



دانشگاه ارومیه

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد در گرایش حالت جامد

مطالعه خط برگشت نا پذیری مغناطیسی ابررسانای پایه Bi با آلایش Y

استاد راهنما :

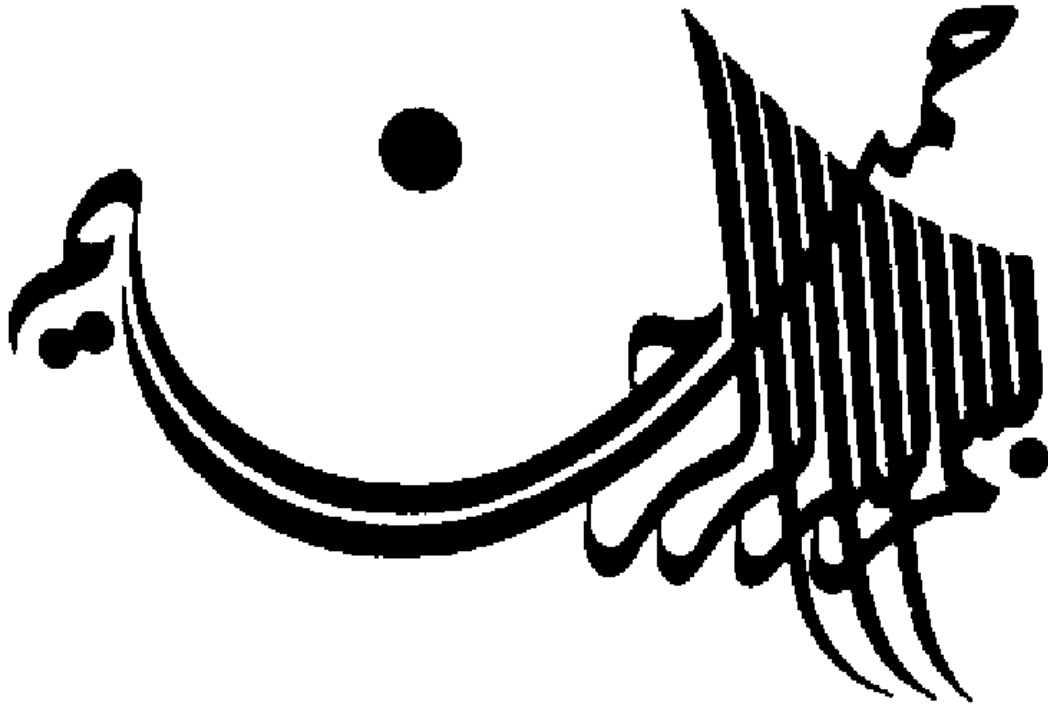
دکتر حسن صدقی

ارائه دهنده :

سونای نشانی

بهمن 1390

حق نشر و چاپ مطلب این پایان نامه برای دانشگاه ارومیه محفوظ است .



فهرست مطالب

1.....	چکیده
2.....	1-1 مطالعات اولیه
2.....	1-1-1 مطالعه در رسانندگی الکتریکی
3.....	2-1-1 مطالعه در ترمودینامیک
3.....	3-1-1 مطالعه در دمای صفر مطلق
4.....	2-1 مطالعات تئوریک اولیه
5.....	1-2-1 مدل درود درباره فلزات
7.....	2-2-1 نظریه سومرفلد درباره فلزات
8.....	1-3 خواص فلزات عادی
8.....	1-3-1 انرژی فرمی ، تراز فرمی
12.....	2-3-1 قاعده ماتیسن
16.....	1-1-2 ابررسانایی
17.....	2-2 شناخت ابررسانایی
18.....	3-2 مشخصات بنیادی ابررسانایی
18.....	1-3-2 دما ، جریان و میدان بحرانی
20.....	2-3-2 فرضیه سیلزی
20.....	4-2 دیامغناطیسی کامل و اثر مایسنر

