بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه لرستان

دانشکده علوم پایه

گروه فیزیک

عنوان پایان‌نامه

مطالعه جایگزینی آنیون‌ها در اکسیدهای فلزی در چارچوب نظریه تابعی چگالی

نگارش

مهری مرادیان‌الوار

استاد راهنما

دکتر مهرداد دادستانی

پایان‌نامه جهت دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته فیزیک

دی‌ماه ۱۳۹۱

همه امتیازات این پایان‌نامه به دانشگاه لرستان تعلق دارد. در صورت استفاده از تمام یا بخشی از مطالب در مجلات، کنفرانس‌ها یا سخنرانی‌ها، باید نام دانشگاه لرستان (یا استاد یا اساتید راهنمای پایان نامه) و نام دانشجو با ذکر ماخذ و ضمن کسب مجوز کتبی از دفتر تحصیلات تکمیلی دانشگاه ثبت شود. در غیر اینصورت مورد پیگرد قانونی قرار خواهد گرفت .

بسمه تعالی

دانشگاه لرستان

مدیریت تحصیلات تکمیلی

صورتجلسه ی ارزشیابی پایان نامه ی کارشناسی ارشد

جلسه ی دفاع از پایان نامه ی کارشناسی ارشد خانم مهری مرادیان الوار

تحت عنوان : **"مطالعه جایگزینی آنیون‌ها در اکسیدهای فلزی در چارچوب نظریه تابعی چگالی"**

در تاریخ دوازدهم دی ماه یکهزار و سیصد و نود ویک (۱۳۹۱/۱۰/۱۲) در دانشکده علوم پایه دانشگاه لرستان ارائه گردید و هیئت داوران براساس کیفیت پایان نامه، استماع دفاعیه و نحوه ی پاسخ به سوال ها ، پایان نامه ایشان را برای دریافت درجه ی کارشناسی ارشد در رشته فیزیک معادل با ۶ واحد بانمره ی(به حروف).....نوزده تمام..... (به عدد).....۱۹.....و با درجه ی .....عالی.....مورد تایید قرارداد.

هیات داوران	مرتبه علمی	امضاء
۱- استاد راهنما : دکتر مهرداد دادستانی	دانشیار	
۲- استاد داور : دکتر سالار باهر	دانشیار	
۳- استادداور : دکترعبد الرحیم بهاروند	استاد یار	
۴- استاد ناظر ونماینده تحصیلات تکمیلی دانشکده : مهندس محمد چابچی تهرانی	مربی	

دکترعلی بهاری
مدیرگروه فیزیک

دکتر امین میار یعقوبی
معاون پژوهشی و تحصیلات تکمیلی دانشکده

دکتر بهمن عادلی
رئیس دانشگاه علوم پایه

دکتربهمن غضنفری
مدیر تحصیلات تکمیلی دانشگاه

(نسخه مربوط به آموزش دانشکده علوم پایه -لطفا صحافی نشود)

تقدیر و تشکر

تشکر و سپاس خدا را که بزرگ‌ترین امید و یاور در لحظه لحظه زندگی است.

از استادار جمندم جناب آقای دکتر داستانی که با راهنمایی‌های خود مرا در انجام این پروژه یاری رساندند کمال تشکر را دارم.

در نهایت از خانواده عزیزم تشکر می‌کنم، بخصوص پدر و مادرم که نه می‌توانم مو‌هایشان را که در راه عزت من سفید شد، سیاه کنم و نه برای دست‌های پینه بسته‌شان که ثمره تلاش برای افتخار من است، مرهمی دارم. از خداوند می‌خواهم که هر لحظه شکرگزارشان باشم و ثانیه-های عمرم را در عصای دست بودنشان سپری کنم.

