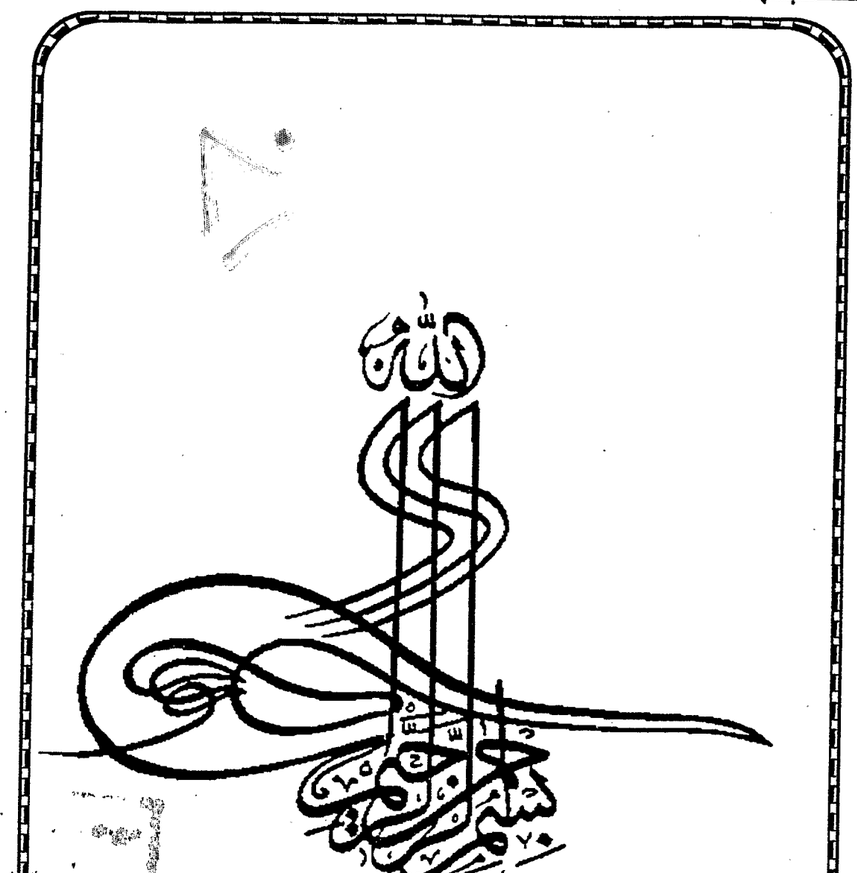
اسکن شد
تاریخ : ۸۶/۱۱/۲۰
توسط :



۲۴۴۸۳

دانشگاه تربیت مدرس

دانشکده علوم پایه

پایان‌نامه کارشناسی ارشد

فیزیک

مطالعه جایگزیدگی اندرسن و اثر آن روی خواص الکترونیکی یک فلزساده

حسین بیدار

استاد راهنما:

دکتر ناصر شاه‌طهماسبی

استاد مشاور:

دکتر حسن عزیزی

زمستان ۱۳۷۷

1517/2

۲۴۶۸۳

مرکز اطلاعات و مدارک علمی ایران
تقسیم مدارک

تأییدیه اعضای هیأت داوران حاضر در جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد

۱۳۷۸ /۲/ ۳۵

اعضای هیئت داوران نسخهٔ نهایی پایان نامه خانم/ آقای حسین بیدار

تحت عنوان: **مطالعه جایگزیدگی اندرسن و اثر آن روی خواص الکترونیکی یک فلز ساده**

را از نظر فرم و محتوی بررسی نموده و پذیرش آنرا برای تکمیل درجه کارشناسی ارشد پیشنهاد می‌کنند.

اعضای هیأت داوران	نام و نام خانوادگی	رتبهٔ علمی	امضاء
۱- استاد راهنما	آقای دکتر ناصر شاه طهماسبی	استادیار	
۲- استاد مشاور	آقای دکتر حسن عزیزی	دانشیار	
۳- استاد ناظر	آقای دکتر مروج	دانشیار	
۴- نماینده تحصیلات تکمیلی	آقای دکتر امیرحسین عباسی	استادیار	

مرکز اطلاعات و مدارک علمی ایران
تقسیم مدارک

بسمه تعالی

تاریخ:.....

شماره:.....

پیوست:.....

