

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه تبریز

دانشکده فیزیک

گروه حالت جامد و الکترونیک

پایان نامه

برای دریافت درجه کارشناسی ارشد در رشته فیزیک حالت جامد - الکترونیک

عنوان

بررسی اثر شکل میله های دی الکتریک بر گاف نوری در بلورهای فوتونی ناهمسانگرد

استادان راهنما

دکتر منوچهر کلافی دکتر علی سلطانی والا

استاد مشاور

مهندس بهروز رضایی

پژوهشگر

مهسا حدادی مقدم

اسفند ۱۳۸۶

با سپاس از :

- استادان گرانقدر آقای دکتر منوچهر کلافی و آقای دکتر علی سلطانی والا که راهنمایی این پایان نامه را به عهده داشتند و در طی انجام آن گره گشای مشکلات پژوهشی بودند.

- زحمات جناب آقای مهندس بهروز رضایی به جهت راهنمایی ها و دلسوزی های ارزنده شان.

- استاد گرامی جناب آقای دکتر علی رستمی که داوری پایان نامه را تقبل فرمودند.

- اساتید و کارکنان پژوهشکده فیزیک کاربردی و دانشکده فیزیک دانشگاه تبریز.

مهسا حدادی مقدم

اسفند ۱۳۸۶

نام خانوادگی دانشجو: حدادی مقدم	نام: مهسا
عنوان پایان نامه: بررسی اثر شکل میله های دی الکتریک بر باند ممنوعه فوتونی در بلورهای فوتونی ناهمسانگرد	
استادان راهنما: دکتر منوچهر کلافی ، دکتر علی سلطانی والا استاد مشاور: مهندس بهروز رضایی	
مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد رشته: فیزیک گرایش: حالت جامد و الکترونیک دانشگاه: تبریز دانشکده: فیزیک تاریخ فارغ التحصیلی: تعداد صفحه: ۱۰۹	
کلید واژه ها: بلور فوتونی- مواد ناهمسانگرد-باند ممنوعه فوتونی-میله های دی الکتریک	
چکیده:	
<p>با استفاده از ثابت دی الکتریک وابسته به مکان و روش بسط موج تخت ، ساختار باند فوتونی را برای امواج الکترومغناطیس در بلورهای فوتونی محاسبه کرده ایم.</p> <p>ساختار باند بلورهای فوتونی ناهمسانگرد دو بعدی شامل شبکه با تقارن های مختلف و میله های دی الکتریک با شکل ، جهتگیری و اندازه متفاوت به طور عددی مطالعه می شود. به طور خاص سه نوع شبکه (مثلثی ، هگزاگونال و مربعی) و پنج شکل مختلف از میله های دی الکتریک (هگزاگونال ، دایره ، مربع ، مستطیل و بیضی) در نظر گرفته می شود. تقارن شبکه و شکل سطح مقطع میله ها می تواند بر پهنای باند ممنوعه فوتونی تاثیر بگذارد.</p>	

ادامه چکیده پایان نامه

بزرگترین پهنای باند ممنوعه فوتونی کامل برای شبکه مثلثی شامل میله های بیضوی بدست می آید. در مقایسه با بلور های فوتونی همسانگرد که بزرگترین پهنای باند ممنوعه فوتونی مربوط به میله های با سطح مقطع مشابه با تقارن منطقه اول بریلوئن شبکه بدست می آید ، در بلور های فوتونی ناهمسانگرد کمترین پهنای باند ممنوعه فوتونی حاصل می شود. محاسبات عددی نشان می دهند که ناهمسانگردی در مواد دی الکتریک می تواند پهنای باند ممنوعه فوتونی را افزایش دهد.

مقدمه

با توسعه فن آوری نانو ، حوزه های جدیدی از علوم و فناوری ایجاد شده اند که یکی از آنها علم فوتونیک است. علم فوتونیک مجموعه ای از پدیده ها از قبیل گسیل ، عبور دهی ، تقویت ، آشکارسازی ، مدولاسیون و کلید زنی نور را بررسی می کند و شامل ابزارهای فوتونیک از قبیل لیزرها ، دیودهای گسیل نوری ، فیبرهای نوری و کریستال های فوتونی می باشد. کاربردهای فوتونیک از آشکارسازهای نوری گرفته تا ارتباطات و پردازش اطلاعات تغییر می کند.

