

ساختار الکترونی و خواص مغناطوساپتیکی جامدات

تألیف:

حمدا.. صالحی

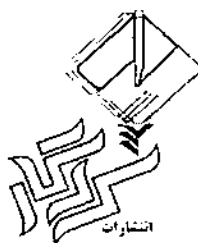
دانشیار دانشگاه شهید چمران

سرشناسه : حمدالله صالحی: ۱۳۴۵
 عنوان و نام پدیدآور : ساختار الکترونی و خواص مغناطوایتیکی جامدات / حمدالله صالحی.
 مشخصات نشر : اهواز: کردگار، ۱۳۹۱.
 مشخصات ظاهری : ۶۲۸ ص.: جدول .
 شابک : 978-600-281-004-5
 وضعیت فهرست‌ویسی : فیا
 موضوع : فیزیک حالت جامد
 موضوع : ساختار الکترونی
 موضوع : جامدات -- خواص نوری
 موضوع : جامدات -- خواص مغناطیسی
 رده بندی کنگره : ۱۳۹۱ ص ۲ س ۱۷۶/۲ QC
 رده بندی دیویی : ۵۳۰/۳۱
 شماره کتابشناسی ملی : ۲۷۹۲۱۲۲

ساختار الکترونی و خواص مغناطوایتیکی جامدات

حمدالله صالحی

ناشر: انتشارات کردگار
 جلد و صفحه آایی: نشر کردگار
 نوبت چاپ: اول - ۱۳۹۱
 چاپخانه: مینیاتور
 شمارگان: ۱۰۰۰
 شابک: ۵-۰۰۴-۲۸۱-۶۰۰-۹۷۸
 قیمت: ۱۵۰۰۰ تومان
 تمامی حقوق چاپ برای مؤلف محفوظ است.



اهواز امانیه تیش سقراط غربی
 مجتمع اقبال واحد ۱۰
 ۳۳۳۹۱۹۸ و ۳۳۶۵۱۸۵ (۰۶۱۱)

فهرست مطالب

عنوان

صفحه

پیشگفتار مؤلف

فصل اول: مفاهیم نظری

۴	۱-۱ نظریه تابعی چگالی (DFT)
۵	۱-۱-۱ فرمول بندی
۷	۲-۱-۱ تقریب چگالی موضعی
۱۰	۲-۱ اصلاح تقریب چگالی موضعی
۱۱	۱-۲-۱ تقریب‌هایی بر مبنای محاسبه دقیق E_{xc}
۱۳	۲-۲-۱ تصحیح شیب
۱۶	۳-۲-۱ تصحیح خود - برهم کنشی
۱۹	۴-۲-۱ روش LDA+U
۳۰	۵-۲-۱ تصحیح فطش اریتمالی
۳۴	۳-۱ برانگیختگی‌ها در بلور
۳۴	۱-۳-۱ نظریه لاندائو برای مایع فرمی
۳۹	۲-۳-۱ توابع گرین الکترون‌ها در فلزات و برانگیختگی‌های بنیادی
۴۳	۳-۳-۱ تقریب GW
۴۵	۴-۳-۱ نظریه میدان - متوسط دینامیکی (DMFT)
۵۰	۴-۱ آثار مغناطوس-ایتیکی
۵۱	۱-۴-۱ اپتیک کلاسیکی
۶۱	۲-۴-۱ پدیده‌های مغناطوس - اپتیک (MO)
۷۷	۳-۴-۱ نظریه پاسخ - خطی
۸۶	۴-۴-۱ عناصر ماتریس اپتیک

فصل دوم: خواص مغناطواینتیکی مواد فرومغناطیس

۹۰	۱-۲ فلزات واسطه و ترکیبات
۹۰	۱-۱-۲ فلزات فرومغناطیس نیکل: آهن: کبالت
۹۳	۲-۱-۲ فلزات پارامغناطیس پالادیوم و پلاتین
۱۱۸	۳-۱-۲ آلیاژهای کبالت
۱۴۳	۴-۱-۲ ترکیبات XPt ($X=V, Cr, Mn, Fe, Co$)
۱۴۹	۵-۱-۲ آلیاژهای هیوسلر
۱۵۵	۶-۱-۲ $MbBi$
۱۵۸	۷-۱-۲ ترکیبات حاوی آنیون های اسپینل کرومیت
۱۷۶	۲-۲ ویژگی های مغناطواینتیکی چندلایه های مغناطیسی
۱۷۷	۱-۲-۲ خصوصیات مغناطواینتیکی سیستم های چندلایه ای های Co/Pd
۱۸۹	۲-۲-۲ خصوصیات مغناطواینتیکی چندلایه ای های Co/Pt
۲۰۱	۳-۲-۲ خصوصیات مغناطواینتیکی چندلایه ای های Co/Cu
۲۰۷	۴-۲-۲ ناهمسانگردی مغناطواینتیکی در ابرشبکه Fe_n / Au_n