دانشگاه تربیت مدرس

آیین نامهٔ چاپ پایان نامه (رساله) های دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس

نظربه اینکه چاپ و انتشار پایان‌نامه (رساله) های تحصیلی دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس مبیّن بخشی از فعالیتهای علمی - پژوهشی دانشگاه است بنابراین به منظور آگاهی و رعایت حقوق دانشگاه، دانش‌آموختگان این دانشگاه نسبت به رعایت موارد ذیل متعهد می‌شوند:

مادهٔ ۱ در صورت اقدام به چاپ پایان نامه (رساله) ی خود، مراتب را قبلاً به طورکتبی به مرکز نشر دانشگاه اطلاع دهد.

مادهٔ ۲ در صفحهٔ سوم کتاب (پس از برگ شناسنامه)، عبارت ذیل را چاپ کند:

«کتاب حاضر، حاصل پایان‌نامهٔ کارشناسی ارشد/رسالهٔ دکتری نگارنده در رشتهٔ فیزیك است که در سال ۷۷ در دانشکدهٔ علوم پایه دانشگاه تربیت مدرس به راهنمایی سرکار خانم/ جناب آقای دکتر شاه طهماسبی و مشاورهٔ سرکارخانم/جناب آقای دکتر عزیزی از آن دفاع شده است.»

مادهٔ ۳ به منظور جبران بخشی از هزینه‌های نشریات دانشگاه تعداد یک درصد شمارگان کتاب (در هر نوبت چاپ) را به مرکز نشر دانشگاه اهدا کند دانشگاه می‌تواند مازاد نیاز خود را به نفع مرکز نشر در معرض فروش قرار دهد.

مادهٔ ۴ در صورت عدم رعایت ماده ۳، ۵۰٪ بهای شمارگان چاپ شده را به عنوان خسارت به دانشگاه تربیت‌مدرس تأدیه کند.

مادهٔ ۵ دانشجو تعهد و قبول می‌کند در صورت خودداری از پرداخت بهای خسارت، دانشگاه می‌تواند خسارت مذکور را از طریق مراجع قضایی مطالبه و وصول کند؛ به علاوه به دانشگاه حق می‌دهد به منظور استیفای حقوق خود، از طریق دادگاه، معادل وجه مذکور در مادهٔ ۴ را از محل توقیف کتابهای عرضه‌شدهٔ نگارنده برای فروش، تأمین نماید.

مادهٔ ۶ اینجانب حسین بیدار دانشجوی رشته فیزیك مقطع کارشناسی ارشد تعهد فوق و ضمانت اجرایی آن را قبول کرده، به آن ملتزم می‌شوم.

تقدیم به

دو ستاره درخشان زندگیم،

آن دو که بـا تمـام وجـود دوستشـان دارم

وبه وجودشان افتخار می کنم، پـدر و مـادر

مهربانم، که سالها با رنـج و تـلاش خویـش

پیمودن طریق علم و دانش را برایم تسهیل

نمودند.

تقدیر و تشکر

سپاس و حمد ، ذات پاک وبی نیازمعبودی را سزد که به قلم قداست و به انسان کرامت بخشیدو انسان را به زیور علم ومعرفت بیاراست. اکنون که در سایه الطاف و عنایت بیکران ومراحم بی شمار خداوندی موفق به نگارش این پایان نامه شده ام بر خود لازم می دانم که از زحمات بیدریغ استاد ارجمند جناب آقای دکترناصر شاه طهماسبی که مسئولیت راهنمائی این پایان نامه را به عهده داشتندودر این راستا از هر گونه ارشاد دریغ ننمودند کمال امتنان وتشکر را داشته باشم. همچنین از زحمات جناب آقای دکتر حسن عزیزی که مشاوره این پایان نامه را بر عهده داشتند تشکرنمایم.

حضور جناب آقای دکتر امیر حسین عباسی در گروه فیزیک نقطه قوت واطمینانی است برای دانشجویان فیزیک ،که همیشه از محضر ایشان استفاده می نمایند از طرف خود و دیگر دوستان ازایشان بخاطر آنچه که حس احترام هر انسانی را بر می انگیزد تشکر و قدردانی می نما یم.

از اساتید ارجمندم آقایان دکتر شهناس ودکتر رزمی وهمه دوستان وعزیزانی که مرا در تکمیل این پایان نامه یاری کردند، کمال تشکر وقدردانی را دارم.