20.....	1-4-2 بررسی در مغناطیس.....
22.....	2-4-2 دیا مغناطیسی.....
22.....	3-4-2 اثر مایسنر.....
24.....	5-2 مشخصات الکترومغناطیسی.....
25.....	6-2 مشخصات ترمودینامیکی.....
26.....	1-6-2 گذار فاز.....
26.....	2-6-2 انرژی آزاد گیبس.....
29.....	3-6-2 آنتروپی.....
29.....	4-6-2 ظرفیت گرمایی.....
31.....	7-2 مدل دو شاره و معادله لندن.....
31.....	1-7-2 مدل دو شاره.....
35.....	8-2 معادله لندن.....
40.....	9-2 عمق نفوذ میدان مغناطیسی در ابرسانا.....
42.....	1-9-2 الکترودینامیک غیر موضعی پیپارد.....
44.....	11-2 انواع ابرساناها.....
46.....	1-11-2 ابرساناهای نوع یک و دو.....
53.....	12-2 تئوری های ابرسانایی.....

- 55..... 13-2 نظریه میکروسکوپی ابرسانایی
- 55..... 1-13-2 نظریه گینزبورگ - لاندائو
- 56..... 2-13-2 گاف انرژی ، زوجهای کوپر و تئوری BCS
- 62..... 2-13-3 اثر ایزوتوپ
- 63..... 2-13-4 پارامتر نظم ، کوانتش شار
- 65..... 2-14 اثر جوزفسون
- 65..... 2-14-1 تونل زنی نرمال و اثر جوزفسون
- 66..... 2-14-2 اثر DC جوزفسون
- 67..... 2-14-3 اثر AC جوزفسون
- 68..... 3-1 ابرساناهای دما بالا
- 70..... 3-2 ساختار اتمی در ابرساناهای دما بالا
- 74..... 3-3 ابرساناهای اکسید مس پروسکایتها
- 76..... 3-4 ساختار ابرسانای دما بالای پایه بیسموت
- 78..... 3-5 روشهای ساخت ابرسانای دما بالا
- 83..... 3-5-1 خزش شار و میخکوب شدگی گردشها
- 84..... 3-6 خط برگشت ناپذیری
- 87..... 4-1 ساخت ابرسانای BI-2223 با جانشانی CA در جایگاه Y

91	4-2 آزمایش و اندازه گیری
91	4-2-1 پراش اشعه X و ساختار بلوری
96	4-3 اندازه گیری مقاومت الکتریکی
98	4-3-1 نحوه محاسبه مقاومت الکتریکی در روش چهار میله ای
99	4-3-2 نتایج اندازه گیری مقاومت الکتریکی
102	4-4 نمودار آرنوس و اندازه گیری انرژی فعالسازی
106	4-5 روش های اندازه گیری خط برگشت ناپذیری
110	4-6 نتایج میکروسکوپ الکترونی روبشی
113	نتایج
114	پیشنهادات
115	منابع
118	ABSTRACT

فهرست نمودارها و جداول

- 15..... جدول (1-1): مشخصات برخی عناصر
- 16..... نمودار (2-1): دیاگرام گذار به ابرسانایی در جیوه
- 17..... نمودار (2-2): روند تاریخی کشف برخی ابرساناها
- 18..... نمودار (3-2): الف) نمودار تغییرات میدان مغناطیسی بر حسب دما در یک ابرسانا
- 19..... نمودار (2-4): ب) منحنی آستانه میدان بحرانی بر حسب دما چند ابرسانا
- 19..... جدول 1: دمای گذار و میدان مغناطیسی بحرانی در برخی ابرساناها
- 23..... شکل (2-5): شکل خطوط میدان در ابرسانای و رسانای کامل در حضور و غیاب میدان با کاهش دما
- 24..... نمودار (2-6): میدان بحرانی در یک ابرسانا
- 30..... نمودار (2-7): منحنی تغییرات گرمای ویژه بر حسب دما
- 41..... نمودار (2-8): عمق نفوذ نرمال شده بر حسب دمای نرمال شده
- 47..... شکل (2-9): کره ابرسانا در حضور میدان مغناطیسی
- 47..... شکل (2-10): A) میدان اعمالی موازی B) میدان اعمالی عمود C) حالت میانی در ابرسانای استوانه ای
- 48..... شکل (2-11): حالت میانی ابرسانای استوانه ای در حضور میدان
- 48..... شکل (2-12): حالت میانی در صفحه ابرسانا از جنس آلومینیوم
- 49..... شکل (2-13): نفوذ میدان مغناطیسی در یک ابرسانای استوانه ای نوع یک