یکی از مهم ترین کشف ها در علم فوتونیک تا به امروز کریستال های فوتونی است که با توسعه فیبرهای کریستال فوتونی ادامه یافت و در حال حاضر اکثر دانشگاه های دنیا برنامه ها و امکاناتی دارند که در زمینه کریستال های فوتونی متمرکز نموده اند. در واقع کریستال های فوتونی ساختار های دی الکتریک متناوب هستند که به طور مصنوعی ساخته می شوند و در تشابه با نیمه هادی ها دارای یک ناحیه ممنوعه فرکانسی می باشند به طوریکه انتشار امواج الکترومغناطیسی در آن ناحیه خاص ممنوع است. این خاصیت کریستال های فوتونی ما را قادر می سازد که بتوانیم انتشار نور را در چنین ساختارهایی کنترل کنیم و این مسئله منجر به تولید پدیده هایی می شود که امکان تولید آن با استفاده از اپتیک متعارف غیر ممکن است. بنابراین با جایگزینی الکترون های کند توسط فوتون ها به عنوان حاملین اطلاعات ، سرعت و حوزه عمل سیستم های ارتباطی پیشرفته بطور چشمگیر افزایش یافته و باعث متحول شدن صنعت ارتباطات خواهد شد. کریستال های فوتونی یک سرمایه ای از ابزارهای جدید را وعده می دهند که می تواند نیاز به کامپیوتر های با سرعت بالا و ارتباطات نوری را ارضا نماید.

چون ساخت هر کریستال فوتونی با توجه به نیاز از نظر کاربرد های خاص آن صورت می گیرد ، لذا قبل از هرگونه اقدام به ساخت که متضمن هزینه های سنگین است ، باید شبیه سازی و مدل بندی نظری سیستم مورد نظر انجام گیرد به طوریکه بررسی نظری اینگونه سیستم ها بخش اعظم تحقیقات در این زمینه را تشکیل می دهد. کریستال های فوتونی می توانند کاربردهای

فراوانی نظیر موجرها ، فیبرهای نوری ، میکروکاواک ها ، آنتن ها که در صنعت مخابرات از اهمیت فوق العاده ای برخوردار هستند ، همچنین لیزرها ، آینه های فیدبک و غیره داشته باشند. با توجه به موارد فوق به نظر می رسد که در چند سال آینده کریستال های فوتونی نقش تعیین کننده ای در فن آوری نوین ایفا خواهند نمود. لذا تأمین زیر ساختار های لازم نظری و تجربی در این زمینه به منظور همگانی با این فن آوری پیشرفته ضروری به نظر می رسد. هدف اصلی این پروژه بررسی و تحقیق در زمینه چگونگی استفاده از این کریستال ها در حوزه های مختلف فن آوری و مدل بندی مورد نیاز جهت ساخت آنها می باشد.

از آنجائیکه دارا بودن باند ممنوعه فوتونی با پهنای بیشینه به عنوان پایه و اساس برای کاربرد های گوناگون از کریستال های فوتونی مانند موجرهای نوری ، میکروکاواک ها و لیزرهای کریستال فوتونی به شمار می رود ، بنابراین تلاش بر این است که با بهینه کردن پارامتر های ساختاری بتوان پهنای باند ممنوعه فوتونی کامل را برای ساختارهای فوتونی مورد نظر بیشینه کرد.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
	فصل اول: بررسی منابع
۱-۱-۱-۱	شبکه های بلوری.....
۱-۱-۱-۱-۱	شبکه های نامتناهی و بلورهای متناهی.....
۱-۱-۲-۱-۱	یاخته واحد بسیط.....
۱-۱-۲-۱-۱-۱	یاخته واحد؛ یاخته واحد قراردادی.....
۱-۱-۲-۱-۱-۱-۱	یاخته بسیط ویگنر- سایتز.....
۲-۱-۲-۱	طبقه بندی شبکه های براوه و ساختارهای بلوری.....
۱-۲-۱-۱	شبکه های براوه دو بعدی.....
۲-۲-۱-۱	شبکه های براوه سه بعدی.....
۳-۱-۱	شبکه وارون.....
۱-۳-۱-۱	منطقه اول بریلوئن.....
۴-۱-۱	فرمول بندی براگ از پراش پرتوایکس توسط یک بلور.....
۵-۱-۱	ساختار باند.....
۱-۵-۱-۱	پتانسیل دوره ای و اثبات قضیه بلوخ.....
۲-۵-۱-۱	روش بسط موج تخت، روش بستگی قوی و سایر روش ها.....