چکیده

خواص فیزیکی بلورهایی که نظم کاملی دارند بخوبی شناخته شده است.ولی تئوری فراگیری در مورد سیستم های بی نظم وجود ندارد درنتجه استفاده از تکنیکهای مختلف ریاضی و مدل سازی در بررسی این سیستمها اهمیت ویژه ای می یابد.

هدف این پایان نامه مطالعه عددی سیستم های بی نظم بر اساس مدل اندرسن است.در این مدل از یک هامیلتونی بستگی قوی استفاده می شود که در آن بی نظمی از طریق تراز اتمی بصورت کاتوره ای به جایگاههای سیستم وارد میشود.با استفاده از ویژه مقادیر وویژه حالتها ی هامیلتونی دو کمیت که معیار جایگزیدگی به شمار می روند محاسبه می شوند.یکی از آنها جابجائی انرژی ، که میانگین هندسی تفاوت ویژه مقادیر در شرایط مرزی تناوبی و پاد تناوبی و دیگری نسبت مشارکت متناسب با توان چهارم دامنه موج میباشد.این کمیت ها معیاری برای درجه جایگزیدگی حالت های الکترونی در سیستم در نظر گرفته می شوند.

این نتایج بدست می آید که در زیر یک بی نظمی بحرانی حالت های مرکز نوار انرژی گسترده ولی حالتهای انتهای نوار انرژی جایگزیده اند این حالتها با لبه تحرک از هم جدا می شوند.با افزایش بی نظمی لبه تحرک به طرف مرکز نوار حرکت می کند.در بالای بی نظمی بحرانی تمام حالتها جایگزیده ا ند ورسانندگی d.c از بین می رود .

واژه های کلیدی: بی نظمی - جایگزیدگی اندرسن -مطا لعه عددی

فهرست

عنوان	صفحه
پیشگفتار	۱
فصل اول	
بی نظمی در بلورها	۷
مقدمه	۷
۱-۱- بلور منظم	۸
۱-۲- عیوب نقطه‌ای	۹
۱-۲-۱ عیوب جای خالی	۹
۱-۲-۲- عیوب شوتکی	۱۰
۱-۲-۳- عیوب بین نشینی	۱۱
۱-۲-۴- عیب فرنکل	۱۲
۱-۳- عیوب خطی	۱۵
۱-۲-۱- نابجائی لبه‌ای	۱۵
۱-۳-۲- نابجائی پیچی	۱۶
۱-۳-۳- نابجائی مختلط	۱۷
۱-۴- عیوب سطحی	۱۷
۱-۴-۱- عیوب لایه‌ای	۱۷
۱-۴-۲- مرز دانه‌ها	۱۷
۱-۵- عیوب فضائی	۱۸
فصل دوم	
جایگزیدگی اندرسن	۱۹
مقدمه	۱۹
۲-۱- جایگزیدگی کلاسیکی	۲۰
۲-۲- جایگزیدگی و ابعاد سیستم	۲۱

۲-۳- مدل اندرسن ۲۲
۲-۳-۱- قضیه اولیه اندرسن ۲۵
۲-۲-۲- اثبات قضیه اندرسن ۲۶
۲-۴- حالتهای گسترده و جایگزیده ۲۹
۲-۵- تشخیص حالتهای جایگزیده و گسترده ۳۰
۲-۵-۱- استفاده از توابع ویژه ۳۰
۲-۵-۲- استفاده از مقادیر ویژه ۳۱
۲-۶- جایگزیدگی اندرسن در سیستمهای مزوسکوپیک ۳۲
۲-۷- چگالی حالتها ۳۳
۲-۸- تئوری مقیاس و گروههای باز بهنجارش ۳۵
۲-۸-۱- تعریف تئوری مقیاس ۳۵
۲-۸-۲- توصیف کیفی پدیده‌های بحرانی ۳۶
۲-۸-۳- گروههای باز بهنجارش ۴۱
۲-۸-۴- نماهای بحرانی ۴۲