فصل سوم: بررسی خواص ساختاری الکترونی و اپتیکی مواد (I)

۲۲۷	۱-۳ هگزایمراید ساماریم SmB_6 و YbB_{12}
۲۳۶	۱-۱-۳ ترکیبات $YbMCu_4$, [$M = Cu, Ag, Au, Pd, In$]
۲۴۵	۲-۱-۳ ترکیبات حاوی تک آنیون های لانتانیم
۲۵۷	۲-۳ ترکیبات اورانیوم
۲۵۹	۱-۲-۳ UFe_2
۲۶۴	۲-۲-۳ $(X = P, As, Sb, Bi)U_2X$
۲۶۷	۳-۳ گالیم آرسنید $GaAs$
۲۷۱	۴-۳ اکسید منیزیم: MGO
۲۷۵	۵-۳ $MnSb$
۲۸۰	۶-۳ دی اکسید قلع، SnO_2

فصل چهارم: بررسی خواص ساختاری، الکترونی و اپتیکی مواد (II)

۳۱۹	۱-۴ ترکیب $PuPt_3$
۳۲۲	۲-۴ ترکیبات XPt_3 , $[X = V, Cr, Mn, Fe, No, Ci]$
۳۲۴	۳-۴ ترکیبات اورانیوم
۳۲۶	۱-۳-۴ ترکیبات UX ($X = Te, Se, Sb$)
۲۳۰	۲-۳-۴ UPt_3
۳۳۵	۴-۴ اکسیدروی: ZnO
۳۴۵	۵-۴ لانتانیم کرومیت
۳۷۵	۶-۴ استرانسیوم هافنات
۴۰۲	۷-۴ خواص اپتیکی بلور تیشات سرب ($PbTiO_3$) در فاز مکعبی
۴۱۰	۸-۴ اکسید ایتیم (Y_2O_3)
۴۲۴	۹-۴ دی اکسید تیتانیوم (TiO_2)
۴۴۱	۱۰-۴ بلور $\alpha - Al_2O_3$
۴۵۸	۱۱-۴ بلور مونونیتريد پلاتین PtN
۴۷۵	۱۲-۴ $LiBC$
۴۸۶	۱۳-۴ گالیم نیترايد (GaN)
۵۰۲	۱۴-۴ سولفیدروی (ZnS)
۵۲۲	۱۵-۴ منیزیم سلفيد ($MgSe$)
۵۳۸	۲-۴-۴ خواص الکترونی ساختار B_3-MgSe
۵۴۲	۲-۵-۴ خواص الکترونی B_4-MgSe
۵۴۵	۱۶-۴ تیتانیوم ایندیوم کربيد (Ti_2InC)
۵۵۹	۱۷-۴ ایندیوم فسفید (InP)
۵۷۷	۱۸-۴ زیرکنیوم نیتريد کلريد
۵۸۴	۱۹-۴ کادمیوم کلرايد ($CdCl_2$)
۵۹۹	۲۰-۴ کادمیوم برمايد
۶۱۶	مراجع

پیش‌گفتار مؤلف

سپاس بیکران پروردگار را که به انسان قدرت اندیشیدن بخشید تا به یاری این موهبت الهی راه ترقی و تعالی را پیموده و در درک علم که یکی از راه های تقرب به ذات اوست کوشا و در انتقال آموخته های علمی خود به جویندگان علم و دانش توانا و درانتشار و انتقال آن از مهمترین ابزار که همانا کتاب است به شایستگی بهره جوید.

سپاس و تحیات الهی بر پیامبر بزرگ اسلام (ص) که والاترین عالم و معلم انسان ها و جامعه بشریت است.

دروود بی پایان برائمه بزرگوار "علیهم السلام" که سراسر زندگی و مساعی خویش را در جهت تزکیه، تعلیم و ارشاد جوامع بشری مصروف داشتند و انسانیت را با آداب و آئین الهی آراسته و پیراسته ساختند.

خواص فیزیکی جامدات به ویژه خواص الکترونی و اپتیکی آن ها به رفتار الکترونی و حالات الکترونی آن ها بستگی مستقیم دارد. از این رو؛ محاسبه حالت های الکترونی جامد و تعیین ساختار نواری انرژی در آن ها از مهمترین مباحث پژوهشی نظری و تجربی در فیزیک ماده چگال می باشد.