فصل دوم: مبانی و روش ها

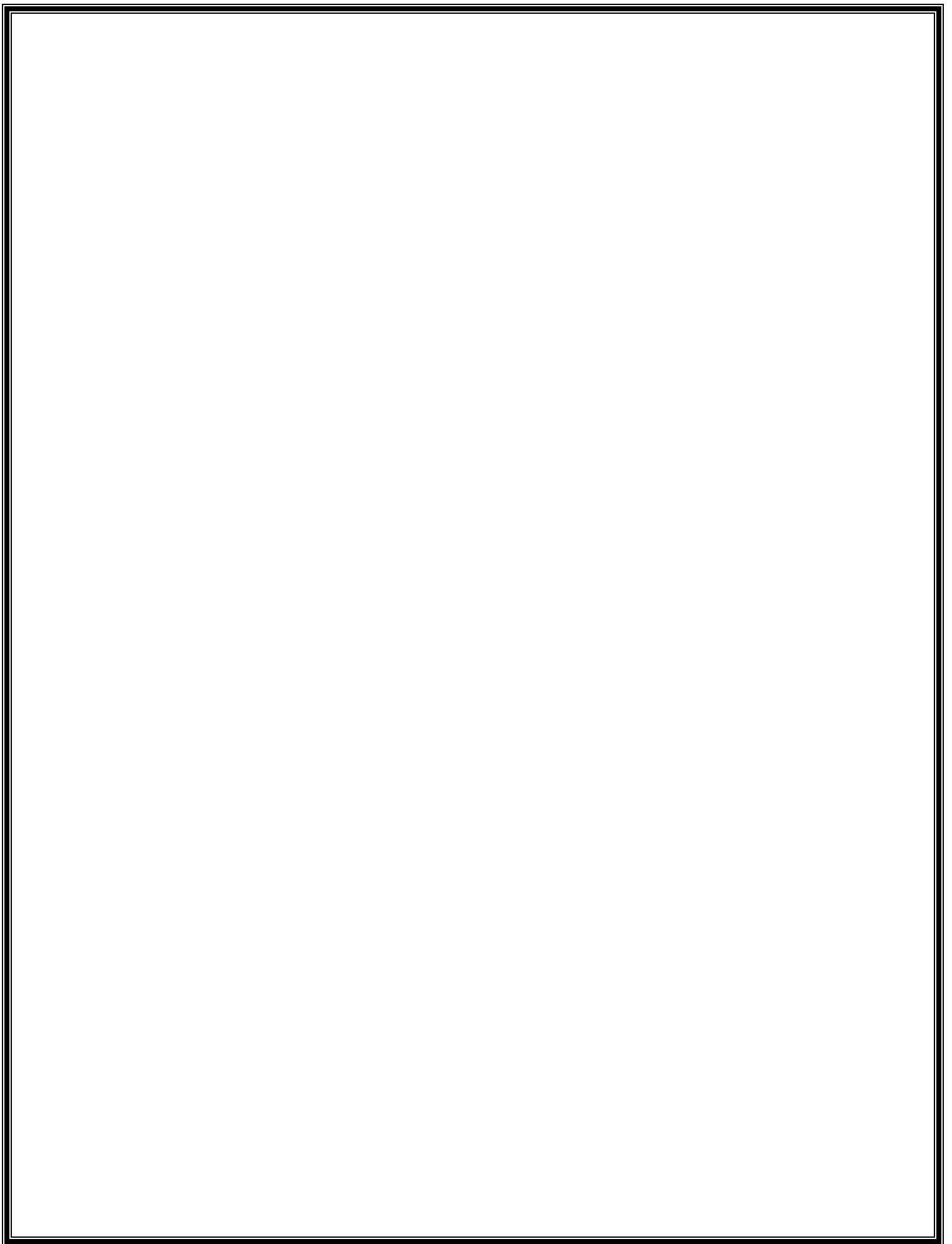
۱-۲-۱	کریستال فوتونی.....
۲-۲-۱	محاسبه ساختار باند کریستال فوتونی.....
۱-۲-۲-۱	محاسبه ضریب فوریه عکس تابع دی الکترونیک $\eta(\vec{G})$ برای شکل های مختلف از سطح مقطع میله های دی الکترونیک.....
۱-۲-۲-۱-۱	میله های با سطح مقطع دایروی.....
۲-۲-۱-۲-۱	میله های با سطح مقطع بیضوی.....
۲-۲-۱-۲-۲	میله های با سطح مقطع مربعی.....

- ۴۵.....۲-۱-۲-۲- میله های با سطح مقطع مستطیلی.....
- ۴۶.....۲-۱-۲-۲- میله های با سطح مقطع هگزاگونال.....
- ۴۸.....۳-۲- دوران میله های واقع در سلول واحد.....
- ۴۹.....۴-۲- ساختار باند کریستال فوتونی دو بعدی برای شبکه های مختلف.....
- ۴۹.....۲-۴-۱- شبکه مربعی.....
- ۵۱.....۲-۴-۲- شبکه هگزاگونال.....
- ۵۳.....۲-۴-۳- شبکه مثلثی.....
- ۵۶.....۲-۵- ساختار باند کریستال فوتونی دو بعدی از مواد ناهمسانگرد.....