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فصل اول: نیمرساناهای مغناطیسی

مقدمه ۲

۱-۱ مواد مغناطیسی ۳

۱-۱-۱ دیامغناطیس ۴

۱-۱-۲ پارامغناطیس ۵

۱-۱-۳ فرومغناطیس ۶

۱-۱-۴ پادفرومغناطیس ۷

۱-۱-۵ فری‌مغناطیس ۸

۱-۲ نیمرساناها ۱۰

۱-۳ اسپینترونیک ۱۱

۱-۴ نیمرساناهای مغناطیسی رقیق (DMS) ۱۳

۱-۵ ویژگی‌های اکسید استرانسیوم (SrO) ۱۵

۱-۶ ناراستی در بلور ۱۶

۱-۶-۱ تهیجاها ۱۷

۱-۶-۲ ناخالصی ۱۸

۱-۷ تأثیر جایگزینی N بجای O در SrO ۱۹

عنوان **صفحه**

فصل دوم: نظریه تابعی چگالی (DFT)

مقدمه ۲۲

۲-۱ معادله شرودینگر ۲۳

۲-۲ تفکیک الکترون‌ها و هسته ۲۴

۲-۳ قضیه هلمن-فاینمن و نیروهای وارد بر یون ۲۵

۲-۴ بحث مختصر روش‌های حل معادله شرودینگر ۲۸

۲-۵ تقریب هارتری ۲۹

۲-۶ تقریب هارتری-فک ۳۱

۲-۷ انرژی همبستگی و نظریه پیکربندی برهم‌کنشی (CI) ۳۵

۲-۸ نظریه تابعی چگالی (DFT) ۳۷

۲-۹ قضایای هوهنبرگ-کان ۳۷

۲-۱۰ معادلات کان-شم ۴۰

۲-۱۱ انرژی تبادلی-همبستگی ۴۳

۲-۱۱-۱ تقریب چگالی موضعی (LDA) ۴۴

۲-۱۱-۲ تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) ۴۵

۲-۱۲ روش امواج تخت بهساخته (APW) ۴۷

عنوان **صفحه**

فصل سوم: بررسی طیف اتلاف انرژی الکترون

مقدمه ۵۲

۳-۱ پراکندگی ذرات توسط بلور ۵۲

۳-۲ برهم‌کنش الکترون با ماده ۵۴

۳-۲-۱ پراکندگی الاستیک ۵۵

۳-۲-۲ پراکندگی غیرالاستیک ۵۶

۳-۲-۳ اثرات ثانویه ۵۷

۳-۳ میکروسکوپ‌های الکترونی ۵۹

۳-۳-۱ میکروسکوپ الکترونی عبوری (TEM) ۶۰

۳-۳-۲ میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) ۶۲

۳-۴ طیف‌نمایی اتلاف انرژی الکترون (EELS) در TEM ۶۴

۳-۴-۱ مؤلفه‌های طیف اتلاف انرژی الکترون ۶۵

۳-۵ توصیف مکانیک کوانتومی ELNES ۶۸

۳-۶ روش‌های محاسباتی EELS ۷۰

۳-۷ EELS در مقایسه با سایر روش‌ها ۷۲

عنوان **صفحه**

فصل چهارم: محاسبه خواص ساختاری، الکترونی و طیف ELNES

مقدمه ۷۶

۴-۱ روش انجام محاسبات ۷۶

۴-۲ ویژگی‌های ساختاری ۷۷

۴-۳ محاسبه خواص الکترونی ۸۰

۴-۴ مطالعات انجام شده روی خواص الکترونی $SrO_{1-x}N_x$ ۹۲

۴-۵ محاسبه طیف ELNES ۹۴

نتیجه‌گیری ۹۹

منابع ۱۰۰

فهرست جدول‌ها

عنوان **صفحه**

جدول ۴-۱. پارامتر شبکه (Å)، مدول حجمی (GPa) و مشتق مدول حجمی محاسبه شده و تجربی برای $SrO_{1-x}N_x$ ۷۹

جدول ۴-۲. مقادیر گاف انرژی محاسبه شده برای آلیاژ $SrO_{1-x}N_x$ به ازای مقادیر ۰/۷۵ و ۰/۵۰ و ۰/۲۵ و ۰ =x همراه با نتایج تجربی موجود ۸۳

