضوی با فرکانس را طی می‌کند.



شکل ۳۱-۹ (الف) اختلاف فاز بین میدان عرضی b و مغناطش عرضی (ب) منحنی بیضوی که مغناطش عرضی m ایجاد می‌کند.

نکته‌ی مهم تر دوم این است که طبق رابطه‌ی (۳۲-۹) وقتی $\omega = \omega_0$ باشد، پذیرفتاری بی نهایت می‌شود. این مطلب خیلی تعجب‌آور نیست؛ زیرا با توجه به رابطه‌ی (۶۵-۹)، ω_0 فرکانس طبیعی سیستم است و هنگامی که $\omega = \omega_0$ شود میدان مغناطیسی با حرکت تقدیمی همزمان می‌شود و این منجر به یک افزایش خیلی زیاد در مغناطش می‌گردد. این شرط مربوط به تشدید پارامغناطیسی الکترون (EPR) است که اغلب مشاهده می‌شود.



۹-۳۲ قطبش دایروی راست و چپ

با استفاده از قطبش دایروی به جای قطبش تخت، تحلیل فوق را می‌توان به نحو قابل ملاحظه‌ای ساده کرد. برای یک قطبش راست گرد $b_x = b_0 \cos \omega t$ و $b_y = b_0 \sin \omega t$ یعنی $b = b_0 e^{i \omega t}$ بنابراین بر طبق نماد گذاری مختلط (همین طور شکل ۹-۳۲) داریم:

$$b_y = -ib_x \quad (۹-۷۴ \text{ الف})$$

با همین قیاس، رابطه‌ی زیر برای قطبش چپ گرد برقرار است.

$$b_y = ib_x \quad (۹-۷۴ \text{ ب})$$

اگر رابطه‌ی (۹-۷۴ الف) را در (۹-۶۹) جای‌گزین نماییم، پذیرفتاری راست گرد ν به دست می‌آید.

$$\chi_R = \frac{\mu_0 \gamma M_Z}{\omega_0 - \omega} \quad (۹-۷۵ \text{ الف})$$

به طور مشابه، پذیرفتاری برای قطبش چپ گرد برابر است با

$$\chi_L = \frac{\mu_0 \gamma M_Z}{\omega_0 + \omega} \quad (۹-۷۵ \text{ ب})$$

این عبارات‌ها از عبارات‌های متناظر قطبش تخت (روابط ۹-۷۳) ساده‌ترند. توجه کنید که χ_R تشدید در ω را نشان می‌دهد در حالی که χ_L این‌طور نیست. دلیل این امر این است که حرکت تقدیمی لارمور در جهت پادساعت گرد انجام می‌شود. بنابراین با به کار بردن قرارداد قطبش دایروی، نه تنها فرکانس تشدید ω را باقیمانده بلکه به حالت چرخش آن نیز پی‌بردییم. برای این نوع حرکت تقدیمی، قطبش دایروی یک انتخاب طبیعی است. البته یک حرکت قطبیده‌ی تخت همیشه می‌تواند به دو مؤلفه‌ی دایروی تجزیه و سپس با استفاده از رابطه‌ی (۹-۷۵) بررسی گردد.

واهلش^۱

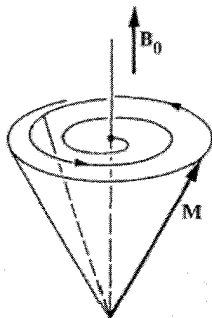
توصیفی که از حرکت تقدیمی دوقطبی ارایه دادیم هنوز از یک نظر کامل نیست. برای به حساب آوردن برهم کنش بین دوقطبی‌ها و محیط اطرافشان، مکانیزم جفت شدگی را معرفی نکردیم. چنین مکانیزمی وجود دارد و از بررسی زیر وجود آن آشکار می‌شود. هنگامی که یک میدان استاتیک بر یک سیستمی از دوقطبی‌ها اعمال گردد، دوقطبی‌ها می‌چرخند و سرانجام خود را با میدان هم جهت می‌کنند. ولی در انجام این کار، مقداری از انرژی مغناطیسی خود را از دست می‌دهند. از آن جا که انرژی کل پایسته است، انرژی از دست رفته‌ی دوقطبی‌ها باید جبران شود، و این تنها در صورتی می‌تواند اتفاق افتد که دوقطبی‌ها با اطراف خود به طریقی جفت شوند. حال این جفت شدگی را به حساب می‌آوریم.

به جای معادله‌ی (۹-۶۴) از عبارات زیر به عنوان معادلات حرکت استفاده می‌کنیم.

$$\frac{dm_{xy}}{dt} = -\gamma(M \times B)_{xy} - \frac{m_{xy}}{\tau_y} \quad (9-76)$$

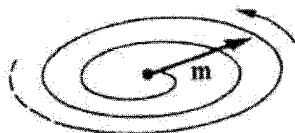
$$\frac{dM_z}{dt} = -\gamma(M \times B)_z - \frac{M_z - M_0}{\tau_1} \quad (9-77)$$

این روابط به معادلات بلوخ موسومند. در رابطه‌ی اول، حرکت یا توصیف می‌شود. رابطه‌ی دوم، حرکت M_y را توصیف می‌کند. کمیت‌های τ_1 و τ_2 ثابت‌های زمانی هستند که معنی آن‌ها را به زودی توضیح می‌دهیم. ابتدا باید به درست بودن و با معنی بودن این معادلات مهم فکر کنیم. معادله‌ی (۹-۷۷) را در نظر می‌گیریم. این معادله به جز دومین جمله‌ی طرف راست، شبیه معادله‌ی (۹-۶۴) است. در این جمله، M_z مؤلفه‌ی، Z مغناطش لحظه‌ای است، در حالی که M_0 مغناطش اشباع در آن جهت است M_z از یک مقدار اختیاری شروع می‌شود، با آهنگی که متناسب با خروج از حالت تعادل است و با ثابت تعادل $\frac{1}{\tau_1}$ تغییر می‌کند و به مقدار M_0 می‌رسد. چنین فرمی که مشخصه‌ی پدیده‌ی واهلش است، (بخش ۶-۹ را ملاحظه نمایید)، یک واهلش مغناطیسی را نشان می‌دهد که زمان آن τ_1 است. اگر معادله‌ی (۹-۷۷) را برای یک میدان استاتیک B در جهت z حل کنیم، در می‌یابیم همان طور که شکل ۹-۳۳ نشان می‌دهد، M_z حرکت مارپیچی می‌کند و زمانی که طول می‌کشد تا فرآیند مغناطیدگی کامل گردد تقریباً برابر τ_1 است.



شکل ۹-۳۳ واهلش مغناطیسی

زمان τ_1 به نام زمان طولی، یا زمان واهلش شبکه - اسپین موسوم است. این نام گذاری نشان می دهد که در این جا تبادل انرژی وجود دارد: مغناطش مقداری انرژی از دست می دهد و به شبکه منتقل می کند. جزئیات این برهم کنش، پیچیده است ولی به طور کلی ارتعاشات اتم های شبکه که دوقطبی را احاطه کرده اند، یک میدان نوسانی ایجاد می کند که روی دوقطبی عمل می کند و از آن انرژی جذب می کند. بنابراین هر چه دما بالاتر باشد، برهم کنش بیش تر و زمان τ_1 کوتاه تر خواهد بود. معلوم شده است که معمولاً $\tau_1 \sim \frac{1}{T}$ ، مقدار نوعی τ_1 در دمای نیتروژن مایع برابر است با $\tau_1 \approx 10^{-6}$ s.

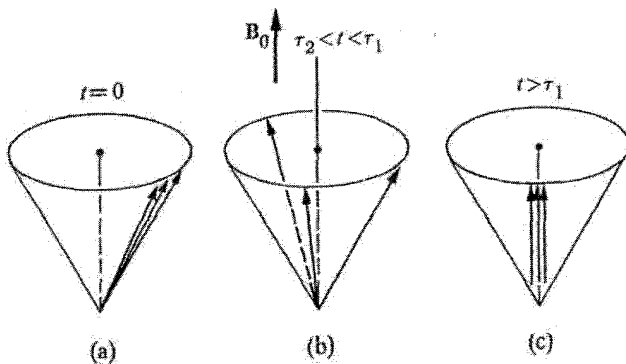


شکل ۹-۳۴ واهلش مغناطش عرضی m وقتی میدان عرضی $b=0$ باشد.

حال به معادله (۹-۷۶) که حرکت عرضی را توصیف می کند برمی گردیم. به کمک بحث فوق حالا باید بتوانیم آن را آسان تر درک کنیم. باز هم راجع به آن جمله ی جدید در طرف راست صحبت می کنیم. برای این که اثر آن را به طور واضح درک کنیم، می باید حالتی را که $B = B_0$ است بررسی کنیم. شکل (۹-۳۴) نشان می دهد که در این جا چه اتفاق می افتد: از مقدار اولیه ی خود شروع می کند و بعد از زمانی که تقریباً مساوی τ_1 است، به مقدار نهایی خود $m=0$ می رسد بنابراین τ_2 زمان واهلش برای حرکت عرضی است.

زمان τ_2 به نام زمان واهلش عرضی و یا زمان واهلش اسپین - اسپین موسوم است. این زمان از دوقطبی‌های همسایه که از طریق برهم کنش مغناطیسی دوقطبی - دوقطبی جفت می‌شوند، ناشی می‌شود. این برهم کنش می‌خواهد هرگونه هم‌دوسی اولیه بین جهت‌های گشتاورهای مغناطیسی عرضی منفرد را از بین ببرد. این زمان معمولاً خیلی کوتاه و از مرتبه‌ی 10^{-11} s است و مستقل از دما است؛ ولی به شدت به چگالی اتم‌های مغناطیسی بستگی دارد؛ هر چه چگالی بیش‌تر باشد، دوقطبی‌ها به یکدیگر نزدیک‌ترند که این منجر به یک برهم کنش قوی‌تر و در نتیجه یک زمان واهلش کوتاه‌تر می‌شود.

چگونه این اختلاف بین τ_1 و τ_2 بر تصویر ما از فرآیند مغناطیدگی اثر می‌گذارد و اصولاً چرا چنین اختلافی وجود دارد؟ از سؤال اول شروع می‌کنیم. فرض کنید که فقط سه تا دوقطبی وجود دارد که در لحظه‌ی $t=0$ ، کاملاً با یکدیگر هم ردیف شده‌اند، (شکل ۳۵-۹ الف). میدان استاتیک B_0 در جهت z ها اعمال می‌گردد؛ پس از آن حرکت تقدیمی در دوقطبی‌ها مشاهده می‌شود. از آن جا که $\tau_2 \ll \tau_1$ است، اولین چیزی که انجام می‌شود این است که $m \rightarrow 0$ (شکل ۳۵-۹ ب). اختلاف فاز بین گشتاورهای دوقطبی به سرعت تغییر می‌کند (جابه‌جا می‌شوند) تا یک مغناطش عرضی صفر شونده حاصل شود. بنابراین زمان τ_1 را گاهی زمان وافازی^۱ نیز می‌گویند. بعد از فرآیند وافازی، گشتاورهای مغناطیسی شروع می‌کنند به حرکت مارپیچی به طرف جهت میدان مغناطیسی در نتیجه مغناطیدگی بعد از مدت زمان τ_1 افزایش می‌یابد (شکل ۳۵-۹ ج).



شکل ۳۵-۹ الف) جهت اولیه سه اسپین. ب) وضعیت پس از واهلش عرضی (ج) وضعیت پس از واهلش طولی

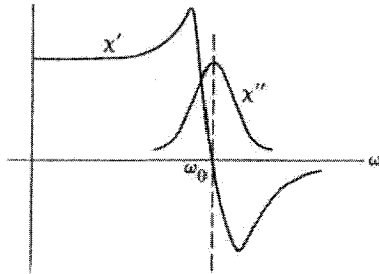
دلیل اساسی اختلاف بین τ_1 و τ_2 این است که فرآیند واهلش طولی منجر به یک اتلاف انرژی می‌شود؛ در حالی که واهلش عرضی این طور نیست. فقط در صورتی گشتاورها می‌توانند بطرف B_0 متمایل شوند که قسمتی از انرژی خود را آزاد کنند، و هر چه این کار سریع‌تر انجام شود، τ_1 کوچک‌تر است. بهر جهت شرایط برای تبادل مقدار زیادی انرژی در برهم‌کنش‌های مغناطیسی سخت‌تر است. به خاطر این که تبادل سریع انرژی گشتاورها به سختی انجام می‌شود، مغناطیدگی آن‌ها به کندی صورت می‌گیرد. توجه کنید که برای واهلش عرضی لازم نیست گشتاورها به سمت B_0 متمایل شوند. بنابراین هیچ‌گونه تبادل انرژی صورت نمی‌گیرد.

حال با روشی مشابه به آن چه برای حل معادله‌ی (۹-۶۹) به کار بردیم، معادلات (۹-۶۷) و (۹-۷۷) را حل می‌کنیم؛ فرض می‌کنیم وضعیت در یک حالت پایا است یعنی در معادله‌ی (۹-۷۷)، داریم $\frac{dM_z}{dt}$ و در معادله‌ی (۹-۷۶) داریم $m = m_0 e^{i\omega t}$ و البته، سیگنال ac قطبیده‌ی دایروی در جهت راستگرد است. برای پذیرفتاری خواهیم داشت $\chi = \chi' + i\chi''$ (بخش مسائل را ملاحظه کنید).

$$\chi'(\omega) = \gamma\mu_0 M_0 \frac{(\omega_0 - \omega)\tau_2^2}{1 + (\omega_0 - \omega)^2 \tau_1^2 + \tau_1 \tau_2 (\gamma B_0)^2} \quad (9-78 \text{ الف})$$

$$\chi''(\omega) = \gamma\mu_0 M_0 \frac{\tau_2}{1 + (\omega_0 - \omega)^2 \tau_1^2 + \tau_1 \tau_2 (\gamma B_0)^2} \quad (9-78 \text{ ب})$$

چون سیگنال حالا به طور جزیی جذب می‌شود، پذیرفتاری یک عدد مختلط است. نمودار تغییرات χ' و χ'' بر حسب فرکانس در شکل (۹-۳۶) رسم شده است. در این شکل یک رفتار تشدید نوعی در $\omega = \omega_0$ نشان داده شده است که البته قابل انتظار است. مشکل واگرایی در ω_0 با در نظر گرفتن مکانیزم واهلش برطرف شده است.



شکل ۹-۳۶ پذیرفتاریهای حقیقی و موهومی X' و X'' به صورت تابعی از فرکانس (ω) در EPR

اطلاعات به دست آمده از این منحنی‌ها به قرار زیر است.

الف) ضریب g^1 این کمیت را می‌توان با اندازه‌گیری فرکانس تشدید ω_0 تعیین کرد زیرا

$$\omega_0 = \gamma B_0 = g \frac{e}{2m} B_0$$

در یک بلور، این ضریب با رابطه‌ی (۹-۴۵) بیان نمی‌شود. ولی به شدت از میدان بلور تأثیر می‌پذیرد.

ب) زمان τ_0 . راحت‌ترین راه برای تعیین این زمان به کمک عرض خط X'' است.

از رابطه‌ی (۹-۷۸) می‌توان دید که

$$\tau_p^{-2} = (\omega' - \omega_0)^2 \quad (9-79)$$

که ω' ، فرکانس نیم-عرض^۳ است یعنی فرکانسی است که در آن X'' به نصف مقدار فرکانس تشدید کاهش می‌یابد.

ج) زمان τ_1 . این زمان نیز از X'' به دست می‌آید. در نزدیکی تشدید، این پذیرفتاری، مقدار تقریبی زیر را دارد.

$$X'' = \gamma \mu_e M_0 \frac{\tau_2^2}{1 + \tau_1 \tau_2 (\gamma b_0)^2} \quad (9-80)$$

که نشان می‌دهد، با افزایش قدرت سیگنال (که با نشان داده می‌شود) X'' کاهش می‌یابد. این پدیده

1. g - factor
2. linewidth
3. halfe wiath

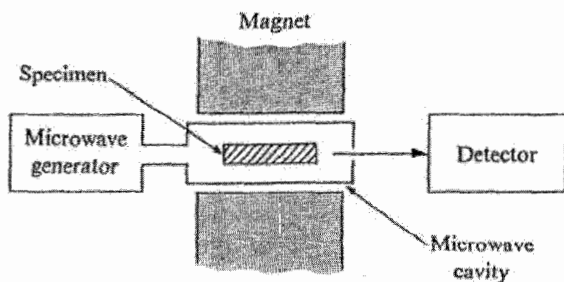
به اشباع موسوم است و می توان از آن برای تعیین τ_1 استفاده کرد. زیرا وقتی $(\gamma b_0)^2 \tau_1 \tau_2$ است، χ'' به نصف مقدار خودش کاهش می یابد، τ_1 و b_0 را می توان مستقلاً تعیین کرد.

کیفیت تشدید (یعنی تیزی پیک آن) را با طولانی کردن τ_2 می توان بهبود بخشید؛ در غیر این صورت خط تشدید خیلی پهن تر از آن است که بتوان آن را آشکار کرد. این کار معمولاً با رقیق کردن یون های مغناطیسی در بلور میزبان انجام می شود. همین طور، τ_1 نمی باید خیلی کوتاه باشد و گرنه تشدید نمایان نمی شود. این امر اغلب در دمای اتاق و یا حتی پایین تر اتفاق می افتد.

شکل (۹-۳۷) نمودار طرح واره ی یک آزمایش را نشان می دهد که برای مشاهده ی تشدید پارامغناطیسی به کار می رود. برای یک میدان در حدود چند کیلوگوس، فرکانس تشدید ω_0 در ناحیه ی میکروموج یعنی حدود 10^{11} Hz قرار می گیرد. قسمت حقیقی پذیرفتاری، χ' را توسط تغییر در القایدگی سیم پیچ (بواسطه ی حضور نمونه مغناطیسی) اندازه می گیرند در حالی که قسمت موهومی χ'' به کمک جذب موج توسط نمونه تعیین می گردد. می توان نشان داد که توان جذب بر واحد حجم از رابطه ی زیر به دست می آید.

$$P = \frac{1}{\mu_0} \omega \chi''(\omega) b_0^2 \quad (9-81)$$

نکته ی مهمی که باید در این جا تذکر داد این است که در اندازه گیری های تشدید، معمولاً میدان B_0 استاتیکی را به جای فرکانس ω تغییر می دهند. زیرا این کار خیلی راحت تر انجام می گیرد. اندازه گیری در فرکانس ثابت ω صورت می گیرد.



شکل ۹-۳۷ نمودار طرح وار آزمایشی برای اندازه گیری EPR

تکنیک تشدید پارامغناطیسی در فیزیک، شیمی، زیست شناسی و علوم دیگر کاربرد وسیعی دارد و

یکی از ابزارهای اصلی شناخت مواد است. در این جا کاربردهای اولیه‌ی آن در فیزیک بحث می‌شوند. از تشدید پارامغناطیسی در مطالعه‌ی خواص مغناطیسی یون‌های $3d$ ، $4d$ ، $5d$ و همین طور یون‌های $4f$ و $5f$ در نمک‌ها استفاده‌ی بسیار می‌شود. جدول ۹-۹ اطلاعات راجع به این مواد را ارائه می‌دهد. به محدوده‌ی وسیع مقادیر g توجه کنید که توسط میدان بلور ایجاد شده است. اغلب این مقادیر به طور تئوری محاسبه شده‌اند و سازگاری خوبی با تجربه دارند.

تکنیک EPR در مطالعه‌ی مولکول‌های پارامغناطیسی، به خصوص O_2 ، NO و NO_2 استفاده می‌شود. اسپین‌ها در این مولکول‌ها بر خلاف اغلب مولکول‌های دیگر نامتوازن هستند که نتیجه‌ی آن یک گشتاور مغناطیسی خالص است. این مواد پدیده‌ی EPR نشان می‌دهند.

جدول ۹-۹: داده‌های مربوط به یون‌های فلزات واسطه، خاکی‌های نادر و اکتینیدها که از اندازه‌گیری‌های EPR به دست آمده است. (Morrish, 1965)

یون	آرایش	اسپین مؤثر	محدوده‌ی مقادیر g
Cr^{2+}, V^{2+}	$3d^3$	$\frac{3}{2}$	۱/۹۹۲
Fe^{2+}	$3d^6$	$\frac{1}{2}$	۰/۷ - ۲/۶
Mo^{5+}	$4d^1$	$\frac{1}{2}$	۱/۹۵
Ru^{2+}	$4d^6$	$\frac{1}{2}$	۱/۰ - ۳/۲۴
Ce^{2+}	$4f^1$	$\frac{1}{2}$	۰/۹۵ - ۲/۱۸
Nd^{2+}	$4f^3$	$\frac{1}{2}$	۲/۰ - ۳/۶
Er^{2+}	$4f^{11}$	$\frac{1}{2}$	۱/۴۷ - ۸/۹
$(NpO_2)^{2+}$	$5f^1$	$\frac{1}{2}$	۰/۲ - ۳/۴
$(PuO_2)^{2+}$	$5f^3$	$\frac{1}{2}$	۰ - ۰/۵۹

میزر (maser)^۱

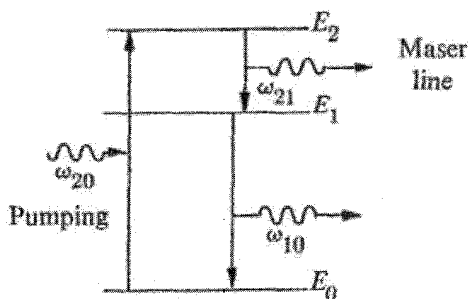
اغلب تحقیقات در زمینه‌ی EPR ابتدا توسط میزر یا قوت و در اواسط دهه ۱۹۵۰ انجام شد. اساس کار میزر و رابطه‌ی آن با EPR را می‌توان با مشاهده‌ی شکل ۳۸-۹ دریافت. دو تراز انرژی E_1 و E_2 ، ترازهای دوگانه‌ی زمین هستند که در اثر اعمال یک میدان مغناطیسی استاتیکی B_0 به وجود می‌آیند. اختلاف انرژی $\Delta E = E_2 - E_1$ با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$\Delta E = \hbar\omega_0 = \hbar\gamma B_0 = g\mu_B B_0 \quad (9-82)$$

فرض کنید، سیستم در حضور میدان مغناطیسی، در حال تعادل است. جمعیت N_1 و N_2 دو تراز به صورت زیر به هم مربوط‌اند.

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-\frac{\Delta E}{kT}} \quad (9-83)$$

که نشان می‌دهد $N_2 < N_1$ ، یعنی چگالی جمعیت تراز بالایی کمتر است. در دمای اتاق و میدان معمولی، $KT \gg \Delta E$ و جمعیت دو تراز اساساً مساوی است. انرژی گرمایی آن قدر زیاد است که اتم‌ها به سادگی از یک تراز به تراز دیگر منتقل می‌شوند.



شکل ۳۸-۹ اصول گسیل میزر: الکترون‌ها از تراز E_0 به تراز E_2 پمپ می‌شوند، اسپین خود را تغییر می‌دهند، به تراز پایین‌تر E_1 می‌روند و تابش همدوس با فرکانس ω_2 گسیل می‌دارند.

در دماهای پایین، $KT \ll \Delta E$ ، اغلب اتم‌ها به تراز پایینی می‌افتند. یعنی گشتاورها موازی میدان

۱- کلمه‌ی میزر علامت اختصاری عبارت زیر است

می‌شوند. اگر تحت این شرایط سیگنالی با فرکانس ω از سیستم بگذرد، ممکن است آن سیگنال جذب شود. این امر وقتی اتفاق می‌افتد که اتم یک فوتون جذب کند و از تراز پایین‌تر به تراز بالاتر انتقال یابد و این اتفاق فقط وقتی می‌افتد که مطابق قاعده‌ی بوهر $\Delta E = \hbar\omega$ (بخش A-5)، باشد، از مقایسه‌ی این رابطه با رابطه‌ی (۸۲-۹) در می‌یابیم که:

$$\omega = \omega_0 \quad (9-84)$$

و این همان شرط تشدید است که قبلاً بر مبنای مدل کلاسیک به دست آمده بود. بنابراین ملاحظه می‌شود که سیگنال در دمای پایین جذب می‌شود و انرژی جذب شده برای برانگیختگی سیستم اسپین استفاده می‌شود.

حال فرض می‌کنیم جمعیت ترازها به گونه‌ای توزیع شده‌اند که $N_1 > N_2$ و معنی آن این است که تراز بالایی چگالی جمعیت بیش‌تری دارد. البته به این ترتیب به شرط وارونی جمعیت نمی‌توان رسید، ولی به طریق دیگری می‌توان به آن دست یافت. در آن حالت و وقتی شرط تشدید $\omega = \omega_0$ ارضا گردد، سیگنال تقویت می‌شود، زیرا بیش‌تر اتم‌ها برانگیختگی می‌شوند و با گسیل فوتون‌هایی بیش‌تر به طرف پایین منتقل می‌شوند و در نتیجه سیگنال بهبود می‌یابد. این تقویت‌کنندگی همان چیزی است که مسئول عمل میزر است.

چگونگی برقراری شرط وارونی جمعیت در ساده‌ترین حالت ممکن، در شکل ۳۸-۹ نشان داده شده است.

$$(E_2 - E_1)$$

به کمک پمپ کردن سیستم با یک تابش خارجی به فرکانس $\omega_0 = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$ ، اتم‌ها از تراز پایه‌ی E_0 به تراز بالایی E_2 ، از ترازهای دوگانه‌ی زیرمان، منتقل می‌شوند. حالا این اتم‌ها گذارهای هم‌زمان به E_1 و E_0 انجام می‌دهند ولی اگر زمان واهلش اسپین - شبکه τ_1 ، برای گذارهای از E_2 به E_1 طولانی باشد، در دماهای پایین، احتمال این که اتم‌های زیادی در تراز E_2 باشد بیش از این احتمال برای تراز E_1 است. سپس سیستم معکوس می‌شود و اگر یک سیگنال با فرکانس $\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$ از سیستم بگذرد، ممکن است سیگنال تقویت شود.

عمل میزر عکس پدیده‌ی EPR است. معروف‌ترین میزر، میزر یاقوت است که شامل ناخالصی کروم می‌باشد. اطلاعات بیش‌تر راجع به این میزر را می‌توان در مراجع مربوط به الکترونیک کوانتومی مثلاً (Yariv 1966) یافت.

۹-۱۳ تشدید مغناطیسی هسته‌ای^۱

تشدید مغناطیسی هسته‌ای (NMR) مانسته‌ی تشدید پارامغناطیسی الکترون است. هسته نیز مانند الکترون گشتاور تشدید دارد. هسته از پروتون‌ها و نوترون‌هایی تشکیل شده است که در حجم فوق العاده کوچکی (به شعاع حدود 10^{-13} cm) گرد آمده‌اند. این نوکلئونها اسپین دارند. اسپین هسته، جمع برداری اسپین‌های تک تک نوکلئون‌ها است. عدد کوانتومی اسپین برای هسته با I نمایش داده می‌شود که یک مقدار صحیح یا نیمه صحیح است. اندازه حرکت زاویه‌ای هسته با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$I = I\hbar \quad (9-85)$$

که I ، بزرگی و جهت بردار اندازه حرکت زاویه‌ای را مشخص می‌کند. [بزرگی اندازه حرکت زاویه‌ای $I = I(I + 1)^{1/2} \hbar$ است.]

متناظر با حرکت اسپینی هسته، یک گشتاور مغناطیسی هسته وجود دارد که به μ_n نشان داده می‌شود. این گشتاور مربوط به اندازه حرکت زاویه‌ای است.

$$\mu_n = g_n \left(\frac{e}{2M_p} \right) I = g \mu_{Bn} I \quad (9-86)$$

که g_n ، عامل g هسته‌ای، M_p جرم پروتون و $\mu_{Bn} = \hbar e / 2M_p$ ، مگنتون بوهر هسته‌ای است. جدول ۹-۱۰ مقادیر I و g_n برای تعدادی از هسته‌ها را می‌دهد. مقادیر g_n از مرتبه‌ی بزرگی واحد هستند.

گشتاور هسته‌ای از دو جهت با گشتاور الکترونی متفاوت است. اول این که گشتاور هسته‌ای از مرتبه‌ی μ_{Bn} است که چون جرم پروتون 1836 مرتبه از جرم الکترون بزرگ‌تر است، μ_{Bn} حدود یک دو هزارم گشتاور الکترون است. دوم این که مقدار μ_{Bn} بسته به هسته‌های مختلف، ممکن است مثبت و یا منفی باشد. بنابراین بردار گشتاور μ_n ممکن است موازی یا پادموازی I باشد، و این برخلاف مورد الکترون است که دو بردار همیشه پادموازی‌بند.

جدول ۹-۱۰: گشتاورهای مغناطیسی هسته‌ای و اسپینی ($\mu_B = 5/0.5 \times 10^{-27} \text{ ampm}^2$) اسپینی

I	μ_n بر حسب واحد μ_{Bn}	ایزوتوپ
$\frac{1}{2}$	- ۱/۹۱۳	n^1
$\frac{1}{2}$	۲/۷۹۳	p^1
۱	۰/۸۵۷۴	H^2
$\frac{1}{2}$	- ۲/۱۲۷	He^3
$\frac{3}{2}$	۳/۲۵۶	Li^7
$\frac{1}{2}$	۰/۷۰۲۲	C^{13}
۱	۰/۴۰۳۶	N^{14}

وقتی یک میدان مغناطیسی B_0 بر یک سیستم هسته‌ای اعمال گردد، همچنان که از معادلات حرکت (۹-۹) و (۹-۸۶) نتیجه می‌شود، گشتاورهای هسته‌ای حول میدان B_0 یک حرکت تقدیمی با فرکانس لارمور خواهند داشت.