فصل سوم: نتایج و بحث

- ۵۹.....۳-۱- مقدمه.....
- ۶۱.....۳-۲- شبکه مربعی شامل میله هایی با سطح مقطع متفاوت.....
- ۶۱.....۳-۲-۱- شبکه مربعی شامل میله هایی با سطح مقطع مربعی.....
- ۶۳.....۳-۲-۲- شبکه مربعی شامل میله هایی با سطح مقطع بیضوی.....
- ۶۶.....۳-۲-۳- شبکه مربعی شامل میله هایی با سطح مقطع هگزاگونال.....
- ۶۸.....۳-۲-۴- شبکه مربعی شامل میله هایی با سطح مقطع دایروی.....
- ۷۰.....۳-۲-۵- شبکه مربعی شامل میله هایی با سطح مقطع مستطیلی.....
- ۷۵.....۳-۲-۶- نتایج کلی برای شبکه مربعی.....
- ۷۶.....۳-۳- شبکه هگزاگونال شامل میله هایی با سطح مقطع متفاوت.....
- ۷۶.....۳-۳-۱- شبکه هگزاگونال شامل میله هایی با سطح مقطع مربعی.....
- ۷۹.....۳-۳-۲- شبکه هگزاگونال شامل میله هایی با سطح مقطع هگزاگونال.....
- ۸۱.....۳-۳-۳- شبکه هگزاگونال شامل میله هایی با سطح مقطع دایروی.....
- ۸۲.....۳-۳-۴- شبکه هگزاگونال شامل میله هایی با سطح مقطع مستطیلی.....
- ۸۵.....۳-۳-۵- شبکه هگزاگونال شامل میله هایی با سطح مقطع بیضوی.....
- ۸۸.....۳-۳-۶- نتایج کلی برای شبکه هگزاگونال.....
- ۸۹.....۳-۴- شبکه مثلثی شامل میله هایی با سطح مقطع متفاوت.....

- ۳-۴-۱- شبکه مثلثی شامل میله هایی با سطح مقطع مربعی..... ۸۹
- ۳-۴-۲- شبکه مثلثی شامل میله هایی با سطح مقطع هگزاگونال..... ۹۱
- ۳-۴-۳- شبکه مثلثی شامل میله هایی با سطح مقطع دایروی..... ۹۳
- ۳-۴-۴- شبکه مثلثی شامل میله هایی با سطح مقطع مستطیلی..... ۹۵
- ۳-۴-۵- شبکه مثلثی شامل میله هایی با سطح مقطع بیضوی..... ۹۹
- ۳-۴-۶- نتایج کلی برای شبکه مثلثی..... ۱۰۲
- ۳-۵- نتیجه گیری و پیشنهادات..... ۱۰۳
- منابع..... ۱۰۵



فهرست شکل ها

صفحه

فصل اول: بررسی منابع

- ۱-۱- یک ترکیب لانه زنبوری دو بعدی.....۱
- ۲-۱- چندین گزینه ممکن برای جفت بردارهای بسیط یک شبکه براوه دو بعدی.....۲
- ۳-۱- دو یاخته بسیط ممکن برای شبکه براوه دو بعدی.....۴
- ۴-۱- یاخته بسیط و واحد قراردادی برای شبکه براوه مکعبی مرکز سطحی.....۵
- ۵-۱- یاخته های بسیط و قراردادی برای شبکه براوه مکعبی مرکز حجمی.....۵
- ۶-۱- یاخته ویگنر سایتز برای یک شبکه براوه دو بعدی.....۶
- ۷-۱- یاخته ویگنر سایتز برای شبکه براوه کعبی مرکز حجمی.....۶
- ۸-۱- الف- اولین منطقه بریلوئن برای شبکه مکعبی مرکز حجمی.....۱۶
- ۸-۱- ب- اولین منطقه بریلوئن برای شبکه مکعبی مرکز سطحی.....۱۶
- ۹-۱- یک بازتاب براگ از صفحات شبکه که به اندازه d از هم فاصله دارند.....۱۷
- ۱۰-۱- پتانسیل میوفین-تین در نواحی بین شبکه ای مقدارش صفر است.....۲۹

فصل دوم: مبانی و روش ها

- ۱-۲- کریستال های فوتونی.....۳۲
- ۲-۲- نمونه ای از ساختار کریستال فوتونی دو بعدی.....۳۴
- ۳-۲- ساختار یک کریستال فوتونی با شبکه مربعی.....۴۹
- ۴-۲- تصویر منطقه اول بریلوئن برای شبکه مربعی.....۵۰
- ۵-۲- ساختار کریستال فوتونی با شبکه هگزاگونال.....۵۱
- ۶-۲- تصویر منطقه اول بریلوئن برای شبکه هگزاگونال.....۵۲
- ۷-۲- ساختار یک کریستال فوتونی با شبکه مثلثی.....۵۴
- ۸-۲- تصویر منطقه اول بریلوئن برای شبکه مثلثی.....۵۴