جدول ۴-۳. گشتاور مغناطیسی کلی و جزئی آلیاژ $SrO_{1-x}N_x$ به ازای مقادیر x برابر ۰/۲۵ و ۰/۵۰ و۰/۷۵ ..... ۹۰

جدول ۴-۴. مکان تمام پیک‌های تجربی و محاسباتی طیف ELNES لبه K اکسیژن و نیتروژن ۹۸

فهرست شکل‌ها

عنوان **صفحه**

شکل۱-۱.جهتگیری کاتوره ای گشتاورهای مغناطیسی ۳

شکل ۱-۲. جدول تناوبی: انواع مواد مغناطیسی ۴

شکل۱-۳. نظم اسپینی فرومغناطیس ۶

شکل۱-۴. یک موج اسپینی ۷

شکل۱-۵. نظم اسپینی پادفرومغناطیس ۷

شکل۱-۶. نظم اسپینی پادفرومغناطیس در(a) مکعبی مرکز حجمی و (b) مکعبی ساده ۸

شکل۱-۷. نظم اسپینی فری‌مغناطیس ۹

شکل ۱-۸. ساختار بلوری اسپینل ۹

شکل۱-۹. طرح نواری رسانندگی ذاتی نیمرسانا ۱۰

شکل۱-۱۰. اسپینترونیک: ترکیب بار و اسپین الکترون ۱۲

شکل ۱-۱۱. ساختار بلوری SrO ۱۵

شکل۱-۱۲. یک تهیجای شبکه یا ناراستی شوتکی ۱۷

شکل ۱-۱۳. اتم بین‌جایگاهی در بلور شبکه را اطراف خود واپیچیده می‌کند ۱۸

شکل۳-۱. فرآیندهایی که در طی آزمایش EELS اتفاق می‌افتند ۵۵

شکل ۳-۲.گسیل الکترون اوژه و پرتو x در اثر برخورد پرتو الکترونی با ماده ۵۸

شکل ۳-۳ . قسمت‌های مختلف یک TEM ۶۱

شکل ۳-۴. قسمت‌های مختلف و مسیر پرتو الکترونی در میکروسکوپ الکترونی روبشی ۶۳

شکل ۳-۵. سازوکارهای موجود در برخورد پرتو با نمونه در یک SEM ۶۳

شکل ۳-۶. یک طیف EELS ۶۶

شکل ۳-۷. تقسیم‌بندی ساختار ریز به دو ناحیه: (a) ELNES و (b) EXELFS ۶۷

شکل ۳-۸. دو ناحیه‌ی طیف XAS ۷۳

شکل۴-۱. منحنی انرژی کل بر حسب حجم یاخته واحد برای $SrO_{1-x}N_x$ ۷۸

شکل ۴-۲ .مسیرهای تقارنی یک شبکه مکعبی مرکز سطحی ۸۰

شکل ۴-۳. ساختار نواری محاسبه شده برای SrO برای جهت اسپین بالا(سمت چپ) و اسپین پایین(سمت راست) ۸۱

شکل ۴-۴. ساختار نواری محاسبه شده برای آلیاژ $SrO_{0.75}N_{0.25}$ برای جهت اسپین بالا (سمت چپ) و اسپین پایین (سمت راست) ۸۱

شکل ۴-۵. ساختار نواری محاسبه شده برای آلیاژ $SrO_{0.50}N_{0.50}$ برای جهت اسپین بالا (سمت چپ) و اسپین پایین (سمت راست) ۸۲

شکل ۴-۶. ساختار نواری محاسبه شده برای آلیاژ $SrO_{0.25}N_{0.75}$ برای جهت اسپین بالا (سمت چپ) و اسپین پایین (سمت راست) ۸۲

شکل ۴-۷. چگالی حالت‌های کلی (سمت چپ) و چگالی حالت‌های جزئی (سمت راست) برای SrO ۸۴