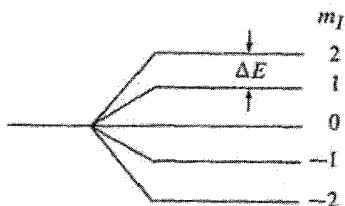
$$\omega_0 = \gamma_n B_0 = (g_n e / 2M_p) B_0 \quad (9-87)$$

اگر یک سیگنال با فرکانس ω که میدان آن عمود بر B_0 است بر سیستم وارد شود، تشدید هسته‌ای صورت می‌گیرد. این تشدید با یک جذب شدید در $\omega = \omega_0$ همراه است:

$$\omega = \omega_0 = \left(\frac{g_n e}{2M_p} \right) B_0 \quad (9-88)$$

$$\nu = 0/213 g_n B_0 \text{ MHz}$$

که B_0 بر حسب $\frac{Wb}{m^2}$ است. برای یک مقدار نوعی، مثلاً $B_0 = 0.5 \frac{Wb}{m^2}$ ، فرکانس تشدید در ناحیه RF یعنی $10^6 - 10^7$ Hz قرار می‌گیرد. این محدوده‌ی مناسبی است. زیرا می‌توان در مدارهای پارامتر جمعی^۱ از آن‌ها استفاده کرد و به دقت خیلی بالایی دست یافت.



شکل ۳۹-۹ شکافتگی زیمان در یک فراز هسته‌ای I=۲

از دید مکانیک کوانتومی، به NMR می‌توان به عنوان گذار بین زیر لایه‌های زیمان نگریست. مثلاً اگر $I=2$ باشد، در اثر اعمال میدان مغناطیسی B_0 ، لایه‌ها به $5 = (2I+1)$ زیر لایه شکافته می‌شوند. فاصله‌ی بین زیر لایه‌ها با هم مساوی و برابر است با:

$$\Delta E = g_n \mu_{Bn} B_0 \quad (9-89)$$

هنگامی که یک سیگنال خارجی ac اعمال گردد، در صورتی که شرط زیر برقرار باشد؛

$$\Delta E = \hbar \omega \quad (9-90)$$

گذاری بین زیر لایه‌ها القا می‌شود و سیگنال جذب می‌گردد. توجه کنید که معادله‌ی (۹-۹۰)، همان شرط (۸۷-۹) است و نشان می‌دهد که فقط در حالت تشدید، جذب به میزان قابل ملاحظه‌ای صورت می‌گیرد و این همان نتیجه‌ای است که انتظار می‌رود. معادله‌ی (۹-۹۰) فقط بر مبنای گذار بین زیر لایه‌های همسایه زیمان بنا شده است.

گذار بین لایه‌های غیر همسایه ممنوع است. در این جا قاعده‌ی انتخاب $\Delta m_I = \pm 1$ حاکم است که m_I عدد کوانتومی مؤلفه‌ی z اندازه حرکت زاویه‌ای است.

هنوز راجع به واهلش مغناطیسی هسته‌ای بحث نکرده‌ایم؛ می‌توانیم این کار را به روشی مشابه آن

چه برای EPR به کار بردیم، انجام دهیم. باز هم دو زمان τ_1 و τ_2 داریم که برهم کنش بین گشتاورهای هسته‌ای با محیط را مشخص می‌کنند. شبیه حالت مربوط به الکترون، این زمان‌ها را می‌توان از روی ارتفاع خط NMR تعیین کرد. در این جا نیازی به تکرار آن نیست.

معمولاً به جای تغییر فرکانس برای رسیدن به تشدید، میدان مغناطیسی B_0 را تغییر می‌دهند. تا شرط تشدید برقرار گردد. بنابراین آرایش در فرکانس ثابت انجام می‌شود. متداول‌ترین طیف سنج‌های NMR در فرکانس‌های ۶۰، ۱۰۰ یا ۲۲۰ مگاهرتز، با میدانی که برای هسته‌های مختلف تنظیم می‌شود، طراحی شده‌اند. به منظور تعیین دقیق یک خاصیت هسته‌ای مثل μ_n ، می‌باید هم فرکانس و هم میدان را تا حد معینی از دقت تعیین کرد (رابطه‌ی ۸۷-۹ را ملاحظه کنید). فرکانس را می‌توان با وقت یک قسمت در 10^6 یا بهتر تعیین کرد. ولی چون ناهمگنی در میدان‌های مغناطیسی غیرقابل اجتناب است، دقت به حدود یک قسمت 10^4 محدود می‌شود. این دقت اندازه‌گیری NMR است.

تکنیک NMR مانند تکنیک EPR ابزاری است که استفاده وسیعی در فیزیک، شیمی و زیست‌شناسی دارد، زیرا اطلاعاتی راجع به ساختمان مغناطیسی مواد به دست می‌دهد. در این جا به خواص آن در فیزیک نظر می‌کنیم.

(i) داده‌های هسته‌ای. به کمک NMR می‌توان داده‌هایی راجع به هسته به دست آورد، زیرا همان طور که از رابطه‌ی (۸۷-۹) برمی‌آید، از این اندازه‌گیری‌ها، g_n و یا معادل آن گشتاور هسته‌ای μ_n بدست می‌آید. گرچه اسپین I تعیین نمی‌شود ولی انواع دیگر اندازه‌گیری‌های تشدید را می‌توان انجام داد. بنابراین NMR در فیزیک هسته‌ای تکنیک فوق‌العاده مفیدی است.

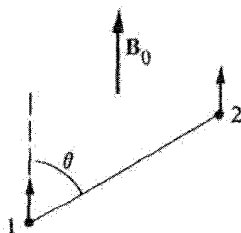
(ii) آثار محیطی. در بحثمان راجع به NMR هسته را به گونه‌ای در نظر گرفتیم که گویی ذره‌ای منفرد است. ولی در پدیده‌های حالت جامد، هسته منزوی نیست بلکه توسط الکترون‌هایش و همین طور اتم‌ها و مولکول‌های همسایه که محیط طبیعی اطراف آن را تشکیل می‌دهند احاطه شده است. برهم کنش هسته با محیط اطرافش، باعث خطوط تشدید می‌شود که در مشخص کردن محیط به کار می‌رود. NMR برای مطالعه محیط‌های میکروسکوپی استفاده می‌شود. به همین دلیل NMR در فیزیک، شیمی و شاخه‌های دیگر علوم بسیار با ارزش است.

(iii) تشدید در جامدات. زمان واهلش عرضی τ_2 که می‌توان آن را از روی عرض خط تعیین کرد

مربوط به برهم کنش اسپین - اسپین است. وقتی یک گشتاور هسته‌ای تشدید می‌شود با گشتاور هسته‌ای همسایه برهم کنش داشته باشد یک میدان مغناطیسی روی اولین گشتاور عمل می‌کند که با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$B = \pm \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mu_H (r \cos^2 \theta - 1)}{r^3} \quad (9-91)$$

که r فاصله‌ی بین گشتاورها و θ زاویه‌ی بین B_0 و خطی است که گشتاورها را به هم متصل می‌کند (شکل ۹-۴۰). علامت مثبت مربوط به حالتی است که گشتاورها موازی‌اند و علامت منفی مربوط به حالتی است که گشتاورها پادموازی‌اند. اگر چندین گشتاور دیگر به طور همزمان بر گشتاور اولی اثر کند با اضافه کردن سهم تمام گشتاورها می‌توان میدان موضعی را پیدا کرد.



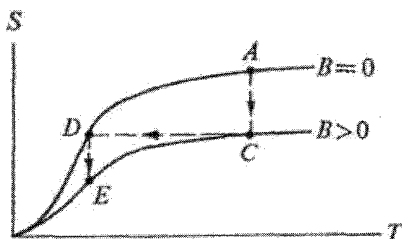
شکل ۹-۴۰ برهم‌کنش اسپین - اسپین بین دو دوقطبی ۱ و ۲

میدان مغناطیسی کل که بر گشتاور تشدید می‌گردد، با اضافه کردن رابطه‌ی (۹-۹۱) به میدان اعمال شده‌ی B_0 به دست می‌آید. از آن جا که بسته به جهت‌های نسبی اسپین و گشتاورهای همسایه، B ممکن است مقادیر خیلی متفاوتی را اختیار کند، میدان کل مقادیری را اختیار می‌کند که نزدیک به B_0 باشد و این منجر به شکافتگی خط تشدید می‌شود. از روی شکل این خط می‌توانیم فراتر رویم و محیط اطراف گشتاور هسته‌ای را مشخص کنیم.

(iv) تشدید در مایعات و گازها. از تکنیک NMR برای انجام آزمایش‌هایی بر روی مایعات و گازها نیز استفاده می‌شود. عرض خط در مایعات و گازها خیلی باریک‌تر از جامدات است. برای بیان دلیل این امر، معادله‌ی (۹-۲۲) را یادآوری می‌کنیم که برهم کنش اسپین - اسپین را توصیف می‌کند. این برهم کنش در مایعات نیز وجود دارد، ولی در مایعات هسته‌ها سریعاً می‌چرخند و حرکت می‌کنند. بنابراین محیط موضعی سریعاً تغییر می‌کند و میدان موضعی میانگین مقدار خیلی کوچکی می‌شود و نتیجه‌ی آن یک عرض خط کوچک است. این پدیده به نام باریک شدن شدگی

حرکتی^۱ موسوم است.

(۷) سرد سازی توسط وامغانطیدگی بی در رو. آزمایش‌هایی هستند که لازمه‌ی انجام آن‌ها دماهای خیلی پایین (خیلی پایین‌تر از 1K) است. با استفاده از روش‌های مستقیم و معمولی سرد سازی و با استفاده از هلیوم مایع به این دماها نمی‌توان رسید. روش استاندارد، وامغانطیدگی بی در رو است. این روش بر اساس پدیده‌های پارامغانطیس و اسپین‌های هسته‌ای استوار است.



شکل ۴۱-۹ آنترروپی S بر حسب دمای T برای یک سیستم اسپین، با و بدون یک میدان مغناطیسی. سردسازی بی در رو (خط چین) توسط قطع وصل میدان مغناطیسی ایجاد شده است.

یک نمک پارامغانطیسی را در نظر بگیرید که تا دمای حدود 1K سرد شده است. نمونه در یک میدان مغناطیسی $\frac{wb}{m}$ قرار می‌گیرد و اسپین‌های آن در امتداد میدان مرتب می‌شوند. در اثر این کار، اسپین‌ها انرژی از دست می‌دهند که این انرژی به شبکه منتقل می‌شود. در نتیجه شبکه تا حدودی گرم می‌شود ولی دمای نمونه در تماس با هلیوم مایع، پایین نگه داشته می‌شود. وقتی گرمای مربوط به مغناطیدگی کاملاً خارج شد نمونه را از لحاظ حرارتی منزوی می‌کنند و میدان مغناطیسی به صفر کاهش داده می‌شود. در غیاب میدان، اسپین‌ها تمایل دارند که کاتوره‌ای قرار گیرند (به طور بی در رو وامغانطیده شوند). این امر نیاز به انرژی دارد. این انرژی از شبکه جذب می‌شود و در نتیجه شبکه سردتر و دمای آن باز هم پایین‌تر می‌رود. این کار را می‌توان چندین بار تکرار کرد (شکل ۴۱-۹)، تا به دمای مورد نظر رسید. با استفاده از وامغانطیدگی پارامغانطیس به دماهای تا 0.01K رسیده‌اند. کاهش بیش‌تر دما با استفاده از وامغانطیدگی هسته‌ای میسر است.

۱۴-۹ تشدید فرومغناطیسی: امواج اسپین

وقتی میدان مغناطیسی بر یک ماده فرومغناطیس اعمال گردد، بردار مغناطش M در اطراف میدان شروع به بزرگ شدن می کند. بنابراین امکان پدیده‌ی تشدید فرومغناطیسی (FMR) وجود دارد. این پدیده مانسته پدیده‌ی تشدید اسپین است که در بخش ۱۲-۹ بحث شد. در حقیقت هر دو نوع تشدید تقریباً به طور همزمان در سال ۱۹۴۶ مشاهده شدند و این در حدود همان زمانی است که اولین مشاهده‌ی NMR گزارش شد.

به چندین دلیل تشدید فرومغناطیسی در فیزیکی و مهندسی حائز اهمیت است.

(۱) این پدیده یک ابزار قدرتمند برای مطالعه‌ی مواد فرومغناطیسی و خواص جالب آن‌ها است.

(۲) FMR مبنای بسیاری از دستگاه‌های میکروموج است.

بحث مقایسه‌ای خود را با معادله بلوخ آغاز می کنیم، که مانسته‌ی معادله (۹-۶۴) است.

$$\frac{dM}{dt} = -\gamma M \times B \quad (9-92)$$

در این جا $\gamma = \frac{g\mu_B}{\hbar m}$ نسبت ژیرومغناطیسی است. ولی در حالت کلی، بر خلاف حالت EPR، میدان B کاملاً متفاوت با میدان اعمال شده است زیرا میدان‌های دیگری معمولاً در ماده فرومغناطیسی وجود دارند. اگر H_0 را میدان اعمال شده‌ی خارجی بگیریم، عمومی ترین عبارت برای میدان خارجی B چنین خواهد بود.

$$B = \mu_0(H_0 - DM + H_a + H_e) \quad (9-93)$$

که $-DM$ میدان وامغناطیدگی، H_a میدان مربوط به ناهمسانگردی مغناطیسی و H_e میدان مربوط به انرژی تبادل است. جملات مختلف رابطه‌ی (۹-۹۳) مانسته‌ی مغناطیسی جملات الکتریکی رابطه‌ی (۸-۲۴) می باشند. ولی طبیعت برهم کنش در این دو مورد کاملاً متفاوت است. واضح است که طبیعت پیچیده‌ی میدان در رابطه‌ی (۹-۹۳) به این معنی است که فرکانس تشدید به صورت پیچیده‌ای به برهم کنش‌های گوناگون در بلور بستگی دارد و به این ترتیب به کمک پدیده‌ی تشدید، اطلاعاتی راجع به این برهم کنش‌ها می توان به دست آورد. برای این که بحث را ساده کنیم، ساده ترین حالت ممکن را در نظر می گیریم: از H_a و H_e چشم پوشی می کنیم، فقط میدان وامغناطیدگی $-DM$ و میدان خارجی H_0 باقی می ماند ضریب وامغناطیدگی D بستگی به

شکل و جهت نمونه دارد. برای یک قرص تخت عمود بر B_0 ، $D=1$ است، بنابراین

$$B = \mu_0(H_0 - M_0) \quad (9-94)$$

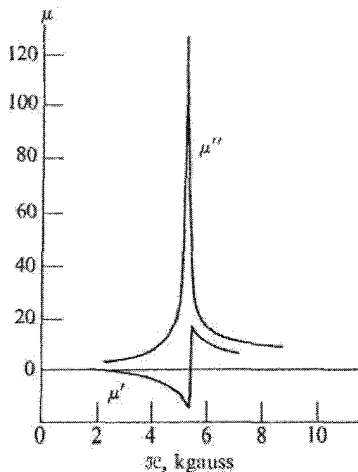
که M_0 مغناطش اشباع است. از آن جا که M_0 در همان جهت H_0 است، می توان نوشت:

$$B = \mu_0(H_0 - M_0) \quad (9-95)$$

اگر رابطه‌ی (۹-۹۵) در رابطه‌ی (۹-۹۲) جایگزین شود، نتیجه می شود که M حول H_0 یک حرکت تقدیمی با فرکانس لارمور زیر را خواهد داشت.

$$\omega_0 = \mu_0 \gamma (H_0 - M_0) \quad (9-96)$$

که فرکانس تشدید فرومغناطیسی است. میدان و امغناطیدگی، فرکانس تشدید را کاهش می دهد. برای میدان هایی در حدود $B = 1 \frac{Wb}{m}$ ، فرکانس ω_0 در محدوده‌ی میکروموج، یعنی همان ناحیه‌ای که EPR کار می کند، قرار می گیرد. این امر غیر منتظره نیست، زیرا اساسا برای هر دو مورد γ یکسان است. FMR برای سوپرمالوی^۱ در شکل (۹-۴۲) نشان داده شده است. تشدید در مواد فری مغناطیس و آنتی فرومغناطیس نیز گزارش شده است. بررسی کلاسیکی فوق را به سادگی می توان برای مطالعه‌ی این مواد تعمیم داد.

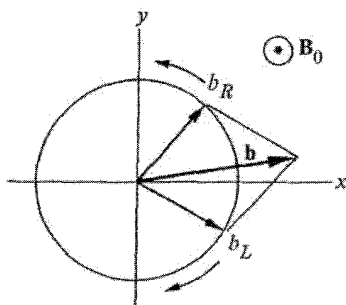


شکل ۹-۴۲ تراوایی حقیقی و موهومی در سوپرمالوی، که FMR نشان می دهد.

(Bloembergen, Phys. Rev. 78, 572 (1950))

یکی از کاربردهای مهم مربوط به FMR، چرخش فارادی است: فرض کنید یک سیگنال قطبیده‌ی تخت، در صفحه xy از قطعه‌ای از یک ماده‌ی فرومغناطیس عبور کند. یک میدان مغناطیسی B_0 بر ماده اعمال می‌گردد. و همان طور که شکل ۹-۴۳ نشان می‌دهد، سیگنال در امتداد محور z حرکت می‌کند. سیگنال را می‌توان به دو مؤلفه دایروی، یکی راست‌گرد و دیگری چپ‌گرد تجزیه کرد. دو مؤلفه با سرعت‌های مختلف حرکت می‌کنند.

در نتیجه وقتی موج از طرف دیگر قطعه بیرون می‌آید قطبش تخت آن به اندازه‌ی مقدار معین (زاویه‌ی فارادی) می‌چرخد.



شکل ۹-۴۳ یک موج تخت قطبیده‌ی k که در یک چرخش فارادی به دو موج قطبیده‌ی دایره‌ای تجزیه شده است.

حال زاویه‌ی فارادی را محاسبه می‌کنیم. به دلیل حرکت ژيروسکوپی مغناطش M ، محیط، تراوایی مغناطیسی نشان می‌دهد. بسته به این که موج راست‌گرد یا چپ‌گرد باشد تراوایی برابر است با:

$$\mu_R = \mu_0 \left(1 + \frac{\omega_M}{\omega_0 - \omega} \right) \quad (۹-۹۷ \text{ الف})$$

$$\mu_L = \mu_0 \left(1 + \frac{\omega_M}{\omega_0 + \omega} \right) \quad (۹-۹۷ \text{ ب})$$

در روابط فوق از رابطه‌ی (۹-۷۵) استفاده کردیم که $\omega_M = \gamma \mu_0 M_0$ است

برای یک سیگنال فرودی به شکل:

$$b = b_0 e^{-i(\omega t - kz)}$$

دو مؤلفه دایروی بردارهای موج زیر را دارند.

$$k_R = \omega \sqrt{\mu_R \epsilon} \quad (9-98 \text{ الف})$$

$$k_L = \omega \sqrt{\mu_R \epsilon} \quad (9-98 \text{ ب})$$

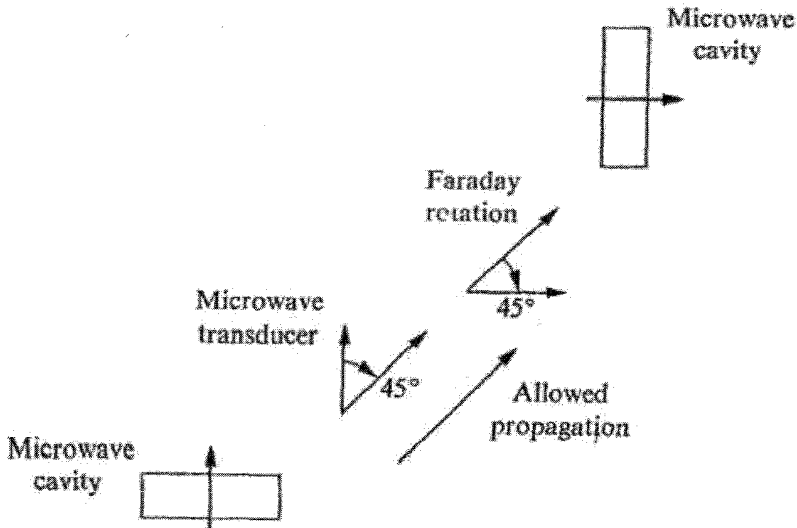
که ϵ ثابت دی الکتریک است. از آن جا که در اثر عبور موج از قطعه‌ای به ضخامت d ، زاویه‌ی فاز به اندازه‌ی kd تغییر می‌کند، نتیجه می‌شود

$$\theta = \frac{\theta_R - \theta_L}{2} = \frac{(k_R - k_L)d}{2} \quad (9-99)$$

این را نیز با مراجعه به شکل (۹-۴۳) می‌توان دریافت. حال اگر رابطه‌ی (۹-۹۷) را در (۹-۹۸) و سپس در (۹-۹۹) جای‌گزین نمایم، زاویه‌ی چرخش فارادی بر واحد طول به دست می‌آید.

$$\frac{\theta}{d} = -\sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_0}} \frac{\omega_M}{\gamma c} \quad (9-100)$$

که c سرعت نور است. برای فریت منگنز - روی که $\omega_M = 2/6 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ و $\frac{\epsilon}{\epsilon_0} = 23$ است، مقدار $\frac{\theta}{d} = 118 \frac{\text{درجه}}{\text{cm}}$ به دست می‌آید. (فرض شده است که $\omega_0 \omega_m \ll \omega$)



شکل ۹-۴۴ اساس منزوی کننده. بردارها در کاواکها، مبین جهت مدهای تشدیدی در هر کاواک هستند.

چرخش فارادی اساس بسیاری از دستگاه‌های میکروموج فرو مغناطیسی است. ساده‌ترین آن‌ها منزوی کننده است (شکل ۴۴-۹). دو کاواک میکروموج طوری مرتب شده‌اند که قطبش آن‌ها بر یکدیگر عموداند. یک موج پیش رونده صفحه‌اش را به اندازه زاویه 90° می‌چرخاند به طوری که بتواند از کاواک دوم عبور کند. ولی یک موج پس رونده در همان قطبش باقی می‌ماند زیرا چرخش فارادی غیر وارونی است، بنابراین توسط اولین کاواک باز می‌ماند. بدین ترتیب این آرایش فقط در یک جهت به موج‌ها اجازه عبور می‌دهد و می‌توان آن را برای منزوی کردن موج در جهت انتشارشان استفاده کرد. با استفاده از ترکیبی از منزوی کننده‌ها برای طراحی قطعات دیگر همچون ژیراتورها^۱، گردش کننده‌ها^۲ و غیره استفاده کرد. تفصیل بیش تر را می‌توان در کتاب Wang (۱۹۶۶) یافت.^۳

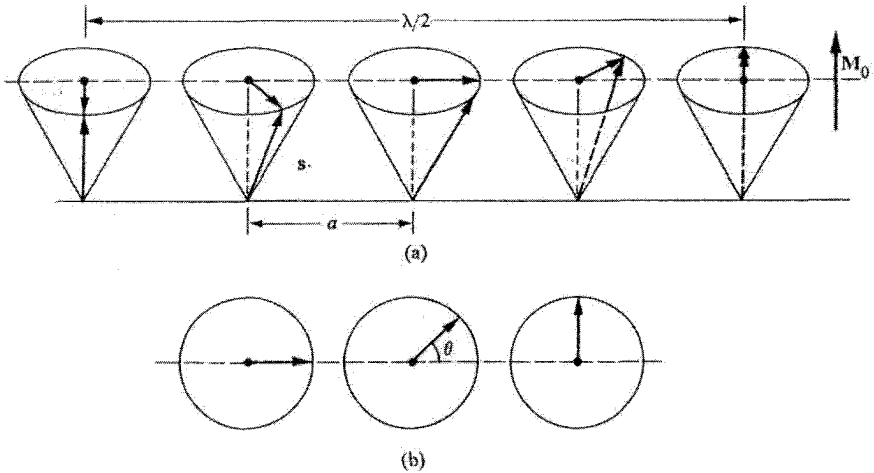
امواج اسپین

جنبه خیلی جالب دیگری از حرکت اسپین در مواد فرومغناطیس هست که امواج اسپین نام دارد. اسپین‌ها حول بردار M_0 طوری حرکت تقدیمی انجام می‌دهند که همانند شکل ۴۵-۹ (الف) جهت‌های اسپین‌های مختلف به هم مربوط‌اند. چنین موجی با یک سرعت معین که در زیر محاسبه می‌شود در طول شبکه منتشر می‌شود.

نیروی بازگرداننده‌ای که مسئول نوسان است این جا همان نیروی تبادلی بین اسپین‌ها است (بخش ۸-۹). هنگامی سیستم پایین‌ترین انرژی را دارد، که تمام اسپین‌ها در جهت M_0 موازی یکدیگر قرار گیرند. ولی وقتی یکی از اسپین‌ها منحرف شود، در اثر میدان مربوط به اسپین‌های دیگر، شروع به حرکت تقدیمی می‌کند، و به خاطر برهم‌کنش تبادلی این انحراف به صورت یک موج در سیستم منتشر می‌شود.

1. gyrotator
2. circulator

^۳ - چرخش فارادی و آثار مربوط به آن در تکنولوژی مدرن مگنتوپتیک کاربرد دارد. برای مثال مراجعه کنید به



شکل ۹-۴۵ (الف) حرکت موج اسپین (طول موج $\lambda = 16a$ که a ثابت شبکه است) (ب) زاویه θ بین اسپین‌های مجاور است (دید از بالای سیستم اسپین).

امواج اسپین، مانده‌ی امواج شبکه هستند (بخش ۶-۳). در امواج شبکه، اتم‌ها حول موضع تعادلشان نوسان می‌کنند و جابه‌جایی آن‌ها مربوط به نیروهای کشسانی است. در امواج اسپین، اسپین‌ها حول مغناطش اشباع حرکت تقدیمی می‌کنند که این حرکت مربوط به نیروهای تبدالی است. حال تشابهات بین این دو نوع موج را مدنظر قرار می‌دهیم. ولی قبل از آن رابطه‌ی پاشندگی را برای امواج اسپین محاسبه می‌کنیم. به این منظور از روشی که قبلاً در مورد امواج شبکه به کار بردیم، استفاده می‌کنیم. از بخش ۸-۹ یادآوری می‌کنیم که انرژی تبدالی بین دو اسپین با رابطه‌ی

$E = -J S^z \cos \theta$ بیان می‌شود که θ زاویه‌ی بین اسپین‌ها است. با مراجعه به شکل ۹-۴۵ (ب) در می‌یابیم که هر اسپین تحت تأثیر دو اسپین دیگر که در جهت مخالف آن هستند (برهم کنش نزدیک‌ترین همسایه‌ها) قرار می‌گیرد. بنابراین انرژی تبدالی برابر است با:

$$E = -2J S^z \cos \theta$$

بنابراین انرژی نسبی- یعنی افزایش در انرژی، بالای حالت پایه- برابر است با:

$$\begin{aligned} \Delta E &= -2J S^z \cos \theta - (-2J S^z) \\ &= +2J S^z (1 - \cos \theta) \end{aligned}$$

$$= 4S^2 \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right)$$

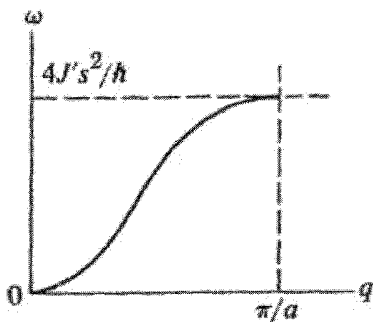
فرکانس نوسان (در مکانیک کوانتومی) برابر است با $\omega = \frac{\Delta E}{\hbar}$ در نتیجه:

$$\omega = \left(\frac{4J^2 S^2}{\hbar} \right) \sin^2 \left(\frac{\theta}{2} \right)$$

زاویه θ ، اختلاف فاز بین دو اسپین همسایه است. بنابراین $\theta = \left(\frac{a}{\lambda} \right) 2\pi = aq$ که ثابت شبکه و q بردار موج است. با جای‌گزینی این‌ها در معادله‌ی فوق خواهیم داشت:

$$\omega = \left(\frac{4J^2 S^2}{\hbar} \right) \sin^2 \left(\frac{aq}{2} \right) \quad (9-101)$$

که همان رابطه‌ی پاشندگی مورد نظر است.



شکل ۹-۴۶ منحنی پاشندگی برای یک موج اسپین

منحنی پاشندگی برای موج اسپین در شکل ۹-۶۴ نشان داده شده است. این شبکه‌ی اسپین می‌تواند

امواجی را که محدوده‌ی فرکانسی آن‌ها بین صفر و مقدار ماکزیمم $\omega_m = 4J^2 S^2 / \hbar$ است پشتیبانی کند. بنابراین یک فرکانس بالایی قطع وجود دارد که در فرکانس‌های بالاتر از آن امواج قویا پراکنده می‌شوند و منتشر نمی‌شوند. این یک یادآوری دیگر از امواج شبکه است. فرکانس بالایی در ناحیه‌ی میکروموج قرار می‌گیرد، این را می‌توان با جای‌گزینی مقدار تقریبی J از بخش

۸-۹ یعنی $J \approx 0.1 \text{ eV}$ به دست آورد.