- 50..... شکل (2-14) : سطح یک ابرسانای نوع دو در حضور میدان مغناطیسی عمودی
- 51..... شکل (2-15) : وابستگی دمایی میدانهای بحرانی بالایی و پایینی
- 52..... شکل (2-16) : هسته های نرمال یک ابرسانای نوع دو
- 53..... شکل (2-17) : مقایسه نفوذ میدان مغناطیسی و چگالی ابرالکترونها در ابرسانای نوع یک و دو
- 70..... جدول 3-1 : ترکیبات ابرسانای اکسید مس و دمای گذار مربوط به آنها
- 72..... شکل (3-2) : شبکه های براوه
- 73..... شکل (3-2) : لایه های اتمی
- 73..... شکل (3-3) : صفحه اتمی (212) اندیس گذاری شده به روش میلر
- 75..... جدول (3-2) : فرمول کلی و نامگذاری برخی ابرساناهای اکسید مس
- 76..... شکل (3-5) : سلول واحد سیستم ابرسانایی BSCCO به همراه روند تکرار سلول واحد هر فاز
- 81..... شکل (3-6) : ابرسانای نوع یک و دو در میدان مغناطیسی
- 85..... شکل (3-7) : دیاگرام فاز یک ابرسانای دما بالا
- 87..... جدول (4-1) : مشخصات پودر های اولیه
- 88..... جدول (4-2) : مقادیر مورد نیاز از پودر های اولیه برای تولید قرص های ابرسانای 10 گرمی
- 89..... نمودار (4-1) : طرح شماتیک از روند پخت نمونه ها در مرحله تکلیس
- 90..... جدول (4-3) : مقادیر فشار و مکث در مرحله تفتجوشی

- 90..... نمودار (2-4) : طرح شماتیک روند پخت نمونه ها در مرحله تفتجوشی
- 91..... شکل (1-4) : تفرق اشعه X بر اثر برخورد با صفحات اتمی
- 92..... شکل (2-4) : دواير متحد المركز در فيلم دبای - شرر
- 93..... شکل (3-4) : روش دیفرکتومتری پراش اشعه X
- 93..... جدول (4-4) : روابطه بين پارامترهای شبکه و فواصل صفحات اتمی سیستم های بلوری
- 94..... نمودار (4-4) : طرح پراش اشعه X برای نمونه های
- 95..... شکل (5-4) : طرح پیک مرجع برای BI -2212 و BI -2223
- 95..... جدول (6-4) : درصد کسر حجمی محاسبه شده برای نمونه ها
- 101..... شکل (7-4) : منحنی تغییرات مقاومت بر حسب تغییرات دما برای نمونه های (A), (B)
- 101..... شکل (8-4) : منحنی تغییرات مقاومت بر حسب تغییرات دما برای نمونه های (C), (D), (E)
- 103..... جدول (7-4) : مقادیر T_c و T_{IRR} برای نمونه ها
- 103..... جدول (8-4) : مقادیر T_{cONSET} برای نمونه ها
- 104..... جدول (9-4) : مقادیر مقاومت در صفر کلونین
- 104..... شکل (9-4): نمودار آرنوس نمونه های (A) و (B)
- 105..... شکل (10-4) : نمودار آرنوس نمونه های (C), (D) و (E)
- 106..... جدول (10-4) : مقادیر بدست آمده از قسمت خطی منحنیهای آرنوس

- 107 شکل (4- 11) : تغییرات انرژی فعال سازی برحسب دما
- 107 جدول (4- 11) : مقدار بدست آمده برای β
- 110 شکل (4- 13) : نمودار خط برگشت پذیری برای نمونه های (C) (D) (E)
- 112 جدول (4- 12) : مقادیر بدست آمده از نمودار های خط برگشت ناپذیری برای γ
- 112 شکل (4- 14) : SEM برای نمونه
- 113 شکل (4- 15) : SEM برای نمونه های (C), (B) و (D)
- 114 شکل (4- 16) : SEM برای نمونه های (D)