شکل ۴-۸. چگالی حالت‌های کلی و جزئی آلیاژ $SrO_{1-x}N_x$ به ازای x=۰/۲۵ ..... ۸۵

شکل ۴-۹. چگالی حالت‌های کلی و جزئی آلیاژ $SrO_{1-x}N_x$ به ازای x=۰/۵۰ ..... ۸۶

شکل۴-۱۰. چگالی حالت‌های کلی و جزئی آلیاژ $SrO_{1-x}N_x$ به ازای x=۰/۷۵ ..... ۸۸

شکل ۴-۱۱. ساختار نواری برای SrO (سمت چپ) و $SrO_{0.75}N_{0.25}$ (سمت راست) ۹۱

شکل ۴-۱۲. چگالی حالات کلی برای SrO (سمت چپ) و $SrO_{0.75}N_{0.25}$ (سمت راست)..... ۹۲

شکل۴-۱۳. α نیم‌زاویه همگرایی و β نیم‌زاویه جمع ۹۵

شکل ۴-۱۴. طیف ELNES لبه K اکسیژن (سمت راست) و نیتروژن (سمت چپ) در یاخته واحد با تقریب corehole ۹۶

شکل ۴-۱۵. مقایسه طیف ELNES محاسباتی (نمودار قرمز)و طیف تجربی (نمودار سیاه) برای لبه K نیتروژن (سمت چپ) و لبه K اکسیژن (سمت راست) در $SrO_{0.75}N_{0.25}$ ۹۷

نام‌خانوادگی: مرادیان الوار نام: مهری

عنوان پایان‌نامه:

مطالعه جایگزینی آنیون‌ها در اکسیدهای فلزی در چارچوب نظریه تابعی چگالی.

استاد راهنما: دکتر مهرداد دادستانی

درجه‌ی تحصیلی: دکترا رشته: فیزیک گرایش: حالت جامد

محل تحصیل: دانشگاه لرستان دانشکده: علوم‌پایه گروه آموزشی: فیزیک

تاریخ فارغ‌التحصیلی: ۱۳۹۱/۱۰/۱۲ تعداد صفحه: ۱۰۲

کلید واژه‌ها:

فارسی: نیمرساناهای مغناطیسی رقیق ، نظریه تابعی چگالی ، طیف اتلاف انرژی الکترون، خواص مغناطیسی

انگلیسی: Dilute Magnetic Semiconductors ، DFT ، EELS، magnetic properties

چکیده:

اسپینترونیک فصل مشترک مغناطیس و الکترونیک است. پایه اصلی اسپینترونیک‌ها استفاده صحیح از جریان‌های اسپینی در حضور جریان‌های الکتریکی اصلی، است. امروزه استفاده ازاسپین الکترون باعث ایجاد توانایی‌ها و ظرفیت‌های جدیدی در وسایل الکتریکی و الکترواپتیکی می‌شود. تولید نیم‌رساناهای مغناطیسی رقیق یک روش مهم برای بکارگیری هم‌زمان اسپین و بار الکترون، و ایجاد خاصیت فرومغناطیسی در مواد اکسیدی است. اخیراً، چندین سیستم که دارای خاصیت فرومغناطیسی در دمای اتاق هستند معرفی شده‌اند. اما بیش‌تر این سیستم‌ها از عنصر فلز واسطه یا عنصر فلز خاکی کمیاب به‌عنوان ناخالصی استفاده می‌کنند. ما می‌خواهیم خاصیت فرومغناطیسی موجود در مواد اکسیدی بدون عناصر مغناطیسی رایج را بررسی کنیم. جایگزینی نیتروژن بجای اکسیژن در مواد اکسیدی غیرمغناطیسی ساده منجر به حفره‌هایی در حالت‌های ۲p اتم N بشکل گشتاورهای مغناطیسی موضعی می‌شود. به همین دلیل در این مطالعه، به روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل و در چارچوب نظریه تابعی چگالی، خاصیت فرومغناطیسی اکسید استرانسیوم آلائیده با نیتروژن، که ناخالصی نیتروژن فلز نیست و SrO اکسید عایق غیرمغناطیسی است را بررسی می‌کنیم. بررسی ساختار نواری، چگالی حالت‌های کلی و جزئی آلیاژ $SrO_{1-x}N_x$ به ازای مقادیر مختلف x،نشان می‌دهد که حالت ۲p اتم N برای جهت اسپین پایین تأثیر اصلی را در ایجاد رسانش و خاصیت فرومغناطیسی این ترکیبات دارد و بزرگ‌ترین گشتاور محاسبه شده معادل $۰/۸۶\mu_B$ برای N به ازای ۲۵ درصد ناخالصی N در SrO است. همچنین طیف ELNES لبه K اکسیژن و نیتروژن در $SrO_{۰/۷۵}N_{۰/۲۵}$ محاسبه و با نتایج تجربی مقایسه شده است که تطابق مطلوبی با نتایج تجربی موجود دارند. نتایج حاصل از طیف ELNES نشان می‌دهد که گذار الکترون مغزه از حالت ۱s به حالت نیمه‌پر شده‌ی $2p_{1/2}$ و $2p_{3/2}$ کم‌ترین اتلاف انرژی و بیش‌ترین تأثیر را در ایجاد این ساختارها برعهده دارد.