در مقادیر کوچک q ، ω نیز کوچک است. زیرا در طول موج‌های بلند اسپین‌ها تقریباً موازی یکدیگرند، بنابراین نیروی تبدلی بازگرداننده کوچک است. ولی برای q های بزرگ، اسپین‌ها به طور قابل ملاحظه‌ای پادموازی می‌شوند و بنابراین یک نیروی تبدلی بازگرداننده‌ی بزرگ ظاهر می‌گردد. بیشینه‌ی مقدار نیروی بازگرداننده وقتی رخ می‌دهد که ثابت شبکه مساوی $\frac{\lambda}{4}$ و $q = \frac{\pi}{a}$ باشد. این رویداد در مرز منطقه‌ی برلیون رخ می‌دهد.

مطلبی که در مورد تقارن منحنی موج - شبکه در منطقه‌ی برلیون بیان کردیم (بخش ۶-۳)، در این جا نیز به کار می‌رود، بنابراین آن را در این جا تکرار نمی‌کنیم. در محدوده‌ی طول موج بلند

$$\omega \cong Aq^2 \quad (9-102)$$

یعنی ω متناسب با q^2 است. این با حالت مربوط به امواج شبکه، که در آن $\omega \sim q$ متفاوت است. با توجه به رابطه‌ی (۹-۱۰۲) حتی در ناحیه‌ی طول موج‌های بلند نیز، سرعت‌های فاز و گروه موج اسپین با هم برابر نیستند. منحنی پاشندگی را می‌توان توسط پراش نوترون تعیین کرد. از آن جا که نوترون گشتاور مغناطیسی دارد، می‌تواند با میدان اسپین جفت می‌شود و این از پراش باریکه‌ی نوترونی نتیجه می‌شود. معادله‌ی پایستگی اندازه حرکت زاویه‌ای چنین است.

$$k' = k + q \quad (9-103)$$

که k و k' بردارهای موج اولیه و نهایی نوترون و q بردار موج، موج اسپین است.

امواج اسپین مانند امواج شبکه کوانتیده هستند. واحد کوانتش (یا برانگیختگی مغناطیسی) مگنون^۱ نامیده می‌شود. یک مگنون با بردار موج q ، دارای انرژی E ، اندازه حرکت زاویه‌ای p و گشتاور مغناطیسی m است.

$$E = \hbar\omega(q) \quad (9-104)$$

$$p = \hbar q \quad (9-105)$$

$$m = g\mu_B \quad (9-106)$$

این گشتاور در خلاف جهت M_0 قرار می‌گیرد. تا جایی که به مغناطش مربوط می‌شود، هر

برانگیختگی مگنون معادل با وارون شدن یک اسپین است. علاوه بر محاسبه‌ی مغناطش مربوط به برانگیختگی مگنون می‌توانیم گرمای ویژه را محاسبه نماییم. در تعادل حرارتی، تعداد مگنون‌ها در مد q ، با تابع بوز-انیشتمین بیان می‌شود.

$$\bar{n}(q) = \frac{1}{e^{\hbar\omega(q)/kT} - 1} \quad (9-107)$$

بنابراین انرژی برابر است با

$$\bar{E} = \int_0^{\omega_m} \hbar\omega \bar{n}g(\omega) d\omega \quad (9-108)$$

که $g(\omega)$ چگالی حالت‌های مگنون است. همچون حالت مربوط به فونون‌ها (بخش ۷-۳) این چگالی حالت‌ها را می‌توان از رابطه‌ی پاشندگی محاسبه نمود. با انجام این کار و با استفاده از تقریب طول موج بلند (رابطه‌ی ۱۰۲-۹) و تقریب دی، در می‌یابیم که $\bar{E} \sim T^{5/2}$. بنابراین

$$C_V \sim T^{3/2} \quad (9-109)$$

در دماهای پایین، این با تجربه سازگار است.

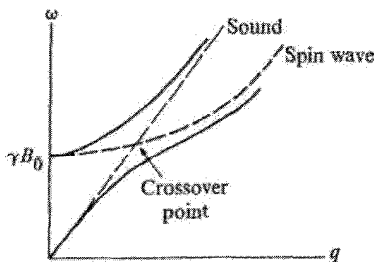
به طور مشابه، مغناطش $M(T)$ رامی توان به صورت زیر نوشت:

$$M(T) = M(0) - g\mu_B \int_0^{\omega_m} \bar{n}g(\omega) d\omega$$

با همان تقریبی که در بالا استفاده شد، در می‌یابیم که کاهش مغناطش در نتیجه‌ی برانگیختگی حرارتی برابر است با:

$$\Delta M = M(0) - M(T) \sim T^{3/2} \quad (9-110)$$

که به قانون بلوخ موسوم است. این نام‌گذاری به افتخار بلوخ که برای اولین بار وجود امواج اسپین را مطرح کرد، صورت گرفته است. نتیجه‌ی فوق با تجربه نیز سازگار است.



شکل ۴۷-۹ برهم‌کنش بین مدهای موج شبکه و موج آکوستیکی. منحنی‌های خط چین مدهای آزاد و منحنی‌های پیوسته نمایانگر مدهای جفت شده هستند.

حال به برهم کنش بین اسپین و امواج اسپین نظر می کنیم. هنگامی که یک میدان خارجی بر یک نمونه فرومغناطیس اعمال گردد، رابطه‌ی پاشندگی (۹-۱۰۲) برای موج اسپین به صورت زیر تغییر می کند.

$$\omega = \gamma B_0 + Aq^2 \quad (9-111)$$

اولین جمله در طرف راست مربوط به میدان خارجی و دومین جمله مربوط به برهم کنش تبادل است. شکل ۹-۴۷. منحنی‌های پاشندگی برای امواج اسپین و امواج کشسان را نشان می دهد. در ناحیه تقاطع، دو مد، قویا جفت می شوند و یکدیگر را دفع می کنند. این شبیه حالت مربوط به امواج شبکه و امواج الکترومغناطیسی است. به چگونگی تغییر مشخصه‌ی مدها در اثر افزایش q توجه کنید. در YIG (ایتریوم - ید - گارنت) فرکانس تقاطع برای $B_0 = 0.3 \text{ Wb/m}^2$ مساوی $\omega = 0.46 \text{ GHz}$ است.

جفت شدگی برای تولید امواج آکوستیکی از طریق تبدیل انرژی مغناطیسی به انرژی آکوستیکی، به کار می رود. این امر کاربردهای احتمالی و جالب تقویت کننده‌های آکوستیکی را مطرح می کند.

خلاصه

القاء مغناطیسی B و میدان مغناطیسی H در یک ماده‌ی مغناطیسی به صورت معادله زیر به هم مربوط‌اند.

$$B = \mu_0 H + \mu_0 M$$

که M بردار مغناطش محیط است. مغناطش M با میدان متناسب است.

$$M = \chi H$$

ثابت χ پذیرفتاری مغناطیسی است. با جای‌گزینی این معادله در رابطه‌ی قبل خواهیم داشت:

$$B = \mu H$$

که تراوایی μ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\mu = \mu_0 (1 + \chi)$$

تراوایی نسبی $\mu_r = \frac{\mu}{\mu_0}$ برابر است با:

$$\mu_r = (1 + \chi)$$

دو عامل در پذیرفتاری سهم هستند: یک سهم دیامغناطیس که از تغییر شکل مدارهای الکترونی توسط میدان مغناطیده‌کننده نتیجه می‌شود و یک سهم پارامغناطیسی که مربوط به صف بندی گشتاورهای مغناطیسی الکترون‌ها (اگر چنین گشتاورهایی موجود باشند) با میدان است.

دیامغناطیس لانژوین

اگر مدارهای الکترونی اطراف اتم‌ها را به صورت حلقه‌های جریان دایره‌ای در نظر بگیریم، در می‌یابیم که میدان مغناطیسی یک پذیرفتاری دیامغناطیسی ایجاد می‌کند.

$$\chi = -\frac{\mu_0 e^2}{6m} (NZr^2)$$

پارامغناطیس لانژوین

با در نظر گرفتن این که اتم‌ها نوعاً یک گشتاور μ دارند، می‌توان نشان داد که صف بندی گشتاورها منجر به یک پذیرفتاری پارامغناطیس کلاسیک می‌شود؛ به طوری که

$$\chi = \frac{N\mu_0\mu^2}{3KT}$$

بررسی کوانتومی نیز به همین نتیجه می‌رسد، به شرط این که $\mu = gJ(J+1)\mu_B$ این فرمول در یون‌های خاکی نادر و عناصر واسطه درست است.

مغناطیس در فلزات

در فلزات، الکترون‌های رسانش یک سهم پارامغناطیسی اسپینی ایجاد می‌کنند.

$$\chi_P = \mu_0\mu_B^2 g(E_F)$$

که مستقل از دما است. الکترون‌های رسانش نیز اثر دیامغناطیسی دارند که مربوط به حرکت سیکلوترونی آن‌ها است. در فلزاتی که از مدل ساده نواری پیروی می‌کند، سهم سیکلوترونی الکترون مساوی یک سوم سهم اسپین آن‌ها است. یون‌های درونی نیز یک اثر دیامغناطیسی دارند که می‌باید به دو سهم قبلی اضافه شود.

فرومغناطیس

یک ماده‌ی فرومغناطیس، ماده‌ای است که در دماهای پایین‌تر از دمای کوری، از خود مغناطش خودبه‌خودی نشان می‌دهند. بالای این دما ماده پارامغناطیس است و از قانون کوری-وایس پیروی می‌کند.

$$\chi = \frac{C}{T - T_f}$$

T_f دمای کوری است.

به دلیل وجود یک میدان مغناطیسی داخلی $H = \lambda M$ ، فاز فرومغناطیسی ظاهر می‌گردد. این میدان از برهم‌کنش تبادلی بین دو قطبی‌های مغناطیسی در ماده ناشی می‌شوند.

علاوه بر فرومغناطیس، ساختارهای مغناطیسی دیگری نیز مشاهده شده است. به عنوان مثال می‌توان از پادفرومغناطیس و فری مغناطیس نام برد. خواص این گونه مواد نیز مربوط به برهم‌کنش تبادلی بین گشتاورهای مغناطیسی است.

فرومغناطیس در بعضی از فلزات مشاهده می‌شود ولی بررسی تئوری آن‌ها مشکل است؛ زیرا الکترون‌های $3d$ فقط به طور جزئی جای گزیده هستند. فرومغناطیس در فلزاتی مشهود است که نوارهای انرژی باریک ولی چگالی ثابت‌های تبادلی بزرگ دارند.

تشدید مغناطیسی

وقتی میدان مغناطیسی B_0 بر ماده‌ای اعمال گردد، گشتاورهای مغناطیسی اتم‌ها حول میدان با فرکانس ω حرکت تقدیمی پیدا می‌کنند؛

$$\omega = \gamma B_0$$

که γ نسبت ژیرومغناطیسی دوقطبی است. اگر سیگنالی با فرکانس $\omega = \omega_0$ از سیستم عبور کند، دوقطبی‌ها از سیگنال، انرژی جذب می‌کنند. این پدیده تشدید پارامغناطیسی الکترون (EPR) نام دارد. آثار واهلش را می‌توان با معرفی زمان‌های واهلش مناسب تعیین کرد. تشدید مغناطیسی هسته‌ای (NMR) مانسته‌ای هسته‌ای EPR است.

تشدید فرومغناطیسی (FMR) مانند EPR است، به جز این که میدان مغناطیسی داخلی، - حالا خیلی قوی است - صریحا به حساب آمده است. این میدان تابعی از چندین نوع برهم‌کنش است. این برهم‌کنش‌ها را می‌توان به کمک FMR مطالعه کرد.

امواج اسپین

امواج اسپین برانگیختگی‌های گروهی در سیستم‌های اسپین هستند. برهم‌کنشی که مسئول این مدها است، برهم‌کنش تبادلی بین گشتاورهای سیستم است. امواج اسپین هم انرژی وهم اندازه حرکت دارند، با افزایش دما، انرژی توسط برانگیختگی‌های امواج اسپین جذب می‌شوند، و مغناطیدگی نیز کاهش می‌یابد.

References

- R. Kubo and T. Nagamiya, editors, 1969, Solid State Physics, New York: McGrawHill
- D. H. Martin, 1967, Magnetism in Solids, Cambridge, Mass: M. I. T. Press
- A. H. Morrish, 1965, Physical Principles of Magnetims, New York: John Wiley
- J. H. van Vleck, 1932, The Theory of Electric and Magnetic Susceptibility, Oxford: Oxford University Press.
- R. M. White, 1970, Quantum Theory of Magnetism, New York: McGrawHill

Ferromagnetism, antiferromagnetism, and ferrimagnetism

- R. M. Bozorth, 1951, Ferromagnetism, New York: Nostrand
- S. Chikazumi, 1964, Physics of Magnetism, New York: John Wiley
- B. Lax and K. J. Button, 1962, Microwave Ferrites and Ferrimagnetism, New York: McGrawHill
- D. H. Martin, op, cit.
- A. H. Morrish, op. cit.
- G. T. Rado and H. Suhl, editors, 1963, Magnetism, New York: Academic Press
- J. S. Smart, 1965, Effective Field Theories of Magnetism, Philadelphia: W. B. Saunders
- J. Smit, editor, 1971, Magnetic Properties of Materials, New York: McGrawHill

Magnetic resonances

- A. Abragam, 1961, Nuclear Magnetism, Oxford: Oxford Uneversity Press.
- W. Low, 1960, "Paramagnetic Resonance in Solids," Solid State Physics, Supplement 2, New York: Academic Press
- B. Lax and K. J. Button, op, cit.
- A. H. Morrish, op. cit.
- G. E. Pake, 1956, :Nuclear Magnetic Resonance, "in Solid State Physics, Volume 2, New York: W. A. Benjamin
- G. E. Pake, 1962, Paramagnetic Resonance, New York: W. A. Benjamin
- R. T. Schumacher, 1970, Introduction to Nuclear Magnetic Resonance, New

York: W. A. Benjamin

- C. P. Slichter, 1963, Principles of Magnetic Resonance, New York: Harper and Row
- M. Sparks, 1964, Ferromagnetic Relaxation Theory, New York: McGrawHill
- A. Yariv, 1966, Quantum Electronics, New York: John Wiley

پرسش‌ها

۱- در متن درس بیان شد که پاسخ دیامغناطیس مربوط به حرکت مداری الکترون‌های اتم را می‌توان بر اساس قانون لنز پیش بینی کرد. این گفته را اثبات کنید.

۲- آیا انتظار دارید ثابت λ در رابطه‌ی (۹-۳۰) که پذیرفتاری پیوند کووالان را توصیف می‌کند، مثبت باشد یا منفی، چرا؟

۳- با توجه به این که عدد کوانتومی اندازه حرکت زاویه‌ای Z برای یک اتم مساوی $\frac{1}{2} = Z$ است، آیا این الزام بدین معنی است که اندازه حرکت زاویه‌ای فقط اسپینی خالص است و بنابراین $g=2$ است؟ جواب خود را به صورت یک مثال نشان دهید.

۴- ممکن است شما بعد از خواندن بخش ۶-۹ متوجه شده باشید که فرمول پذیرفتاری پارامغناطیسی تنها وقتی معتبر است که حالت پایه اتم بررسی شود. ولی ترازهای اتمی دیگر نیز حضور دارند، موارد زیر را توضیح دهید.

الف) چرا در محاسبه‌ی پذیرفتاری اغلب می‌توان این ترازهای بالایی را نادیده گرفت؟

ب) چگونه می‌توان معادله‌ی (۹-۴۲) و یا فرمول اصلی را تغییر داد که اگر دما به اندازه‌ی کافی زیاد شود؛ بعضی از لایه‌های برانگیخته به طور قابل ملاحظه پر شوند.

۵- اگر فرکانس تقدیمی مربوط به برهم کنش اسپین - مدار، 10 GHz باشد، میدان مغناطیسی مؤثری را که در اثر این برهم کنش، بر گشتاور اسپین وارد می‌شود، برآورد نمایید.

۶- با توجه به پرسش‌های ۴ و ۵ دمایی را تخمین بزنید که بالای آن دما، فرمول ساده‌ی (۹-۴۲) برای برهم کنش اسپین - مدار (با قدرتی که در پرسش ۵ داده شده است)، نقض می‌شود.

۷- شرط کافی برای وجود پذیرفتاری پارامغناطیسی بر حسب تعداد الکترون‌ها در اتم (یا یون) را بیان کنید.

۸- پذیرفتاری پارامغناطیسی اسپینی الکترون‌های رسانش با رابطه‌ی (۹-۴۷) بیان می‌شود. مقدار آن برای یک نوار بر چقدر است؟ آیا پاسخ این سوال تعجب آور است؟ توضیح دهید.

۹- نه Mn و نه Cr به خودی خود فرومغناطیس نیستند؛ ولی بعضی از آلیاژهای آن‌ها (با عناصر دیگر) فرومغناطیس اند. توضیح دهید چگونه این امر ممکن است؟ به شکل ۱۷-۹ مراجعه نمایید.

۱۰- تئوری‌های حالت جامد اغلب فرض می‌کنند که هر سیستم اسپین سرانجام در دماهای پایین، فرومغناطیس می‌شود، آیا می‌توانید این فرض را بر مبنای بحث بخش ۸-۹ توجیه کنید؟ با فرض این که برهم کنش الکترواستاتیکی دوقطبی - دوقطبی عامل چنین گذاری است، دمای کوری را تخمین بزنید (چگونه می‌توان این واقعیت را به حساب آورد که حتی در دماهای پایین، تعداد نسبتاً کمی سیستم اسپین در فاز فرومغناطیس مشاهده شده‌اند؟

۱۱- آیا ساختار حوزه‌ها در یک ماده‌ی فرومغناطیسی را می‌توان به کمک پراش پرتوهای ایکس آشکار کرد؟ با پراش نوترون چطور؟

۱۲- معادله‌ی (۸۰-۹) نشان می‌دهد که با افزایش قدرت سیگنال، χ کاهش می‌یابد. این پدیده به نام اشباع موسوم است. منشأ فیزیکی این پدیده را توضیح دهید. راهنمایی: در نظر بگیرید که χ به آهنگ جذب مربوط است. همین‌طور توجه داشته باشید که تصویر کوانتومی EPR از تصویر کلاسیکی آن در توجیه این پدیده مفیدتر است.

۱۳- توضیح دهید چرا برای مشاهده EPR، شرط $1 \ll (\gamma b_0)^2 \tau_1 \tau_2$ لازم است.

۱۴- معادله (۸۱-۹) را ثابت کند.

۱۵- اغلب، شرط وارونی جمعیت در یک میزر با نسبت دادن یک دمای مطلق منفی (!) به سیستم بیان می‌شود. توضیح دهید با توجه به معادله‌ی (۸۳-۹) این امر چگونه می‌تواند معنی داشته باشد. با فرض $\Delta E = 1 \text{ GHz}$ و $\frac{N_p}{N_1} = 2$ دمای سیستم را محاسبه نمایید.

۱۶- برای هسته‌ای که در شکل (۳۹-۹) نشان داده شده است، ضریب هسته‌ای g_n مثبت است یا منفی.

۱۷- با این که نوترون از لحاظ الکتریکی خنثی است ولی گشتاور مغناطیسی دارد. آیا از وجود این گشتاور تعجب نمی‌کنید؟ توضیح دهید.

۱۸- معنی دقیق کلمه‌ی بی دررو در ارتباط با تکنیک سردسازی توسط وامغناطش بی‌دررو چیست؟ چرا به جای اسپین‌های الکترون در دماهای پایین از اسپین‌های هسته استفاده می‌شود.

۱۹- به خاطر تشدید پروتون هیدروژن، تکنیک NMR در شیمی آلی خیلی مفید است. دو تا از

معمول‌ترین عناصری را که در این شاخه از شیمی مطرح هستند نام ببرید و بگویید چرا آن‌ها معمولاً در NMR مفید نیستند.

۲۰- تکنیک دیگر استاندارد برای مشاهده مواد فرومغناطیس استفاده از میکروسکوپ قطبیده است. اگر یک قطعه‌ی نازک از ماده بریده شود به طوریکه سطح مقطع قطعه عمود بر جهت محور ساده باشد، سپس اگر فیلتر قطبیده‌ای بر روی میکروسکوپ قرار دهیم، نیمی از حوزه مغناطیسی روشن و نیمه‌ی دیگر آن تاریک دیده می‌شود. توضیح دهید چرا؟

۲۱- با استفاده از این واقعیت که گرمای ویژه‌ی یک سیستم اسپین در دمای پایین برابر است با $C \sim T^3$ ، یک استنتاج فیزیکی برای بستگی چگالی حالت‌های مگنون، $g(\omega)$ به ω ، در ناحیه‌ی طول موجهای بلند ارائه دهید. نتیجه‌ی به دست آمده‌ی خود را با جواب مسأله ۲۵ مقایسه کنید.

مسائل

۱- درستی معادلات (۳-۹) و (۴-۹) را تحقیق کنید.

۲- رابطه‌ی (۶-۹) را ثابت کنید.

۳- الف) قضیه‌ی لارمور را ثابت کنید. به این معنی که ثابت کنید دوقطبی کلاسیک μ در میدان مغناطیسی B حول میدان با فرکانسی مساوی فرکانس لارمور $\omega_L = \frac{eB}{2m}$ ، حرکت تقدیمی دارد.

ب) برای گشتاور مداری الکترون در میدان $B = 1 \text{ Wb/m}^2$ ، فرکانس لارمور را بر حسب هرتز محاسبه نمایید.

ج) فرکانس حرکت تقدیمی برای یک گشتاور دوقطبی اسپین در همان میدان چه قدر است.

۴- پذیرفتاری دیامغناطیسی مربوط به مغز یون در فلز مس مساوی $10^6 \times 0.2 -$ است. با فرض این که جرم حجمی Cu مساوی 8.93 g/cm^3 و وزن اتمی مس 63.5 است، شعاع متوسط یون Cu را محاسبه نمایید.

۵- الف) پذیرفتاری ژرمانیوم $10^{-5} \times 0.8 -$ است. شعاع مغز یون 0.44 \AA است، درصد سهم پیوند کووالان در پذیرفتاری را تخمین بزنید. جرم حجمی ژرمانیوم 5.38 g/cm^3 و وزن اتمی آن 72.6 است.

ب) اگر میدان مغناطیسی $H = 5 \times 10^4 \text{ amp-m}^{-1}$ بر ژرمانیوم اعمال گردد، مغناطش و طور القاء مغناطیسی در ژرمانیوم را محاسبه نمایید.

۶- سیستمی از اسپین‌ها ($s = \frac{1}{2}$) در یک میدان مغناطیسی $H = 5 \times 10^4 \text{ amp-m}^{-1}$ قرار می‌گیرد، مطلوب است محاسبه‌ی:

الف) - کسری از اسپین‌ها که در دمای اتاق ($T = 300^\circ \text{K}$) موازی با میدان قرار می‌گیرند.

ب) - میانگین مؤلفه گشتاورهای دوقطبی که در این دما در امتداد میدان قرار می‌گیرند.

ج) میدانی که به ازای آن $\mu_z = \frac{1}{2} \mu_B$ است

د) - قسمت الف) و ب) را برای دمای خیلی پایین‌تر از 1°K تکرار کنید.

۷- رابطه‌ی (۹-۴۲) را برای یک مقدار اختیاری Z تحقیق کنید. (این نتیجه در شرایط $\mu_B \ll kT$ استنتاج شده است). میدانی را تخمین بزنید که در پایین آن این نتیجه در دمای اتاق معتبر باشد.

۸- ثابت کنید میانگین گشتاور دوقطبی یک اتم که برهم کنش اسپین - مدار دارد، با رابطه‌ی
$$\mu_{av} = g \left(-\frac{e}{m} \right) J$$
 است که ضریب لانده با رابطه‌ی (۹-۴۵) بیان می‌شود.

۹- مقادیر p که در ستون سوم جدول ۹-۳ آمده است را به دست آورید.

۱۰- مسأله ۹ را برای ستون‌های سوم و چهارم جدول ۹-۴ تکرار کنید.

۱۱- (الف) پذیرفتاری اسپینی الکترون‌های رسانش در دمای این $T = 0^\circ \text{K}$ با معادله‌ی (۹-۴۷) بیان می‌شود. این نتیجه را بر حسب چگالی الکترونی یک نوار انرژی، به شکل استاندارد بیان کنید.

(ب) پذیرفتاری اسپینی را برای پتاسیم به جرم حجمی 0.87 g/cm^3 و جرم اتمی 39.1 محاسبه نمایید.

(ج) پذیرفتاری دیامغناطیسی الکترون‌های رسانش در پتاسیم را محاسبه کنید.

(د) با استفاده از نتایج فوق و جدول ۹-۵، شعاع میانگین یون پتاسیم در حالت فلزی را محاسبه نمایید.

۱۲- آهن ساختار bcc با ثابت شبکه $a = 2.86 \text{ \AA}$ دارد.

(الف) - با استفاده از مقادیر مغناطش اشباع در جدول ۹-۶، نشان دهید که گشتاور دوقطبی یک اتم آهن مساوی $2.22 \mu_B$ است. جرم حجمی آهن 7.92 g/cm^3 و وزن اتمی آن 55.6 است. (برای این منظور می‌توان فرض کرد که الکترون‌های $3d$ کاملاً جای گزیده‌اند)

(ب) ثابت تبدلی وایس λ ، و میدان مولکولی در آهن را حساب کنید.

(ج) ثابت کوری در آهن را محاسبه نمایید.

(د) انرژی تبدلی برای یک برهم کنش دوقطبی با نزدیک‌ترین همسایگانش را تخمین بزنید.

۱۳- مسأله ۱۲ را برای Co (ساختار hcp، $a = 2.51 \text{ \AA}$ ، $c = 4.1 \text{ \AA}$) و Ni (hcp، $a = 2.66 \text{ \AA}$ ، $c = 4.29 \text{ \AA}$) تکرار کنید. جرم حجمی‌های Co و Ni به ترتیب 8.67 و 9.04 g/cm^3 است.

۱۴- (الف) با به کار بردن مدل وایس، با دو ثابت تبادلی λ_1 و λ_2 و یک ماده‌ی فرومغناطیس، فرمول نیل برای پذیرفتاری در دماهای زیاد [معادله‌ی (۹۵-۹)] را نتیجه بگیرید.

(ب) ثابت‌های λ_1 و λ_2 را برای MnF_2 محاسبه نمایید.

(ج) توضیح دهید چرا $\lambda_2 > \lambda_1$ است

۱۵- مراحل‌ی را که منجر به معادله‌ی (۷۲-۹) شده است انجام دهید.

۱۶- (الف) راجع به شکافتگی یون Cr^{3+} در یک میدان الکتریکی استاتیک بحث کنید.

(ب) میدانی را محاسبه نمایید که در آن میدان تشدید الکترونی برای یون‌های Cr^{3+} در فرکانس ۱۰ GHz رخ می‌دهد

۱۷- معادلات بلوخ (۶۶-۹) و (۶۷-۹) را در حضور یک میدان استاتیک B_0 ولی در غیاب سیگنال حل کنید و نشان دهید همان گونه که در شکل (۳۳-۹) نشان داده شده است، بردار مغناطش به طرف مقدار تعادل خود حرکت مارپیچی می‌کند. زاویه‌ی اولیه بین مغناطش و میدان را θ_0 ، و زمان‌های طولی و عرضی را به ترتیب τ_1 و τ_2 و 5×10^{-7} ثانیه بگیرید. منحنی مؤلفه‌های طولی و عرضی مغناطش را بر حسب زمان در بازه‌ی $0 < t < 5 \times 10^{-6}$ رسم کنید.

۱۸- مراحل‌ی را که منجر به معادله‌ی (۷۸-۹) شد، انجام دهید.

۱۹- تشدید مغناطیسی هسته‌ای در آب مربوطه به پروتون‌های هیدروژن است.

(الف) میدان لازم برای تولید NMR در ۶۰ MHz را تعیین کنید.

(ب) با فرض آنکه قدرت سیگنال آنچنان باشد که $(\gamma b_0 \tau_1 \tau_2)^2 = 1$ و $\tau_1 = \tau_2 = 3s$ ، بیشینه توان جذب شده را به دست آورید.

۲۰- مراحل‌ی را که منجر به معادله‌ی (۱۰۰-۹) می‌شود را انجام دهید.

۲۱- بسیاری از دستگاه‌های مغناطیسی میکروموج در کتاب (Lax and Button ۱۹۶۲) بحث شده است، مطالعه‌ی مختصری راجع به این دستگاه‌ها انجام دهید و گزارشی راجع به آن تهیه کنید.

۲۲- در متن درس بیان شد که امواج اسپین مدهایی هستند که برانگیختگی‌های گروهی سیستم

اسپین را توصیف می کنند. همین طور به مانستگی بین امواج اسپین (مگنون‌ها) و امواج شبکه (فونون‌ها) اشاره شد. چه چیزی در مد اسپین برانگیخته، مانسته‌ی مد انیشتین در شبکه است. یعنی مدهای جایگزیده‌ی برانگیخته اسپین چه هستند؟ فرض کنید که این‌ها تنها مدهای برانگیخته‌ی ممکن هستند (کدام نادرست است)، مغناطش و گرمای ویژه اسپین را برای سیستم به صورت تابعی از دما به دست آورید.