فصل سوم: نتایج و بحث

۲-۳- شبکه مربعی

- ۱-۲-۳- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی کامل بر حسب r/a برای میله های مربعی..... ۶۱
- ۲-۲-۳- ساختار باند فوتونی کامل به ازای مقدار بهینه $r=0/505a$ برای میله های مربعی..... ۶۲
- ۳-۲-۳- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی بر حسب زاویه دوران θ به ازای مقدار بهینه $r=0/505a$ برای میله های مربعی..... ۶۳
- ۴-۲-۳- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی کامل بر حسب r/a برای میله های بیضوی..... ۶۴
- ۵-۲-۳- ساختار باند فوتونی کامل به ازای مقادیر بهینه $\rho_1 = 0/43a$ و $t = 0/46$ برای میله های بیضوی..... ۶۵
- ۶-۲-۳- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی بر حسب زاویه دوران θ به ازای مقادیر بهینه $\rho_1 = 0/43a$ و $t = 0/46$ برای میله های بیضوی..... ۶۵
- ۷-۲-۳- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی کامل بر حسب r/a برای میله های هگزاگونال..... ۶۷
- ۸-۲-۳- ساختار باند فوتونی کامل به ازای مقدار بهینه $r=0/39a$ برای میله های هگزاگونال..... ۶۷
- ۹-۲-۳- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی بر حسب زاویه دوران θ به ازای مقدار بهینه $r=0/39a$ برای میله های هگزاگونال..... ۶۸
- ۱۰-۲-۳- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی کامل بر حسب r/a برای میله های دایروی..... ۶۹
- ۱۱-۲-۳- ساختار باند فوتونی کامل به ازای مقدار بهینه $r=0/357a$ برای میله های دایروی..... ۷۰
- ۱۲-۲-۳- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی کامل بر حسب r/a برای میله های مستطیلی..... ۷۱
- ۱۳-۲-۳- ساختار باند فوتونی کامل به ازای مقادیر بهینه $\rho_1 = 0/51a$ و $t = 0/98$ برای میله های مستطیلی..... ۷۲
- ۱۴-۲-۳- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی بر حسب زاویه دوران θ به ازای مقادیر بهینه $\rho_1 = 0/51a$ و $t = 0/98$ برای میله های مستطیلی..... ۷۲
- ۱۵-۲-۳- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی بر حسب زاویه دوران θ به ازای مقادیر بهینه $\rho_1 = 0/64a$ و $t = 0/61$ برای میله های مستطیلی..... ۷۳
- ۱۶-۲-۳- ساختار باند فوتونی کامل به ازای مقادیر بهینه $\rho_1 = 0/64a$ و $t = 0/61$ و در زاویه $\theta=0$ برای میله های مستطیلی..... ۷۴

۳-۲-۱۷- ساختار باند فوتونی کامل به ازای مقادیر بهینه $\rho_1 = 0/64a$ و $t = 0/61$ و در زاویه $\theta = 150^\circ$ برای میله های مستطیلی..... ۷۴

۳-۳- شبکه هگزاگونال

۳-۳-۱- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی کامل بر حسب r/a برای میله های مربعی..... ۷۶

۳-۳-۲- ساختار باند فوتونی کامل به ازای مقدار بهینه $r = 0/57a$ برای میله های مربعی..... ۷۷

۳-۳-۳- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی بر حسب زاویه دوران θ به ازای مقدار بهینه $r = 0/57a$ برای میله های مربعی..... ۷۸

۳-۳-۴- ساختار باند فوتونی کامل به ازای مقدار بهینه $r = 0/57a$ و در زاویه $\theta = 10^\circ$ برای میله های مربعی..... ۷۸

۳-۳-۵- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی کامل بر حسب r/a برای میله های هگزاگونال..... ۷۹

۳-۳-۶- ساختار باند فوتونی کامل به ازای مقدار بهینه $r = 0/67a$ برای میله های هگزاگونال..... ۸۰

۳-۳-۷- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی بر حسب زاویه دوران θ به ازای مقدار بهینه $r = 0/67a$ برای میله های هگزاگونال..... ۸۰

۳-۳-۸- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی کامل بر حسب r/a برای میله های دایروی..... ۸۱

۳-۳-۹- ساختار باند فوتونی کامل به ازای مقدار بهینه $r = 0/33a$ برای میله های دایروی..... ۸۲

۳-۳-۱۰- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی کامل بر حسب r/a برای میله های مستطیلی..... ۸۳

۳-۳-۱۱- ساختار باند فوتونی کامل به ازای مقادیر بهینه $\rho_1 = 0/41a$ و $t = 0/86$ برای میله های مستطیلی..... ۸۴

۳-۳-۱۲- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی بر حسب زاویه دوران θ به ازای مقادیر بهینه $\rho_1 = 0/41a$ و $t = 0/86$ برای میله های مستطیلی..... ۸۴

۳-۳-۱۳- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی کامل بر حسب r/a برای میله های بیضوی..... ۸۵

۳-۳-۱۴- ساختار باند فوتونی کامل به ازای مقادیر بهینه $\rho_1 = 0/38a$ و $t = 0/60$ برای میله های بیضوی..... ۸۶

۳-۳-۱۵- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی بر حسب زاویه دوران θ به ازای مقادیر بهینه $\rho_1 = 0/38a$ و $t = 0/60$ برای میله های بیضوی..... ۸۷