چکیده

در این پایان نامه اثر آرایش با Y در ابررسانای دما بالای با پایه Bi بر خواص ابررسانایی و خط برگشت ناپذیری مغناطیسی بررسی شده است. نمونه ها به روش واکنش حالت جامد و با ترکیب اسمی $Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10+\delta}$ برای نمونه بدون آرایش و $Bi_{1.6}Pb_{0.4}Sr_2Y_xCa_{2-x}Cu_3O_{10+\delta}$ برای نمونه های با آرایش $x = 0.1, 0.2, 0.3$ ساخته شدند. جهت بررسی ویژگی های ساختاری نمونه ها با پراش اشعه X و همچنین از طریق تصویر برداری میکروسکوپ الکترونی روبشی مورد مطالعه قرار گرفتند. خواص ابررسانایی نمونه ها از طریق بررسی منحنی تغییرات مقاومت الکتریکی بر حسب دما و به روش چهار میله ای مورد بررسی قرار گرفتند. انرژی فعال سازی حرارتی با رسم منحنی آرنوس مربوط به هر نمونه محاسبه شده و وابستگی آن به میدان مغناطیسی مورد بررسی قرار گرفت. دما و خط برگشت نا پذیری مغناطیسی مربوط به هر نمونه از طریق بررسی منحنی تغییرات مقاومت الکتریکی بر حسب دما با اعمال میدان مغناطیسی 3، 20، و 30 میلی تسلا اندازه گیری و رسم گردید و نتایج بدست آمده با تئوری های موجود مقایسه شدند.

1-1 مطالعات اولیه

1-1-1 مطالعه در رسانندگی الکتریکی

رسانندگی عبارتست که برای توصیف توانایی ماده در عبور دادن حامل های انرژی استفاده می شود و رسانندگی الکتریکی¹ هم در واقع مربوط به توانایی مواد در عبور دادن ذرات باردار است. مطالعات اولیه در مورد رسانندگی الکتریکی در فلزات در قرن 18 آغاز شده بود. در سال 1729 ویلیام گری² توانست پدیده هدایت الکتریکی در برخی از مواد را کشف کند. این آغاز عصری بود که به عصر الکتریسیته ساکن معروف شد. در این سالها بنجامین فرانکلین³ در آزمایشهای خود نشان داد که بار الکتریکی ناشی از رعد و برق توانایی جاری شدن در یک میله فلزی را دارد و الساندرو ولتا⁴ توانست مفهوم پتانسیل الکتریکی را در الکتریسیته ساکن مطرح نماید و آندره ماری آمپر⁵ مطالعات گسترده ای در زمینه جریانهای الکتریکی انجام داد. در سال 1827 جرج سیمون اهم⁶ خواص رسانندگی در فلزات را بررسی کرد و توانست ارتباط بین اختلاف پتانسیل و جریان الکتریکی را کشف کند که ملاکی برای اندازه گیری رسانندگی در فلزات شد. همچنین در سال 1862 با کشف پیوستگی الکتریسیته و مغناطیس، جیمز ماکسول⁷، قوانین الکترومغناطیس را ارائه نمود و به دنبال کشف الکترون توسط تامسون⁸ در سال 1879 اولین قدمها در جهت فهم میکروسکوپی هدایت الکتریکی برداشته شد. اواخر قرن نوزدهم در واقع اوج شکوفایی در الکتریسیته بود که به همت دانشمندانی چون نیکولا تسلا⁹ و توماس ادیسون¹⁰ شکل گرفت [1].

1. Electrical conductivity
2. W. Gray
3. B. Frankline

4. A. Volta
5. A.M. Ampere
6. G.S. Ohm

7. J.C. Maxwell
8. J.J. Thompson
9. N. Tesla

10. T. Edison

1-1-2 مطالعه در ترمودینامیک

در سال 1797 بنجامین تامسون¹ نشان داد که کار مکانیکی می تواند گرما تولید کند و به این ترتیب نظریه کالریک² را که گرما را به شکل سیالی در نظر می گرفت که از مواد گرم به مواد سرد جاری می شود ، به چالش کشید و نهایتاً قوانین سه گانه ترمودینامیک در محدود زمانی 1824 تا 1860 شکل گرفت. با تلاشهای جیمز ژول³ و ویلیام توماس کلوین⁴ در سال 1848 مفهوم دمای مطلق⁵ که مستقل از خواص هر ماده ای بود و بر پایه قوانین ترمو دینامیک قرار داشت ، مطرح گردید. دمای مطلق که مقدار صفر آن برابر 273/15- درجه سلسیوس بود [2] .