۲۳- توضیح دهید چرا امواج اسپین به عنوان مدهای برانگیخته، به خصوص در دماهای پایین، از مدهای اسپین منطقه‌ای مناسب ترند؟

۲۴- عباراتی برای سرعت‌های فاز و گروه امواج اسپین بیان کنید. سرعت گروه در آهن در طول موج $\lambda = 1 \text{ cm}$ را محاسبه نمایید (از نتایج مسأله ۱۲ استفاده کنید).

۲۵- نشان دهید که چگالی حالت‌های مگنون $g(\omega)$ در محدوده‌ی طول موج بلند با رابطه‌ی زیر بیان می شود.

$$g(\omega) = \left(\frac{1}{4} \pi^2 \right) \left(\frac{\hbar}{J s a} \right)^3 \times \omega^{\frac{1}{2}}$$

۲۶- بسیاری از مواد فرومغناطیس، فری مغناطیس و پارامغناطیس مانند اکسیدهای فلزات واسطه ۳d، رسانایی الکتریکی کمی دارند، یعنی نیمه‌رسانا هستند. گرچه در این جا راجع به این مطلب صحبت نکرده‌ایم، ولی این موضوع جالب است و در مرجع زیر مورد بحث قرار گرفته است.

J.P. Souchet, 1971, Crystal Chemistry and Semiconduction. New York, Academic Press.

این کتاب را مطالعه کنید و گزارشی از آن تهیه نمایید.

فصل دهم

ابررسانایی

- | | |
|-----------------------------|------|
| مقدمه | ۱۰-۱ |
| مقاومت صفر | ۱۰-۲ |
| دیامغناطیس کامل، اثر مایسنر | ۱۰-۳ |
| میدان بحرانی | ۱۰-۴ |
| ترمودینامیک گذار ابررسانایی | ۱۰-۵ |
| الکترو دینامیک ابررساناها | ۱۰-۶ |
| تئوری ابررسانایی | ۱۰-۷ |
| تونل زنی و اثر جوزفسون | ۱۰-۸ |
| مباحث گوناگون | ۱۰-۹ |

یکی از جالب‌ترین خواص جامدات در دماهای پایین این است که: در بسیاری از فلزات و آلیاژها، در دماهای پایین‌تر از یک مقدار بحرانی مقاومت الکتریکی کاملاً صفر می‌شود. دمای بحرانی به نوع ماده بستگی دارد. این مقاومت صفر (یا رسانایی بی‌نهایت)، ابررسانایی نام دارد. تلاش دانشمندان برای توجیه این پدیده جالب، کمک شایان توجهی به درک خواص جامدات به خصوص در دماهای پایین می‌کند. ابررسانایی در طراحی آهنرباهای ابررسانا، سویچ‌های کامپیوتر و بسیاری از وسایل تکنیکی دیگر کاربردهای فراوانی دارد. مهندسين امیدوارند بتوانند از ابررسانایی در حوزه‌های ترابری و انتقال انرژی بدون ایجاد آلودگی استفاده نمایند.

ما بحث خود را با خواص الکتریکی ابررساناها آغاز می‌کنیم، سپس به بررسی این خاصیت که ابررساناها شار مغناطیسی را از خود می‌رانند می‌پردازیم. این پدیده اثر مایسنر^۱ نام دارد. پس از آن به تأثیر میدان مغناطیسی بر ابررسانایی می‌پردازیم و نشان می‌دهیم که میدان مغناطیسی ممکن است خواص ابررسانایی را از بین ببرد. بررسی‌های ترمودینامیکی وجود یک گاف در طیف انرژی الکترون‌ها در سطح فرمی را پیشنهاد می‌کند. بحث بعدی ما راجع به تئوری لندن در الکتروپدینامیک ابررساناها است. این تئوری توزیع میدان‌ها و جریان‌ها را در ابررساناها توصیف می‌کند. این تئوری گرچه ماهیتاً نیمه پدیده‌شناسی است ولی در ارائه یک تصویر ساده از بسیاری از پدیده‌های ابررسانایی فوق‌العاده مفید است. به دنبال آن بررسی میکروسکوپی تئوری نیمه رسانایی مربوط به باردین^۲، کوپر^۳ و شریفر^۴ را که به تئوری BCS معروف است ارائه می‌دهیم. این تئوری نشان می‌دهد منشأ فیزیکی نیمه‌رسانایی در اندرکنش بین الکترون‌های رسانش و یون‌های شبکه نهفته است.^۵ سپس در مورد پدیده‌های تونل زنی در نیمه رساناها بحث می‌کنیم که اثر جوزفسون را شامل می‌شود. این پدیده‌ها در زمره‌ی شناخته شده‌ترین پدیده‌هایی است که بر مبنای مفاهیم مکانیک کوانتومی استوار است.

این فصل با نگاهی به موضوعات مختلف مربوط به ابررسانایی خاتمه می‌یابد.

1. Meissner effect

2. Bardeen

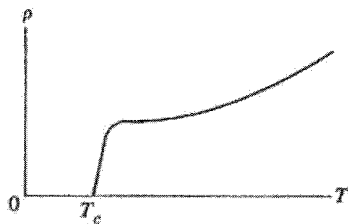
3. Cooper

4. Schrieffer

۵- به منظور قدردانی از تلاش‌های علمی باردین، کوپر و شریفر جایزه‌ی نوبل فیزیک سال ۱۹۷۲ به آن‌ها اهدا شد. باردین قبلاً جایزه‌ی نوبل را به خاطر کار روی ترانزیستور دریافت کرده بود و از معدود افرادی است که دو جایزه نوبل را در یک شاخه علمی دریافت کرده است.

۲-۱۰ مقاومت صفر

ابرسانایی برای اولین بار در سال ۱۹۱۱ توسط کامرلینگ اونس^۱، فیزیک دان هلندی، در حین انجام آزمایش‌هایش بر روی رسانایی الکتریکی فلزات در دماهای پایین مشاهده شد. اونس مشاهده کرد که با سرد کردن یک قطعه‌ی جیوه‌ی خالص تا دمای $4/2^\circ\text{K}$ مقاومت آن به یک باره صفر می‌شود. (شکل ۱-۱۰). بالای این دما، مقاومت کوچک است ولی صفر نیست. مقاومت الکتریکی در پایین تراز این دما آنقدر کوچک است که اساساً صفر به حساب می‌آید. دمایی که در آن این گذار صورت می‌گیرد دمای بحرانی T_c نامیده می‌شود.



شکل ۱-۱۰ مقاومت ویژه ρ بر حسب دمای T برای یک ابررسانا. در دماهای T_c و T مقاومت ویژه صفر می‌شود.

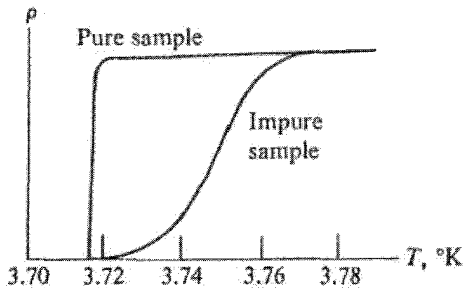
اونس به درستی حدس زد که در پایین دمای بحرانی با یک حالت جدیدی از ماده مواجه است و آن را حالت ابررسانایی نام نهاد. در دماهای بالاتر از دمای بحرانی، ماده همان حالت طبیعی خود را دارد ولی در دماهای پایین‌تر از T_c به حالت ابررسانایی وارد می‌شود که کاملاً متفاوت با حالت طبیعی آن است. این گذار را می‌توان بر گذارهای آشنای دیگر مانند گذار بخار - مایع در نقطه‌ی تبخیر و یا گذار فرومغناطیس در دمای کوری تشبیه کرد.

اونس دریافت که گذار ابررسانایی برگشت‌پذیر است: با گرم کردن نمونه تا دمای T_c ، مقاومت آن به مقدار طبیعی‌اش باز می‌گردد. این امر تأیید می‌کند که ابررسانایی حالت جدیدی از ماده است که نه به تاریخچه‌ی ماده، بلکه به متغیری مانند دما بستگی دارد. با استفاده از مدل الکترون آزاد (فصل ۴) می‌توان به طبیعت ابررسانایی نظر کرد. در بخش ۴-۴ نشان دادیم که مقاومت فلزات را می‌توان به صورت زیر نوشت:

که زمان برخورد است و نشان می‌دهد که در اثر کاهش دما، ρ کاهش می‌یابد، زیرا با کاهش دما، ارتعاشات شبکه شروع به انجماد می‌کنند و پراکندگی الکترون‌ها از بین می‌رود و همان طور که رابطه‌ی فوق نشان می‌دهد این امر باعث طولانی‌تر شدن τ و کوچک‌تر شدن ρ می‌شود. اگر در یک دمای پایین، τ نامتناهی گردد، مقاومت کاملاً از بین می‌رود که این پدیده در ابرسانایی مشاهده می‌گردد. در بخش ۵-۱۰ خواهیم دید که با کاهش دما به پایین‌تر از T_c ، کسری از الکترون‌ها ابرسانا می‌شوند؛ به گونه‌ای که زمان برخورد آن‌ها نامتناهی می‌گردد. این الکترون‌ها هستند که مسئول پدیده‌ی ابرسانایی می‌باشند.

برای اندازه‌گیری مقاومت یک ابرسانا، معمولاً یک جریان الکتریکی در یک نمونه‌ی حلقه شکل برقرار می‌کنند و جریان را به صورت تابعی از زمان اندازه می‌گیرند. (می‌توان با القاء سپس حذف شار مغناطیسی جریان الکتریکی را در حلقه ایجاد کرد). اگر نمونه در حالت طبیعی خود باشد، به دلیل وجود مقاومت حلقه، جریان به سرعت کاهش می‌یابد و صفر می‌شود. ولی اگر مقاومت حلقه صفر باشد، همین که جریان برقرار گردد، برای مدتی نامتناهی بدون کاهش، ادامه خواهد داشت. فیزیک‌دانان آزمایش‌هایی برای تحقیق این امر انجام داده و دریافته‌اند که حتی پس از گذشت چندین سال مقدار جریان ثابت می‌ماند. حدّ بالایی مقاومتی که برای یک حلقه‌ی سربی نیمه‌رسانا اندازه‌گیری شده است 10^{-25} اهم - متر است. این مقدار حدود 10^{17} مرتبه کوچک‌تر از مقاومت همان نمونه در دمای اتاق است و به راحتی می‌توان برای حالت ابرسانایی مقاومت ویژه ρ را صفر گرفت.

گذار ابرسانایی همیشه تیز نیست، ولی اگر نمونه از عناصر فلزی تشکیل شده باشد که خالص و به لحاظ ساختاری کامل باشد، گذار معمولاً تیز است. در گالیوم خالص که تحت این شرایط تهیه شده است، محدوده‌ی گذار کمتر از 10^{-50} K است. در مقابل یک آلیاژ فلزی که تحت کشش قرار گرفته است محدوده‌ی گذار یهن و در حدود $1/10 \text{ K}$ است. این مطلب در شکل ۲-۱۰ نمایش داده شده است.



شکل ۱۰-۲ اثر ناخالصی در گذار نیمه رسانایی قلع

وقوع ابررسانایی

ابررسانایی یک پدیده‌ی نادر نیست. این پدیده در تعداد قابل ملاحظه‌ای از عناصر و آلیاژها رخ می‌دهد. لیست اغلب عناصر و بعضی از آلیاژهای نیمه رسانا به همراه دمای بحرانی آن‌ها در جدول ۱۰-۱ ارائه گردیده است.

دمای بحرانی در محدوده‌ی نسبتاً وسیعی از 0.1 K برای W تا $20/8\text{ K}$ برای Nb Al Ge تغییر می‌کند. هر چه دمای بحرانی یک ابررسانا بالاتر باشد، مفیدتر است، (به ویژه اگر به دمای اتاق برسد). ولی کوشش‌هایی که برای یافتن و یا ساختن ابررساناهایی که دمای بحرانی آن‌ها در حدود دمای اتاق باشد، تاکنون بی نتیجه بوده است.

از آن جا که ابررسانایی در بعضی از مواد و نه در همه‌ی آن‌ها رخ می‌دهد، و از آن جا که T_c در محدوده‌ی وسیعی تغییر می‌کند، می‌باید ملاکی برای تعیین مقدار T_c در مواد مختلف ابررسانا در اختیار داشته باشیم. قواعد زیر توسط ماتیاس^۱ ارائه شده و بر مبنای آن، صدها ماده نیمه رسانا کشف شده است.

جدول ۱-۱۰: دمای گذار ابرساناها

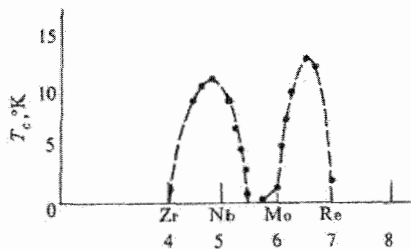
T_c °K	ترکیبات ابرسانا	T_c °K	عناصر ابرسانا
۲۰/۱	$Nb_3Al_{0.8}Ge_{0.2}$	۱/۲	Al
۱۸/۱	Nb_3Sn	۰/۵	Cd
۱۷/۵	Nb_3Al	۱/۱	Ga
۱۱/۵	Nb_3Au	۳/۴	In
۱۶	Nb_3N	۰/۱	Ir
۱۲	MoN	۴/۸	La(α)
۱۶/۵	V_3Ga	۴/۹	La(β)
		۷/۲	Pb
		۴/۲	Hg(α)
		۴/۰	Hg(β)
		۰/۹	Mo
		۹/۳	Nb
		۰/۷	Os
		۱/۷	Rh
		۰/۵	Ru
		۴/۵	Ta
		۴/۵	Tc
		۲/۴	Tl
		۱/۴	Th
		۳/۷	Sn
		۰/۴	Ti
		۰/۰۱	W
		۰/۶	U(α)
		۱/۸	U(β)
		۵/۳	V
		۰/۹	Zn
		۰/۸	Zr

الف) ابرسانایی فقط در موادی رخ می‌دهد که اعداد ظرفیت بر اتم آن‌ها بین ۲ و ۸ باشد. به طور کلی عناصر ابرسانا در ستون‌های داخلی جدول تناوبی قرار دارند. این پدیده تاکنون در فلزات نجیب و فلزات قلیایی مشاهده نشده است.

ب) اعداد ظرفیت ۳، ۴/۷، ۴/۴ (تقریباً فرد) اعداد مرجح هستند، یعنی دماهای بحرانی بالاتری

می‌دهند؛ در حالی که اعداد ۲، ۴ و ۵/۶ (تقریباً زوج) اعداد غیر مرجح هستند. این مطلب در شکل ۳-۱۰ نشان داده شده است. در این شکل اعداد در آلیاژ $ZrNbMoRe$ به طور پیوسته تغییر می‌کنند.

(ج) برای عناصر با حجم اتمی کوچک همراه با جرم اتمی کوچک احتمال ابررسانایی بیشتر است.



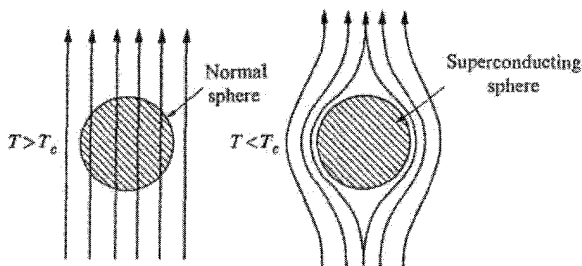
شکل ۳-۱۰ تغییرات دمای بحرانی بر حسب عدد ظرفیت برای آلیاژهای عناصر سری دوم واسطه در جدول تناوبی عناصر

اگرچه قواعد فوق را ماتیاس بر مبنای تجربه توصیف کرد، ممکن است آن‌ها را به تئوری BCS (البته به طور ضعیف) مربوط کرد.

۳-۱۰ دیامغناطیس کامل، اثر مایسنر

در سال ۱۹۳۳ دو فیزیک دان آلمانی، مایسنر^۱ و اوشنفلد^۲ مشاهده کردند که ابررساناها شار مغناطیسی را کاملاً دفع می‌کنند. این پدیده به نام اثر مایسنر نامیده می‌شود. آن‌ها در آزمایش‌هایی که روی استوانه‌های ابررسانا انجام دادند نشان دادند که با کاهش دما به پایین تر از T_c و ابررسانا شدن نمونه، ناگهان شار مغناطیسی کاملاً بیرون رانده می‌شود (شکل ۴-۱۰).

بیرون راندن شار را برای همه‌ی دماهای $T < T_c$ در اطراف نمونه به دست آوردند و نشان دادند این اثر برگشت پذیر است. هنگامی که دما به T_c افزایش یابد ناگهان شار مغناطیسی به درون نمونه نفوذ می‌کند و ماده به فاز طبیعی خود بر می‌گردد.



شکل ۴-۱۰ اثر مایسنر: در دماهای $T < T_c$ ، شار مغناطیسی از ابررسانا رانده می‌شود.

القای مغناطیسی درون ماده با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$B = \mu_0(H + M) = \mu_0(1 + \chi)H \quad (10-1)$$

H شدت میدان مغناطیسی خارجی، M مغناطش ماده و χ پذیرفتاری مغناطیسی است. از آن جا که در حالت ابررسانایی $B=0$ است، نتیجه می‌شود.

$$M = -H \quad (10-2)$$

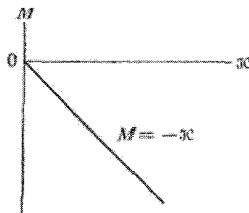
یعنی مغناطش مساوی و در خلاف جهت H است. بنابراین ماده دیامغناطیس و پذیرفتاری آن برابر است با

$$\chi = -1 \quad (10-3)$$

چنین وضعیتی که مغناطش، شدت میدان مغناطیسی خارجی را خنثی کند به عنوان دیامغناطیس کامل موسوم است. شکل ۵-۱۰ مغناطیدگی یک ابررسانا را نشان می‌دهد.

حال این رفتار را با رفتار مغناطیسی یک فلز دیامغناطیس مقایسه می‌کنیم. پذیرفتاری در چنین فلزی $\chi = -10^{-5}$ است که بسیار کوچک‌تر از پذیرفتاری در رابطه‌ی (۱۰-۳) است. نتیجه می‌شود که مکانیزم‌های جدیدی در ابررساناها عمل می‌کنند تا چنین پذیرفتاری مغناطیسی بزرگی حاصل شود.

اثر مایسنر به روشن شدن ابررسانایی کمک مؤثری کرد و اگر این اثر قبل از ۱۹۳۳ کشف می‌شد، درک کامل ابررسانایی نیز زودتر صورت می‌گرفت. اثر مایسنر به ویژه، از آن جهت بسیار جالب است که با قوانین فیزیک کلاسیک متناقض است.



شکل ۱۰-۵ منحنی مغناطیدگی برای یک ابررسانا

۱۰-۴ میدان بحرانی

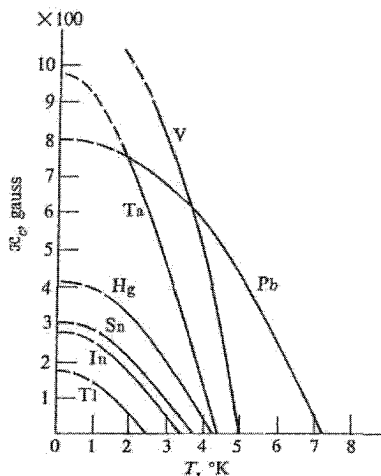
مدت کوتاهی بعد از این که کامرلینک اونس پدیده‌ی ابررسانایی را مشاهده کرد، معلوم شد که اعمال میدان مغناطیسی می‌تواند ابررسانایی را از بین ببرد. اگر یک میدان مغناطیسی قوی که به میدان بحرانی موسوم است، بر یک نمونه‌ی ابررسانا اعمال گردد، نمونه را به حالت طبیعی برمی‌گرداند و حتی در دماهای $T < T_c$ نیز در اثر اعمال میدان بحرانی، مقاومت طبیعی نمونه برمی‌گردد.

میدان بحرانی به دما بستگی دارد. برای یک ماده‌ی مفروض با افزایش دما (از $T=0\text{ K}$ تا $T = T_c$)، میدان بحرانی کاهش می‌یابد. به طور تجربی معلوم شده است که تغییرات میدان بحرانی با رابطه‌ی زیر بیان می‌گردد.

$$H_c(T) = H_c(0) \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 \right] \quad (10-4)$$

این رابطه همان طور که شکل ۱۰-۶ نشان می‌دهد، برای بسیاری از مواد با تقریب خوبی برقرار است. این میدان در $T=0\text{ K}$ مقدار بیشینه‌ی را دارد. در میدان بحرانی صفر می‌شود، زیرا نمونه در حالت طبیعی قرار گرفته و دیگر نیازی به اعمال میدان مغناطیسی نیست. میدان بحرانی معمولاً از مرتبه‌ی چند صد گوس است. جدول ۱۰-۲ میدان بحرانی برای بعضی از ابررساناها را نشان می‌دهد.

میدان بحرانی لازم نیست حتماً یک میدان خارجی باشد. جریان الکتریکی که در یک حلقه‌ی ابررسانا جاری است میدان مغناطیسی ایجاد می‌کند و اگر جریان به اندازه‌ی کافی بزرگ باشد، به طوری که میدان متناظر با آن به مقدار بحرانی برسد، خاصیت ابررسانایی از بین می‌رود. این امر، مقدار شدت جریانی را که می‌تواند از یک ابررسانا بگذرد محدود می‌کند و در واقع این یک محدودیت برای ساخت آهنرباهای قوی ابررسانای می‌باشد.



شکل ۶-۱۰ میدان بحرانی بر حسب دما برای چند ماده‌ی ابررسانا

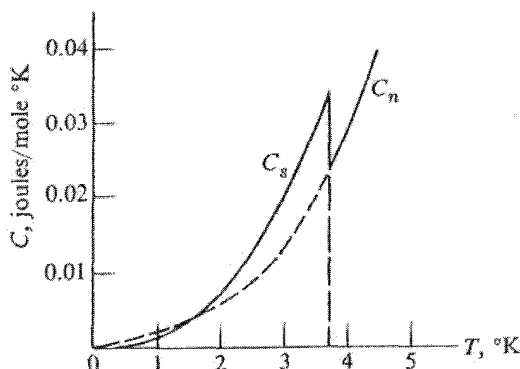
جدول ۲-۱۰: میدان بحرانی برای چند ماده ابررسانا

H_0		عنصر
Gauss	A/m	
۹۹	0.79×10^4	Al
۳۰	۰/۲۴	Cd
۵۱	۰/۴۱	Ga
۸۰۳	۶/۴	Pb
۴۱۳	۲/۳	Hg(α)
۳۴۰	۲/۷	Hg(β)
۸۳۰	۶/۶	Ta
۳۰۶	۲/۴	Sn

۱۰-۵ ترمودینامیک گذار ابررسانایی

هدف از بحث ترمودینامیک در این بخش این است که مشاهدات مختلفی که تاکنون بیان و توصیف کردم به هم دیگر ارتباط دهیم و آن‌ها را متحد کنیم. گرچه این بحث منجر به عبارت جامعی در مورد نیروهای میکروسکوپی مربوطه نمی‌شود، (ترمودینامیک اساساً یک علم

ماکروسکوپی است)، می توان به شواهدی دست یافت که به طبیعت گذار مربوط می شوند. شکل ۷-۱۰ تغییرات گرمای ویژه یک ابررسانا را بر حسب دما ترسیم می کند. پیک منحنی C_V در دمای T_c رخ می دهد که کمی پایین تر از است؛ و این نشان می دهد که با افزایش T (از صفر مطلق) به سمت T_c ، آنتروپی یا بی نظمی افزایش می یابد و گذار به حالت طبیعی قریب الوقوع خواهد شد. بنابراین درجهی نظم در حالت ابررسانایی بیش تر از حالت طبیعی است.



شکل ۷-۱۰ گرمای ویژه مولی قلع بر حسب دما. منحنی خط چین یک برون یابی است که نشان می دهد اگر در دماهای $T < T_c$ نیز حالت طبیعی برقرار بود، گرمای ویژه چگونه می شد.

آزمایش هایی که در دماهای بسیار پایین انجام شده است نشان می دهد، گرمای ویژه الکترون ها در آن ناحیه به طور نمایی کاهش می یابد.^۱

$$C_V = ae^{-b(T/T_c)} \quad (10-5)$$

این رفتار نمایی بیان گر حضور یک گاف انرژی در طیف انرژی الکترون ها است. این گاف که درست در اطراف تراز فرمی قرار می گیرد (شکل ۸-۱۰) و از این که الکترون ها به سادگی برانگیخته شوند، ممانعت می کند. همچنین این گاف منجر به یک گرمای ویژه خیلی کوچک می شود. عرض گاف Δ ، می باید از مرتبه kT_c باشد زیرا وقتی دما به T_c می رسد، ماده به حالت طبیعی برمی گردد و الکترون های آن به سادگی برانگیخته می شوند. بنابراین

$$\Delta \cong kT_c \quad (10-6)$$

۱- برای به دست آوردن گرمای ویژه کل یک ابررسانا، باید گرمای ویژهی شبکه را به این مقدار اضافه کنیم. همان طور که در فصل ۳ بیان شد، در دماهای پایین سهم شبکه از گرمای ویژه متناسب با T^3 است.

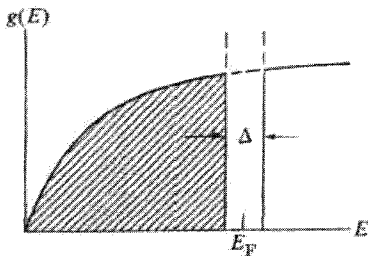
با قرار دادن $T_c = 5^\circ \text{K}$ که مقدار نوعی دمای بحرانی است، خواهیم داشت، $\Delta \approx 10^{-4} \text{ eV}$ این گاف انرژی در مقایسه با گاف‌هایی که قبلاً بررسی کردیم خیلی کوچک است. دلیل این امر این است که ابررسانایی در دماهای خیلی پایین ظاهر می‌شود.

اشاره کردیم که حالت ابررسانایی نسبت به حالت طبیعی درجه‌ی بالاتری از نظم دارد. در واقع می‌توان گذار ابررسانایی را به گذار چگالش^۱ بخار به حالت مایع (حالت با نظم بیشتر) تشبیه کرد. در نتیجه‌ی این گذار، یک کاهشی در انرژی سیستم ایجاد می‌شود. حال انرژی چگالش متناظر با گذار ابررسانایی را محاسبه می‌کنیم.

میدان بحرانی H_c بر حسب T در شکل ۹-۱۰ رسم شده است. این منحنی، صفحه‌ی $H_c - T$ را به دو ناحیه‌ی طبیعی و ابررسانایی تقسیم کرده است. فرض کنید نمونه در دمای $T_1 < T_c$ قرار دارد. اگر نمونه از نقطه‌ی A شروع و مسیر قائم AN را طی کند (یعنی میدان تدریجاً افزایش یابد)، در نقطه‌ی N نمونه حالت طبیعی خود را باز می‌یابد. بنابراین انرژی چگالش برابر است با

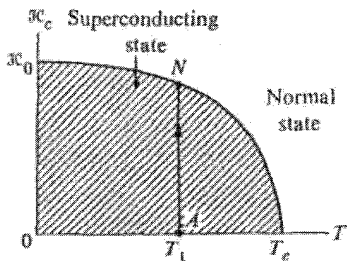
$$\Delta E = E_N - E_A \quad (10-7)$$

انرژی را می‌توان به سادگی محاسبه کرد. از آن جا که در طول مسیر AN ، نمونه همچون یک دیامغناطیس کامل عمل می‌کند، ΔE مساوی انرژی و امغناطیدگی بر واحد حجم است.



شکل ۸-۱۰ چگالی حالت‌ها $g(E)$ بر حسب E برای یک ابررسانا که گاف ابررسانایی در تراز فرمی را نشان می‌دهد. برای نمایش بهتر شکل، گاف انرژی خیلی بزرگ نشان داده شده است. مقدار واقعی Δ/E_F در حدود 10^{-4} است. سطح هاشورزده نشان دهنده ناحیه‌ای است که در $T = 0^\circ \text{K}$ اشغال می‌شود.

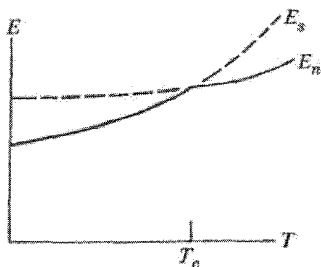
$$\Delta E = E_N - E_A.$$



شکل ۹-۱۰ محاسبه انرژی چگالش ابررسانایی

$$\Delta E = - \int_0^{H_c} B dM = -\mu_0 \int_0^{H_c} H(-dH) = -\frac{1}{2} \mu_0 H_c^2 \quad (10-8)$$

این مقدار برابر است با انرژی لازم برای تبدیل سیستم از حالت ابررسانایی به حالت طبیعی. همین طور این مقدار برابر است با تلفات انرژی سیستم وقتی که از حالت طبیعی به حالت ابررسانایی گذار انجام می‌دهد. از آن جا که یک سیستم همیشه تمایل دارد که کمترین مقدار انرژی ممکن را داشته باشد، نتیجه می‌شود که در دماهای $T < T_c$ حالت ابررسانایی حالت پایدارتری است. (شکل ۱۰-۱۰)



شکل ۱۰-۱۰ انرژی‌های E_s و E_n برای حالت‌های ابررسانایی و طبیعی بر حسب دما

مقدار بیشینه انرژی چگالش برابر است با

$$\Delta E = \frac{1}{2} \mu_0 H_c^2(0) \quad (10-9)$$

این امر در دمای $T=0\text{ K}$ رخ می‌دهد. اگر مقدار نوعی $H_c(0) = 500\text{ G}$ را جایگزین نمایم،

مقدار: $\Delta E = 10^3\text{ J/m}^3$ به دست می‌آید.