۳-۴- شبکه مثلثی

- ۳-۴-۱- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی کامل بر حسب r/a برای میله های مربعی..... ۸۹
- ۳-۴-۲- ساختار باند فوتونی کامل به ازای مقدار بهینه $r=0.57a$ برای میله های مربعی..... ۹۰
- ۳-۴-۳- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی بر حسب زاویه دوران θ به ازای مقدار بهینه $r=0.57a$ برای میله های مربعی..... ۹۰
- ۳-۴-۴- ساختار باند فوتونی کامل به ازای مقدار بهینه $r=0.57a$ و در زاویه $\theta=21$ برای میله های مربعی..... ۹۱
- ۳-۴-۵- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی کامل بر حسب r/a برای میله های هگزاگونال..... ۹۲
- ۳-۴-۶- ساختار باند فوتونی کامل به ازای مقدار بهینه $r=0.39a$ برای میله های هگزاگونال..... ۹۲
- ۳-۴-۷- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی بر حسب زاویه دوران θ به ازای مقدار بهینه $r=0.39a$ برای میله های هگزاگونال..... ۹۳
- ۳-۴-۸- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی کامل بر حسب r/a برای میله های دایروی..... ۹۴
- ۳-۴-۹- ساختار باند فوتونی کامل به ازای مقدار بهینه $r=0.36a$ برای میله های دایروی..... ۹۴
- ۳-۴-۱۰- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی کامل بر حسب r/a برای میله های مستطیلی..... ۹۵
- ۳-۴-۱۱- ساختار باند فوتونی کامل به ازای مقادیر بهینه $\rho_1 = 0.79a$ و $t = 0.15$ برای میله های مستطیلی..... ۹۶
- ۳-۴-۱۲- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی بر حسب زاویه دوران θ به ازای مقادیر بهینه $\rho_1 = 0.79a$ و $t = 0.15$ برای میله های مستطیلی..... ۹۷
- ۳-۴-۱۳- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی بر حسب زاویه دوران θ به ازای مقادیر بهینه $\rho_1 = 0.56a$ و $t = 0.69$ برای میله های مستطیلی..... ۹۸
- ۳-۴-۱۴- ساختار باند فوتونی کامل به ازای مقادیر بهینه $\rho_1 = 0.56a$ و $t = 0.69$ و در زاویه $\theta=146$ برای میله های مستطیلی..... ۹۸
- ۳-۴-۱۵- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی کامل بر حسب r/a برای میله های بیضوی..... ۱۰۰
- ۳-۴-۱۶- ساختار باند فوتونی کامل به ازای مقادیر بهینه $\rho_1 = 0.45a$ و $t = 0.16$ برای میله های بیضوی..... ۱۰۱
- ۳-۴-۱۷- تغییرات پهنای باند ممنوعه فوتونی بر حسب زاویه دوران θ به ازای مقادیر بهینه $\rho_1 = 0.45$ و $t = 0.16$ برای میله های بیضوی..... ۱۰۱

فهرست جدول ها

صفحه

عنوان

فصل سوم: نتایج و بحث

- ۳-۲-۱- نتایج عددی ساختارهای مختلف برای شبکه مربعی با پارامترهای بهینه.....۷۵
- ۳-۳-۱- نتایج عددی ساختارهای مختلف برای شبکه هگزاگونال با پارامترهای بهینه.....۸۸
- ۳-۴-۱- نتایج عددی ساختارهای مختلف برای شبکه مثلثی با پارامترهای بهینه.....۱۰۲

۱-۱- شبکه های بلوری^۱ [۱, ۲]

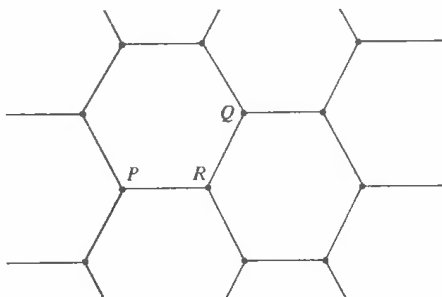
یکی از مفاهیم اساسی در توصیف جامد های بلورین ، شبکه براوه^۲ است که آرایه دوره ای را که واحدهای تکرار شونده طبق آن نظم یافته اند ، مشخص می کند. خود واحد ها ممکن است اتم های منفرد ، گروهی از اتم ها ، مولکول ها ، یون ها و غیره باشند ولی شبکه براوه ، بدون توجه به این که واحد های واقعی چه هستند ، تنها ، هندسه ساختار دوره ای اصلی را خلاصه می کند. ما دو تعریف هم ارز در مورد یک شبکه براوه ارائه می دهیم :

(الف) یک شبکه براوه آرایه های نا متناهی از نقاط مجزا از هم با ترتیب و جهت گیری دقیقاً یکسان از هر طرف می باشند.

