

نام :الله	نام خانوادگی دانشجو : میرداودی
عنوان پایان نامه : گرماسنجی روبشی تفاضلی و مشخصه نگاری ساختاری شیشه های $Sb-V_2O_5-TeO_2$	
استاد راهنما : دکتر داریوش سوری	
مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد دانشگاه ملایر-گروه: فیزیک تعداد صفحات: ۹۶	گرایش: حالت جامد رشته: فیزیک تاریخ فارغ التحصیلی : شهریور ۱۳۹۱
کلید واژه : نیمرسانی بی شکل، دمای گذار شیشه ای، گرماسنجی روبشی تفاضلی، دمای بلوری شدن، شیشه های اکسیدی	

### چکیده:

در این کار پژوهشی، تحلیل کالریمتری نمونه های توده ای آمورف  $X Sb - (60-X) V_2O_5 - 4.0 TeO_2$  ( $0 \leq x \leq 15$  mol%) با استفاده از آنالیز گرماسنجی روبشی تفاضلی انجام شد. دمای گذار شیشه ای ( $T_g$ ) و دمای بلوری شدن ( $T_{cr}$ ) در این شیشه ها اندازه گیری شد و تأثیر نرخ گرمایش و همچنین درصد مولی Sb روی  $T_g$  بررسی شد. همچنین این نتیجه بدست آمد که ناحیه گذار شیشه ای با کاهش زمان اندازه گیری (نرخ گرمایش) به سمت دماهای بالاتر می رود. وابستگی دمای گذار شیشه ای به نرخ گرمایش و انرژی فعالسازی گذار شیشه ای ( $\Delta H^*$ ) این نمونه ها نیز در نرخهای مختلف گرمایش بررسی شد. با استفاده از مدل های

Moynihan و Kissinger مقادیر مختلف انرژی فعالسازی در ناحیه های مختلف گرمایش بدست آمد. با استفاده از آنالیز گرماسنجی تفاضلی رویشی بستگی ترکیبی  $T_g$  محاسبه شد در نهایت یک معادله تجربی بدست آمد که رابطه بین دمای گذار شیشه ای و درصد مولی Sb را مشخص می کرد.

در این پژوهش، پارامتر تردی ( $m = \Delta H^*/RT_g$ ) برای  $x=15\text{ mol\%}$  به میزان  $54/40$  بدست آمد که می توان گفت نسبت به شیشه های دیگر دارای سخت ساختاری بیشتری است (در شیشه های ترد می توان گفت که مقدار تردی  $m > 90$ ).

## فهرست مطالب

عنوان	صفحه
فصل اول: معرفی مواد بی شکل و نظریه الکترونی محیط های غیر بلوری ..... ۲	۲
۱-۱) مقدمه ..... ۱	۲
۱-۲) تعریف جامدات بی شکل ..... ۱	۳
۱-۳) معرفی و دسته بندی بی نظمی ..... ۴	۴
۱-۴) نیمرساناهای بی شکل (آمورف) ..... ۱۰	۱۰
۱-۴-۱) مقدمه ..... ۱۰	۱۰
۱-۴-۲) انواع نیمرساناهای بی شکل ..... ۱۰	۱۰
۱-۴-۳) شیشه ها ..... ۱۳	۱۳
۱-۴-۴) مراتب گذار ..... ۱۶	۱۶
۱-۴-۵) نظریه الکترونی در محیط غیر بلوری ..... ۱۹	۱۹
۱-۵) مقدمه ..... ۱۹	۱۹
۱-۵-۱) حالت های جایگزیده و جایگزیدگی آندرسون ..... ۲۱	۲۱
۱-۶) مدل های ساختار نواری برای مواد بی شکل ..... ۲۷	۲۷
۱-۶-۱) مدل کوهن- فریتشه- اوشینسکی ..... ۲۹	۲۹
۱-۶-۲) مدل دیویس- مات ..... ۳۰	۳۰
۱-۶-۳) مدل رسانشی پلارون کوچک ..... ۳۰	۳۰