فصل سوم

رسانائی ۴۴
مقدمه ۴۴
۳-۱- مدل درود ۴۵
۳-۱-۱- هدایت الکتریکی d.c یک فلز ۴۶
۳-۲- رسانائی و ساختار نواری ۴۷
۳-۳- سطح فرمی ۴۸
۳-۴- مدل بستگی قوی و نوارهای انرژی ۴۹
۳-۵- نظریه نیمه کلاسیکی ۵۰
۳-۵-۱- رسانائی در دمای $T \neq 0$ ۵۱
۳-۶- تصحیح تقریب زمان واهلش ۵۳
۳-۷- محاسبهٔ پراکندگی ۵۴
۳-۸- جایگزیدگی و رسانائی ۵۵

فصل چهارم

روش و نتایج محاسبات عددی ۵۶

مقدمه ۵۶

۴-۱- روش حل معادلهٔ شرودینگر ۵۷

۴-۲- بررسی رفتار تابع موج ۵۷

۴-۳- رفتار توابع ویژه نزدیک لبهٔتحرک ۶۸

۴-۴- رابطهٔ مقادیر ویژه با مقادیر بحرانی ۷۱

۴-۶- چگالی حالتها ۷۸

۴-۷- لبهٔ تحرک ۸۱

۴-۸- رسانائی ۸۵

۴-۹- نتیجه گیری ۹۵

۴-۹-۱- بررسی رفتار کمیت α ۹۵

۴-۹-۲- بررسی رفتار کمیتهای A_y, A_x ۹۵

۴-۹-۳- نماهای بحرانی ۹۶

۴-۹-۴- بررسی رفتار جابجائی انرژی $N\Delta\overline{E}$ ۹۶

۴-۹-۵- چگالی حالتها ۹۷

۴-۹-۶- رفتار کمیت $N\Delta\overline{E}\frac{dn}{de}$ ۹۷

۴-۹-۷- رفتار رسانایی در طی یک نوار انرژی ۹۷

پیوست‌ها

پیوست الف

محاسبات عددی

پیوست ب

مدل بستگی قوی

پیشگفتار

بنام خدا

پیشگفتار

در مکانیک کوانتومی الکترونها به روش موجی توصیف می‌شوند و در بلورهای کامل[1] آنهابصورت امواج بلاخ[2] (امواج گسترده[3]) منتشر می‌شوند حضور بی‌نظمی در بلور باعث پراکندگی امواج بلاخ می‌گردد و چنانچه بی‌نظمی قوی باشد بخاطر اثر تداخلی امواج پراکنده، امواج الکترونی ، جایگزیده[4] می‌شوند. این پدیده جایگزیدگی اندرسن[5] نامیده می‌شود.[۱]

که اولین بار در سال ۱۹۵۸ توسط اندرسن کشف شد. [۲] وی، علاوه بر فرمول بندی این پدیده، بطور همزمان ارتباط بین جایگزیدگی و ترابری را بدست آورد. همچنین یک مقدار تخمینی برای بی‌نظمی بحرانی، [6] جهت گذار[7] از محدوده امواج گسترده به جایگزیده ارائه نمود. پدیدهٔ جایگزیدگی امواج، یکی از مهمترین پدیده‌های کوانتوم مکانیکی مربوط به مواد چگال[8] می‌باشد که خود منشاء خواص فیزیکی بسیار جالب و گوناگونی است که ما در این کار پژوهشی مورد مطالعه و بررسی قرار می‌دهیم.

فیزیک ماده چگال موضوع علمی را تشکیل می‌دهد که به تحقیق و بررسی پیرامون خواص فیزیکی جامدات و ارتباط این خواص از طریق قوانین بنیادی فیزیک با ساختار میکروسکوپی جامد می‌پردازد. بخشی از این علم که به فیزیک حالت جامد موسوم است براساس نظریه حالتهای الکترون بلاخ در یک بلور کامل و منظم، و مبتی بر کارهای دبای[9]، بورن[10]، بریلوئن[11] و دیگران، روی فونون در جامدات کامل بنا شده است.[۳] این نظریه بنیادی که اساس آن رفتار ذرات غیر بر هم کنشی[12] در یک بلور کامل است مبنای تحقیقات

---

1) perfect crystal
2) Bloch waves
3) extend wavss
4) localized
5) P.W Anderson
6) critical disorder
7) transition
8) condensed matter
9) Deby
10) Born
11) Brillouin
12) noninteration

اولیه در زمینه ماده چگال را براساس مدل شبکه استاتیک[1] توصیف کرد. این مدل صرفا" یک تقریب برای پیکربندی واقعی یونهاست. مدل شبکه استاتیکی از دید کلاسیکی فقط در دمای صفر مطلق[2] معتبر است.