حال رابطه‌ی مفیدی بین میدان بحرانی و دمای بحرانی برقرار می‌کنیم. انرژی چگالش را بر حسب میدان محاسبه کردیم، ولی می‌توان آن را بر حسب T_c نیز محاسبه نمود. برای این کار باید توجه داشته باشیم که فقط کسر کوچکی از الکترون‌ها، یعنی آن‌هایی که به فاصله‌ی kT_c از سطح فرمی قرار دارند انرژی بسیار بیش‌تری لازم دارند تا برانگیخته شوند. این انرژی در حدود $5eV$ بر الکترون است در حالی که قبلاً دیدیم انرژی‌های مربوط به ابررسانایی فقط در حدود $10^{-4} eV$ است. بنابراین می‌توان چگالی الکترون‌های مؤثر را تخمین زد.

$$n_{\text{eff}} \cong n \frac{kT_c}{E_F} \quad (10-10)$$

که n چگالی کل الکترون‌های رسانش است. هر کدام از الکترون‌های مؤثر انرژی اضافی در حدود kT_c لازم دارند تا بتوانند برانگیخته شوند و از گاف انرژی عبور کنند. بنابراین

$$\Delta E \cong n_{\text{eff}} kT_c = n \frac{(kT_c)^2}{E_F} \quad (10-11)$$

که همان مقدار انرژی‌ای است که در رابطه‌ی (۹-۱۰) محاسبه شد. با مساوی قرار دادن این دو انرژی در می‌یابیم که:

$$H_c(0) \cong \left(\frac{\gamma n k^2}{\mu_0 E_F} \right)^{1/2} T_c \quad (10-12)$$

یعنی میدان بحرانی متناسب با دمای بحرانی است. هر چه دمای گذار بالاتر باشد، میدان لازم برای از بین بردن ابررسانایی بیش‌تر خواهد بود. با مقایسه اعداد جدول‌های ۱-۱۰ و ۲-۱۰ به سادگی می‌توان اعتبار رابطه‌ی (۱۲-۱۰) را تأیید کرد. اگر T_c معلوم باشد، از معادله‌ی (۱۲-۱۰) برای محاسبه $H_c(0)$ (و بالعکس) می‌توان استفاده کرد. بنابراین اگر مقادیر $E_F = 5eV$ ، $T_c = 5^\circ K$ و $n = 10^{29} \text{cm}^{-3}$ را جای‌گزین نماییم $100 G$ $B_c(0) = \frac{0.1 \text{Wb}}{m}$ به دست می‌آید که سازگاری بسیار خوبی با مقادیر مشاهده شده دارد.

مدل دو شاره‌ای

در سال ۱۹۳۴، به منظور توجیه کامل خواص ترمودینامیکی ابررساناها، گورت^۱ و کاسیمیر^۲ مدل ابررسانایی دو شاره‌ای را معرفی کردند. بر طبق این مدل، در مواد ابررسانا، الکترون‌های رسانش به

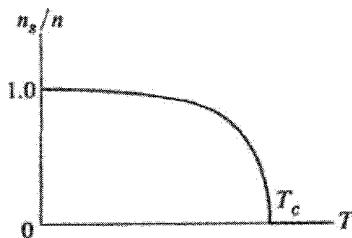
دو دسته تقسیم می‌شوند: ابرالکترون‌ها^۱ و الکترون‌های طبیعی. الکترون‌های طبیعی به همان شیوه‌ی معمول که در فصل ۴ بحث شد رفتار می‌کنند، یعنی همچون ذرات باردار که در محیط وشکسان جریان می‌یابند، رفتار می‌نمایند. ولی ابررساناها خواص عجیبی دارند که باعث خاصیت ابررسانایی ماده می‌شوند. این الکترون‌ها هرگز پراکنده نمی‌شوند، آنتروپی آن‌ها صفر است (نظم کامل) و یک طول همدوسی بسیار بزرگ (در حدود ۱۰۴ Å) دارند. این ناحیه، یک گسترش فضایی است که ابرالکترون‌ها در آن گسترده می‌شوند.

تعداد ابرالکترون‌ها به دما بستگی دارد. گورتر و کاسیمیر دریافتند که اگر چگالی این الکترون‌ها را با فرمول زیر بیان کنند، سازگاری خوبی با تجربه به دست می‌آید.

$$n_c = n \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^4 \right] \quad (10-13)$$

چگالی ابرالکترون‌ها بر حسب دما در شکل ۱۱-۱۰ رسم شده است. در $T = 0 \text{ K}$ همه‌ی الکترون‌ها، ابرالکترون هستند، ولی با افزایش T ، تعداد ابرالکترون‌ها کاهش می‌یابد و سرانجام در $T = T_c$ همه به الکترون طبیعی تبدیل می‌شوند.

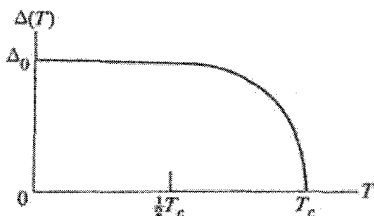
مدل دو شاره‌ای خواص مقاومت صفر ابرالکترون‌ها را توجیه می‌کند. در دمای $T < T_c$ بعضی از ابرالکترون‌ها حضور دارند و از آن جا که رسانایی آن‌ها نامتناهی است (یادآوری می‌کنیم که ابرالکترون‌ها پراکنده نمی‌شوند)، اساساً الکترون‌های طبیعی را اتصال کوتاه می‌کنند؛ که نتیجه‌ی آن یک رسانایی نامتناهی برای کل نمونه است.



شکل ۱۱-۱۰ تعداد نسبی ابرالکترون‌ها، $(\frac{n_s}{n})$ ، بر حسب دما

این مدل را به سادگی می‌توان به مفهوم گاف انرژی که در بالا بحث شد مرتبط کرد. تمام الکترون‌های زیر گاف انرژی اساساً به واسطه‌ی وجود گاف در حالت حرکتی خود منجمد شده‌اند

(شکل ۸-۱۰ را ملاحظه نمایید). این‌ها ابرالکترون هستند. الکترون‌های بالای گاف انرژی، الکترون‌های طبیعی هستند. با افزایش دما، گاف انرژی کاهش می‌یابد و همان‌طور که شکل ۱۰-۱۲ نشان می‌دهد در $T = T_c$ کاملاً از بین می‌رود. بنابراین هم‌چنان که $T \rightarrow T_c$ ، گاف انرژی صفر می‌شود و تمام الکترون‌ها، الکترون طبیعی می‌شوند.^۱



شکل ۱۰-۱۲ کاهش گاف ابررسانایی $\Delta(T)$ بر حسب دما

۶-۱۰ الکترو دینامیک ابررساناها

جالب‌ترین و در عمل مفیدترین پدیده‌های ابررسانایی، خواص الکترو دینامیکی آن‌ها است. تئوری که این پدیده‌ها را توجیه می‌کند توسط برادران لندن^۲ در سال ۱۹۳۵ ارائه شد. این تئوری را اف. لندن در کتابی که در سال ۱۹۵۰ منتشر کرد، گسترش داد. طبیعت این تئوری نیمه پدیده‌شناسی است و از معادلات اضافی استفاده می‌کند که در آن زمان نمی‌شد آن‌ها را از اصول اولیه استنتاج کرد. این معادلات فوق‌العاده مفیدند، زیرا مشاهدات معروف و مهم ابررسانایی را با کمترین عملیات ریاضی توجیه می‌کنند.

از مدل دو شاره‌ای استفاده می‌کنیم. معادله‌ی حرکت یک ابرالکترون در حضور یک میدان الکتریکی به صورت زیر است:

$$m \frac{dV_s}{dt} = -e\varepsilon \quad (10-14)$$

زیرا تنها نیرویی که بر الکترون اثر می‌کند نیروی مربوط به میدان الکتریکی است. نیروی برخورد

۱- کاهش گاف در اثر افزایش دما و صفر شدن گاف در $T=T_c$ قابل انتظار است؛ زیرا گذار ابررسانایی یک اثر جمعی و اشتراکی است. (مطلب مشابه‌ای را که در ارتباط با قطبیدگی دوقطبی در جامدات در بخش ۷-۸ بیان کردیم، ملاحظه نمایید.)

حضور ندارد زیرا این نوع الکترون هیچ برخوردی انجام نمی‌دهد. بنابراین چگالی آبرجریان J_x با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$J_s = n_s(-e)V_s \quad (10-15)$$

که اگر با رابطه‌ی (۱۰-۱۴) ترکیب شود، خواهیم داشت:

$$\dot{J}_s = \frac{n_s e^2}{m} \varepsilon \quad (10-16)$$

که نقطه روی J_s بیان گر مشتق نسبت به زمان است. در حالت پایا جریان ابررسانا مقدار ثابتی است.

بنابراین از رابطه‌ی (۱۰-۱۶) نتیجه می‌شود که $\dot{J}_s = 0$

$$\varepsilon = 0 \quad (10-17)$$

این نتیجه‌ی مهم بیان می‌کند که در حالت پایا، میدان الکتریکی داخل یک ابررسانا صفر می‌شود.

به بیان دیگر افت ولتاژ دوسر یک ابررسانا صفر است. معادله‌ی (۱۰-۱۷) بلافاصله به نتیجه‌ی مهم

دیگری منجر می‌گردد. اگر این رابطه را با معادله‌ی ماکسول ترکیب کنیم، خواهیم داشت:

$$\dot{B} = -\nabla \times \varepsilon \quad (10-18)$$

بنابراین:

$$\dot{B} = 0 \quad (10-19)$$

که نشان می‌دهد در حالت پایا میدان مغناطیسی ثابت است.

ولی معادله‌ی (۱۰-۱۹) با اثر مایسنر مغایرت دارد. این معادله بیان می‌کند که بدون در نظر گرفتن

دما، B ثابت است، در حالی که در بخش ۳-۱۰ دیدیم که وقتی T به سمت T_c افزایش یابد، در

نقطه‌ی گذار، ناگهان شار مغناطیسی به درون نمونه نفوذ می‌کند. بنابراین لازم است در فرمول

بندی فوق تغییراتی ایجاد شود.

برای این کار، مقدار ε را از رابطه‌ی (۱۰-۱۶) در رابطه‌ی (۱۰-۱۸) جای‌گزین می‌کنیم نتیجه

می‌شود:

$$\dot{B} = -\frac{m}{n_s e^2} \nabla \times \dot{J}_s \quad (10-20)$$

همان طور که قبلاً دیدیم، این معادله معتبر نیست زیرا پیش‌بینی می‌کند که $\dot{B} = 0$ است. لندن

برای برطرف کردن این مشکل رابطه‌ی زیر را پیشنهاد کرد.

$$B = -\frac{m}{n_s e^2} \nabla \times J_s \quad (10-21)$$

که به همان شکل رابطه‌ی (۱۰-۲۰) است، به جز این که مشتق زمانی حذف شده است. رابطه‌ی (۱۰-۲۱) که به معادله‌ی لندن موسوم است به نتایجی منجر می‌شود که با تجربه سازگار است. معادله‌ی (۲۱۰-۲۱) رابطه‌ای بین B و J_s است. این کمیت‌ها نیز با معادله‌ی ماکسول مرتبط هستند.

$$\nabla \times B = \mu_0 J_s \quad (10-22)$$

اگر J_s را بین رابطه‌ی (۱۰-۲۱) و (۱۰-۲۲) حذف کنیم [می‌توان از رابطه‌ی (۱۰-۲۲) کرل گرفت، رابطه‌ی (۱۰-۲۱) را در $\nabla \times J_s$ جای‌گزین کرد و از اتحاد $\nabla \times \nabla \times B = \nabla(\nabla \cdot B) - \nabla^2 B = -\nabla^2 B$ استفاده کرد ($\nabla \cdot B = 0$)] خواهیم داشت:

$$\nabla^2 B = \frac{\mu_0 n_s e^2}{m} B \quad (10-23)$$

این معادله‌ی میدان را در یک وضعیت هندسی ساده به کار می‌بریم. فرض می‌کنیم نمونه نیمه نامتناهی است، وجه آن در امتداد صفحه‌ی yz قرار دارد (شکل ۱۳-۱۰)، و میدان در امتداد محور y ها اعمال می‌گردد. از آن جا که کمیت‌ها فقط در امتداد محور x ها تغییر می‌کنند، معادله‌ی (۱۰-۲۳) به شکل زیر تحویل می‌شود.

$$\frac{\partial}{\partial x^2} B_y = \frac{\mu_0 n_s e^2}{m} B_y \quad (10-24)$$

حل این معادله‌ی دیفرانسیل ساده به صورت زیر است.

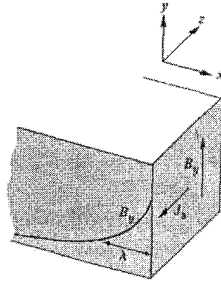
$$B_y(x) = B_y(0)e^{-x/\lambda} \quad (10-25)$$

$$\lambda = (m/\mu_0 n_s e^2)^{1/2} \quad (10-26)$$

معادله‌ی (۱۰-۲۵) نشان می‌دهد که با حرکت از سطح به درون ابررسانا، میدان به طور نمایی کاهش می‌یابد. بنابراین در درون توده‌ی محیط ابررسانا، میدان صفر می‌شود که در سازگاری با اثر مایسنر است. این مطلب تأییدی است بر معادله‌ی لندن (رابطه‌ی ۱۰-۲۱). در واقع در ابتدا این سازگاری برای فرمول بندی اصول معادله‌ی لندن، عامل مهمی بود

باید توجه داشت که معادله‌ی (۱۰-۲۵) پیش بینی می‌کند، میدان تاحدودی به درون نمونه نفوذ

می‌کند. عمق نفوذ λ تقریباً برابر است. بنابراین آن طور که قبلاً گفته شد، شار کاملاً از ابرسانا دفع نمی‌شود بلکه ناحیه‌ی کوچکی در نزدیکی سطح هست که میدان قابل ملاحظه‌ای در آن جا وجود دارد. پارامتر λ به نام عمق نفوذ لندن موسوم است.



شکل ۱۰-۱۳ حل معادله لندن. میدان مغناطیسی درون ابرسانا به طور نمایی کاهش می‌یابد.

این پیش بینی نظری، بعداً با آزمایش تأیید شد که موفقیت بزرگی برای تئوری لندن بود. با جایگزینی مقادیر مناسب برای پارامترها در رابطه‌ی (۱۰-۲۶) خواهیم داشت: $\lambda = 500 \text{ \AA}$ که نزدیک به مقادیر اندازه‌گیری شده است. این مقادیر در جدول ۱۰-۳ آمده‌اند.

موفقیت دیگر تئوری لندن، پیش بینی تغییرات λ بر حسب دما است. اگر n_s را از رابطه‌ی (۱۰-۱۳) در رابطه‌ی (۱۰-۲۶) جایگزین نماییم، خواهیم داشت ۴.

$$\lambda = \lambda(0) \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{-1/2} \quad (10-27)$$

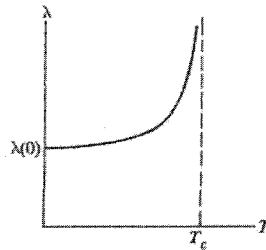
که

$$\lambda(0) = \left(\frac{m}{\mu_0 n e^2}\right) \quad (10-28)$$

(۱۰-۲۷) مطابق رابطه‌ی (۱۰-۲۷)، با افزایش T از صفر مطلق، λ افزایش می‌یابد و همان طور که شکل (۱۰-۱۴) نشان می‌دهد، در $T = T_c$ ، عمق نفوذ λ نامتناهی می‌شود. این نتیجه‌گیری قابل انتظار است زیرا در $T = T_c$ ، ماده به حالت طبیعی برمی‌گردد و میدان به تمام نمونه نفوذ می‌کند، یعنی نمونه عمق نفوذ بی‌نهایت دارد. رابطه‌ی (۱۰-۲۷) که بستگی دمایی را پیش بینی می‌کند به خوبی با تجربه تأیید می‌شود.

جدول ۳-۱۰: عمق‌های نفوذ (مقادیر اندازه‌گیری شده)

عنصر	$\lambda(0)A^0$
Al	۵۰۰
Cd	۱۳۰۰
Hg	۳۸۰-۴۵۰
In	۶۴۰
Nb	۴۷۰
Pb	۳۹۰
Sn	۵۱۰



شکل ۱۴-۱۰ افزایش عمق نفوذ λ بر حسب دما بر طبق تئوری لندن

سومین نتیجه‌گیری از تئوری لندن، حضور یک جریان الکتریکی است که در نزدیکی سطح جریان می‌یابد. اگر B را از رابطه‌ی (۱۰-۲۵) در رابطه‌ی (۱۰-۲۱) جای‌گزین و معادله را بر حسب جریان حل کنیم، خواهیم داشت.

$$J_z = -\left(\frac{n_s e^2}{\mu_0 m}\right)^{\frac{1}{2}} B_y(x) = -J_s(0) e^{-(x/\lambda)} \quad (10-29)$$

J_s جریانی است که در امتداد منفی محور z ها جریان می‌یابد. از آن جا که با حرکت به درون ابررسانا، این جریان به طور نمایی کاهش می‌یابد، اساساً یک جریان سطحی است. بنابراین اثر مایستر با یک جریان سطحی همراه است و این جریان است که ابررسانای داخلی را از میدان مغناطیسی خارجی محافظت می‌نماید و نتیجه امر وجود یک محیط دیامغناطیس کامل می‌شود (به بیان دیگر میدان مغناطیسی مربوط به جریان سطحی کاملاً میدان خارجی داخل محیط را خنثی می‌کند).

بدین ترتیب تصویر بسیار جالبی به دست آوردیم: جریان در یک ابررسانای حامل جریان (ابر جریان) در ناحیه‌ای خیلی نزدیک به سطح محدود می‌شود. مثلاً اگر نمونه به شکل استوانه باشد جریان فقط در امتداد سطح استوانه جریان می‌یابد و ناحیه‌ی داخلی بدون جریان می‌ماند. این پدیده با آن چه در رسانای معمولی اتفاق می‌افتد کاملاً متفاوت است. در رسانای معمولی جریان در کل نمونه یکنواخت است.

۷-۱۰ تئوری ابررسانایی

باردین، کوپر و شریف‌ر در مقاله‌ی کلاسیک خود که در سال ۱۹۵۷^۱ چاپ شد، تئوری نوین ابررسانایی را معرفی کردند. تئوری RCS مورد قبول جامعه‌ی علمی جهان قرار گرفته است؛ زیرا قادر است تمام پدیده‌های مشاهده شده مربوط به ابررسانایی را توجیه نماید. این تئوری از اصول اولیه آغاز می‌کند و با بررسی کاملاً کوانتومی ادامه می‌دهد و آثار مشاهده شده مختلف مانند مقاومت صفر، اثر مایسنر و غیره را توضیح می‌دهد. از آن جا که این تئوری کاملاً بر مبنای مفاهیم کوانتومی استوار است، بدون استفاده از مفاهیم پیشرفته‌ی کوانتومی و تکنیک‌های ریاضی نمی‌توان به طور کامل راجع به آن بحث کرد. بنابراین برای سادگی، در این جا یک توصیف کیفی مختصر و مفهومی از تئوری BCS را ارائه می‌دهیم. فلزی را در نظر بگیرید که الکترون‌های رسانش آن در درون کره‌ی فرمی قرار گرفته‌اند. فرض کنید دو الکترون درست زیر کره‌ی فرمی قرار دارند (شکل ۱۵-۱۰) و در اثر برهم کنش کولنی یکدیگر را دفع می‌کنند. ولی به دلیل وجود الکترون‌های دیگر در کره‌ی فرمی و حفاظتی که ایجاد می‌نمایند مقدار این نیروی کولنی کاهش می‌یابد (به بحث مربوط به کره‌ی فرمی در بخش ۳-۴ مراجعه نمایید). با در نظر گرفتن این حفاظت، برهم کنش بین این دو الکترون بسیار ناچیز می‌شود ولی هنوز هم یک نیروی دافعه‌ی اندکی باقی می‌ماند.

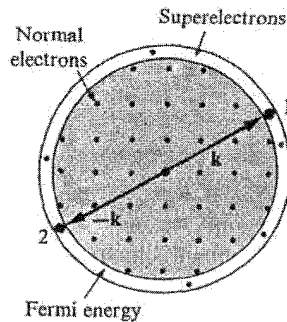
ولی ممکن است یک چیز جدیدی اتفاق افتد. فرض کنید بنا بر دلایلی دو الکترون همدیگر را جذب نمایند. کوپر نشان داد که در این صورت این دو الکترون یک حالت نواری تشکیل می‌دهند (به شرط این که خیلی نزدیک به سطح فرمی باشند). این امر بسیار مهم است زیرا در یک حالت

1. Phys. Rev, 106, 162, (1957)

تئوری مشابه‌ای به فاصله‌ی کمی بعد از چاپ مقاله‌ی فوق ارائه گردید:

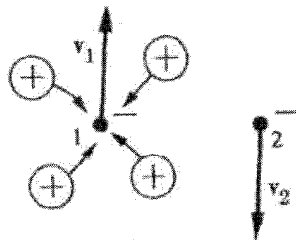
N. Bogolubov, Nuovo Cimento 7: 6, 794(1958)

نواری، الکترون‌ها جفت می‌شوند و سیستم منفردی را تشکیل می‌دهند و حرکتشان مرتبط با یکدیگر می‌شود. فقط اگر مقدار انرژی‌ای مساوی با انرژی پیوندی به سیستم اعمال گردد این جفت شدگی شکسته می‌شود. این دو الکترون، زوج‌های کوپر نامیده می‌شوند. وقتی الکترون‌هایی که تشکیل زوج می‌دهند گشتاورها و اسپین‌های مخالف داشته باشند؛ ($\uparrow k$ و $\downarrow -k$) انرژی پیوندی بیشترین مقدار را دارد. بنابراین نتیجه می‌شود که اگر هرگونه جاذبه‌ای بین آن‌ها وجود داشته باشد، در آن صورت تمام الکترون‌های در همسایگی سطح فرمی، در یک سیستمی از زوج‌های کوپر چگالیده می‌شوند. در واقع این زوج‌ها همان ابرالکترون‌هایی هستند که در بخش ۵-۱۰ و ۶-۱۰ راجع به آن‌ها بحث شد و انرژی پیوندی متناظر با گاف انرژی در بخش ۵-۱۰ معرفی گردید.



شکل ۱۰-۱۵ برهم کنش بین دو الکترون ۱ و ۲ نزدیک سطح فرمی در یک فلز

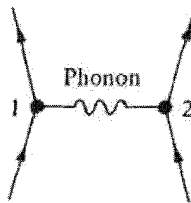
راجع به آثار و نتایج جاذبه الکترون - الکترون صحبت کردیم ولی چگونه در ابتدا این جاذبه به وجود می‌آید؟ در مواد ابررسانا این جاذبه از برهم کنش الکترون - شبکه نتیجه می‌شود (شکل ۱۰-۱۶).



شکل ۱۰-۱۶ حفاظت الکترون شماره ۱ توسط یون‌های مثبت شبکه. دایره‌های توپر دو الکترون مورد مطالعه را نشان می‌دهند.

فرض کنید دو الکترون ۱ و ۲ در مقابل یکدیگر قرار می‌گیرند. از آن جا که الکترون ۱ بار منفی دارد یون‌های مثبت را به طرف خود می‌کشد (برهم کنش الکترون - شبکه) بنابراین الکترون ۲، الکترون ۱ را بدون حفاظ نمی‌بیند بلکه پرده‌ای از یون‌ها این الکترون را محافظت می‌نمایند. این حفاظت به اندازه‌ی زیادی بار مؤثر الکترون را کاهش می‌دهد. در واقع یون‌ها یک بار مثبت خالص ایجاد می‌کنند. اگر این امر اتفاق افتد، الکترون ۲ به طرف الکترون ۱ جذب می‌شود، و منجر به یک برهم کنش خالص جاذبه می‌شود که برای شکل‌گیری زوج‌های کوپر لازم است. رفتار یون‌ها را نیز می‌توان به طور کیفی درک کرد. از آن جا که الکترون ۱ نزدیک سطح فرمی است سرعت آن بیش تر است. یون‌ها به دلیل جرم سنگینشان خیلی کند عکس‌العمل نشان می‌دهند. در مدت زمانی که طول می‌کشد تا یون‌ها به الکترون ۱ کاملاً پاسخ دهند، الکترون ۱ ناحیه‌ی اولیه‌ی خود را (لااقل به طور جزئی) ترک می‌کند که این نتیجه‌ی معکوس می‌دهد. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که وقتی الکترون ۱ و ۲ در دو جهت مخالف حرکت می‌کنند این فرآیند بیش‌ترین تأثیر را دارد.

به بیان دیگر می‌توان گفت که هر الکترون توسط یک ابرفونونی احاطه شده است. مثلاً الکترون ۱ فونون‌هایی گسیل می‌دارد که همان طور که شکل ۱۷-۱۰ نشان می‌دهد، سریعاً توسط الکترون ۲ جذب می‌شوند.^۱ از آن جا که فونون دوبار منظور می‌شود، یک بار در گسیل و یک بار در جذب؛ نیروی جاذبه‌ی بین الکترون‌ها یک فرآیند مرتبه‌ی دوم است.

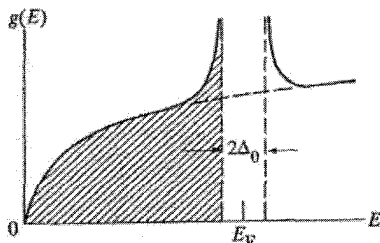


شکل ۱۷-۱۰ تبادل فونون که عامل برهم کنش جاذبه بین الکترون ۱ و ۲ است.

در نتیجه‌ی این پیوند، بین الکترون ۱ و الکترون ۲، یک گاف انرژی در طیف الکترون ظاهر

۱- وضعیتی را در نظر بگیرید که شخصی توپ‌های سنگینی را به سمت شخص دیگری پرتاب و او آن‌ها را دریافت می‌کند. به سادگی ملاحظه می‌شود که چنین فرآیندی منجر به یک نیروی دافعه بین این دو شخص می‌شود. اولین شخص وقتی توپ‌ها را پرت می‌کند به سمت عقب پس زده می‌شود و شخص دوم نیز وقتی توپ‌ها را دریافت می‌کند به همین اندازه پس زده می‌شود. ولی اگر این دو شخص بالن‌های محتوی هلیوم را مبادله کنند، نیروی جاذبه بین آن‌ها ایجاد خواهد شد.

می‌شود. این گاف (همان طور که در شکل ۱۸-۱۰ نشان داده شده است) تراز انرژی فرمی را کمی جابه‌جا می‌کند. چگالی حالت‌ها برای یک ابررسانا در شکل ۱۸-۱۰ رسم شده است.



شکل ۱۸-۱۰ چگالی حالت‌های $g(E)$ بر حسب E برای یک ابررسانا، گاف انرژی در شکل نشان داده شده است. ناحیه‌ی هاشور زده در دمای $T = 0^\circ \text{K}$ کاملاً اشغال شده است

حالت‌های مربوط به محدوده‌ی انرژی $(E_F - \frac{1}{2}\Delta_0, E_F + \frac{1}{2}\Delta_0)$ حالت‌های ممنوع هستند. این حالت‌ها هم به پایین و هم به بالا کشیده می‌شوند و نتیجه‌ی آن ایجاد پیک در چگالی حالت‌ها درست در پایین و بالای گاف انرژی می‌شود. در نواحی دور از انرژی فرمی، چگالی حالت‌ها برای ابررسانا شبیه چگالی حالت‌های یک فلز عادی است. تئوری نشان می‌دهد که در دمای صفر، گاف انرژی با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$\Delta_0 = 4\hbar\omega_D e^{-(\gamma/g(E_F)V)} \quad (10-30)$$

که ω_D فرکانس دبی، $g(E_F)$ چگالی حالت‌ها برای فلزات معمولی در تراز فرمی، و V قدرت برهم کنش الکترون - شبکه است. فرکانس دبی در رابطه‌ی (۱۰-۳۰) به خاطر تبادل فونون بین الکترون‌های زوج کوپر ظاهر شده است. از این عبارت نتایج جالبی به دست می‌آید. الف) به بیان تقریبی $\Delta_0 \approx \hbar\omega_D$ ، انرژی یک فونون نوعی است. زیرا این مقدار از نظر مرتبه‌ی بزرگی برابر است با:

$$\hbar\omega_D \approx 10^{-34} \times 10^{+13} = 10^{-21} \text{ Joule} \approx 10^{-2} \text{ eV}$$

اگر عامل نمایی رابطه‌ی (۱۰-۳۰) را نیز منظور کنیم، Δ_0 به حدود 10^{-4} eV کاهش می‌یابد که این امر با مشاهدات تجربی سازگاری دارد.

ب) از آن جا که $\omega_D \approx M^{-\frac{1}{2}}$ است، بنابراین با افزایش M ، گاف انرژی و دمای بحرانی T_C کاهش می‌یابند.