۳۱	۱-۷) روش های تهیه مواد بی شکل
۳۲	۸-۱) آلیاژهای هالوژنی آمورف
۳۳	۹-۱) کاربردهای مواد بی شکل
۳۳	۹-۱-۱) کاربردهای الکتریکی
۳۴	۹-۱-۲) کاربردهای الکتروشیمیایی
۳۵	۹-۱-۳) کاربردهای نوری

۳۷	فصل دوم: مرور نظری روش‌های تحلیل گرمایی جامدات آمورف
۳۷	۱-۲) مقدمه
۳۸	۲-۲) ظرفیت گرمایی شبکه
۳۹	۱-۲-۲) مدل اینشتین
۴۱	۲-۲-۲) مدل دبی در مورد ظرفیت گرمایی شبکه
۴۴	۳-۲) ظرفیت گرمایی شیشه ها و جامدات آمورف
۴۵	۴-۲) اندازه گیری ظرفیت گرمایی شیشه ها در فشار ثابت
۴۵	۴-۲) اندازه گیری ظرفیت گرمایی شیشه ها در حجم ثابت
۴۵	۴-۲) شیشه های ترد و سخت
۴۷	۱-۴-۲) مدل Ozawa
۴۸	۲-۴-۲) مدل Moynihan
۴۹	۳-۴-۲) مدل Kissinger

۵۰	..... تکنیکهای تحلیل حرارتی ..... ۲-۵
۵۰	..... ۱-۵) تحلیل گرمایی تفاضلی ..... ۲
۵۱	..... ۲-۵) گرماسنجدی روبشی تفاضلی ..... ۲
۵۵	<b>فصل سوم: روش آزمایشگاهی.....</b>
۵۵	..... ۱-۳) مقدمه ..... ۳
۵۵	..... ۲-۳) فرآیند آزمایشگاهی ..... ۳
۵۵	..... ۱-۲-۳) مقدمه ..... ۳
۵۶	..... ۲-۲-۳) مشخصات نمونه های اولیه و روش تهیه ..... ۳
۵۸	..... ۳-۳) مشخصه یابی نمونه ها ..... ۳
۵۸	..... ۱-۳-۳) تحلیل طرح پراش پرتو X ..... ۳
۵۸	..... ۲-۳-۳) اندازه گیری چگالی نمونه ها ..... ۳
۵۹	..... ۳-۳-۳) تحلیل گرمایی ..... ۳
۶۱	<b>فصل چهارم: نتایج و بحث.....</b>
۶۱	..... ۱-۴) مقدمه ..... ۴
۶۲	..... ۲-۴) مشخصه یابی پرتو ایکس ..... ۴
۶۵	..... ۳-۴) ملاحظات گرمایی و انرژی فعالسازی گذار شیشه ای ..... ۴
۷۸	..... ۱-۳-۴) مدل Moynihan ..... ۴

۷۹	Kissinger مدل (۴-۳-۲)
۸۰	۴-۴) وابستگی دمای گذار شیشه ای به ترکیب نمونه ها
۸۴	۴-۵) چگالی نمونه های توده ای
۸۵	۴-۶) بررسی میزان سختی نمونه ها
۸۸	۴-۷) ویسکوزیته نمونه ها در ناحیه گذار شیشه ای
۹۳	منابع و مأخذ

## فهرست جدول ها

عنوان	صفحة
جدول ۱-۳) مشخصات پودر های اولیه جهت تهیه نمونه $Sb - V_2O_5 - TeO_2$	۵۶
جدول ۱-۴) نرخ گرمایش، دمای گذار شیشه ای، دمای تبلور، اختلاف دماهای گذار شیشه ای و تبلور، انرژی فعالسازی در نرخهای گرمایش پایین و انرژی فعالسازی در نرخهای گرمایش بالا برای نمونه های TGSX	۸۷