فصل اول

نیمرساناهای مغناطیسی

مقدمه

دو پایه اصلی تکنولوژی رایانه‌ای مدرن نیمرساناها (بر پایه بار الکترون) برای پردازش داده‌ها و مواد مغناطیسی (بر پایه اسپین الکترون) برای ذخیره‌سازی داده‌ها (اطلاعات) هستند. با استفاده همزمان از بار و اسپین الکترون، احتمال دارد نوع جدیدی از مواد ساخته شود. اسپینترونیک بر اساس استفاده همزمان از بار و اسپین الکترون است که از این طریق می‌توان وسایل الکترونیکی جدید با ظرفیت بالا و کاربردهایی فراتر از کاربردهای امروزی این وسایل تولید کرد، امروزه اسپینترونیک کاربردهای بسیاری در زندگی مدرن دارد. دانشمندان فرضیاتی برای ترکیب نیمرساناها ومواد مغناطیسی شروع کرده‌اند، استفاده از نیمرساناهای مغناطیسی رقیق یکی از این روشهاست .اهنو[1]در سال۱۹۸۸ با اضافه کردن ناخالصیMn به نیمرسانای غیرمغناطیسی GaAs متوجه خاصیت فرومغناطیسی در این نیمرسانا شد، و از آن زمان تاکنون چندین سیستم با ناخالصی‌های متفاوت مورد مطالعه و بررسی قرار گرفته‌اند. خاصیت مغناطیسی معمولاً ناشی از اوربیتال های نیمه پر d یا f است مانند فلزات واسط[2](TMs) یا فلزات خاکی نادر[3](REs). اخیراً سیستم‌های دیگری از نیمرساناهای اکسیدی بدون شمول ناخالصیTMs یا REs معرفی شده است، یک دسته جالب از آن ها سیستم‌های ناخالص اکسید فلزات قلیایی خاکی است، که در دمای اتاق خاصیت فرومغناطیسی از خود نشان می‌دهند. معمولاً هنگامی‌که از ناخالصی کربن (C) یا نیتروژن (N) در اکسید فلزات قلیایی خاکی استفاده می‌شود این خاصیت فرومغناطیسی، که فرومغناطیس°d نامیده شده است، ظاهر می‌شود[۳-۱].

استفاده از ناخالصی‌ها برای دستیابی به خاصیت فرومغناطیسی در نیمرساناها یک روش ساده و ارزان است که می‌تواند اثرات مغناطیسی قابل توجهی بدست آورد و بسیار مورد توجه پژوهشگران و صنعتگران است . به همین دلیل در این فصل به بررسی تاثیر ناخالصی نیتروژن روی اکسید فلز قلیایی خاکی SrO می‌پردازیم. برای این کار ابتدا به معرفی مواد مغناطیسی و انواع آن در بخش اول می‌پردازیم، سپس خلاصه‌ای از نیمرساناها بیان می‌کنیم. استفاده همزمان از ویژگی‌های نیمرساناها و مواد مغناطیسی تحت عنوان اسپینترونیک، و تولید نیمرساناهای مغناطیسی