1-1-3 مطالعه در دمای صفر مطلق

تلاش ها برای دستیابی به تکنولوژی رسیدن به دماهای پایین سالها مورد مطالعه بود. طی سالهای طولانی از اوایل قرن 17 مطالعاتی در مورد گازها انجام می گرفت. در سال 1787 ژاک چارلز⁶ رابطه دما و حجم را و در سال 1802 جوزف گای لوساک⁷ ارتباط بین فشار و دما را گازها یافتند. در دهه 1880 جیمز دوار⁸ مطالعه در مورد مقاومت در دماهای پایین را آغاز و پیش بینی کرد که در دمای صفر مطلق فلزات خالص رسانایی الکترومغناطیسی کامل خواهد شد. زیگمونت وروبلوسکی⁹ مطالعه در دمای پایین را به تمام خواص الکتریکی گسترش داد و در سال 1864 به همراه اولژوسکی¹⁰ پدیده الکتریکی را پیش بینی کرد که بر اساس آن دماهای بسیار پایین باعث کاهش در مقدار مقاومت الکتریکی می شد.

1 . B. Thompson
2. Caloric theory
3.J.Joule

4.W.T.Kelvin
5.absolute temperature
6.J.A.C.Charles

7.J.L.G.Lussac
8.J.Dewar
9.Z.Florenty Wroblewski

10.K.Olszewski

در سال 1876 کارل ون لیند¹ توانسته بود با مایع کردن هوا به دمای منفی 190 درجه سانتیگراد برسد. این تلاش برای دستیابی به صفر مطلق همچنان ادامه داشت تا اینکه هایک کامرلینگ اونس² 1908 توانست به هلیوم مایع و دمای منفی 272.2 درجه سانتیگراد دست یابد که نزدیکترین دما به صفر مطلق بود [3].

1-2 مطالعات تئوریک اولیه

یکی از مهم ترین نظریه های ارائه شده در تاریخ فیزیک نظریه جنبشی گازها³ است که در سال 1738 توسط دانیل برنولی⁴ ارائه گردید. این تئوری سر آغاز ارزشمندی در شناخت ساختار مواد در حالات مختلف گاز، مایع و جامد می باشد و توصیف نوسانات حرکت مولکولی ای را شامل می شود که به معرفی توزیع آماری ماکسول - بولتزمن، مفهوم آنتروپی و حرکت براونی منجر شد. در فاصله بین سالهای 1898 تا 1905 تلاشهای بسیار توسط دانشمندانی چون درود⁵، لورنتس⁶ و ریک⁷ در جهت برقراری ارتباط بین خواص الکتریکی، مغناطیسی، اپتیکی و ساختار فیزیکی مواد انجام شد تا اینکه مدل درود در توصیف خواص حرارتی و الکتریکی مواد و قانون ویدمن - فرانز⁸ در مورد ارتباط بین رسانندگی حرارتی و رسانندگی الکتریکی ارائه گردید.