## فهرست شکل ها

عنوان	صفحة
شکل ۱-۱) یک ساختار دو بعدی فرضی: a) شکل بلورین b) شکل آمورف ..... ۴	
شکل ۱-۲) انواع بی نظمی در ساختار مواد ..... ۱۰	
شکل ۱-۳) گذار فاز برای بلور و شیشه ..... ۱۵	
شکل ۱-۴) a) چاه پتانسیل برای شبکه بلوری ..... ۲۵	
شکل ۱-۴) b) چاه پتانسیل برای شبکه آندرسون ..... ۲۵	
شکل ۱-۵) تابع موج در مدل آندرسون ..... ۲۶	
شکل ۱-۶) چگالی حالتها در مدل آندرسون ..... ۲۷	
شکل ۱-۷) a) رسانندگی $\sigma$ بر حسب انرژی E در مدل آندرسون ..... ۲۸	
شکل ۱-۷) b) انرژی فعال سازی جهشی W بر حسب انرژی E ..... ۲۸	
شکل ۱-۸) نمودار چگالی حالتها برای مواد بی شکل ..... ۳۰	
شکل ۲-۱) ظرفیت گرمایی سیلیسیم و ژرمانیوم ..... ۳۹	
شکل ۲-۲) مقایسه مقادیر تجربی ظرفیت گرمایی الماس با مقادیری که از مدل اینشتین محاسبه شده اند ..... ۴۱	

..... ۴۲	..... شکل ۲-۳) چگالی مدها به صورت تابعی از بسامد
..... ۴۴	..... شکل ۲-۴) توضیحی کیفی از قانون $T^{\alpha}$ دبی
..... ۴۶	..... شکل ۲-۵) نمودار طرحوار از بستگی دمایی ویسکوزیته در شیشه های ترد و سخت
..... ۵۳	..... شکل ۲-۶) منحنی های DSC نمونه TVSX ۴۰ در نرخ های گرمایی مختلف
..... ۶۴	..... شکل ۲-۱) طرح پراش پرتو ایکس نمونه های TVSX ۴۰
..... ۶۸	..... شکل ۲-۲) نمودارهای DSC مربوط به نمونه TVS۵ ۴۰
..... ۷۰	..... شکل ۲-۳) نمودارهای DSC مربوط به نمونه TVS۱۰ ۴۰
..... ۷۲	..... شکل ۲-۴) نمودارهای DSC مربوط به نمونه TVS۱۲ ۴۰
..... ۷۴	..... شکل ۲-۵) نمودارهای DSC مربوط به نمونه TVS۱۵ ۴۰
..... ۷۶	..... شکل ۲-۶) نمودار $T_g$ بر حسب نرخ گرمایش φ برای نمونه های TVSX ۴۰
..... ۷۷	..... شکل ۲-۷) نمودار $\ln \varphi$ بر حسب $T_g$ برای نمونه TVS۰ ۴۰
..... ۷۷	..... شکل ۲-۸) نمودار $\ln \varphi$ بر حسب $T_g / 1000$ برای نمونه های TVSX ۴۰
..... ۷۸	..... شکل ۲-۹) نمودار $\ln(\frac{\varphi}{T_g})$ بر حسب $T_g / 1000$ برای نمونه های TVSX ۴۰
..... ۷۹	..... شکل ۲-۱۰) نمودار تغییرات دمای گذار شیشه ای بر حسب درصد مولی Sb
..... ۸۰	..... شکل ۲-۱۱) نمودار $\Delta H^*$ بر حسب درصد مولی Sb در نرخهای گرمایی بالا و پایین
..... ۸۱	..... شکل ۲-۱۲) نمودار تغییرات دمای گذار شیشه ای بر حسب درصد مولی Sb
..... ۸۳	..... شکل ۲-۱۳) نمودار تغییرات $\ln(T_g)$ بر حسب x برای نمونه های TVSX ۴۰ در نرخ های گرمایش مختلف

شكل ۴-۱۴) نمودار A بر حسب  $\ln \varphi$  برای نمونه های ۴۰TVSX در نرخهای مختلف گرمایش

۸۳.....

شكل ۴-۱۵) نمودار n بر حسب  $\ln \varphi$  برای نمونه های ۴۰TVSX در نرخهای مختلف گرمایش

شكل ۴-۱۶) نمودار تغییرات چگالی بر حسب درصد مولی Sb برای نمونه های ۴۰TVSX

۸۵.....

شكل ۴-۱۷) نمودار پارامتر سختی نمونه بر حسب درصد مولی Sb در نرخهای گرمایش بالا ..

شكل ۴-۱۸) نمودار پارامتر سختی نمونه بر حسب درصد مولی Sb در نرخهای گرمایش پایین

شكل ۴-۱۹) نمودار طرحوار از بستگی دمایی ویسکوزیته در شیشه های ترد و سخت .....