در دمای غیر صفر حرکت حرارتی اتمهای شبکه منجر به انحراف از حالت تناوبی آن می‌گردد که البته در دماهای معمولی این انحراف تقریبا" به حدی کوچک است که نظم همچنان ویژگی مشخصهٔ یک جامد بلوری باقی می‌ماند. در بلور حقیقی ناراستی‌هایی نسبت به شبکهٔ تناوبی ایده‌آل مشاهده می‌شود. به عنوان مثال هر جامد بلورین حقیقی دارای گسترش فضایی متناهی است و لذا توسط سطوح و مرزهایی محدود می‌گردد سطح بلور[3] در واقع یک ناراستی صفحه‌ای[4] می‌باشد اصولا" هر انحراف از شبکه یا ساختار تناوبی کامل یک ناراستی به شمار می‌آید. و جود اتمهای ناخالصی،[5] جایگاههای تهی شبکه[6] یا اتمهای اضافی که در فضای بین شبکه قرار دارند نیز از ناراستی‌های نقطه‌ای[7] متداول در بلورها می‌باشد. بدین ترتیب در نظر گرفتن تاثیرات ناراستی در خواص ماده چگال و اجتناب از کاربرد شبکه استاتیک در بسیاری موارد ضروری است.

از جمله خواصی که به هیچ وجه در مدل شبکهٔ استاتیک قابل تبیین نمی‌باشد خواص ارتعاشی جامدات است که گسترهٔ وسیعی از زمینه‌های کاربردی و بنیادی نظیر انبساط حرارتی[8]، رسانایی حرارتی[9]، تغییرات گرمایی ویژه[10] و ... را شامل می‌شود. علاوه بر خواص ارتعاشی، بی‌نظمی‌ها و مواد بی‌نظم گستره وسیعی را در بر می‌گیرد مایعات، شیشه‌ها، مواد آمورف، مواد پلیمری و مواد دانه‌ای همه از انواع مواد نامنظمی هستند که بررسی خواص هر یک نیاز به بحث گسترده و مستقلی دارد. به دلیل وجود چنین گستردگی در انواع مختلف بی‌نظمی و در نتیجهٔ پیچیدگیهای موجود در ریاضیات حاکم بر سیستمهای

---

1) static
2) absoulate zero
3) crystal surface
4) plane defect
5) impurity
6) vacant lattice site
7) point imperfection
8) thermal expansion
9) therimall conductivity
10) specific heat

بی‌نظم بود که علیرغم اهمیت نظریه اندرسن، درک میکروسکوپی آن نزدیک به دو دهه بتاخیر افتاد و پیشرفت آن به کندی صورت گرفت. [۴]

از جمله مشکلات عمده آن است که نمی‌توان بسیاری از مفاهیم کاملا" پذیرفته شده در شبکه‌های منظم (بلور کامل) را برای چنین ساختارهایی مورد استفاده قرار داد. از آن جمله نظریه ساختار نواری [۱] با کلیه مفاهیم آشنای آن، نظیر حالتهای بلاخ، مناطق بریلوئین و... می‌باشد که برای سیستمهای بی‌نظم نمی‌تواند کاربرد داشته باشد. در این موارد بدلیل عدم وجود ناورایی انتقالی [۲] k دیگر یک عدد کوانتومی خوب [۳] نخواهد بود. با این وجود مفاهیم فوق باز هم برای ناخالصی‌های کم یا مواردی که انحراف از حالت تناوبی و نظم شبکه بصورت نابجایی، ناکاملی و یا حذف بعضی از اتمها از جایگاه خود ظاهر می‌گردد (بی‌نظمی بسیار کم) قابل استفاده هستند و می‌توان خواص ارتعاشی آنها را به روش اختلال [۴] مورد بررسی قرار داد. [۵] محاسبهٔ اختلال اگر چه برای کسب یک نگرش کمی از پدیده‌ها در حد جایگزیدگی ضعیف مفید است اما از توصیف رفتار یک سیستم بی‌نظم وقتی پتانسیل بی‌نظمی افزایش می‌یابد عاجز است. مخصوصا" بررسی رفتار در محدوده‌ای که گذار رسانایی به عایق [۶] وجود دارد با مشکل مواجه می‌شود . بنابراین تئوری بلاخ که رفتار الکترون در سیستمهای منظم را توضیح می‌دهد و براساس بلور کامل با ذرات غیر بر هم کنشی بنا شده است باید قبل از اعمال به سیستمهای واقعی توسط اثرات بی‌نظمی، اثرات بس ذره‌ای، نظیر بر هم کنش الکترون – الکترون ، الکترون – فونون و تئوری جنبشی در الکترونها و فونونها تصحیح شود.این برهم کنشها تا حدودی بوسیلهٔ معادلهٔ بواتزمن [۷] (در چارچوب‌برخوردها) [۳] در نظر گرفته شده است. این معادله، گذار بین حالتهای بلورهای کامل را توصیف می‌کند (این گذارها بوسیلهٔ برهم کنش ایجاد می‌شود). معادلهٔ بولتزمن وقتی تراکم ناخالصی پایین است جوابهای درستی ارائه می‌دهد اما این معادله در توضیح جزئیات مسائل برای وقتی که تراکم ناخالصی بالاست و انحراف از حالت بلور کامل زیاد است کاملا" با مشکل مواجه