(ب) یک شبکه (سه بعدی) براوه از مجموع نقاطی با بردار مکان \vec{R} به شکل زیر تشکیل می شود :

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \quad (1-1)$$

که در آن \vec{a}_1 ، \vec{a}_2 و \vec{a}_3 سه بردارند که باهم در یک صفحه نیستند و n_1 ، n_2 و n_3 اعداد صحیح می باشند. بنابراین با n_i گام به طول a_i در جهت \vec{a}_i ($i=1,2,3$) به نقطه $\sum_i n_i\vec{a}_i$ می رسیم. بردارهای \vec{a}_i ای که در تعریف (ب) شبکه براوه ظاهر شده اند بردارهای بسیط^۳ نام دارند و شبکه را تولید کرده یا اندازه می گیرند. دو تعریف شبکه براوه هم ارزند. مهم است که نه تنها شیوه چینش بلکه جهت مندی نیز از هر نظر یکسان به نظر برسد. به رئوس یک لانه زنبوری^۴ دو بعدی شکل (۱-۱) توجه کنید.



شکل (۱-۱) یک ترکیب لانه زنبوری دو بعدی تشکیل شبکه براوه نمی دهد. ترتیب نقاط با نگاه از نقطه P یا Q یکسان اند. ولی از نقطه R با این دو فرق داشته و به اندازه ۱۸۰ درجه چرخیده است.

^۱ Crystal lattice

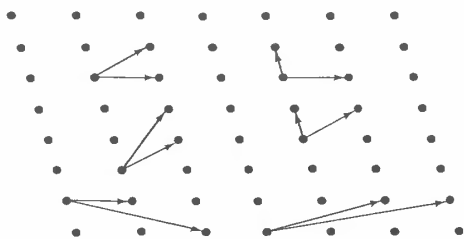
^۲ Bravais lattice

^۳ Primitive vectors

^۴ Hexagonal lattice

آرایه نقاط وقتی کاغذ 180° چرخانده شود یکسان به نظر می رسد و تنها نقاط مجاور جایشان را با هم عوض می کنند. روابط ساختاری کاملاً شبیه هم هستند ، اما در مورد جهت مندی این طور نیست ، بنابراین رئوس یک لانه زنبوری ، یک شبکه براوه تشکیل نمی دهند. موردی که از نظر عملی جالب توجه است و الزامات ساختاری و نه جهت مندی تعریف (الف) را برآورد می کند ، شبکه تنگ پکیده شش گوشه^۱ است.

از دو تعریف فوق برای شبکه براوه ، تعریف (ب) از نظر ریاضی دقیق تر بوده و نقطه شروع روشنی برای هر کار تحلیلی محسوب می شود. در عین حال دو کاستی جزئی دارد. نخست این که برای هر شبکه براوه معلوم ، مجموعه بردارهای بسیط یکتا نیستند - در حقیقت تعداد نامتناهی گزینه های غیر هم ارز وجود دارند ، شکل (۱-۲) - بنابراین غیر قابل قبول (و گاهی گمراه کننده) است که به تعریفی که روی یک گزینه ویژه تأکید می کند بیش از حد اطمینان داشته باشیم. در ثانی وقتی با در اختیار داشتن یک آرایه ویژه از نقاط ، بتوان با یک نگاه گفت که آیا تعریف نخست تأمین شده است یا نه ، حتی وجود مجموعه ای از بردارهای بسیط یا مدرکی در مورد وجود نداشتن چنین مجموعه ای را به سختی می توان فوراً پذیرفت.



شکل (۱-۲): چندین گزینه ممکن برای جفت بردارهای بسیط یک شبکه براوه دو بعدی. برای وضوح بیشتر آنها از جهات متفاوتی کشیده شده اند.

اگرچه عبارت شبکه براوه را برای مجموعه ای از نقاط به کار بردیم اما عبارت مذکور معمولاً برای اشاره به مجموعه ای از بردارهایی که به هر یک از این نقاط وصل می شوند نیز مورد استفاده قرار می گیرد. به دلیل آن که نقاط مورد بحث یک شبکه براوه هستند ، این مجموعه بردارها به اینکه کدام نقطه به عنوان مبدأ انتخاب شود بستگی ندارند. یک مورد استفاده دیگر از این حقیقت به دست می آید که هر بردار \vec{R} یک انتقال و جابه جایی را معین می کند که در آن همه چیز در فضا عملاً به اندازه R در جهت \vec{R} حرکت داده می شود. هم چنین عبارت شبکه براوه بیشتر برای اشاره به مجموعه نگاشت

^۱ Hexagonal close-packed

هایی که بردارها تعیین می کنند مورد استفاده قرار می گیرد تا برای اشاره به خود بردارها. در عمل همیشه از متن روشن می شود که منظور اشاره به کدام یک بوده است ، نقاط ، بردارها و یا نگاشت ها.