شكل ۴-۲۰) نمودار  $\log \eta(T)$  بر حسب  $T_g/1000$  برای نمونه های مختلف در شیشه های

۴۰TVSx در نرخهای گرمایش پایین .....

شكل ۴-۲۱) نمودار  $\log \eta(T)$  بر حسب  $T_g/1000$  برای نمونه های مختلف در شیشه های

۴۰TVSX در نرخهای گرمایش بالا .....

## فصل اول

معرفی مواد بی شکل و نظریه الکترونی

محیط‌های غیربلوری

### ۱-۱) مقدمه

مواد آمورف یا بی شکل، مواد جدیدی نیستند و شیشه های سیلیکاتی دارای قدمت بیلیون ساله اند [۱]. مواد آمورف به خاطر خواص منحصر به فرد خود جایگاه خاصی در صنعت دارند که این خواص تقریباً در جامدات بلوری مشاهده نمی شود. از جمله دلایل دیگر اهمیت این مواد، تهیه ی نسبتاً ساده ی آنها نسبت به مواد بلوری و همچنین کنترل خواص نوری و الکتریکی مواد آمورف از طریق تغییر درصد مولی مؤلفه های تشکیل دهنده آن ها می باشد [۱,۲].

مواد آمورف بصورت توده ای<sup>۱</sup> و لایه های نازک<sup>۲</sup> در سیستم های کلیدزنی<sup>۳</sup>، فیبر نوری و... به کار می روند [۱]، که در بخش پایانی فصل برخی کاربردهای این مواد را در دسته بندي های خاص بیان خواهیم کرد.

---

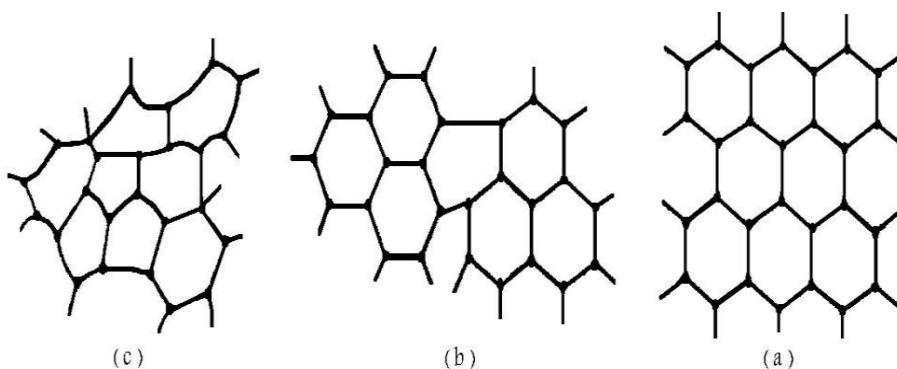
<sup>۱</sup> Bulk  
<sup>۲</sup> Thin film  
<sup>۳</sup> Switching

## ۱-۲) تعریف جامدات بی شکل

جامدات بی شکل، غیربلوری هستند و فاقد نظم تناوبی بلندبرد در آرایش اتم- های تشکیل دهنده می باشند. البته منظور این نیست که مواد بی شکل به طور کامل بر روی مقیاس اتمی بی نظم هستند [۳-۵].

جامدات بی شکل به دلیل فقدان نظم و تناوب بلندبرد در شبکه، دارای ویژگی های خاصی هستند که در مواد بلوری دیده نمی شود. در بلور کامل، اتم ها به طور تناوبی و نامتناهی در یک فضای سه بعدی تکرار می شوند و به عبارت بهتر نظم بلندبرد داشته و تابع موج الکترونی در آن ها تابع موج بلاخ می باشد، در حالیکه در جامدات بی شکل تابع موج بلاخ دیگر معتبر نیست. بلورهای محدود دارای ناکاملی های سطحی و حاوی نقایصی مانند تهیجا<sup>۱</sup>، اتم بین شبکه ای، دررفتگی، بلورهای ناکامل یا واقعی هستند. با این وجود، بی نظمی<sup>۲</sup> می تواند فراتر از حد ناکاملی در بلور باشد [۳]. بنابراین می توان از نظر ساختاری جامدات را به طور کامل، به سه دسته بلوری، چندبلوری و بی شکل تقسیم نمود که طرحواره بلور کامل و بی شکل در شکل (۱-۱) نشان داده شده است [۴]؛ البته لازم است بین جامدات بی شکل و چندبلوری تفاوت قائل شویم، بدین صورت که در جامدات بی شکل صرفاً ممکن است مناطقی کوچک با نظم کوتاه برد در ریز ساختار نمونه وجود داشته باشد در صورتیکه در حالت چندبلوری، نظم بلوری حوزه های مختلف با هم تفاوت دارد [۵].