با توجه به این که سیستم گاز الکترونی در یک جامد اصولاً یک سیستم برهم کنش گر است؛ بنابر این راه حل اساسی برای محاسبه حالات الکترونی به حل مسأله ی بس ذره ای منتهی می شود. واضح است که حل و بررسی کامل و دقیق این مسأله عملاً امکان پذیر نیست و از این رو؛ از آغاز پایه گذاری علم فیزیک حالت جامد؛ تلاش پژوهشگران بر این بوده است تا به عنوان یک تقریب؛ مسأله بس ذره ای گاز الکترون جامد را به یک مسأله تک ذره ای قابل حل تبدیل کنند. کلیه متون مربوط به زمینه حالت جامد و روش های مختلف و گوناگون محاسبات ساختار نوارهای انرژی الکترونی جامدات؛ حکایت از انواع تقریب هایی دارد که برای حل معادله شرودینگر تک ذره ای انجام می شود. خوشبختانه؛ برخلاف تقریبی بودن روش های بس ذره ای؛ این روش ها موفقیت عملی فوق العاده ای را از خود نشان داده اند. با این وجود؛ هر روش تقریبی گستره اعتبار خاصی دارد. بنابر این؛ در مواردی که پیچیدگی های ناشی از آثار برهم کنش الکترون ها در رفتار نهایی سیستم

مؤثر هستند باید در حد امکان و با روش های مختلف حداکثر آثار بس ذره ای را در محاسبات دخالت داد. از طرف دیگر اساس فیزیک فلزات بر قوانین پایه کوانتوم مکانیکی استوار است. با این وجود رسانندگی الکتریکی که یک خاصیت مهم از فلزات است قبل از ظهور مکانیک کوانتومی در محدوده مدل الکترون آزاد گسترش یافته بود. در سال ۱۹۲۸ سامرفیلد یک مدل الکترون آزاد کوانتوم مکانیکی را ارائه نمود و نشان داد که رسانندگی الکتریکی یک خاصیت ذاتی از سیستم های کوانتوم مکانیکی است که از آمار فرمی دیراک پیروی می کند. همان سال بلاخ نظریه حرکت الکترون را در یک پتانسیل تناوبی در نظر گرفت. این نظریه تقسیم بندی حالت های الکترون را با بردار موج k ؛ در اولین منطقه بریلوین در نظر گرفت. در سال ۱۹۳۱ ویلسون نشان داد که محتوای فیزیکی نظریه بلاخ توانایی امکان تقسیم بلورها به فلزات، نیم رساناها و عایق ها را فراهم می کند. به همین دلیل مفهوم ساختار نواری در فیزیک حالت جامد و سمیت یافت. اولین نتایج کمی روی حالت پای-ه فلزات توسط ویگنر و ساتیز برای سدیم در سال ۱۹۳۴ به دست آمد. آن ها مکان انرژی ته نواری سانش را بر اساس داده های تجربی روی پتانسیل اتمی باروش سلولی به دست آوردند. در محاسبات ساختار انرژی نواری؛ مسأله بسیار مهم و دشوار؛ تعیین وضع پتانسیل بلور می باشد. در چارچوب تقریب هارتری- فوک تک ذره؛ پتانسیل باید با محاسبات خود- سازگار تعیین شود. با این وجود؛ برهمکنش تبدیلی منجر به پتانسیل غیر موضعی می شود که محاسبات را مشکل می کند. برای رفع این مشکل اسلیتر در سال ۱۹۳۴ پیشنهاد استفاده از یک بسط ساده را داد این بسط در حالت گاز الکترون آزاد و در حالی که چگالی الکترون ρ ؛ ثابت باشد معتبر است. اسلیتر همچنین پیشنهاد کرد که می توان همین بسط را برای پتانسیل موضعی در حالتی که چگالی غیر یکنواخت هم باشد مورد استفاده قرار داد. بعد از آن اسلیتر در سال ۱۹۶۵ پارامتر بدون بعد α را معرفی کرد که این پارامتر با مقایسه انرژی کل اتم تعیین می شود. با این حال؛ پتانسیل موضعی در چارچوب تقریب هارتری- فوک به دست می آید. این مدل به نام روش α شناخته شده است و به صورت گسترده ای برای چند دهه استفاده می شد.