1. K.Von Linde
2. H.Kamerling Onnes
3. kinetic theory of gases

4. D. Bernoulli
5. P. Drude
6. H.A. Lorentz

7. E. Riecke
8. Wiedemann-Franz law

1-2-1 مدل درود درباره فلزات

کشف الکترون توسط تامسون تاثیر بسیاری بر تئوری های مطرح شده در مورد ساختار مواد، خصوصا مفهوم رسانش در فلزات داشت. در این میان مدل هدایت الکتریکی درود - لورنتس که در باره خواص حرکت الکترونها در مواد خصوصا در فلزات بحث می کند، در سال 1905 ارائه گردید. این مدل در واقع کاربردی از نظریه جنبشی گازهاست و توصیف خوبی از رسانندگی DC و AC و رسانندگی حرارتی در فلزات و اثر هال ارائه می کند. بنا بر نظریه جنبشی گازها، مولکولهای گاز به شکل کره های صلب شبیه به هم توصیف شده اند که حرکت مستقیم الخط دارند و در این مسیر با یکدیگر برخورد می کنند. در این نظریه از زمان بین برخوردها صرف نظر می شود و در برخوردها هیچ نیرویی رد و بدل نمی شود. اگر همین نظریه جنبشی را در مورد فلزات به کار ببریم باید در نظر بگیریم که فلزات برخلاف گازها از یک نوع ذره تشکیل نشده اند و در مورد فلزات حداقل دو نوع ذره باید در نظر گرفته شود. درود ساختار فلزات را به شکل مجموعه ای از الکترونها با بار منفی و متحرک فرض کرد و آن را گاز الکترونی¹ نامید و برای جبران مسئله خنثی بودن فلزات به لحاظ الکتریکی، بارهای مثبتی را به صورت ذرات بسیار سنگین تر و ساکن در نظر گرفت. بدین ترتیب درود با توصیف یک ساختار فلزی فرض کرد الکترونها را در عنصر فلزی رها شده و آزادانه در حال حرکت باشند و یونها بارهای مثبت غیر متحرک آن عنصر فلزی باشند. درود نظریه جنبشی گازها را در مورد گاز الکترونی که در ساختارهای فلزی توصیف کرده بود به کار گرفت یعنی از توزیع آماری ماکسول - بولتزمن² برای گاز الکترونی استفاده نمود و از برهمکنش های یک الکترون با سایر الکترونها و همچنین یونها چشم پوشی نمود. استفاده از این توزیع توافق خوبی با قانون ویدمن - فرانتز داشت. از نتایج مدل درود رابطه الکتریکی حرکت* و رابطه خطی بین چگالی جریان و میدان الکتریکی** است. یعنی در غیاب میدان مغناطیسی خارجی هر الکترون حرکت یکنواخت و در یک خط راست خواهد داشت و با اعمال میدان مغناطیسی الکترون بر اساس قوانین حرکت نیوتن حرکت خواهد کرد. همین طور

-
1. Electron gas
 2. Maxwell-Boltzmann Statistical Distribution
 3. Independent electron approximation
 4. Free electron approximation

$$* \quad \frac{d}{dt} P(t) = qE - \frac{P(t)}{\tau}$$

$$** \quad J = \left(\frac{nq^2\tau}{m} \right) E$$

میدانهای ناشی از وجود الکترونها و یونها نادیده گرفته می شود. نادیده گرفتن برهمکنش های الکترون – الکترون در برخوردها تحت عنوان تقریب الکترون مستقل³ و نادیده گرفتن برهم کنش های الکترون – یون⁴، تقریب الکترون آزاد نامیده می شود. برخورد ها در فرضیه درود، مشابه تئوری جنبشی، به طور لحظه ای و ناگهانی رخ می دهد و با تغییر سرعت همراه هستند. فاصله زمانی این تغییر ناگهانی سرعت الکترون برخوردی، زمان واهلش¹ یا زمان آزاد میانگین² نامیده می شود که بر مبنای حرکت کاتوره ای الکترونهاست به طوری که در آن زمان واهلش مستقل از سرعت و مکان الکترون می باشد. در فرضیات درود این برخورد ها به عنوان منشاء تعادل گرمایی و رسانش الکتریکی در فلزات معرفی می شوند. با ابداع نظریه کوانتومی و ارائه اصل طرد پاولی³ در سال 1925 استفاده از توزیع آماری ماکسول – بولتزمن برای الکترونها که فرمیون به حساب می آیند نادرست بود لذا باید از توزیع آماری فرمی – دیراک⁴ استفاده می شد. این کار توسط آرنولد سومرفلد⁵ انجام شد. روابط مربوط به توزیع آماری ماکسول – بولتزمن و فرمی دیراک به فرم زیر است

$$f_{MB}(\vec{v}) = 4\pi v^2 \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} e^{\left(-\frac{\frac{1}{2}mv^2}{k_B T}\right)}$$

توزیع آماری ماکسول – بولتزمن بر حسب سرعت الکترونی (1-1)

$$f_{FD}(\vec{v}) = \frac{(m/\hbar)^3}{4\pi^3} \frac{1}{\exp\left[\frac{\frac{1}{2}mv^2 - k_B T_0}{k_B T}\right] + 1}$$

توزیع آماری فرمی – دیراک بر حسب سرعت الکترونی (2-1)

1. Relaxation Time
2. Mean free time
3. Pauli exclusion principal

4. Fermi-Dirac statistical distribution
5. A. Summerfeld
6. Band structure model

که در آن T_0 دمایی است که از شرط بهنجارش زیر تعیین می شود .