ج) با افزایش برهم کنش الکترون - شبکه (V)، گاف انرژی و همچنین T_c افزایش می‌یابد. به بیان دیگر هر چه برهم کنش V قوی‌تر باشد، برای ابررسانایی مطلوب‌تر است. زیرا یون‌ها با شدت بیشتر به طرف الکترون‌ها جذب می‌شوند. این نتیجه عجیب به نظر می‌رسد؛ زیرا از طرف دیگر V مسئول مقاومت در حالت طبیعی ماده نیز هست. به طوری که هر چه V بزرگ‌تر باشد، مقاومت بیش‌تر است. بدین ترتیب به نظر می‌رسد با یک پارادوکس مواجه هستیم؛ رساناهای طبیعی ضعیف، ابررساناهای خوبی می‌شوند در حالی که رساناهای طبیعی خوب، ابررساناهای ضعیفی می‌شوند. این مطلب با تجربه سازگار است: مثلاً گروه اول (رساناهای طبیعی ضعیف) شامل Pb و Nb است که به ابررساناهای خوبی تبدیل می‌شوند و گروه دوم (رساناهای طبیعی خوب) شامل فلزات نجیب و قلیایی است که حتی در دماهای بسیار پایین پدیده‌ی ابررسانایی از خود نشان نمی‌دهند.

تئوری BCS نشان می‌دهد که دمای بحرانی با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$\Delta_0 = 3/5 k T_c \quad (10-31)$$

این رابطه را می‌توان به طور تجربی امتحان کرد، زیرا Δ_0 و T_c را می‌توان به طور مستقل اندازه‌گیری کرد. مشاهدات تجربی اعتبار رابطه‌ی فوق را با تقریب خوبی تأیید می‌کنند. مقدار اندازه‌گیری شده Δ_0 نوعاً در حدود $4k_B T_c$ است (جدول ۴-۱۰ را ملاحظه نمایید). همان‌طور که در مورد شکل ۱۱-۱۰ بیان شد، گاف انرژی با دما افزایش می‌یابد. این رفتار نیز از تئوری BCS استنتاج می‌شود و سازگاری آن با تجربه خوب است.^۱

گاف انرژی را می‌توان به طور تجربی با هر یک از روش‌های زیر تعیین کرد. یکی از این روش‌ها، جذب فروسرخ است. اگر در دمای خیلی پایین، باریکه‌ای از نور فروسرخ به یک ابررسانا بتابد، فقط در صورتی که فرکانس تابش آنقدر زیاد باشد که یک زوج کوپر از گاف انرژی برانگیخته شود، تابش فروسرخ جذب می‌شود.^۲ یعنی؛

$$\hbar\omega \geq 2\Delta_0 \quad (10-32)$$

بنابراین از روی فرکانسی که جذب از آن فرکانس شروع می‌شود، می‌توان گاف را تعیین کرد. از

۱- بر طبق تئوری BCS، تغییر گاف بر حسب دما با رابطه‌ی $\frac{\Delta(T)}{\Delta_0} = \tan \left[\frac{T_c \Delta(T)}{T \Delta_0} \right]$ بیان می‌شود.

۲- کمبندی انرژی لازم برای برانگیختن یک زوج کوپر، $2\Delta_0$ دو برابر گاف است. غیرممکن است که فقط یک عضو از یک زوج کوپر برانگیخته شود، زیرا زوج به صورت یک واحد کامل به وجود می‌آید. اگر به هر دلیل زوج کوپر شکسته شود، در آن صورت دو الکترون معمولی خواهیم داشت. یعنی هر دو الکترون‌ها به طور همزمان از گاف برانگیخته می‌شوند.

آن جا که $10^{-4} \text{ eV} \approx \Delta_0$ است، خطوط فرکانس جذب در ناحیه‌ی فروسرخ قرار می‌گیرند. (یادآوری: تئوری BCS خاصیت مقاومت صفر را به صورت زیر توضیح می‌دهد: یک زوج کوپر وقتی حرکت سوقی دارد فقط در صورتی پراکنده می‌شود که در اثر مکانیزم برخورد مقاداری انرژی که حداقل مساوی با $2\Delta_0$ است به زوج کوپر بدهد. ولی در دماهای پایین فونون‌ها نمی‌توانند این مقدار انرژی را تأمین کنند؛ زیرا فقط فونون‌های با انرژی خیلی کم برانگیخته می‌شوند. بنابراین زوج کوپر به حرکت سوقی خود به طور نامحدود ادامه می‌دهد.)

جدول ۱۰-۴: $(\frac{\Delta_0}{kT_c})$ نسبت گاف انرژی اندازه‌گیری شده به kT_c

عنصر	$(\frac{\Delta_0}{kT_c})$
In	۴/۱
Sn	۳/۶
Hg	۴/۶
V	۳/۴
Pb	۴/۱

۸-۱۰ تونل زنی و اثر جوزفسون

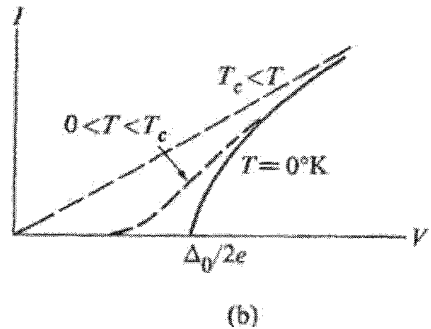
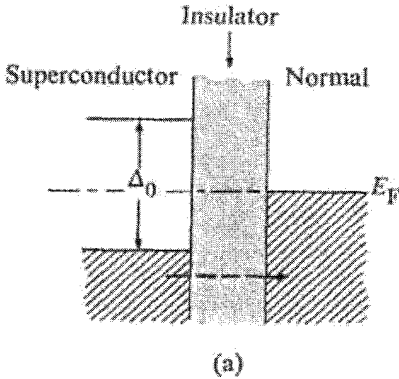
در یک پیوند نازک که شامل ابررسانا هست، ممکن است تونل زنی در امتداد پیوند صورت گیرد و از جریان تونلی می‌توان برای مطالعه خواص فیزیکی ابررسانا استفاده کرد. شکل ۱۹-۱۰ (الف) چنین پیوندی را نشان می‌دهد که در آن دو قطعه‌ی فلز، به ترتیب در حالت‌های ابررسانایی و طبیعی، توسط فیلم عایق نازکی به ضخامت حدود 50 \AA به یکدیگر متصل شده‌اند. مادامی که جریان الکترون‌ها در امتداد پیوند برقرار می‌شود، این فیلم به عنوان یک سد پتانسیل عمل می‌کند. بر طبق قوانین مکانیک کوانتومی الکترون‌ها می‌توانند از این سد پتانسیل نازک تونل بزنند.

اگر یک ولتاژ کوچک V به دو سر پیوند اعمال گردد (جهت میدان را به سمت چپ بگیرد)، نوار انرژی طرف چپ به اندازه‌ی eV افزایش می‌یابد، ولی هنوز الکترون‌ها نمی‌توانند به سمت راست جریان یابند زیرا حالت‌هایی که به طور افقی در امتداد پیوند قرار دارند اشغال هستند. ولی اگر ولتاژ اضافه شود به طوری که نوار انرژی ابررسانا به اندازه‌ی $\frac{\Delta_0}{\varphi}$ افزایش یابد؛ حالا حالت‌های

انرژی افقی مربوطه خالی هستند و جریان برقرار می‌گردد. شکل ۱۹-۱۰ (ب) که منحنی مشخصه‌ی ولتاژ - جریان را نشان می‌دهد، این نتیجه را بیان می‌کند. ولتاژی که در آن جریان شروع می‌شود به صورت زیر است.

$$\frac{\Delta_0}{2} = eV \quad (10-33)$$

و از این رابطه، گاف ابررسانایی را می‌توان تعیین کرد.



شکل ۱۹-۱۰ تونل زنی در پیوند ابررسانا - فلز معمولی (الف) اصل طرد از تونل زنی (پیکان خط چین) ممانعت می‌کند. توجه کنید که تراز فرمی E_F در امتداد سیستم یکسان است و از وسط ابررسانا می‌گذرد. (ب) جریان I بر حسب ولتاژ V در پیوند.

تونل زنی فوق به نام تونل زنی هنجار یا تک الکترون^۱ موسوم است؛ زیرا تک الکترون‌ها به طرف راست تونل می‌زنند. نوع دیگر تونل زنی که شامل زوج‌های کوپر هم می‌شود، توجه زیادی به خود معطوف داشته است و عامل اثر جوزفسون می‌باشد.^۲ اصل اساسی در اینجا این است که اگر فیلم عایق خیلی نازک (در حدود 10 \AA) باشد، زوج‌ها به سرعت از عرض پیوند تونل نمی‌زنند، ولی تابع موج کوانتومی در دو طرف پیوند شدیداً با یکدیگر مرتبط اند. در واقع همان طور که شکل ۲۰-۱۰ نشان می‌دهد، تأثیر فیلم عایق این است که یک اختلاف فاز ϕ_0 بین توابع موج در

1. Normal or Single - electron tunneling

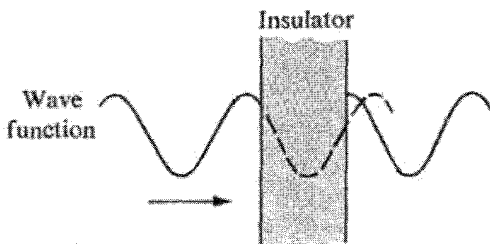
۲- به خاطر پیش بینی این اثر، جوزفسون جایزه نوبل فیزیک سال ۱۹۷۳ را دریافت کرد. (ایور گیاور (Ivor Giaever) و لئواساکی (Leo Esaki) نیز به ترتیب به خاطر کاربر روی تونل زنی هنجار در ابررساناها بحث فوق و دیود تونل (بخش ۷-۵) در جایزه نوبل با جوزفسون سهیم بودند.

طرفین پیوند ایجاد شود. چگالی جریان در امتداد پیوند بر حسب این اختلاف فاز با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود. (به کتاب فاینمن ۱۹۶۳ مراجعه نمایید).

$$J = J_1 \sin \phi_0 \quad (10-34)$$

که J_1 اندازه‌ای از احتمال گذار از عرض پیوند است.

در غیاب هرگونه اختلاف پتانسیل در دو سر پیوند، مقدار فاز ϕ_0 آن چنان تعیین می‌شود که معادله‌ی (۱۰-۳۴) برقرار گردد.



شکل ۲۰-۱۰ تابع موج یک الکترون در پیوند دو ابررسانا. به جابجایی فاز در تابع موج توجه کنید.

حال فرض می‌کنیم که یک پتانسیل استاتیک V_0 در دو سر پیوند برقرار گردد. از قوانین مکانیک کوانتومی یادآوری می‌کنیم که فاز تابع موج در مکانیک کوانتومی با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود:

$$\Delta \phi = \frac{Et}{\hbar} \quad (10-35)$$

که E انرژی کل سیستم است. رابطه‌ی فوق را برای محاسبه‌ی اختلاف فاز اضافه‌ای که زوج کوپر در اثر تونل زدن از پیوند به دست می‌آورند به کار می‌بریم. در این حالت $E = (2e)V_0$ است. ضریب ۲ به این دلیل داده شده است که سیستم شامل یک زوج الکترون است. بنابراین

$$\Delta \phi = \frac{2eV_0 t}{\hbar} \quad (10-36)$$

حال می‌توان رابطه‌ی (۱۰-۳۴) را به شکل جدیدی نوشت:

$$J = J_1 \sin(\phi_0 + \Delta \phi) \quad (10-37)$$

$$= J_1 \sin \left(\phi_0 + \frac{2eV_0}{\hbar} t \right)$$

که نشان دهنده‌ی یک جریان متناوب است. این نتیجه از این نظر جالب است که یک پتانسیل استاتیک به یک جریان ac منجر می‌شود که فرکانس آن را به سادگی می‌توان با تغییر V_0 تنظیم کرد.

$$\omega = \frac{2eV_0}{\hbar} \quad (10-38)$$

مقدار عددی فرکانس برابر است با:

$$\nu = 484V_0 \text{ GHz}$$

که V_0 بر حسب میلی ولت است. از آن جا که V_0 معمولاً از مرتبه‌ی چندین میلی ولت است، فرکانس جوزفسون در ناحیه‌ی میکروموج قرار می‌گیرد. جریان تونلی (رابطه‌ی ۱۰-۳۷) به فاصله‌ی کوتاهی پس از پیش بینی تئوری جوزفسون (سال ۱۹۶۲) مشاهده و اندازه‌گیری شد. یکی از روش‌های مشاهده، شامل اندازه‌گیری گسیل تابش میکروموج از پیوند است. سازگاری بین تئوری و تجربه بسیار خوب است.

اثر جوزفسون کاربردهای بسیاری دارد. مهمترین کاربرد آن، استفاده از این اثر برای تعیین مجدد ثابت‌های بنیادی فیزیک است. فرکانس در رابطه‌ی (۱۰-۳۸) شامل $\frac{2e}{\hbar}$ است که در آن هم بار الکترون و هم ثابت پلانک هست. این نسبت با دقت ۶ppm اندازه‌گیری شده است.

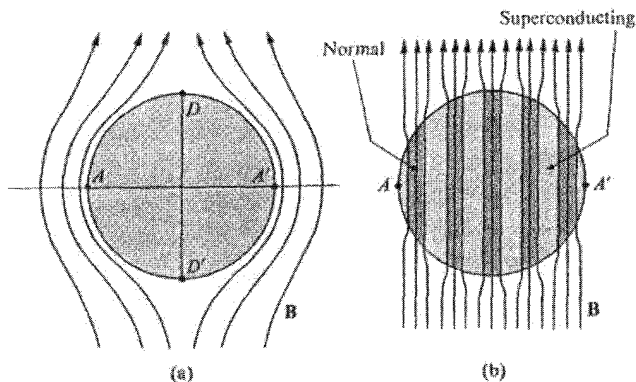
۱۰-۹ مباحث گوناگون

حال نگاهی به مباحث مهم دیگری که مرتبط با ابررسانایی است می‌پردازیم.

حالت میانی

در بحث میدان بحرانی (بخش ۴-۱۰) گفتیم که شار مغناطیسی از ابررسانا دفع می‌گردد تا این که میدان مغناطیسی به H_c برسد؛ در این میدان، نمونه‌ی ابررسانا یک گذار ناپیوسته به حالت طبیعی خود انجام می‌دهد. در واقع این گذار فقط برای نمونه‌هایی با شکل ساده‌ی هندسی و جهت‌های خاص میدان، (مثلاً استوانه‌ای که محورش در امتداد میدان باشد) ناپیوسته است. حالتی را در نظر می‌گیریم که محور استوانه عمود بر میدان باشد. شکل (۲-۱۰) توزیع میدان در نزدیکی استوانه را نشان می‌دهد. میدان در نقاطی که در امتداد AA' است، از میدان در نقاطی که در امتداد DD' است قوی‌تر می‌باشد. زیرا خطوط میدان در امتداد AA' متراکم‌تر است. بنابراین وقتی شدت میدان

افزایش می‌یابد، قبل از این که در امتداد DD' به مقدار بحرانی برسد در امتداد AA' به مقدار بحرانی خود می‌رسد، بنابراین در میدان $H = \frac{1}{2}H_c$ طرفین استوانه به حالت طبیعی برمی‌گردند. با افزایش بیش‌تر شدت میدان، همان‌طور که در شکل ۲۱-۱۰ نشان داده شده است، نمو به دو قسمت متناوباً طبیعی و ابررسانا که به موازات میدان هستند، تقسیم می‌شود. در این حالت گفته می‌شود که نمونه در حالت میانی است. هنگامی که شدت میدان باز هم افزایش یابد نواحی طبیعی گسترش می‌یابند تا این که در $H = H_c$ تمام نمونه کاملاً به حالت طبیعی می‌رسد.



شکل ۲۱-۱۰ حالت میانی در یک استوانه که محور آن عمود بر میدان است. (الف) وضعیت برای $H = \frac{1}{2}H_c$. (ب) وضعیت برای $\frac{1}{2}H_c < H < H_c$ که حالت میانی نشان داده شده است.

به دلیل این که نمونه به ورقه‌های نازک تقسیم می‌شود توزیع میدان به گونه‌ای می‌شود که منجر به کاهش انرژی و امغناطیدگی ناحیه‌ی ابر رسانایی می‌گردد؛ یعنی اساساً همه‌ی شار از ناحیه‌ی طبیعی نمونه می‌گذرد. با توجه به این واقعیت که یک انرژی سطحی مربوط به دیوارهای مابین نواحی ابر رسانا و طبیعی وجود دارد، تعداد ورقه‌های نمونه متناهی است.

میدان بحرانی در یک نمونه‌ی کوچک

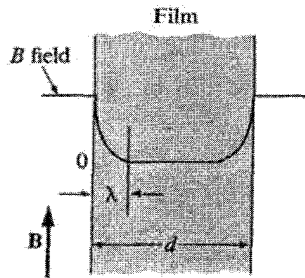
اگر نمونه کوچک باشد، میدان بحرانی به اندازه‌ی نمونه نیز بستگی دارد. این مطلب را با برآورد میدان در یک فیلم نازک نشان خواهیم داد. توزیع میدان در چنین نمونه‌ای در شکل ۲۲-۱۰ رسم شده است. از بخش ۵-۱۰ یادآوری می‌کنیم که انرژی چگالش بر واحد حجم متناسب با H_c^2 است. ولی از آن جا که به واسطه‌ی نفوذ شار، عرض ناحیه‌ی و امغناطیده به جای d ، برابر

$(d - 2\lambda)$ است (d ضخامت فیلم است)، نتیجه می شود:

که H'_c میدان بحرانی برای فیلم نازک و H_c میدان بحرانی برای نمونه ی کپهای است (از آثار نفوذ میدان می توان چشم پوشی کرد). بنابراین:

$$H'_c \cong \left(\frac{1}{1 - (2\lambda/d)} \right)^{1/2} H_c \quad (10-39)$$

H'_c از H_c بزرگ تر است، اگر d کوچک باشد، H'_c ممکن است با یک ضریب ۱۰ از H_c بزرگ تر باشد. این خاصیت کاربردهای بسیاری در قطعات سویچینگ دارد که از فیلم های نازک ابر رسانا استفاده می شود.

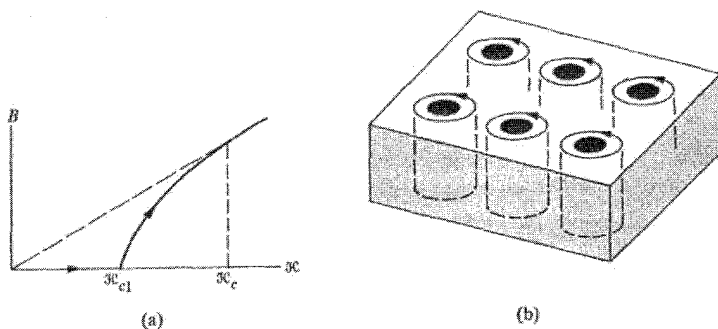


شکل ۱۰-۲۲ توزیع میدان در یک فیلم نازک ابررسانا

ابر رساناهای نوع II

دسته مهمی از ابر رساناها هستند که رفتار شان کاملاً شبیه آن چه تا کنون توصیف کردیم نیست، در این مواد خیلی قبل از آن که میدان به حد بحرانی برسد و حتی وقتی که توزیع میدان یکنواخت است، لااقل به طور جزئی اثر مایسنر نقض می شود. این دسته از مواد که ابررساناهای نوع دوم نامیده می شوند (در مقابل موادی که تاکنون شرح دادیم و به ابررساناهای نوع اول موسوم هستند). شکل ۱۰-۲۳ الف) تغییرات القای مغناطیسی B بر حسب شدت میدان H_c برای ابر رساناهای نوع II را نشان می دهد. اثر مایسنر تا میدان های H_{c1} برقرار است؛ ولی بعد از آن شار مغناطیسی به طور جزئی در ماده نفوذ می کند و در میدان های بزرگ تر از H_c ماده کاملاً حالت طبیعی پیدا می کند. مواد نوع II ابر رساناهای سخت^۱ هستند زیرا معمولاً میدان بحرانی بزرگی دارند.

گفته می‌شود، در میدان‌های از H_{c1} تا H_c که ماده در حالت مختلط^۱ است. به عنوان مثالی از یک ساختار که نزدیک به این حالت است می‌توان به نواحی دایروی کوچکی در حالت طبیعی ماده، که توسط نواحی بزرگی از ماده در حالت ابر رسانی احاطه شده است، اشاره کرد. این نواحی ابر رسانی، بقیه‌ی ماده را تشکیل می‌دهند (شکل ۲۳-۱۰ ب) نواحی طبیعی کوچک به نام ورتیس^۲ یا فلوکسویید^۳ موسوم‌اند.



شکل ۲۳-۱۰ (الف) القای B بر حسب H برای یک ابر رسانی نوع II. منحنی خط‌چین نمایان‌گر ابر رسانی نوع I است. (ب) حالت مختلط که نشان می‌دهد هسته‌هایی از ماده‌ی در حالت طبیعی توسط ابرجریان‌های در گردش، احاطه شده‌اند.

ساختار گردابی حالت مختلط خیلی ریزتر از آن است که با چشم غیر مسلح دیده می‌شود ولی وجود آن به طور تجربی تأیید شده است.

دلیل ظهور ورتیس‌ها این است که طول هم‌دوسی ξ در ابر رسانی‌های نوع II خیلی کوچک است؛ به خصوص این که $\xi < \lambda$ می‌باشد که λ عمق نفوذ است. می‌توان نشان داد که اگر این شرط برآورده شود انرژی سطحی منفی می‌شود و بدین معنی است که در میدان‌هایی که خیلی پایین‌تر از میدان بحرانی است، ایجاد ورتیس‌ها و تشکیل سطوح ابر رسانی - طبیعی انرژی ماده را کاهش می‌دهد. با استفاده از رابطه عدم قطعیت مکان - اندازه حرکت می‌توان نوشت

$$\xi \cong \frac{\hbar}{\Delta P} \quad (10-40)$$

1. mixed state
2. vortice گرداب
3. fluxoid

که Δp عدم قطعیت در اندازه حرکت است. انرژی یک ابر الکترون در بازه‌ی $kT_c \approx$ نسبت به سطح فرمی قرار دارد. بنابراین عدم قطعیت در انرژی آن برابر است با

$$\Delta E \approx kT_c$$

از آن جا که $E = \frac{p^2}{2m}$ است، نتیجه می‌شود که $\Delta E = \frac{p\Delta p}{m}$ یا $\Delta E \sim \Delta E = kT_c$ که با جایگزینی این روابط در رابطه‌ی (۴۰-۱۰) نتیجه می‌شود:

$$\xi \approx \frac{1}{T_c} \quad (۴۱-۱۰)$$

بنابراین ξ با عکس T_c متناسب است و هر چه T_c بیش‌تر باشد طول همدوسی کوتاه‌تر است.

فلزات واسطه و آلیاژها معمولاً از ابر رساناهای نوع دوم هستند. طول همدوسی در این مواد به واسطه‌ی پراکندگی نسبتاً زیادی که وجود دارد کوتاه می‌شود.

اکثر موادی که تا اواخر سال‌های ۱۹۴۰ مطالعه شدند ابر رساناهای نوع II بودند. همان‌طور که می‌دانیم تئوری ساده لندن برای آن‌ها کاملاً درست نیست. تلاش‌هایی برای یافتن و اعمال یک تئوری برای آن‌ها صورت گرفت که تا حدودی موفق بود و در سال‌های ۱۹۵۰ وضعیت کاملاً تغییر کرد و ابر رسانایی به دوران طلایی خود رسید.^۱

۱- هیگر و همکارانش در سال ۱۹۷۳ مقاله‌ای ارائه کردند که تحول چشمگیری در ابر رسانایی بود آن‌ها گذار شبه ابر رسانایی را در دمای $60^\circ K$ در یک ماده مشاهده کردند. این ماده شامل یک نمک آلی (TCNQ) (ATTF) است. ماده در دمای بالای $60^\circ K$ حالت فلزی یک بعدی دارد و با کاهش دما به پایین‌تر از $60^\circ K$ رسانایی به طریقی که قابل مقایسه با گذرا ابر رسانایی معمولی است به شدت کاهش می‌یابد. متأسفانه در این حالت شبکه ناپایدار می‌شود و بلور به یک ساختار جدید تغییر شکل می‌یابد و ماده به جای ابر رسانا نیمه رسانا می‌شود. تلاش‌هایی برای ایجاد پایداری ابر رسانایی و جلوگیری از انتقال شبکه صورت گرفته است. برای اطلاع بیش‌تر راجع به این مطلب به مرجع زیر مراجعه کنید.

مقاومت صفر

هنگامی که دمای یک نمونه‌ی ابررسانایی را به پایین‌تر از دمای بحرانی T_c کاهش دهیم، مقاومت ماده به کلی از بین می‌رود و ماده به یک حالت جدید (حالت ابررسانایی) وارد می‌شود. دمای بحرانی به نوع ماده بستگی دارد.

اثر مایسنر

ابررساناها شار مغناطیسی را کاملاً دفع می‌کنند به طوری که القای مغناطیسی در داخل ماده ابررسانا صفر است ($B=0$)

میدان بحرانی

اگر یک میدان مغناطیسی قوی به یک ابررسانا اعمال گردد، ماده به حالت طبیعی برمی‌گردد. این میدان بحرانی بر حسب دما به صورت زیر کاهش می‌یابد.

$$H_c(T) = H_c(0) \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 \right]$$

که در $T = T_c$ میدان صفر می‌شود.

ملاحظات ترمودینامیکی

گرمای ویژه یک ابررسانا به طور نمایی با دما، به صورت $e^{-b(\frac{T}{T_c})}$ کاهش می‌یابد، که نشان دهنده‌ی وجود یک گاف در طیف انرژی ابررسانا می‌باشد. گاف انرژی از مرتبه‌ی kT_c و به طور دقیق‌تر نزدیک به $3/5 kT_c$ است. وجود این گاف که از تئوری BCS نیز استنتاج می‌شود یکی از جنبه‌های اساسی حالت ابررسانایی است. بسیاری از خواص ابررساناها را می‌توان با مدل دو شاره‌ای توضیح داد. در این مدل الکترون‌ها به دو طبقه تقسیم می‌شوند: الکترون‌های عادی و ابرالکترون‌ها. خواص غیرعادی ابررساناها مربوط به ابرالکترون‌ها است که هیچ برخوردی انجام نمی‌دهند و آنتروپی صفر دارند (نظم کامل).

الکترو دینامیک

لندن به منظور توجیه اثر مایسنر، معادله‌ی میدان برای یک ابررسانا را به صورت زیر نوشت:

$$\nabla \times B = -\left(\frac{m}{n_s e}\right) \nabla \times J_s$$

که n_s و J_s به ترتیب چگالی و چگالی جریان ابررسانا هستند. اگر این معادله با معادلات ماکسول ترکیب گردد در داخل ابررسانا $B=0$ به دست می‌آید، (اثر مایسنر).

دو اثر دیگر نیز از معادله‌ی لندن پیش بینی می‌شود: (الف) شار مغناطیسی در ابررسانا در یک فاصله‌ی کوچک λ (عمق نفوذ) نفوذ می‌کند؛ و (ب) یک ابرجریان در امتداد سطح یک ابررسانا جاری می‌گردد.

تئوری BCS

بر طبق تئوری BCS ابرالکترون‌ها به صورت زوج‌های کوپر وجود دارند. هر زوج یک حالت مقید تشکیل می‌دهد. برهم کنش جاذبه لازم برای چنین حالتی توسط تبادل فونون‌ها بین اجزاء زوج‌های کوپر تولید می‌شود.

تونل زنی

هنگامی که یک فلز و یک ابررسانا یا دو ابررسانا، توسط یک فیلم نازک عایق از یکدیگر جدا شوند، الکترون‌ها از عرض فیلم تونل می‌زنند. از مشخصه‌های جریان - ولتاژ پیوند می‌توان برای تعیین گاف ابررسانایی استفاده کرد. اگر فیلم بین ابررساناها خیلی نازک باشد ممکن است زوج‌های کوپر خودشان از عرض پیوند تونل بزنند که این امر منجر به اثر جوزفسون می‌شود. ولتاژ

استاتیکی دو سر پیوند یک جریان ac با فرکانس $\nu = \frac{2eV_0}{h}$ تولید می‌کند.

References

- P. G. deGennes, 1966, *Superconductivity of Metals and Alloys*, New York: W. A. Benjamin
- R. Feynman, 1963, *Lectures in Physics, Volume III*, Reading, Mass: Addison-Wesley
- C. G. Kuper, 1968, *An Introduction to the Theory of Superconductivity*, Oxford: Oxford University Press.
- E. A. Lynton, 1960, *Superconductivity*, third edition, London: Methuen
- V. L. Newhouse, 1964, *Applied Superconductivity*, New York: John Wiley
- B. W. Petley, 1971, *An Introduction to the Josephson Effect*, London: Mills and Boon, Ltd.
- G. Rickayzen, 1965, *Theory of Superconductivity*, New York: John Wiley
- A. C. Rose-Innes and E. H. Rhoderick, 1969 *Introduction to Superconductivity*, New York: Pergamomg Press
- B. Sering, 1956, *Encyclopedia of Physics*, Volume 15, New York:
- D. Shoenberg, 1960, *Superconductivity*, second edition; foxford Oxford University Press
- J. E. C. Williams, 1970, *Superconductivity and Applications*, London: Pion Ltd.

پرسش‌ها

۱- انتظار دارید ترکیب آلیاژ $ZrNb$ چه باشد تا بالاترین T_c را داشته باشد؟ به سوال مشابه در مورد $NbSn$ پاسخ دهید.