<sup>۱</sup> Vacancy  
<sup>۲</sup> Disorder



شکل ۱-۱) یک ساختار دو بعدی فرضی: a) شکل بلورین b) چندبلوری c) بی شکل [۱]

در این طبقه بندی یادآور می شویم که در مواد بی شکل نظم بلندبرد<sup>۱</sup> وجود ندارد که به معنی فقدان نظم کوتاه برد<sup>۲</sup> روی پیکربندی نزدیکترین همسایه ها نیست و بسیاری از خواص جامدات بی شکل معطوف به وجود همین نظم کوتاه برد می باشد. بنابراین می بایست انواع مختلف بی نظمی را معرفی نماییم.

### ۱-۳) معرفی و دسته بندی بی نظمی

از زمانی که برای نخستین بار تشخیص داده شد بی نظمی کافی موجب جایگزیدگی<sup>۳</sup> حالت های الکترونی درون نوارهای انرژی رسانش و ظرفیت می شود، ۵۰ سال می گذرد (جایگزیدگی در بخش های بعد معرفی خواهد شد). اگر بی نظمی برای جایگزیدگی تمام حالت های درون نوار کافی نباشد آنگاه تنها برخی از حالت های الکترونی همچون آن هایی که در لبه نوارهای انرژی مجاز قرار دارند، جایگزیده می شوند. حتی برای بی نظمی بی نهایت کوچک، حالت های جایگزیده با چگالی های کوچک وجود دارد. جدایی میان پایین ترین انرژی حالت های جایگزیده در پایین نوار رسانش، محدوده ای از انرژی را پدید می آورد که

<sup>۱</sup> Long-rang order

<sup>۲</sup> Short-rang order

<sup>۳</sup> Localization

به عنوان گاف تحرک<sup>۱</sup> شناخته می شود. برای نیمرساناهای آمورف چنین جایگزیدگی موجب ایجاد پیامدهای فراوانی در بسیاری از خواص الکترونی و نوری می شود. اگرچه پیشرفت قابل توجهی در درک جزئیات این حالت ها به وجود آمده است بسیاری از مسائل مهم باقی مانده است. حتی جامدھای بلوری نیز بی نظم هستند. در واقع تمامی جامدات واقعی در دمای محدود رشد می یابند و دچار ناراستی ترمودینامیکی می شوند. همچنین می توان گفت ناخالصی ها همواره در جامدات واقعی وجود دارند. حتی اگر تصور شود که یک جامد کامل مثل Si و Ge که دارای هیچگونه ناخالصی یا ناراستی نیست، به علت وجود ایزوتوب های مختلف دارای بی نظمی خواهد بود [۶]. به عبارت دیگر، در بلورهای کامل، تمامی ویژه حالت های تک ذره ای، حالت های بلاخ هستند که در سراسر فضا گسترش یافته اند. در جامدھای بی نظم، حالت های جایگزیده و گستردہ می تواند بطور همزمان وجود داشته باشد هرچند که دارای انرژی های مختلفی باشند. انواع حالت های جایگزیده و غیر جایگزیده از نظر انرژی توسط لبه ای تحرک از هم جدا می شوند. فرآیند جایگزیدگی ناشی از بی نظمی، جایگزیدگی "آندرسون" نامیده می شود و به طبیعت کوانتوم مکانیک حالت های الکترون بستگی دارد .[۷]