۱ H.Ohno

۲ Transition Metals

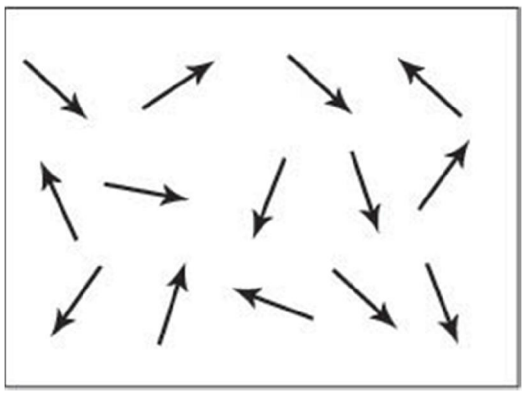
۳ Rare Earth

رقیق که یک روش کارامد برای استفاده از اسپین و بار الکترون است در بخش‌های بعد معرفی می‌شود. در این مطالعه خواص ساختاری و الکترونی اکسید استرانسیوم و همچنین کارهایی که برای محاسبه ویژگی‌های ساختاری و الکترونی این بلور انجام گرفته است بصورت مختصر آورده شده است. وجود ناراستی‌ها در بلور می‌تواند تأثیر بسزایی بر برخی ویژگی‌های بلور بگذارد از این‌رو در ادامه به معرفی ناراستی‌های تأثیر گذار در بلور می‌پردازیم. در نهایت تأثیر نیتروژن بر رسانندگی و مختصه مغناطیسی $SrO_{1-x}N_x$ بیان می‌شود.

۱-۱ مواد مغناطیسی

خاصیت مغناطیسی ناشی از اثرات کوانتومی اسپین الکترون‌هاست. شناخت دقیق خواص مغناطیسی به روش‌های مکانیک کوانتومی نیاز دارد، چون یک دستگاه کاملاً کلاسیکی در تعادل گرمایی حتی در حضور میدان مغناطیسی نمی‌تواند گشتاور مغناطیسی از خود نشان دهد. خواص مغناطیسی مواد اطلاعاتی راجع به اجزاء تشکیل دهنده مواد و برهم‌کنش بین آن‌ها بدست می‌دهد. امروزه این کشف استفاده‌های عملی بسیار زیادی دارد، از آهنرباهای کوچک یخچال تا نوارهای ضبط مغناطیسی، کارت‌های اعتباری، دیسک‌های کامپیوتری و ... را در برمی‌گیرد. مواد مغناطیسی بر اساس جهت‌گیری گشتاورهای آن ها در حوضه های کوچک مغناطیسی به دو دسته کلی تقسیم می‌شوند:

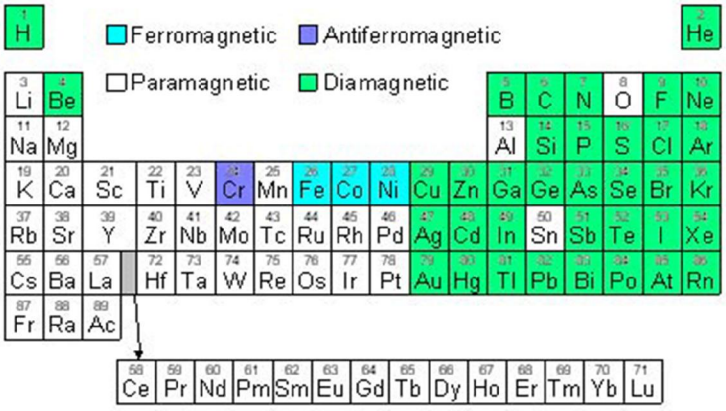
گشتاورهای مغناطیسی کاتوره‌ای: در این مواد در غیاب میدان مغناطیسی اعمالی گشتاورهای مغناطیسی در حوضه‌های کوچک مغناطیسی بصورت کاتوره ای قرار گرفته‌اند ونظم خاصی ندارند (شکل۱-۱)، این مواد عبارتند از مواد دیامغناطیس و پارامغناطیس که در ادامه ویژگی‌های آن‌ها را بررسی می‌کنیم.