۲- به دنبال معادله‌ی (۱۰-۱۲) بیان شد که میدان بحرانی $H_c(0)$ اساساً با دمای بحرانی متناسب است. (این مطلب از رسم منحنی مسأله ۳ نیز تأیید می‌شود.) هنوز هم چگالی الکترونی n در رابطه‌ی (۱۰-۱۲) ظاهر می‌گردد و این چگالی از یک ابررسانا به ابررسانای دیگر متفاوت است. چرا این رابطه‌ی خطی هنوز هم برقرار است.

۳- راجع به حداقل دو روش تجربی متفاوت است برای تعیین دمای بحرانی یک ابررسانا توضیح دهید.

۴- تجربه نشان می‌دهد که یک ابررسانا که مقاومت استاتیک صفر دارد یک مقاومت ac (هر چند خیلی کوچک) ولی متناهی دارد. توضیح دهید چگونه این امر ممکن است؟ (راهنمایی: از مدل دو شاره‌ای استفاده کنید. رسم یک مدار الکتریکی نیز مفید است).

۵- معادله‌ی (۱۰-۲۹) را برای جریان سطحی در یک ابررسانا به دست آورید.

۶- پاورقی بخش ۵-۱۰ بیان می‌کند که به دلیل طبیعت جمعی گذار ابررسانایی، گاف انرژی $\Delta(T)$ با دما کاهش می‌یابد. این نکته را با استفاده از مفهوم زوج‌های کوپر توضیح دهید.

۷- پیوند ابررسانا - طبیعی در شکل ۱۹-۱۰ (الف) مقارن است یا خیر؟

۸- شکل ۲۱-۱۰ (ب) استوانه‌ای در حالت میانی را نشان می‌دهد، یک روش تجربی الکتریکی برای تمایز این حالت با حالت ابررسانایی که در شکل ۲۱-۱۰ (الف) نشان داده شده است، بیان کنید.

۱- سیملوله‌ای از سرب را در نظر بگیرید که به دور یک تیوپ به شکل دونات (یک نوع پیراشکی) پیچیده شده است. تعداد دور سیم پیچ‌ها ۲۵۰۰ دور و قطر سیم سربی ۳۰ cm است. سیملوله تا پایین تر از نقطه‌ی بحرانی سرد می‌شود و یک جریان الکتریکی در سیملوله القا می‌شود. با فرض این که مقاومت ویژه سرب در حالت ابررسانایی کمتر از 10^{-25} ohm-m است، حداقل بازه‌ی زمانی را که لازم است تا جریان به اندازه‌ی ۰/۰۱ درصد کاهش یابد، چقدر است؟ (فرض کنید طول سیم آن قدر بلند باشد که تقریب طول نامتناهی برقرار باشد).

۲- الف) شکل ۷-۱۰ بیان می‌کند که وقتی ماده‌ای ابررسانا می‌شود، در نقطه‌ی گذار، گرمای ویژه به طور ناپیوسته تغییر می‌کند. اندازه‌ی این تغییر ناپیوسته را می‌توان با استفاده از بحث‌های ترمودینامیک محاسبه کرد. نشان دهید که اندازه‌ی این تغییر (برمول) از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید.

$$C_s - C_n = V_m T_c \left(\frac{\partial H_c}{\partial T} \right)_{T_c}^2$$

که V_m حجم مولی است.

ب) این اختلاف را برای قلع محاسبه نمایید و جواب خود را با مقداری که از شکل ۷-۱۰ به دست می‌آید مقایسه کنید. چگالی و وزن اتمی قلع به ترتیب $\frac{g}{cm^3}$ ۷ و ۱۱۹ است. (راهنمایی: در قسمت الف یادآوری می‌کنیم که

$$C = T \frac{\partial S}{\partial T} \quad \text{و} \quad S = - \frac{\partial E}{\partial T}$$

که S انتروپی و E انرژی سیستم است.)

۳- منحنی تغییرات $H_c(0)$ بر حسب T_c را برای چند ابررسانا و با استفاده از داده‌های جدول‌های ۱-۱۰ و ۲-۱۰ رسم کنید و رابطه‌ی خطی را که معادله‌ی ۱۲-۱۰ پیش بینی می‌کند تحقیق نمایید.

۴- همان طور که شکل ۱۲-۱۰ نشان می‌دهد، با افزایش دما، گاف ابررسانایی $\Delta(T)$ کاهش می‌یابد. تئوری BCS نشان می‌دهد که این کاهش برای $T < T_c$ با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$\frac{\Delta(T)}{\Delta_0} = \tanh \left[\frac{T_c \Delta(T)}{T \Delta_0} \right]$$

با استفاده از این رابطه و جدول ۴-۱۰، منحنی نمایش $\Delta(T)$ بر حسب T را برای قلع در محدوده $0 < T < T_c$ رسم نمایید.

۵- در بخش ۱۰-۵ گفته شد که رفتار نمایی گرمای ویژه (رابطه‌ی ۵-۱۰) بر وجود یک گاف انرژی دلالت می‌کند. این مطلب را می‌توان با محاسبه‌ی گرمای ویژه یک نیمه رسانای ذاتی که در آن گاف انرژی نقش بسیار مهمی ایفا می‌کند، به سادگی ملاحظه نمود. این محاسبه را ادامه دهید و رفتار نهایی فوق‌الذکر را به دست آورید.

۶- معادله لندن (رابطه‌ی ۲۱-۱۰) معادل شرط دیامغناطیس کامل بودن ابررساناها است. یک سوال اساسی مطرح می‌شود که: کدام خاصیت الکترودینامیکی مهم‌تر است؛ رسانایی کامل یا دیامغناطیس کامل؟ منظور از این سوال این است که آیا از یکی از این خواص، دیگری را می‌توان به دست آورد یا این که این دو خاصیت مستقل از یکدیگرند؟ [راهنمایی: توجه کنید که میدان الکتریکی و القاء مغناطیسی توسط معادلات ماکسول به هم مربوطند به خصوص به روابط زیر توجه کنید].

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad \text{و} \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$$

که A پتانسیل برداری است

۷- ثابت کنید شار مغناطیسی که از یک حلقه‌ی ابررسانا نشت می‌کند بر طبق رابطه‌ی $\Phi = n \frac{h}{2e} \oint \mathbf{v} \cdot d\mathbf{l}$ کوانتیده است که Φ شار و n یک عدد صحیح است. این کوانتس در سال ۱۹۵۰ توسط اف-لندن پیش‌بینی و در سال ۱۹۶۱ تأیید تجربی شد. [راهنمایی: از شرط کوانتس ویلسون-سامرفیلد^۱ استفاده کنید مسیر انتگرال را محیط داخلی حلقه بگیرید. همین طور یادآوری می‌کنیم که اندازه حرکت یک الکترون در یک میدان مغناطیسی با رابطه‌ی $\mathbf{p} = m\mathbf{v} + e\mathbf{A}$ بیان می‌شود]. در واقع فرمول کوانتس که توسط لندن بیان شد اشتباه بود، زیرا مفهوم زوج‌های کوپر در سال ۱۹۵۰ ناشناخته بود. انتظار دارید فرمول اولیه‌ی لندن چگونه بوده باشد؟

۸- با این فرض که علاوه بر بایاس مستقیم، یک ولتاژ متناوب نیز به دو سر پیوند اعمال می‌گردد، راجع به جریان تونلی بحث کنید. فرکانس‌های مدهای مختلف برانگیختگی را محاسبه نمایید.

۱- این شرط به صورت زیر است $\oint \mathbf{p}_i \cdot d\mathbf{q}_i = nh$ که n یک عدد صحیح است. \mathbf{p}_i و \mathbf{q}_i به ترتیب مختصه و اندازه حرکت تعمیم یافته آن است. شرط بوهر برای کوانتس اندازه حرکت زاویه‌ای، $L = nh$ را می‌توان با در نظر گرفتن $\mathbf{q}_i = \theta$ و $\mathbf{p}_i = L$ (θ زاویه و L اندازه حرکت زاویه‌ای است) و انتگرال‌گیری فوق به دست آورد.

پیوست A

مکانیک کوانتومی

- A-۱ مفاهیم اساسی
- A-۲ معادله‌ی شرودینگر
- A-۳ مثال‌های یک بعدی
- A-۴ اندازه حرکت زاویه‌ای
- A-۵ اتم هیدروژن؛ اتم‌های چند الکترونی؛ جدول تناوبی عناصر
- A-۶ تئوری پیرشیدگی
- A-۷ مولکول هیدروژن و پیوند کووالان
- A-۸ پیوندهای جهت‌دار

A-۱ مفاهیم اساسی

انیشتین فرض کرد که تابش الکترومغناطیسی از فوتونها تشکیل شده است. انرژی و اندازه حرکت هر فوتون به ترتیب با رابطه‌ی زیر بیان می‌گردد.

$$E = hv = \hbar\omega \quad (\text{الف}) \quad p = \frac{hv}{c} = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \quad (\text{ب}) \quad (A-1)$$

که v و λ ، فرکانس و طول موج تابش‌اند، $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ و بردار موج $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ می‌باشد. معادله‌ی (A-۱) به نام رابطه‌ی انیشتین موسوم است.

دوبروی فرض کرد که معادله‌ی (A-۱) را برای ذرات نیز می‌توان به کار برد. یعنی

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \quad (\text{الف}) \quad \lambda = \frac{h}{p} \quad \text{یا} \quad k = \frac{p}{\hbar} \quad (\text{ب}) \quad (A-2)$$

هایزنبرگ این واقعیت را مطرح کرد که عدم قطعیت در مکان و اندازه حرکت یک ذره، یعنی Δx و Δp در رابطه‌ی زیر صدق می‌کنند.

$$\Delta x \Delta p \approx \hbar \quad (A-3)$$

رابطه‌ی مشابهی برای زمان و انرژی به دست می‌آید.

$$\Delta t \Delta E \approx \hbar \quad (A-4)$$

که Δt معمولاً با نیمه عمر ذره بیان می‌گردد.

(A-۲) معادله شرودینگر

موج دوبروی در معادله‌ی شرودینگر صدق می‌کند

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right] \Psi(r, t) \quad (A-5)$$

که Ψ تابع موج ذره و V انرژی پتانسیل آن است. $|\Psi(r, t)|^2 d^3r$ احتمال یافت شدن ذره در المان حجمی d^3r در لحظه‌ی t را به دست می‌دهد. تابع موج بایستی شرط هنجارش را برآورده سازد.

$$\int |\Psi|^2 d^3r = 1 \quad (A-6)$$

و جزء وابسته به مکان $\Psi(r)$ در معادله‌ی زیر صدق می‌کند؛

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V\right] \Psi(r) = E\Psi(r) \quad (A-7)$$

این معادله نیز به نام معادله‌ی شرودینگر خوانده می‌شود. حل این معادله منوط به شرایط مرزی مناسبی است که انرژی‌های مجاز و توابع موج آن‌ها را به دست می‌دهد.

۳-۸ مثال‌های یک بعدی

انرژی و توابع موج ذرات آزاد به صورت زیر بیان می‌گردند:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{الف}) \quad \Psi_k = Ae^{ikx} \quad (\text{ب}) \quad (A-8)$$

که A مقداری ثابت و k بردار موج تخت می‌باشد.

انرژی و توابع موج یک ذره در داخل جعبه‌ای به طول L ، مانند رابطه‌ی (A-۸) است. به جز این که بردار k به صورت زیر کوانتیده است.

$$k = n \frac{\pi}{L} \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (A-9)$$

که از شرایط مرزی تناوبی پیروی می‌کند. (بخش ۲-۳ را ملاحظه نمایید). بنابراین

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n^2 \quad (\text{الف}) \quad \Psi_n = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\left(\frac{\pi}{L}\right)n x} \quad (\text{ب}) \quad (A-10)$$

تعمیم این روابط برای یک جعبه‌ی سه بعدی سر راست است. انرژی‌های یک نوسان گر هماهنگ بارابطه‌ی زیر بیان می‌شود.

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (A-11)$$

که فرکانس طبیعی نوسان گر است

۴-۸ اندازه حرکت زاویه‌ای

بزرگی اندازه حرکت زاویه‌ای مطابق فرمول زیر کوانتیده است:

$$L = \sqrt{l(l+1)} \hbar \quad (A-12)$$

که در آن $l=0, 1, 2, \dots$ می باشد. حالت های 0 و 1 و 2 ... به ترتیب حالت های s, p, d, \dots نامیده می شوند.

$$L_z = m_l \hbar \quad (A-13)$$

که

$$m_l = -l, -(l-1), \dots, 0, \dots, (l-1), l$$

اندازه حرکت زاویه ای اسپینی نیز مطابق معادلات (A-12) و (A-13) کوانتیده اند، به جز اینکه تنها مقدار مجاز برای آن $s = \frac{1}{2}$ است.

A-5 اتم هیدروژن؛ اتم های چند الکترونی؛ جدول تناوبی عناصر

اگر پتانسیل کولنی را در معادله ی شرودینگر جایگزین و آن را حل کنیم، انرژی های مجاز به صورت زیر به دست می آید.

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2a_0^2 m n^2} \quad (A-14)$$

n یک مقدار مثبت است که به عدد کوانتومی اصلی موسوم است و $a_0 = \frac{4\pi\hbar^2 \epsilon_0}{me^2}$ اولین شعاع بوهر است. مقادیر مجاز اندازه ی حرکت زاویه ای برای هر n عبارتند از $l=0, 1, 2, \dots, n-1$ و به ازای هر l مقادیر مجاز m_l عبارتند از تمام اعداد صحیح بین $-l$ و $+l$. یک الکترون می تواند در اثر جذب یا گسیل یک فوتون، گذاری بین دو تراز انرژی انجام دهد به طوری که؛

$$\Delta E = \hbar\omega \quad (A-15)$$

که ΔE اختلاف انرژی بین ترازها است. این معادله به نام فرمول فرکانس بوهر خوانده می شود.

تابع موج برای هر حالت شکل زیر را دارد.

$$\Psi_{nlm_l}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta, \phi) \quad (A-16)$$

که r, θ, ϕ مختصات قطبی کروی هستند. تابع شعاعی R_{nl} یک تابع نوسانی است که قله های آن مبین لایه های اتمی مختلف (مدارهای بوهر) است و Y_{lm_l} یک به اصطلاح هماهنگ کروی است که دوران الکترون به دور پروتون را توصیف می کند.

در اتم‌های چند الکترونی، الکترون‌های مختلف، حالت‌های مجاز را اشغال می‌کنند. ابتدا حالت‌های با کمترین انرژی پر می‌شوند. بر طبق اصل طرد پائولی حالت‌های بعدی پر می‌شوند. این اصل بیان می‌دارد که: در هر حالت کوانتومی، حداکثر دو الکترون با اسپین‌های مخالف می‌توانند جای گیرند. هر لایه‌ی اتمی یعنی به ازای یک مقدار معین n ، حداکثر $2n^2$ الکترون را می‌تواند جای دهد.

بیرونی‌ترین لایه‌ی که لایه ظرفیت نام دارد، خواص شیمیایی اتم را تعیین می‌کند. اگر لایه‌ی ظرفیت نیمه پر باشد، اتم میل ترکیبی دارد. لایه‌ی ظرفیت یک اتم نجیب مانند هلیوم کامل است. در داخل هر لایه، بسته به این که الکترون‌های مربوطه نسبت به هسته چگونه توزیع شده باشند، زیر لایه‌های مختلف (یعنی l های مختلف)، انرژی‌های متفاوت دارند. زیر لایه‌ی s ($l=0$) کمترین انرژی را دارد، زیرا احتمال زیادی وجود دارد که الکترون خیلی نزدیک به هسته باشد.

سری‌های مهمی از عناصر هستند که خواص مغناطیسی بارزی دارند. این خواص به مشخصه‌ی اتمی آن‌ها مربوط است. بنا بر آنچه که در بالا توصیف شد، در اولین سری عناصر واسطه، از Sc تا Ni (28 تا $21 = Z$)، زیر لایه‌ی خارجی $4s$ قبل از $3d$ اشغال می‌شود. (جدول تناوبی عناصر در انتهای کتاب آمده است). در دومین سری عناصر واسطه از Y تا Pd ، نیز به خاطر این که زیر لایه‌ی $5s$ قبل از $4d$ پر می‌شود، خواص مشابهی وجود دارد. عناصر خاکی نادر یا لانتانیدها که از La شروع و تا Lut ادامه دارند، (71 تا $57 = Z$) نیز زیر لایه‌ی $6s$ قبل از $4f$ پر می‌شوند.

۶-۱-۱ تئوری پرتابگری

در آزمایشگاه معمولاً اتم‌ها را با اعمال یک میدان مغناطیسی خارجی و مشاهده‌ی آثار آن روی خواص اتمی، مطالعه می‌کنند. هر دو میدان الکتریکی و مغناطیسی طیف اتمی را تغییر می‌دهند (این اثر را می‌توان توسط تکنیک‌های اسپکتروسکوپی مشاهده کرد). و به این طریق می‌توان اطلاعاتی در مورد ساختار اتم به دست آورد. در حضور میدان اعمال شده، پتانسیل به صورت زیر درمی‌آید:

$$V = V_0(r) + V'(r)$$

که $V_0(r)$ پتانسیل اتمی و $V'(r)$ پتانسیل مربوط به میدان است. در واقع باید با استفاده از پتانسیل جدید که شامل میدان نیز می‌باشد، معادله‌ی شرودینگر را مجدداً حل کرد. متأسفانه این کار را

فقط در چند حالت خاص می‌توان به طور دقیق حل کرد. ولی اگر میدان ضعیف و پتانسیل اضافی $V'(r)$ کوچک باشد، می‌توان روش تقریبی مناسبی برای محاسبه‌ی انرژی و تابع موج به کار برد. این روش معادل بسط سری تیلور بر حسب توان‌هایی از میدان است. بدین ترتیب می‌توان انرژی‌ها و توابع موج را با دقت مورد نظر و با منظور کردن توان‌های بالای بسط سری تیلور محاسبه نمود.

شرح تفصیلی این روش که به تئوری پرتاب‌دهی موسوم است در کتاب‌های مکانیک کوانتومی یافت می‌شود. نتایج به قرار زیرند:

$$E_n \approx E_n^{(0)} + \langle n | V' | n \rangle - \sum_m \frac{|\langle m | V' | n \rangle|^2}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \quad (A-17)$$

$$\Psi_n \approx \Psi_n^{(0)} - \sum_m \frac{|\langle m | V' | n \rangle|^2}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \quad (A-18)$$

در این جا $E_n^{(0)}$ و $\Psi_n^{(0)}$ به ترتیب انرژی و تابع موج یک تراز اختیاری n در غیاب میدان مغناطیسی هستند (انرژی و تابع موج پرتاب‌ده نشده). E_n و Ψ_n کمیت‌های متناظر در حضور میدان می‌باشند. براکت‌ها به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\langle n | V' | n \rangle \equiv \int \Psi_n^{(0)*} V' \Psi_n^{(0)} d^3r$$

$$\langle m | V' | n \rangle \equiv \int \Psi_m^{(0)*} V' \Psi_n^{(0)} d^3r$$

جمع‌های (A-17) و (A-18) به جای حالت n ام که حالت مورد بررسی است، روی تمام حالت‌های کوانتومی بسته می‌شود (علامت پریم روی جمع بیان‌گر این است که جمع شامل جمله‌ی $m=n$ نمی‌شود). انرژی و تابع موج هر دو بر حسب مرتبه‌ی دوم V' داده شده‌اند.

اثر زیمان

به عنوان کاربردی از این نتایج تأثیر اعمال یک میدان مغناطیسی بر طیف هیدروژن را بررسی می‌کنیم. برای پیدا کردن پتانسیل پرتاب‌دهی $V'(r)$ ، توجه داریم که به دلیل چرخش، الکترون یک گشتاور مغناطیسی $\mu = -\left(\frac{e}{2m}\right)L$ دارد که L اندازه‌ی حرکت زاویه‌ای است. هنگامی که یک میدان خارجی اعمال گردد، دو قطبی با آن جفت می‌شود. انرژی پتانسیل سیستم برابر می‌شود

با:

$$V' = -\mu \cdot B$$

که B میدان مغناطیسی است (بخش ۲-۹ را ملاحظه نمایید) با فرض این که میدان در امتداد محور Z ها باشد داریم:

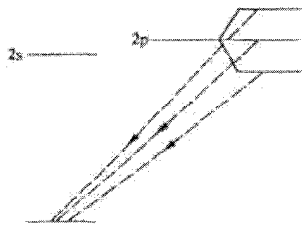
$$V' = -\mu_z B = + \left(\frac{e}{\gamma m} \right) B L_z \quad (A-19)$$

که همان پتانسیل پریشیدگی است که به دنبال آن بودیم. این پتانسیل یک جابه‌جایی در انرژی ایجاد می‌کند که بر طبق رابطه‌ی (A-17) از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید.

$$\langle n | V' | n \rangle = \frac{eB}{\gamma m} \langle n | L_z | n \rangle \quad (A-20)$$

این جابه‌جایی متناسب است با مقدار میانگین مؤلفه‌ی Z اندازه حرکت زاویه‌ای.

حال این نتیجه را برای هیدروژن به کار می‌بریم. برای حالت پایه، یعنی حالت 1s، اندازه‌ی حرکت زاویه‌ای صفر است. بنابراین $\langle 1s | L_z | 1s \rangle = 0$ ، و همان‌گونه که شکل A-1 نشان می‌دهد هیچ اثر مغناطیسی در آن حالت وجود ندارد. همین‌طور هیچ اثری بر حالت 2s ندارد.



شکل A-1 اثر زیمان. ترازهای s از میدان مغناطیسی متأثر نمی‌شوند درحالی که تراز p به سه زیر تراز شکافته می‌شود.

برای حالت 2p وضعیت متفاوت است. این حالت متناظر است با $l=1$. بنابراین $\langle 2p | L_z | 2p \rangle$ می‌تواند مقادیر $+\hbar$ ، 0 ، یا $-\hbar$ را اختیار کند که متناظر با سه مقدار ممکن جهت‌گیری L نسبت به محور Z ها است (که این همان جهت میدان است؛ بخش A-4 را ملاحظه نمایید). بنابراین همان‌گونه که در شکل نشان داده شده است، تراز 2p به سه زیرتراز مغناطیسی هم‌فاصله شکافته می‌شود.

$$\Delta E = \frac{eB}{\gamma m} \hbar = \mu_B B \quad (A-21)$$

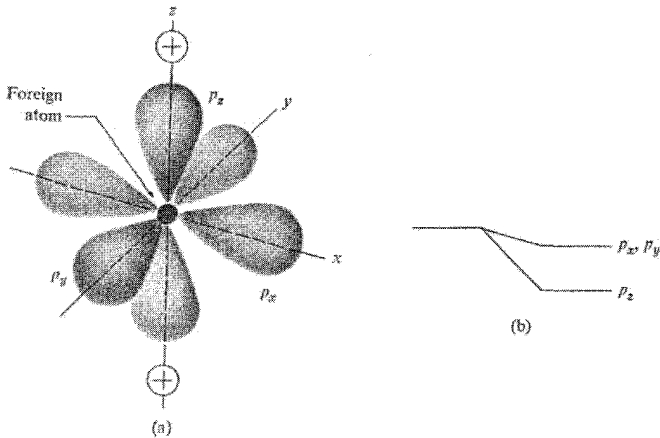
کمیت $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$ به نام مگنتون بوهر موسوم است و مقدار آن مساوی $9.27 \times 10^{-24} \text{amp. m}^2$ می باشد.

در حالت کلی زیرلایه‌ای با اندازه‌ی حرکت زاویه‌ای l به $2l+1$ تراز هم فاصله شکافته می شود که فواصل آن‌ها از رابطه‌ی (A-21) به دست می آید. این شکافتگی که ناشی از اعمال میدان مغناطیسی است اثر زیمان نامیده می شود. این اثر به کمک مشاهده‌ی شکافتگی خطوط طیفی مختلف، هنگامی که میدان اعمال می گردد، مطالعه می شود. مثلاً خط طیفی متناظر با گذار $1s \rightarrow 2p$ به خاطر شکافتگی سه گانه تراز $2p$ به سه خط شکافته می شود. بدین ترتیب اثر زیمان را می توان برای تعیین اندازه‌ی حرکت زاویه‌ای حالت‌های مختلف اتمی به کار برد.

شکافتگی بلور- میدان

هنگامی که یک اتم در درون یک بلور قرار می گیرد توابع موج (یا اوربیتال‌های اتمی) اتم تغییر می کنند. زیرا یون‌های همسایه یک میدان الکتریکی بر الکترون‌های اتمی اعمال می کنند که نتیجه‌ی آن تغییر شکل اوربیتال‌ها و شکافتگی ترازهای انرژی است. این میدان الکتریکی به میدان بلور موسوم است. به شرطی که میدان خیلی بزرگ نباشد، اثر آن را می توان توسط تئوری پرتشیدگی بررسی کرد.

میدان بلور به تعداد و ترکیب هندسی یون‌های همسایه بستگی دارد. معمول‌ترین اعداد همارایی عبارتند از ۲، ۴، ۶ (و ۸)، که به ترتیب متناظر با آرایش یون‌های احاطه شده به صورت خطی، چهاروجهی و هشت وجهی می باشند. با مشاهده‌ی شکافتگی می توان تقارن بلور را تعیین کرد و معادل آن است که عدد همارایی را بدانیم. ما این کار را با بررسی این اثر بر یک اوربیتال p انجام می دهیم.



شکل A-۲ شکافتگی بلور-میدان. (الف) توزیع بار اوربیتال‌های p_x و p_y و p_z (ب) شکافتگی انرژی‌های اوربیتال‌ها.

فرض کنید همان گونه که در شکل (A-۲ الف) نشان داده شده است، آرایش یون‌ها خطی و متشکل از دو یون مثبت در امتداد محور z ها باشد. سه اوربیتال p به p_x و p_y و p_z نمایش داده می‌شوند. توجه کنید که اوربیتال p_z ، الکترون‌هایش را به شکل دمبل در امتداد محور z ها، جایی که شدیداً توسط یون‌های مثبت جذب می‌شوند، توزیع می‌کند. بنابراین اوربیتال p_z به لحاظ انرژی پایین‌تر از دو اوربیتال دیگر می‌باشد که در امتداد محورهای x و y قرار می‌گیرند. در نتیجه سه اوربیتالی که قبلاً به لحاظ انرژی مساوی بودند، حالا انرژی‌های متفاوت دارند و همان گونه که در شکل (A-۲ ب) نشان داده شده است، تراز شکافته می‌شود. این شکافتگی بلور-میدان به ویژه در بررسی تکنیک‌های تشدید پارامغناطیسی الکترون (بخش ۱۲-۹) مهم و قابل ملاحظه است.

A-۷ مولکول هیدروژن و پیوند کووالان

هنگامی که دو اتم هیدروژن در نزدیکی هم قرار می‌گیرند، همدیگر را جذب می‌کنند، و یک مولکول هیدروژن، H_2 را تشکیل می‌دهند که پایدار است. دو اتم یکدیگر را توسط دو الکترون موجود در مولکول نگه می‌دارند. چنین پیوندی، پیوند هیدروژنی نامیده می‌شود. اوربیتال‌های الکترون‌ها در این پیوند به شکل خاصی در اطراف اتم‌ها توزیع می‌شوند. این پیوند دو الکترونی که پیوند کووالان نامیده می‌شود، در مولکول‌های دیگر نیز وجود دارد.

ابتدا حالت مربوط به یون مولکول H_2^+ را بررسی می‌کنیم. این یون که مولکول H_2 یونیده است، تنها یک الکترون دارد که در میدان دو پروتون حرکت می‌کند (شکل ۳-۳ A الف). می‌خواهیم انرژی‌ها و توابع موج را برای این مولکول، به‌ویژه برای حالت پایه به‌دست آوریم.

انرژی پتانسیل برابر است با:

$$V = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \quad (A-22)$$

که اولین جمله مربوط به دافعه‌ی بین پروتون‌ها و دو جمله‌ی بعد مربوط به جاذبه‌ی الکترون توسط دو پروتون است. این پتانسیل را در معادله‌ی شرودینگر قرار می‌دهیم و معادله دیفرانسیل مربوطه را حل می‌کنیم. گرچه این مسأله را می‌توان به‌طور تحلیلی حل کرد، تفصیل آن طولانی و خسته‌کننده است و ما به یک روش تقریبی ساده بسنده می‌کنیم.

وقتی الکترون نزدیک هر کدام از پروتون‌ها قرار گیرد، همچون اوربیتال هیدروژن اتمی ۱s رفتار می‌کند. بنابراین می‌توان پذیرفت اوربیتال مولکولی H_2^+ ، ترکیب خطی از دو اوربیتال ۱s است که در اطراف دو پروتون متمرکز شده‌اند. دو احتمال وجود دارد.