اگر کلیه جامدھای واقعی بی نظم باشند در نگاه اول به نظر می رسد که باید تأثیر حالت های الکترونی جایگزیده تماماً در نظر گرفته شود. به طور کلی این فرضیه صادق است اما واضح است که نظریه ای جامدھای بلورین کاملاً در توصیف خواص کپه ای اغلب جامداتی که اتم های آنها بر روی یک شبکه ای تناوبی قرار گرفته است، بسیار موفق بوده است. در واقع، برخی خواص همچون رسانندگی الکتریکی را می - توان در قالب بعضی جزئیات بدون رجوع به یک شبکه تناوبی که برای محاسبه حالت های کوانتومی لازم است، شرح داده شود. گاز فرمی الکترون آزاد بارزترین مثال به شمار می رود. بنابراین بهتر است بحثمان را به بی نظمی خلاصه کنیم و تنها آن مواردی را در نظر بگیریم که خود بی نظمی در تعیین خواص

<sup>۱</sup> Mobility gap

فیزیکی کپه ای حائز اهمیت است، همچون خواص گرمایی، ارتعاشی، نوری یا الکتریکی. در نیمرساناهای آمورف این مسئله همواره مطرح است [۶].

حال به معرفی مختصر انواع بی نظمی می پردازیم که در یک دسته بنده عمومی عبارتند

از:

الف) بی نظمی همگن<sup>۱</sup>، ب) بی نظمی ناهمگن<sup>۲</sup>. بی نظمی همگن هنگامی رخ می دهد که تمام منطقه های با تعداد زیاد اتم یا مولکول دارای میانگین یکسان خواص کپه ای از جمله چگالی، سرعت صوت، گرمای ویژه، رسانندگی گرمایی یا الکتریکی و ... باشند. ساده ترین مثال بی نظمی همگن، بی نظمی است که در یک شبکه تناوبی ایجاد می شود. این دسته از بی نظمی ذاتاً دارای نظم هندسی هستند، چرا که می توان یک مکان های شبکه ای را با استفاده از بردارهای انتقال مناسب و خوش تعریف مشخص ساخت. یعنی بی نظمی در نوع اتم یا مولکولی که در یک مکان خاص موجود است، ایجاد می شود. اتم ها و مولکول ها بر روی یک شبکه منظم قرار می گیرند، اما در نوع اتم واقع در هر مکان شبکه ای قطعیتی وجود ندارد. بی نظمی همگن بر روی یک شبکه تناوبی گاهی بی نظمی جایگزینی یا بی نظمی سلولی نیز نامیده می شود. هالیدهای قلیایی – نیمرساناهای III-V و ... مثال هایی از بی نظمی همگن اند.

گروه دیگری از بی نظمی همگن، بی نظمی است که جامد دارای نظم تناوبی بلندبرد نمی باشد. این جامدات که جامدات آمورف گروه اصلی آن ها را تشکیل می - دهد دارای بی نظمی هندسی ذاتی هستند، اما بر روی یک مقیاس ماکروسکوپی همگن باقی می مانند. اگرچه نظم بلندبرد تناوبی نیست، اما تمامی جامدات در این گروه دارای ترتیب اتمی محلی می باشند که

<sup>۱</sup> Homogeneous disorder

<sup>۲</sup> Inhomogeneous disorder

تا حدی منظم است (نظم کوتاه برد). برای چنین جامد هایی نظم در ترتیب محلی اتم ها با فاصله گرفتن از یک مکان شبکه ای به سرعت محو می شود.

بسیاری از مواد که دارای بی نظمی همگن از نوع فقدان تناوب بلندبرد می باشند می توانند در قالب آمورف<sup>۱</sup>، زجاجی<sup>۲</sup> یا شیشه ای<sup>۳</sup> توصیف می شوند. یک جامد بی - نظم همگن اگر آرایه ای تناوبی مکان های شبکه ای نداشته باشد، آمورف در نظر گرفته می شود؛ در این سامانه ها برخی از ارتباط های هندسی میان اتم ها یا مولکول ها اتفاقی و کاتوره ای است. با توجه به این توضیحات، چنین برمی آید که فرونشانی سریع فاز مذاب به جامد منجر به آمورف شدن می شود.