شکل۱-۱.جهت‌گیری کاتوره ای گشتاورهای مغناطیسی

گشتاورهای مغناطیسی منظم (نظم مغناطیسی): در دماهای پایین مشاهده شده است که در غیاب یک میدان مغناطیسی اعمالی، تعداد زیادی از مواد دارای یک مغناطش متناهی‌اند. این مغناطش خودبه‌خودی ناشی از همخط شدن گشتاورهای دو قطبی دائمی است و نمایشگر آن است که هر دوقطبی از جهت دوقطبی‌های دیگر آگاهی دارد. این آگاهی ناشی از برهم کنش بین گشتاورهای مغناطیسی است[۵].

انواع نظم مغناطیسی عبارتند از: نظم فرومغناطیس، نظم پادفرومغناطیس و نظم فری‌مغناطیس.



شکل ۱-۲. جدول تناوبی: انواع مواد مغناطیسی

۱-۱-۱ دیامغناطیس

بلورهای یونی و کووالان از جمله دیامغناطیس‌ها هستند، این مواد اتم‌ها یا یون هایی با لایه‌های کامل دارند وخاصیت دیامغناطیسی آن‌ها مربوط به این واقعیت است که اعمال میدان مغناطیسی حرکت مداری آن‌ها را آشفته می‌کند.

دیامغناطیس به تمایل بارهای الکتریکی برای پوشش دادن درون جسم تا حدی در مقابل میدان مغناطیسی اعمال شده مربوط می‌شود. در الکترومغناطیس با قانون لنز آشنا هستیم؛ وقتی‌که شار درون یک مدار الکتریکی تغییر کند، یک جریان القایی (دیامغناطیس) در جهتی ایجاد می‌شود که با تغییر شار مخالفت کند. در یک ابررسانا یا مدار الکترونی درون اتم، جریان‌های القایی تا زمانی که میدان وجود دارد ادامه می‌یابند. میدان مغناطیسی جریان القایی در جهت مخالف میدان اعمال شده است و گشتاور مغناطیسی مربوط به این جریان‌های القایی یک گشتاور دیامغناطیس

است. حتی در فلز عادی سهم دیامغناطیسی ناشی از الکترون‌های رسانشی وجود دارد، و این دیامغناطیس توسط برخوردهای الکترونی از بین نمی‌رود.

این مواد در هر چیزی مثل گیاهان، آب، چوب وحتی پوست ما و غیره هستند. این ویژگی دیامغناطیس‌ها که وقتی در معرض میدان مغناطیسی قرار می‌گیرند بعضی از اتم‌ها از جای خود حرکت می‌کنند؛ آنالیز حرکت تصویر -برداری تشدید مغناطیسی[1] (MRI) نامیده می‌شود و یک ابزار تشخیصی مفید در پزشکی است. واکنش دیامغناطیسی با میدان خارجی اعمالی افزایش می یابد اما مستقل از دماست[۶] .

۱-۱-۲ پارامغناطیس

در یک پارامغناطیس گشتاورهای مغناطیسی در غیاب میدان مغناطیسی بصورت کاتوره‌ای جهت‌گیری کرده‌اند و مغناطش خالص صفر است. هنگامی‌که میدان مغناطیسی اعمال میشود بعضی از گشتاورها به صورت موازی با میدان جهت‌گیری می‌کنند. در یک پارامغناطیس هیچ برهم‌کنشی بین گشتاورهای مغناطیسی وجود ندارد وآن‌ها فقط به میدان مغناطیسی خارجی واکنش نشان می‌دهند.