$$n = \int dv f(v) \quad (3-1)$$

1-2-2 نظریه سومرفلد درباره فلزات

سومرفلد با ادغام نظریه کلاسیک درود و مکانیک کوانتومی و توزیع آماری فرمی دیراک در مدل الکترون آزاد پایه های مدل ساختار نواری² در حالت جامد را بنا نهاد و کمک شایانی به توصیف پدیده های آزمایشگاهی نظیر ظرفیت گرمایی ، قانون ویدمن - فرانتز می کند . بنا به قانون ویدمن - فرانتز نسبت رسانندگی حرارتی به رسانندگی الکتریکی در یک فلز با دما متناسب و ضریب این تناسب عدد لورنز است .

به کمک مدل الکترون آزاد مدلی برای توصیف برهمکنش های بین الکترونهاى رسانش و یونها در جامدات کریستالی ارائه می گردد که در نتیجه وجود رساناها ، نیمه رساناها و عایق ها قابل توضیح می گردد .

در عین حال مدل الکترون آزاد سومرفلد با وجود این که توانست بسیاری از مشکلات مربوط به توصیف رسانش در فلزات حل کند اما پیش بینی های کمی بسیاری داشت که با مشاهدات آزمایشگاهی تطابق نداشت . برای بسیاری از سوالات نیز پاسخی نداشت مثلا نمی توانست تعداد الکترونهاى آزاد را تعیین کند یا اینکه سهم الکترونی گرمای ویژه در دماهای پایین را توجیه کند و غیره . بنابر این تقریب الکترون مستقل نمی توانست توصیف خوبی از برخی خواص فلزات ارائه دهد . خصوصا در مورد اتفاقاتی که در دماهای پایین رخ می دهد . بروز ابررسانایی از دیدگاه تقریب الکترون مستقل بسیار غیر عادی می نمود .

فهم نظری پدیده ابررسانایی و خواص مربوط به آن از چندین دیدگاه میسر شد . برخی نتایج حاصل از مطالعات ترمو دینامیکی است و بسیاری ، از معادلات پدیده شناختی حاصل شد نظیر معادلات لندن ، تئوری گینزبورگ لاندائو و غیره . بدین ترتیب پایه های اولیه برای ارائه تئوری میکروسکوپی و تئوریها بعدی با استفاده از نظریه کوانتومی غیر نسبیتی در ابررسانایی شکل گرفت [4-6] .

1-3 خواص فلزات عادی

1-3-1 انرژی فرمی ، تراز فرمی

الکترونها به دلیل آنکه اسپین نیمه صحیح دارند یعنی فرمیون هستند ، باید از اصل طرد پاولی پیروی کنند پس هر حالت کوانتومی تنها می تواند حاوی یک الکترون باشد. در مکانیک کوانتومی برای پیدا کردن حالتی که دارای کمترین انرژی برای یک سیستم فرمیونی است ، باید حالتها را به صورت سطوح انرژی و به طور افزایشی در نظر بگیریم و به ترتیب با رعایت اصل طرد این سطوح را پر کنیم . زمانی که تمام فرمیونها در سطوح قرار گرفتند انرژی بالاترین سطح اشغال شده ، انرژی فرمی ، E_F ، نامیده می شود . انرژی فرمی مفهوم بسیار مهمی برای درک درست از خواص الکتریکی و حرارتی جامدات است. در فلزات، انرژی فرمی اطلاعات مربوط به سرعت فرمی v_F که سرعتیست که الکترون برای رسیدن به سطح فرمی و شرکت در هدایت الکتریکی عادی نیاز دارد را شامل می شود. چون مقدار انرژی مورد نیاز الکترون برای شرکت در روند هدایت در حد چند میکرو الکترون ولت است و انرژی فرمی در فلزات از مرتبه الکترون ولت ، لذا الکترونهای نزدیک به انرژی فرمی توانایی هدایت دارند. برای یک فلز چگالی الکترونهای هدایتی را می توان از سطح فرمی استنتاج نمود. در عین حال برای یک الکترون در یک فلز کریستالی یک سطح فرضی از انرژی پتانسیل تعریف می شود که سطح فرمی نامیده می شود . در دمای صفر مطلق کلیه حالات انرژی زیر این سطح پر بوده و در واقع دریای الکترونی فرمی را شکل می دهند که تا زمانی که انرژی کافی بدست نیاورند نمی توانند به سطوح خالی بالای سطح فرمی منتقل شوند.