بی نظمی ناهمگن از بی نظمی همگن پیچیده تر است. در این جامدات خواص میانگین از یک منطقه به منطقه ای دیگر متفاوت است. در مقایسه با جامدات بی نظم همگن، می توان جامدات بی نظم ناهمگن را در دو گروه در نظر گرفت، یکی در ابتدا به صورت هندسی منظم و دیگری از ابتدا نا منظم. مثال هایی از گروه اول، جامد های چند بلوری، بلورهای با فازهای مجزا می باشند؛ مثال های گروه دوم شیشه ها و سرامیک چند فازی هستند. لایه های نازک سیلیکون نانو بلورین و میکرو بلورین معمولاً ترکیبی از این دو است.

به طور کلی، بی نظمی افت و خیز در پتانسیل را برای الکترون ها به وجود می - آورد که در عین حال موجب جایگزیدگی برخی از توابع موج الکترون ها و حفره ها در نیمرسانها می گردد. این مسئله نخستین بار توسط آندرسون مورد بررسی قرار گرفت. او مدل سه بعدی کرونیگ - پنی را با چاه پتانسیل هایی که در مقدار میانگین دچار افت و خیز کاتوره ای بودند در نظر گرفت.

<sup>۱</sup> Amorphous

<sup>۲</sup> Vitreous

<sup>۳</sup> Glassy

اگرچه این مدل بسیار ساده است اما دارای اکثر ویژگی هایی است که به جامدات آمورف مربوط می شود و از آن میان می توان به جایگزیدگی حالت های الکترونی در لبه های نواری اشاره کرد؛ (این موضوع در بخش های بعد مورد بررسی قرار می گیرد).

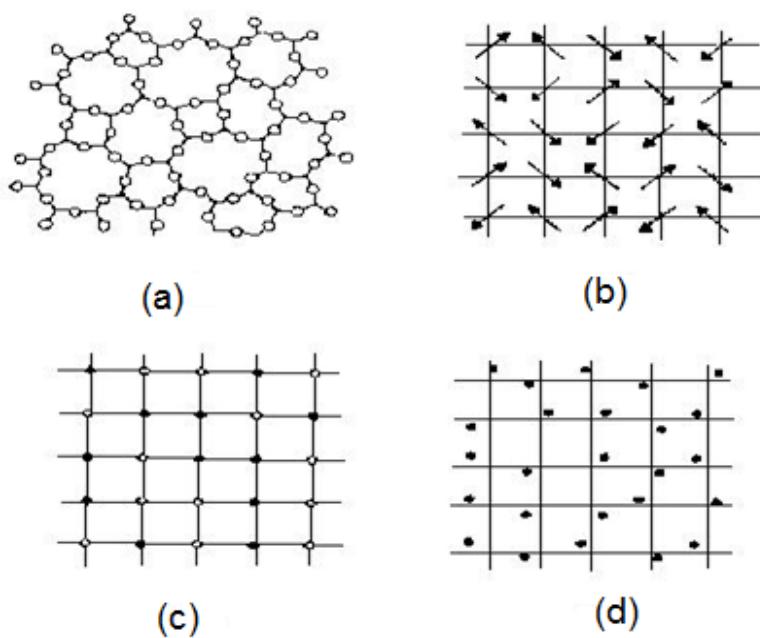
از طرفی در نیمرساناهای که موضوع اصلی این پایان نامه می باشد، الکترون های رسانش در نیمرساناهای بی نظم معمولاً با ارتعاشات شبکه برهمنکنش دارند. این جفت شدگی با حمام فونونی حالت های الکترونی را دستخوش تغییر قرار می دهد. در نتیجه جایگزیدگی آندرسون در نیمرسانای بی نظم با ابهام رویرو می شود. با این وجود می - توان نشان داد علیرغم عدم حضور جایگزیدگی برای حالت های نزدیک به لبه هی تحرک یک نیمرسانای بی نظم، فرمول های توصیف ترابرد الکترونی در حالت های نزدیک به لبه هی تحرک همچنان مشابه آن سیستم هایی است که فاقد برهمنکنش الکترون - فونون می باشد. انحراف های ساختاری در نظم بلوری، عامل وجود لبه هی تحرک به شمار می روند، که به دنباله های نواری منجر شده و شبه گاف را در نیمرساناهای آمورف تعریف می کند. به علاوه اینکه، مواد به طور کلی دارای حالت های ناراستی می باشند که این ناراستی ها به پیوندهای آویزان<sup>۱</sup> یا ناخالصی ها مربوط می شود؛ این حالات در شبه گاف قرار می گیرند و در دماهای بسیار پایین ترابرد جهشی<sup>۲</sup> را شامل می شوند [۷].