۱-۱-۱- شبکه های نامتناهی و بلورهای متناهی

از آنجا که همه نقاط باهم معادل اند ، شبکه براوه باید گستره ای نامتناهی داشته باشد. البته بلورهای واقعی متناهی هستند ولی اگر به اندازه کافی بزرگ باشند ، تعداد بی شماری از نقاط ، آنقدر از سطح دور می مانند که وجود آن تأثیری رویشان نمی گذارد. بنابراین تصور سیستمی نامتناهی ، ایده آل نگری بسیار مفیدی است. اگر اثرات سطحی^۱ نیز مورد توجه باشند ، تصور یک شبکه براوه باز مناسب است ، اما اکنون به بلور فیزیکی صرفاً به عنوان پرکننده بخش متناهی از شبکه براوه ایده آل توجه می کنیم.

غالباً بلورهای متناهی مورد نظرمان هستند ، نه به خاطر اهمیت آثار سطحی ، بلکه فقط به دلیل کارایی مفهومی. معمولاً برای داشتن ساده ترین شکل ممکن ، از قسمت محدودی از شبکه براوه استفاده می شود. می توان با معلوم بودن سه بردار بسیط \bar{a}_1 ، \bar{a}_2 و \bar{a}_3 شبکه ای متناهی از N جایگاه از نقاطی به شکل $\bar{R} = n_1\bar{a}_1 + n_2\bar{a}_2 + n_3\bar{a}_3$ را در نظر گرفت که در آن داریم :

$$0 \leq n_1 \leq N_1 \quad (۱-۲-الف)$$

$$0 \leq n_2 \leq N_2 \quad (۱-۲-ب)$$

$$0 \leq n_3 \leq N_3 \quad (۱-۲-ج)$$

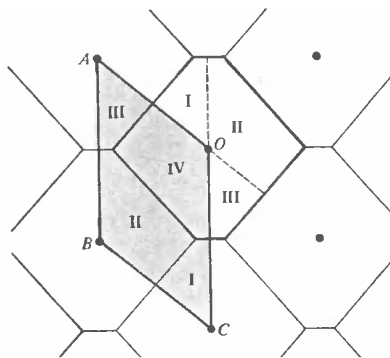
در این روابط $N = N_1N_2N_3$ می باشد. این کارکرد قویاً به تعمیم توصیف سیستم های بلورین با شرط مرزی دوره ای مرتبط است.

^۱ Surface effect

۱-۱-۲- یاخته واحد بسیط^۱

هنگامی که از طریق تمام بردارهای یک شبکه براوه ، روی حجمی از فضا نگاهی صورت پذیرد ، به طوری که تمام فضا را بدون روی هم افتادگی یا باقی گذاردن قسمت های خالی ، پر کند ، این حجم یاخته بسیط یا یاخته بسیط واحد شبکه نام دارد. هیچ روش منحصر به فردی برای برگزیدن یاخته بسیط یک شبکه براوه وجود ندارد. یک یاخته بسیط باید حاوی دقیقاً یک نقطه شبکه باشد ، مگر اینکه به گونه ای قرار گیرد که نقاطی روی سطحش باشند. در نتیجه اگر n چگالی نقاط شبکه و v حجم یاخته بسیط باشند آن گاه $nv=1$ است ، بنابراین داریم $v=\frac{1}{n}$. از آن جا که این نتیجه برای هر یاخته بسیطی برقرار است ، حجم یک یاخته بسیط به انتخاب یاخته بستگی ندارد.

هم چنین بنابر تعریف یاخته بسیط ، با داشتن هر دو یاخته بسیطی با شکل دلخواه ، این امکان وجود دارد که پس از تکه تکه کردن یکی ، با نداشتن از طریق بردار شبکه های مناسب ، آن را دوباره طوری سرهم می کنیم که دیگری بدست آید. این موضوع در شکل (۱-۳) نشان داده شده است.



شکل (۱-۳) دو یاخته بسیط ممکن برای شبکه براوه دوبعدی. یاخته متوازی الاضلاع بسیط است ، یاخته های شش گوشه دیگر بیانگر این اند که یاخته شش گوشه نیز بسیط است.

یاخته بسیط بدیهی مربوط به یک مجموعه خاص از بردارهای بسیط مانند \vec{a}_1 ، \vec{a}_2 و \vec{a}_3 ، مجموعه همه نقاط \vec{r} به شکل زیر است :

$$\vec{r} = x_1 \vec{a}_1 + x_2 \vec{a}_2 + x_3 \vec{a}_3 \quad (۱-۳)$$

برای تمام x_i های پیوسته در بازه بین ۰ و ۱ که به عبارت دیگر متوازی السطوحی است که توسط سه بردار \vec{a}_1 ، \vec{a}_2 و \vec{a}_3 تولید می شود. نقص این انتخاب آن است که تقارن کامل شبکه براوه را نشان نمی دهد. برای مثال شکل (۱-۴) یاخته واحد یک شبکه براوه fcc ، یک متوازی السطوح مایل است که تقارن مکعبی کامل شبکه ای را که در درونش واقع شده ندارد.

^۱ Primitive unit cell