$$v_F = \sqrt{\frac{2E_F}{m}} \quad (4-1)$$

اگر انرژی پتانسیل ϵ باشد و μ معرف پتانسیل شیمیایی باشد بنا به تابع توزیع انرژی فرمی دیراک خواهیم داشت:

$$F_e(\epsilon) = \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu/kT)}+1} \quad (5-1)$$

که احتمال اشغال سطح انرژی را توسط یک الکترون با انرژی ϵ در یک فلز نشان می دهد. K همان ثابت بولتزمن است. زمانی که $\mu = \epsilon$ قسمت نمایی رابطه بالا برابر یک می شود و F_e نشان دهنده سطح فرمی خواهد بود. سطح فرمی و انرژی فرمی در دمای صفر مطلق برابرند ولی در سایر دماها متفاوت خواهند بود. انرژی فرمی یک سیستم از فرمیونهای بدون اندرکنش با اضافه شدن یک ذره از حالت پایه افزایش می یابد. در واقع انرژی فرمی حداکثر انرژی یک فرمیون منفرد در حالت پایه کوانتومی است. مدل دیواره مریعی نامحدود به عرض L در مکانیک کوانتومی مدلی استاندارد برای توصیف یک ذره منفرد است. در این مدل سطوح با یک عدد کوانتومی منفرد n و انرژی های E_n نشان داده می شوند:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \quad (6-1)$$

حال با در نظر گرفتن N ذره فرمیون در این جعبه که اسپین نیم صحیح دارند تنها دو ذره می توانند انرژی یکسان داشته باشند. انرژی ذره اول به شکل زیر خواهد بود

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \quad (7-1)$$

انرژی سایر ذرات به ترتیب به شکل $E_2 = 4 E_1$ و ... خواهد بود. برای یافتن حالت پایه، از آنجا که کلیه حالات بالا $n = N/2$ پر هستند پس برای انرژی فرمی داریم

$$E_F = E_{N/2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (N/2)^2 \quad (8-1)$$

روش دیگر برای بدست آوردن انرژی فرمی محاسبه چگالی حالت ها با استفاده از ویژه توابع حالت پایه برای ذره آزاد است.

$$\epsilon_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (9-1)$$

$$g(\epsilon) = \sum_{\text{حالات}} \delta(\epsilon - \epsilon_0) = \sum_{\text{اسپین}} \sum_k \delta\left(\epsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) \Delta k = \frac{2L}{2\pi} \int \delta\left(\epsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) dk$$

$$g(\epsilon) = \frac{L}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \delta\left(\epsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) dk = \frac{L}{\pi \hbar} \frac{\sqrt{2m}}{\sqrt{\epsilon}}$$

انتگرال چگالی حالات تا سطح فرمی برابر تعداد ذرات خواهد بود

$$N = \int_0^{\epsilon_F} g(\epsilon) d\epsilon = \frac{2L\sqrt{2m\epsilon_F}}{\hbar\pi}$$

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N\pi}{2L}\right)^2 \quad (10-1)$$

در حالت سه بعد یک جعبه مکعبی به ضلع L خواهیم داشت که تقریب خوبی برای توصیف الکترونها در فلزات خواهد بود در این حالت اعداد کوانتومی مثبت n_x , n_y و n_z هستند و انرژی های ذره منفرد به شکل زیر خواهد بود

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x + n_y + n_z)^2 \quad (11-1)$$

در این حالت سطوح چندگانه با انرژی یکسان خواهیم داشت $E_{211} = E_{121} = E_{112}$. حال اگر باز N فرمین غیر برهمکنشی در جعبه قرار بگیرند و بردار \vec{n} را چنین تعریف کنیم

$$\vec{n} = \{n_x, n_y, n_z\}$$

انرژی فرمی چنین خواهد بود

$$E_{\vec{n}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} |\vec{n}|^2 \quad (12-1)$$

در این جا تعداد حالات با انرژی کمتر از E_F برابر با تعداد حالاتیست که در یک کره به شعاع $|\vec{n}|$ در ناحیه فضایی \vec{n} قرار دارند. در حالت پایه این عدد برابر تعداد فرمیونهاست