---

1) band structure
2) translation invariant
3) good quatum number
4) perturbation
5) insulator
6) many body
7) Boltzmann

می‌شود. اصولا " روش اختلال دربارهٔ سیستمهای کاملا" نامنظم اطلاعات نسبتا" کمی ارائه می‌دهد.

ده سال پس از ارائه مقالهٔ اندرسن [۲] مات [۱]، کوهن [۲] و اورشینسکی [۳] [۷] علاقه به موضوع جایگزیدگی الکترون در اثر پتانسیل بی‌نظم را تجدید کردند.طی سالهای اخیر اشکال مرتبط به هم برای بررسی این مسئله ارائه شده‌اند اما خیلی از راه‌ها و روشهای گوناگون بررسی مسئله نتایج یکسانی را ارائه می‌دهند. درستی نتایج حاصل از بررسی الکترونهای غیر بر هم کنشی در یک پتانسیل بی‌نظم استاتیک، ما را به دست یافتن به مدلی جهت توضیح رفتار الکترون در سیستمهای بی‌نظم امیدوار می‌کند. همانطور که تئوری بلاخ، رفتار الکترون در سیستمهای منظم را توضیح می‌دهد به همین ترتیب یک تئوری خوب برای الکترون در سیستمهای بی‌نظم، باید به حد کافی روشن و غیر مبهم باشد تا بتوان آنرا به عنوان نقطهٔ شروع برای بحث تغییرات واقعی مدل وابسته به نوار و اثرات بس ذره‌ای به کار برد. به دلیل وجود گستردگی در انواع مختلف بی‌نظمی ارائه یک تئوری کاملا" فراگیر و پذیرفته شده برای جامدات بی‌نظم تقریبا" غیر ممکن هست و استفاده از تکنیکهای مختلف ریاضی و مدل سازی‌ها اهمیت ویژه‌ای می‌یابد با از بین رفتن ناوردایی انتقالی شبکه، در یک فرمول بندی نظری که برای گذار از نظم به بی‌نظمی لازم است، به مفاهیم و روشهای ریاضی گسترده‌تری نیاز داریم.

نکتهٔ اساسی که باید به آن توجه نمود یافتن ویژگی مشترک تمام جامدات بی‌نظم است که آنها را ازجامدات منظم متمایز می‌سازد. معلوم می‌گردد متناظر با حالتعای غیر جایگزیده [۴] در ساختار نواری، حالتهای جایگزیده در این سیستمها نقش مهم و قاطعی دارند این حالتها در سیستمهایی با بی‌نظمی قوی، مانند مواردی که با تراکم‌های بالایی از ناراستی‌ها، به علت وجود خوشه‌های ناراستی، روبرو هستیم به وجود می‌آیند. [۴]

ساده‌ترین مدل برای بررسی این مسئله بررسی حرکت یک ذرهٔ غیر برهم کنشی بدون اسپین در میان پتانسیلهای کاتوره‌ای می‌باشد چنین مدلی به عنوان پایه‌ای برای بررسی تئوریهای خیلی پیچیده‌تر که در آن ذرات شامل اسپین و برهم کنش نیز هستند به کار

---

1) N. F. mott
2) M.H. cohen
3) overshinsky
4) non localized