بنابراین می توان بحث انواع بی نظمی را در محدوده بی نظمی همگن به صورت زیر خلاصه نمود:

<sup>۱</sup> Dangling bonds  
<sup>۲</sup> Hopping transport

الف) بی نظمی توپولوژیکی<sup>۱</sup> (هندرسی): در این نوع از بی نظمی، تناوب انتقالی وجود ندارد. مواد بی شکل واقعی دارای این نوع بی نظمی هستند، در حالیکه ممکن است نظم کوتاه برد (موقعی) قابل توجهی داشته باشند (شکل a (۲-۱)).

ب) بی نظمی اسپینی<sup>۲</sup> (مغناطیسی): در این بی نظمی شبکه بنیادی بلوری حفظ می-شود، اما هر مکان شبکه ای دارای یک گشتاور مغناطیسی یا اسپینی است که دارای جهت گیری اتفاقی است. این حالت در برخی از آلیاژهای مغناطیسی رقیق<sup>۳</sup> مانند Cu-Mn و Au-Fe با مؤلفه مغناطیسی از ۱۰٪ تا ۱۰٪ درصد مولی رخ می دهد. موادی که دارای بی نظمی هندرسی و جهت گیری اسپینی تصادفی هستند، شیشه های اسپینی<sup>۴</sup> نامیده می شوند (شکل b (۲-۱)).



شکل ۱-۲) انواع بی نظمی در ساختار مواد: a) هندرسی b) اسپینی c) جایگزینی d) ارتعاشی

<sup>۱</sup> Topological disorder

<sup>۲</sup> Spin disorder

<sup>۳</sup> Dilute magnetic alloys

<sup>۴</sup> Spin glass

ج) بی نظمی جایگزینی<sup>۱</sup>: در این بی نظمی نیز شبکه بنیادی حفظ می شود و در واقع اتم های گوناگون در شبکه توزیع و جایگزین برخی اتم های شبکه میزبان می شوند (شکل ۲-۱C).

د) بی نظمی ارتعاشی<sup>۲</sup>: در این بی نظمی مفهوم بلور کامل فقط در دمای صفر مطلق معتبر است (اگر از حرکت نقطه صفر صرف نظر شود) و در هر دمای مشخص تحرک اتفاقی اتم ها حول نقطه تعادلشان، تناوبی بودن کامل آن ها را برهم می زند، (به شکل ۲-۱d) توجه کنید.

[۱]

#### ۱-۴) نیمرساناهای بی شکل (آمورف)

##### ۱-۴-۱) مقدمه

در این بخش به معرفی نیمرساناهای بی شکل می پردازیم. نیمرساناهای بی شکل که مانند دیگر جامدات بی نظم فاقد ترتیب تناوبی بلندبرد اتم های سازنده هستند، در عین حال می توانند دارای نظم کوتاه برد باشند [۳-۷]. نیمرسانا بودن یک ماده به روش تهیه آن بستگی دارد، مثلاً برای سیلیکون و موارد مشابه (ساختار چهار وجهی<sup>۳</sup> با پیوند کوالانسی) روش سرمایش سریع از فاز مذاب<sup>۴</sup> منجر به تولید فلز بی شکل می - شود. در حالیکه بسیاری از نیمرساناهای بی شکل را می توان با همین روش تهیه نمود [۱,۵]. نیمرساناهای بی شکل به علت وجود نوارهای دنباله ای<sup>۵</sup> و حالات جایگزیده<sup>۶</sup> و همچنین گاف نواری متفاوت از حالت بلوری متناظر، از مدل های نواری انرژی خاصی تبعیت می کنند و در نتیجه خواص ترا برد

<sup>۱</sup> Substitutional disorder

<sup>۲</sup> Vibrational disorder

<sup>۳</sup> Four-fold coordination (Tetrahedrally bonded)

<sup>۴</sup> Rapid melt quenching

<sup>۵</sup> Tailing band

<sup>۶</sup> Localized state