تنها الکترون‌هایی در گشتاور دوقطبی سهیم‌اند که در پوسته‌های ناکامل قرار دارند، در حالت کلی این الکترون‌ها همان الکترون‌های ظرفیت‌اند. همخط شدن اسپین الکترون‌ها درداخل اتم وبین اتم‌های همسایه در اثر برهم‌کنش خاصی بوجود می‌آید که برهم کنش تبادلی بین الکترون‌ها در یک پوسته ناکامل به گونه‌ای است که وقتی اسپین الکترون‌ها موازی است (مشروط بر آنکه اصل پائولی نقض نشود) انرژی مینیمم می‌شود.

چون بیش‌تر اتم‌ها پوسته ناکامل دارند گشتاور دوقطبی نیز خواهند داشت. در بلورهای یونی، الکترون‌های خارجی یک اتم به اتم همسایه خودمنتقل می‌شوند تا پوسته خارجی آن را کامل کند به این ترتیب پوسته‌های الکترونی اطراف هر دو یون پر است ودر نتیجه دیگر گشتاور دوقطبی نخواهند داشت[۸-۵].

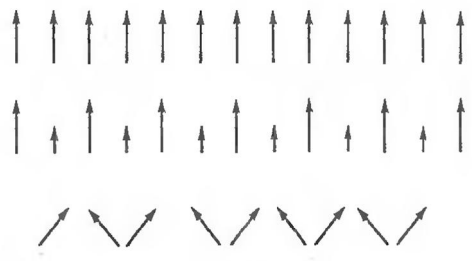
خاصیت پارامغناطیسی در اتم‌ها، مولکول‌ها ونواقص شبکه‌ای که تعداد الکترون‌های فردی دارند، وجود دارد چون در این صورت اسپین کل دستگاه نمی‌تواند صفر باشد. البته تعداد کمی از ترکیباتی که تعداد الکترون‌هایشان زوج باشد مثل اکسیژن جزء این دسته‌اند[۶].

---

۱ Magnetic Resonance Imaging

۱-۱-۳ فرومغناطیس

فرومغناطیس گشتاور مغناطیسی خودبه‌خودی دارد، یعنی در غیاب میدان مغناطیسی اعمال شده نیز دارای گشتاور مغناطیسی است. وجود گشتاور خودبه‌خودی حاکی از آن است که اسپین الکترون‌ها و گشتاورهای مغناطیسی به طور منظم مرتب می‌شوند (شکل ۱-۳)،[۶] .



شکل ۱-۳. نظم اسپینی فرومغناطیس

هنگامی‌که میدان مغناطیسی خارجی اعمال شود، گشتاورهای مغناطیسی در جهت میدان قرار می‌گیرند. فرومغناطیس پدیده‌ای مغناطیسی است که در اثر برهم‌کنش بین یون‌های مغناطیسی موجود در جامد بوجود می‌آید. این برهم‌کنش‌ها چندان قوی‌اند که می‌توانند همخطی متقابل در گشتاورهای مغناطیسی ایجاد کنند. هر برهم‌کنشی بین یون‌ها که بخواهد نظمی را ایجاد کند تنها هنگامی اهمیت پیدا می‌کند که قدرت برهم‌کنش در مقایسه با سازوکارهایی که می‌توانند نظم را مختل کنند بزرگ باشد. خصوصاً برهم‌کنش نظم دهنده باید در مقایسه با انرژی ارتعاشی که تمایل دارد هر همخطی را بی‌نظم کند، بزرگ‌تر باشد[۵و۷].

مواد فرومغناطیس موادی‌اند که دردماهای بالا مانند پارامغناطیس‌های معمولی رفتار می‌کنند، ولی در یک دمای بحرانی، که دمای کوری T_c نامیده می‌شود، خودبه‌خود یک گشتاور دو قطبی دائمی بدست می‌آورند. فلزات واسط Fe و Co و Ni وبرخی از آلیاژهای آنها و بعضی از فلزات خاکی نادر مثل dG و yD از متداول‌ترین فرومغناطیس‌ها به شمار می‌آیند. دمای کوری T_c دمایی است که در بالای آن مغناطیدگی خودبه‌خودی از بین می‌رود؛ این دما فاز پارامغناطیس نامنظم را در $T>T_c$ از فاز منظم فرومغناطیس در $T<T_c$ جدا می‌کند[۶].