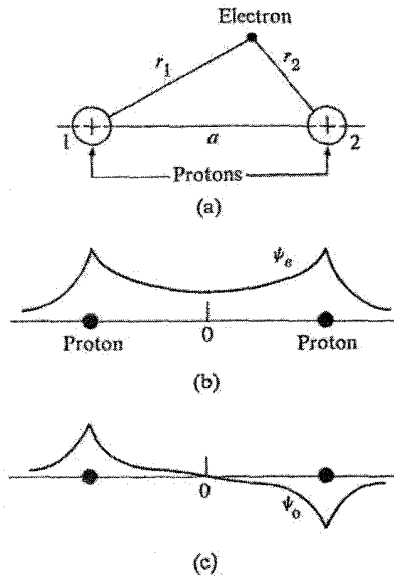
$$\Psi_e = \Psi_1 + \Psi_2 \quad (A-23)$$

و

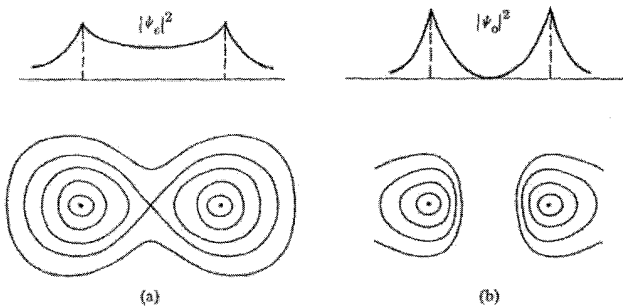
$$\Psi_o = \Psi_1 - \Psi_2 \quad (A-24)$$

که Ψ_1 و Ψ_2 به ترتیب نمایان‌گر حالت‌های ۱s هستند که حول دو پروتون متمرکز شده‌اند، و اندیس‌های e و o ترکیب‌های زوج و فرد را نشان می‌دهند. به دلیل تقارن، هیچ نوع دیگری از ترکیب‌های خطی نمی‌تواند وجود داشته باشد، زیرا توزیع بار الکترونی می‌باید نسبت به دو پروتون متقارن باشد و تنها این ترکیب‌ها هستند که این خواسته را برآورده می‌کنند (چرا؟). اوربیتال‌های مولکولی Ψ_1 و Ψ_2 در شکل ۳-۳ A رسم شده‌اند.

توزیع بار برای این اوربیتال‌ها به صورت $|\Psi_e|^2$ و $|\Psi_o|^2$ داده شده است (شکل ۴-۳ A). می‌توان ملاحظه نمود که Ψ_e الکترون‌هایش را بیش‌تر در ناحیه‌ی بین پروتون‌ها قرار می‌دهد، در حالی که Ψ_o الکترون‌هایش را در اطراف تک تک پروتون‌ها و دور از ناحیه‌ی میانی قرار می‌دهد.



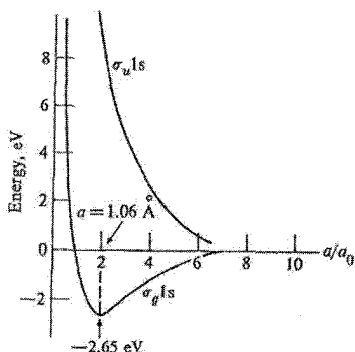
شکل ۳-A (الف) یون مولکول هیدروژن. (ب) تابع موج ψ_e . (ج) تابع موج ψ_o



شکل ۴-A. (الف) توزیع بار به صورت نمایش‌های پروفایل و پربند برای تابع ψ_e (ب) توزیع بار برای ψ_o

اوربیتال‌های دو مولکولی همان طور که در شکل ۵-A نشان داده شده است، انرژی‌های مختلفی دارند. این شکل انرژی‌ها را به صورت تابعی از فاصله‌ی بین هسته‌ای نشان می‌دهد. اوربیتال زوج که معمولاً به صورت $1s \sigma_g$ بیان می‌گردد، انرژی کمتری نسبت به اوربیتال فرد $1s \sigma_g$ دارد. بنابراین الکترون‌ها ترجیحاً در اوربیتال زوج قرار می‌گیرند. علاوه بر آن اوربیتال زوج انرژی منفی

دارد (انرژی صفر مرجع، انرژی یک هیدروژن در حالت پایه، و یک پروتون که در فاصله نامتناهی نسبت به یکدیگر قرار دارند می‌باشد). بنابراین یک اوربیتال پیوندی هست که منجر به یک حالت پایداری می‌شود. در وضعیت تعادل که متناظر با کمینه انرژی است، فاصله جدایی بین هسته‌ای $a \approx 2a_0 \approx 1/06 \text{ \AA}$ ، و انرژی پیوندی $-2/65 \text{ eV}$ است. اوربیتال فرد یاد پیوندی (ناپایدار) است و انرژی آن در وضعیت تعادل مساوی $10/2 \text{ eV}$ است.



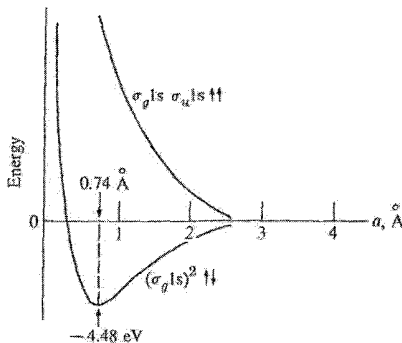
شکل ۵-۸ انرژی حالت‌های پایه و برانگیخته برای یون هیدروژن، بر حسب فاصله بین هسته‌ای (شعاع بوهر $a_0 = 0.53 \text{ \AA}$)

مجددا یادآوری می‌کنیم که مولکول H_2^+ یک مولکول پایدار است. نیروی دافعه بین پروتون‌ها بیش از آن مقداری است که جبران جاذبه بین پروتون‌ها و الکترون را بکند. الکترون با قرار گرفتن در یک اوربیتال مناسب قادر است پروتون‌ها را نزدیک به هم نگه دارد (مانند چسب!). این همان چیزی است که می‌توان آن را پیوند تک الکترونی نامید.

مفاهیم فوق را می‌توان به سادگی بر مولکول هیدروژن که دو الکترون دارد اعمال کرد. به شرطی که اسپین‌های دو الکترون در خلاف جهت یکدیگر باشند، هر دو الکترون می‌توانند اوربیتال پیوندی $1s \sigma_g$ را اشغال کنند. البته دو الکترون به نحوی یکدیگر را دفع می‌کنند و بدین منظور می‌باید تصحیحی در اوربیتال صورت گیرد. انرژی مولکول H_2 به صورت تابعی از فاصله بین هسته‌ای در شکل ۶-۸ نشان داده شده است.

در مولکول هیدروژن فاصله جدایی تعادل 0.74 \AA و انرژی پیوندی $4/48 \text{ eV}$ است (نسبت به دو اتم هیدروژن که در حالت پایه هستند و بی‌نهایت از یکدیگر دورند). از آن جا که هر دو الکترون

در حالت σ_g $1s$ هستند، در بین دو هسته قرار می گیرند و بنابراین الکترون‌ها به طور مساوی بین دو پروتون تقسیم می شوند. مفهوم اشتراک الکترونی در پیوندهای کووالان به طور مکرر در کتاب‌های درسی بیان شده است.



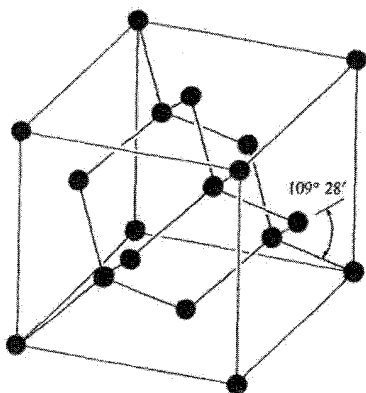
شکل ۶-۸ انرژی‌های حالت‌های پایه و تحریک شده برای مولکول هیدروژن بر حسب فاصله‌ی بین هسته‌ای.

۸-۸ پیوندهای جهت‌دار

کربن یک عنصر شیمیایی مهم است. کربن در هر دو حالت مولکولی و جامد با نزدیک‌ترین همسایگانش پیوند چهاروجهی تشکیل می‌دهد. اتم کربن در مرکز یک چهاروجهی قرار می‌گیرد که در چهار گوشه‌ی آن اتم‌های همسایه قرار گرفته‌اند. مثلاً ساختار بلوری در الماس به گونه‌ای است که هر اتم کربن با چهار اتم دیگر که یک چهاروجهی را تشکیل می‌دهند، احاطه شده است. (شکل ۷-۸). آرایش چهاروجهی در عناصر دیگر ستون چهارم جدول تناوبی و هم چنین در بسیاری از ترکیبات نیمه رسانا مانند $GaAs$ و $InSb$ رخ می‌دهد.

برای توضیح پیکربندی چهاروجهی در الماس باید توجه کرد که هر اتم کربن چهار الکترون در دومین لایه‌اش دارد. از آن جا که هر اتم با همسایگانش چهار پیوند برقرار می‌کند، می‌توان تصور کرد که هر پیوند به منزله‌ی یک پیوند کووالان است. دو الکترون در این پیوند سهیم‌اند که یکی توسط اتم مرکزی و دیگری توسط اتم همسایه به اشتراک گذاشته می‌شود. در این حالت هر اتم کربن توسط هشت الکترون ظرفیت احاطه می‌شود که این یک ساختار پایدار است زیرا لایه‌ی دوم C حالا کاملاً پر است. گرچه این استدلال قانع کننده به نظر می‌رسد، ولی توضیح نمی‌دهد

چرا چنین آرایشی باید یک چهاروجهی منظم با زاویه ی ۱۱۰ درجه بین هر دو پیوند باشد. برای درک این مطلب باید نگاه دقیق تری به توزیع خاص اوربیتال های الکترون های ظرفیت بیفکنیم. یک اتم کربن چهار الکترون ظرفیت دارد: دو تا الکترون ۲s و دو تا الکترون ۲p، و انرژی الکترون های s کمی پایین تر است. حالت های s متقارن کرویند و در حالت های p توزیع بار در امتداد دو تا از سه محور کارتزین قرار می گیرد. این عبارات نمی تواند چگونگی توزیع بار خاص مشاهده شده در الماس را که در آن بارها در امتداد پیوندهای چهار قطبی توزیع می شوند، توضیح دهد. ولی این مشکل را می توان مرتفع کرد.



شکل ۷-۱ ساختار الماس و پیوند چهاروجهی

تصور کنیم که یکی از الکترون های ۲s به یکی از حالت های ۲p برانگیخته شود، نتیجه ی آن پیکربندی $1s^2 2p^3$ خواهد شد. امکان این برانگیختگی هست زیرا اختلاف انرژی بین اوربیتال های ۲s و ۲p خیلی کم است. حال پیکربندی های خطی را تشکیل می دهیم.

$$\Psi_1 = \frac{1}{4}(s + p_x + p_y + p_z) \quad (A-25)$$

$$\Psi_2 = \frac{1}{4}(s + p_x + p_y - p_z)$$

$$\Psi_3 = \frac{1}{4}(s + p_x - p_y - p_z)$$

$$\Psi_4 = \frac{1}{4}(s - p_x - p_y - p_z)$$

اگر چگالی های $|\Psi_1|^2$ و $|\Psi_2|^2$ و ... متناظر با این اوربیتال های جدید را رسم کنیم، درمی یابیم که آن ها واقعا در امتداد جهت های چهاروجهی شکل (A-۷) توزیع شده اند. این نکته نشان می دهد

که اوربیتال‌های جدید نسبت به اوربیتال‌های قدیم p_x و p_y و p_z نمایش بهتری از حالت‌های الکترونی ارائه می‌دهند.

الکترون‌های اتم‌های همسایه با اشغال این اوربیتال‌های جدید می‌توانند بیشینه‌ی همپوشی را داشته باشند که اولین قاعده‌ی پایداری شیمیایی است. گرچه یک مقدار انرژی برای برانگیختگی یک الکترون از حالت $2s$ به حالت $2p$ لازم است، این مقدار بیش‌تر از انرژی‌ای است که توسط کاهش در انرژی برهم‌کنش با اتم مجاور تأمین می‌شود. (همین‌طور از این مثال ملاحظه می‌کنیم که پیکربندی الکترونی با کمترین انرژی در یک مولکول، ممکن است با پیکربندی کمترین انرژی در یک اتم منزوی متفاوت باشد).

در هم آمیختن حالت‌های s و p در رابطه‌ی (A-۲۵) به هیبریداسیون موسوم است.

هیبریداسیون خاصی که در الماس عمل می‌کند به نام sp^3 خوانده می‌شود. با تشکیل انواع متفاوت هیبرید می‌توان به انواع مختلف پیوندهای جهت‌دار رسید.

هیبریداسیون sp^3 در Si و Ge نیز رخ می‌دهد. در Si ، یک حالت $3s$ و سه حالت $3p$ برای تشکیل پیوندهای چهاروجهی باهم ترکیب می‌شوند در حالی که در Ge هیبریداسیون sp^3 شامل یک الکترون $4s$ و سه الکترون $4p$ می‌باشد.

پیوست B

در چند سال گذشته که دروس فیزیک حالت را تدریس کرده‌ام به تجربه دریافتم؛ جدول‌هایی که حاوی پارامترهای مربوط به خواص فیزیکی عناصر است به درک مفاهیم فیزیکی دانشجویان کمک می‌کند. جای خالی این جداول در کتاب حاضر مشهود است. لذا این پیوست را از مراجع دیگر گرفته و ضمیمه حاضر نمودم.

مترجم

بعضی از ثابت های بنیادی فیزیک

مقدار مورد استفاده در محاسبات	مقدار	نماد	ثابت
$3/0 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$	$299792458 \text{ ms}^{-1}$	c	سرعت نور در خلا
$1/6 \times 10^{-19} \text{ C}$	$1/6021892 \times 10^{-19} \text{ C}$	e	بار الکترون
$9/1 \times 10^{-31} \text{ Kg}$	$9/10934 \times 10^{-31} \text{ Kg}$	m_e	جرم سکون الکترون
$1/67 \times 10^{-27} \text{ Kg}$	$1/67262163 \times 10^{-27} \text{ Kg}$	m_p	جرم سکون پروتون
$1/68 \times 10^{-27} \text{ Kg}$	$1/6749543 \times 10^{-27} \text{ Kg}$	m_n	جرم سکون نوترون
$1/18 \times 10^{-28} \text{ Kg}$	$1/183566 \times 10^{-28} \text{ Kg}$	m_μ	جرم سکون میون
$8/85 \times 10^{-12} \text{ Fm}^{-1}$	$8/85418782 \times 10^{-12} \text{ Fm}^{-1}$	ϵ_0	ثابت گذردهی خلا
$1/26 \times 10^{-6} \text{ Hm}^{-1}$	$4\pi \times 10^{-7} \text{ Hm}^{-1}$	μ_0	ثابت تراوایی خلا
$6/63 \times 10^{-34} \text{ Js}$	$6/626176 \times 10^{-34} \text{ Js}$	h	ثابت پلانک
$1/38 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$	$1/380662 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$	k	ثابت بولتزمن
$8/31 \text{ J.mol}^{-1}\text{K}^{-1}$	$8/31441 \text{ J.mol}^{-1}\text{K}^{-1}$	R	ثابت جهانی گازها
$5/67 \times 10^{-8} \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-4}$	$5/67032 \times 10^{-8} \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-4}$	σ	ثابت استفان-بولتزمن
$6/02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$	$6/022045 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$	N_A	عدد آووگادرو
$9/28 \times 10^{-24} \text{ JT}^{-1}$	$9/284832 \times 10^{-24} \text{ JT}^{-1}$	μ_e	گشتاور مغناطیسی الکترون
$1/41 \times 10^{-26} \text{ JT}^{-1}$	$1/4106171 \times 10^{-26} \text{ JT}^{-1}$	μ_p	گشتاور مغناطیسی پروتون
$9/27 \times 10^{-24} \text{ JT}^{-1}$	$9/274078 \times 10^{-24} \text{ JT}^{-1}$	μ_B	مگنتون بور
$5/05 \times 10^{-27} \text{ JT}^{-1}$	$5/050824 \times 10^{-27} \text{ JT}^{-1}$	μ_N	مگنتون هسته ای
$5/29 \times 10^{-11} \text{ m}$	$5/2917706 \times 10^{-11} \text{ m}$	a_0	شعاع بور
$2/43 \times 10^{-12} \text{ m}$	$2/4263089 \times 10^{-12} \text{ m}$	λ_e	طول موج کامپتون الکترون
$9/65 \times 10^4 \text{ C.mol}^{-1}$	$9/648456 \times 10^4 \text{ C.mol}^{-1}$	F	ثابت فاراده
$6/67 \times 10^{-11} \text{ m}^3\text{s}^{-2}\text{kg}^{-1}$	$6/6720 \times 10^{-11} \text{ m}^3\text{s}^{-2}\text{kg}^{-1}$	G	ثابت گرانشی

نام و نماد عناصر

نام عنصر	نماد	نام عنصر	نماد	نام عنصر	نماد
Actinium	Ac	Hafnium	Hf	Praseodymium	Pr
Aluminum	Al	Helium	He	Promethium	Pm
Americium	Am	Holmium	Ho	Protactinium	Pa
Antimony	Sb	Hydrogen	H	Radium	Ra
Argon	Ar	Indium	In	Radon	Rn
Arsenic	As	Iodine	I	Rhenium	Re
Astatine	At	Iridium	Ir	Rhodium	Rh
Barium	Ba	Iron	Fe	Rubidium	Rb
Berkelium	Bk	Krypton	Kr	Ruthenium	Ru
Beryllium	Be	Lanthanum	La	Samarium	Sm
Bismuth	Bi	Lawrencium	Lr	Scandium	Sc
Boron	B	Lead	Pb	Selenium	Se
Bromine	Br	Lithium	Li	Silicon	Si
Cadmium	Cd	Lutetium	Lu	Silver	Ag
Calcium	Ca	Magnesium	Mg	Sodium	Na
Californium	Cf	Manganese	Mn	Strontium	Sr
Carbon	C	Mendelevium	Md	Sulfur	S
Cerium	Ce	Mercury	Hg	Tantalum	Ta
Cesium	Cs	Molybdenum	Mo	Technetium	Tc
Chlorine	Cl	Neodymium	Nd	Tellurium	Te
Chromium	Cr	Neon	Ne	Terbium	Tb
Cobalt	Co	Neptunium	Np	Thallium	Tl
Copper	Cu	Nickel	Ni	Thorium	Th
Curium	Cm	Niobium	Nb	Thulium	Tm
Dysprosium	Dy	Nitrogen	N	Tin	Sn
Einsteinium	Es	Nobelium	No	Titanium	Ti
Erbium	Er	Osmium	Os	Tungsten	W
Europium	Eu	Oxygen	O	Uranium	U
Fermium	Fm	Palladium	Pd	Vanadium	V
Fluorine	F	Phosphorus	P	Xenon	Xe
Francium	Fr	Platinum	Pt	Ytterbium	Yb
Gadolinium	Gd	Plutonium	Pu	Yttrium	Y
Gallium	Ga	Polonium	Po	Zinc	Zn
Germanium	Ge	Potassium	K	Zirconium	Zr
Gold	Au				

جدول تناوبی عناصر همراه با عدد اتمی آن ها

1 H																	2 He									
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne									
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar									
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 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Uun																	
																		87 Ho	88 Er	89 Tm	90 Yb	91 Lu				
																		97 Tb	98 Dy	99 Ho	100 Er	101 Tm	102 Yb	103 Lu		
																		95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

لانتانید ها

اكتینید ها

پارامتر سامرفیلد γ مربوط به ظرفیت گرمایی الکترونی فلزات به دست آمده از تجربه و مدل الکترون آزاد

Li	Be											B	C	N
1.63	0.17													
0.749	0.500													
2.18	0.34													
Na	Mg											Al	Si	P
1.38	1.3											1.35		
1.094	0.992											0.912		
1.26	1.3											1.48		
		$\frac{m/m}{m/m} = \frac{\gamma \text{ مشاهده شده}}{\gamma \text{ مشاهده شده بر حسب } K}$ $\frac{m/m}{m/m} = \frac{\gamma \text{ مشاهده شده}}{\gamma \text{ مشاهده شده بر حسب } K}$												
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As
2.08	2.9	10.7	3.35	9.26	1.40	9.20	4.98	4.73	7.02	0.695	0.64	0.596		0.19
1.668	1.511								0.505	0.753	1.025			
1.25	1.9								1.38	0.85	0.58			
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb
2.41	3.6	10.2	2.80	7.79	2.0	—	3.3	4.9	9.42	0.646	0.688	1.69	1.78	0.11
1.911	1.790								0.645	0.948	1.233	1.410	1.410	
1.26	2.0								1.00	0.73	1.37	1.26	1.26	
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi
3.20	2.7	10.	2.16	5.9	1.3	2.3	2.4	3.1	6.8	0.729	1.79	1.47	2.98	0.008
2.238	1.937								0.642	0.952	1.29	1.509	1.509	
1.43	1.4								1.14	1.88	1.14	1.97	1.97	

واژه نامه انگلیسی به فارسی

Acceptor	پذیرنده
Accumulation	انبارش
Anisotropic	ناهمگن
Avalanche breakdown	شکست بهمنی
Band	نوار
Band theory	تئوری نواری
Base	پایه
Bilayer	دولایه
Bloch electron	الکترون بلوخ
Bohr magneton	مگنتون بوهر
Bond	پیوند
Bound state	حالت مقید
Boundary condition	شرط مرزی
Brillouin Scattering	پراکندگی برلیون
Closure domain	حوزه بستار
Coercive force	نیروی وادارنده
Coherence	همدوسی
Coherence length	طول همدوسی
Collector	جمع کننده
Collision time	زمان برخورد
Conduction band	نوار رسانش
Conduction electrons	الکترون‌های رسانش
Continuous medium	محیط پیوسته
Contour	پربند
Controlled diffusion	پخش کنترل شده
Cooper pairs	زوج‌های کوپر
Core electrons	الکترون‌های داخلی
Covalent bond	پیوند کووالان

Covalent bonding	بستگی کووالان
Critical field	میدان بحرانی
Critical points	نقاط بحرانی
Crystal	بلور
Curie temperature	دمای کوری
Curie-Weiss law	قانون کوری - وایس
Cyclotron frequency	فرکانس سیکلوترونی
Cyclotron resonance	تشدید سیکلوترونی
Defect	نقص
Degenerate	تبهگن
Demagnetization	وامغناطیدگی
Density of states	چگالی حالت‌ها
Depletion layer	تهی لایه
Depolarization field	میدان واقطییدگی
Destructive	ویرانگر
Detector	آشکارساز
Diamagnetism	دیامغناطیس
Diamond	الماس
Diatomic	دو اتمی
Dielectric loss	تلفات دی الکتریک
Dielectric	دی الکتریک
Dielectric Constant	ثابت دی الکتریک
Diffused scattering	پراکندگی بخش شده
Diffusion	بخش
Direct gap semiconductor	نیمه رسانای گاف مستقیم
Dispersion	دوقطبی
Dispersion relation	رابطه‌ی پاشندگی
Displacement current	جریان جابه‌جایی
Displasive model	مدل جابه‌جایی

Divalent	دو ظرفیتی
Domain	حوزه - ناحیه
Donor	بخشنده
Doped	آلاییده
Drain	چاهک
Drift transistor	ترانزیستور سوقی
Easy direction	جهت ساده (آسان)
Effective charge	بار مؤثر
Effective mass	جرم مؤثر
Electric dipole moment	گشتاور دو قطبی الکتریکی
Electrical conductivity	رسانایی الکتریکی
Electrical dipole	دو قطبی الکتریکی
Electron concentration	چگالی الکترونی
Emitter	گسیلنده
Energy band	نوار انرژی
Entropy	آنترپی
Epitaxial growth	رشد بر آراستی
Exciton	اکسیتون
Extinction coefficient	ضریب خاموشی
Extrinsic semiconductor	نیمه رسانای غیرذاتی
Farady rotation	چرخش فارادی
Fermi level	تراز فرمی
Fermi surface	سطح فرمی
Fermi-Dirac distribution	تابع توزیع فرمی - دیراک
Ferroelectric	فروالکتریک
Ferromagnetism	فرومغناطیس
Field effect transistor	ترانزیستور اثر میدان
Fluorescence	فلورسانس
Free carriers	حامل های آزاد

Fundamental absorption	جذب اساسی
Grain	دانه
Gunn diode	دیودگان
Gyromagnetic ratio	نسبت ژيرو مغناطیسی
Hall constant	ثابت هال
Hall field	میدان هال
Hamiltonian	همیلتونی
Hard direction	جهت سخت
Heavy holes	حفره‌های سنگین
Hetropolar	چند قطب
Hexagonal	شش گوشی
Hole	حفره
Homopolar	هم قطب
Hysteresis	هیستریزیس - پسماند
Impurity	ناخالصی
Impurity states	حالت‌های ناخالصی
Incandescence	التهاب
Indirect gap semiconductor	نیمه رسانای گاف غیر مستقیم
Injection efficiency	راندمان تزریق
Integrated circuits	مدارهای مجتمع
Intensity	شدت
Intermediate state	حالت میانی
Intraband transition	گذار بین نواری
Intrinsic frequency	فرکانس ذاتی
Intrinsic semiconductor	نیمه رسانای ذاتی
Ion implantation	یون نشانی
Isotropic	همگن
Itineral electron model	مدل الکترون سیار
Josephson effect	اثر جوزفسون

Jumping frequency	فرکانس جهش
Junction transistor	ترانزیستور پیوندی
Lande factor	ضریب لانده
Langevin function	تابع لانژوین
Larmor frequency	فرکانس لارمور
Light holes	حفره‌های سبک
Light-emitting diode	دیود گسیلنده‌ی نور
Local field	میدان موضعی
Longitudinal	طولی
Longitudinal mass	جرم طولی
Lorantz factor	ضریب لورنتس
Luminescence	لومینسانس
Magnetic anisotropy energy	انرژی عدم تقارن مغناطیسی
Magnetic dipole moment	گشتاور دوقطبی مغناطیسی
Magnetic field intensity	شدت میدان مغناطیسی
Magnetic induction	القا (اندو کسیون) مغناطیسی
Magnetic relaxation	واهلش مغناطیسی
Magnetostriction	مغناطوتنگش
Majority carriers	حامل‌های اکثریت
Maxwell Boltzman distribution	توزیع ماکسول بولتزمن
Meissner effect	اثر مایسنر
Melting point	نقطه‌ی ذوب
Metal insulator transition	گذار فلز - عایق
Minority carriers	حامل‌های اقلیت
Mobility	تحرک
Momentum	اندازه حرکت
Negative differential conductance	رسانایی دیفرانسیلی منفی
Negative differential resistance	مقاومت دیفرانسیلی منفی
Normal electron	الکترون عادی

n-type semiconductor	نیمه رسانای نوع n
Nuclear Bohr magneton	مگنتون هسته‌ای بوهر
Nucleate	دانه بندی
Optical cavity	کاواک نوری
Paraelectric	پاراالکتریک
Paraelectric phase	حالت پارالکتریک
Paramagnetic resonance	تشدید پارامغناطیسی
Paramagnetism	پارامغناطیس
Penetration dept	عمق نفوذ
Perfect crystal	بلور کامل
Permanent magnetic moment	گشتاور مغناطیسی دائمی
Permeability	تراوایی
Phase transition	گذار فاز - گذار حالت
Phosphorescence	فسفر سانس
Photoconductivity	فوتو رسانش
Photovoltaic	فوتوولتاییک
Piezoelectricity	پیزو الکتریسیته
Plane Polarized	قطبیده تخت
Point group	گروه نقطه‌ای
Polarizability	قطبش پذیری
Polarization	قطبیدگی - قطبش
Polarization catastrophe	فاجعه قطبیدگی
Population inversion	وارونی جمعیت
Processional motion	تکت تقدیمی
Pseudofunction	شبه تابع
Pseudopotential	شبه پتانسیل
p-type semiconductor	نیمه رسانای نوع p
Puali exclusion principle	اصل طرد پائولی
Quantum efficiency	کارایی کوانتومی

Raman scattering	پراکندگی رامان
Recombination time	زمان بازترکیب
Relaxation time	زمان واهلش
Remanent magnetization	مغناطش باقیمانده
Reversible	برگشت پذیر
Saturation current	جریان اشباع
Saturation magnetization	مغناطش اشباع
Semimetal	نیمه فلز
Skin depth	عمق پوست
Source	چشمه
Space-charge	بار فضایی
Spin waves	امواج اسپین
Spin-lattice relaxation time	زمان واهلش اسپین - شبکه
Spin-orbit interaction	برهم کنش اسپین - مدار
Spontaneous	خودبه خودی
Stimulated emission	گسیل القایی
Substrate	زیر لایه
Superconductivity	ابر رسانایی
Superconductor	ابر رسانا
Superelectron	آبر الکترون
Surface recombination	بار ترکیب سطحی
Susceptibility	پذیرفتاری
Symmetry	تقارن
Tetrahedral band	پیوند چهاروجهی
Thermal conductivity	رسانایی حرارتی
Thermal vibrations	ارتعاشات حرارتی
Thermoionic emission	گسیل گرمایونی
Thin film	لایه ی نازک
Threshold field	میدان آستانه

Transition	گذار
Transit-time effect	اثر زمان عبور
Transport factor	ضریب ترابری
Transport phenomena	پدیده‌های ترابری
Transverse	عرضی
Transverse mass	جرم عرضی
Trivalent impurity	ناخالصی سه ظرفیتی
Tuneability	کوک پذیری
Tunnel diode	دیود تونل
Two fluid model	مدل دوشاره‌ای
Ultrasonic	فراصوت
Valence band	نوار ظرفیت
Valence electrons	الکترون‌های ظرفیت
Valley	دره
Van der waals bond	پیوند وان در والس
Wavelength	طول موج
Zeeman splitting	شکافتگی زیمان
Zener breakdown	شکست زنر
Zero point energy	انرژی نقطه‌ی صفر
Zero point motion	حرکت نقطه‌ی صفر