از سوی دیگر توصیف مناسب برای هم بستگی الکترون استفاده از نظریه تابعی چگالی الکترون می باشد؛ این نظریه به وسیله هوهنبرگ - کوهن در سال ۱۹۶۴ برای تمام خواص حالت زمینه از سیستم بس- الکترونی مطرح شد و بر حسب تابعی که تنها وابسته به توزیع

چگالی است بیان می شود. کوهن ششم در سال های ۱۹۶۵ و ۱۹۶۶ نشان دادند که توابع موج تک ذره با چگالی $\rho(r)$ جواب یک معادله شرودینگر گونه است که باید تعیین شود. در این معادله شرودینگر گونه به جای پتانسیل؛ پتانسیل مؤثر قرار می گیرد. پتانسیل مؤثر که آن مجموع پتانسیل خارجی و پتانسیل هم بستگی -تبادلی؛ V_{xc} ؛ می باشد.

با این حال انتخاب پتانسیل هم بستگی -تبادلی مهم است و برای محاسبه این پتانسیل باید شکل مجزایی از E_{xc} را در نظر گرفت (E_{xc} برابر با انرژی برهم کنش الکترون - الکترون در یک گاز الکترونی همگن می باشد). یک بسط تقریبی عملی برای E_{xc} تقریب چگالی موضعی است. اگر E_{xc} ؛ از انرژی تبادلی هارتری-فوک؛ ϵ_x ؛ گرفته شود. پتانسیل χ_α را (با $\alpha = \frac{2}{3}$) خواهد داد. بنابر این نظریه تابعی چگالی اساس نظریه لازم را برای روش های میدان خود سازگار که توسط هارتری؛ فوک - اسلیتر بیان شد را دارا می باشد.

نظریه تابعی چگالی عمدتاً برای به دست آوردن خواص حالت پایه مورد استفاده قرار می گیرد. اما هنگامی که حالت برانگیخته در نظر گرفته شود دیگر نمی توان آن را با نظریه تابعی چگالی شرح داد. در نظریه بس درانی. این حالت ها با شبه ذرات توضیح داده می شود که انرژی آن ها $\epsilon(k)$ (ساختار نوار انرژی آن ها انرژی مورد نیاز برای اضافه کردن یک الکترون به سیستم یا خارج کردن یک الکترون از آن می باشد. در سال ۱۹۶۹ لاندائو نظریه شبه ذرات را مطرح کرد. مطابق با این نظریه؛ برانگیختگی ها به صورت شبه ذراتی هستند که تعداد آن ها برابر تعداد ذرات ماده است.

در نظریه لاندائو؛ مایع فرمی؛ با قانون پاشندگی شبه ذرات تعریف می شود که این قانون با مشتق ورودی انرژی کل نسبت به تابع توزیع مشخص می شود و تابع همبستگی از برهمکنش بین شبه ذرات به دست می آید. در این نظریه اصل بر این است که فرمیون های با برهم کنش می تواند با یک مجموعه از شبه ذرات توصیف شود (این برهمکنش ها در مقابل برهمکنش ذرات واقعی ضعیف است).

هدین و لندکوئست در سال ۱۹۷۲ به روش محاسباتی نشان دادند که می توان از وابستگی انرژی به عملگر خود- انرژی در ناحیه ظرفیت صرف نظر کرد. در این حالت؛ معادله دایسون به معادله ای منجر می شود که می تواند در محدوده نظریه تابعی چگالی به دست آید و در بر گیرنده پتانسیل تبادلی - همبستگی؛ V_{xc} ؛ باشد.

به بیان دیگر؛ در بسیاری از موارد می توان تابع همبستگی لاندائو را صفر در نظر گرفت. یعنی از برهمکنش بین شبه ذرات صرف نظر کرد. این تقریب در حالتی که نوارهای انرژی پهن و برهمکنش بین الکترون ها در جایگاه های یکسان قوی نباشد قابل استفاده و مناسب است.

برای بررسی و فهم بیشتر در خواص مواد کمپلکس لازم است که بین روابط ساختار الکترونی و آثار فیزیکی آن تأکید گردد. از سوی دیگر برای مدت زمان طولانی گسترش فیزیک حالت جامد جدای از ساختار نواری انجام می گرفت. به عنوان یک قاعده توصیف هامیلتونی مؤثر برای یک سیستم الکترونی معرفی شده در بر گیرنده تعدادی از پارامترهای ثابت است که به طور تلویحی خواص گرمای ویژه ماده را با استفاده از پارامترهای انتخابی توصیف کند. برای مثال هامیلتونی هایزنبرگ در نظریه فرومغناطیس در بلورهای یونی؛ هامیلتونی اندرسون در نظریه آلیاژهای کم عمق مغناطیسی از این نوع می باشد. امروزه نظریه نواری موقعیت مستندی را در تصویر فیزیکی از جهان به خود اختصاص داده است. با این وجود مسایل تکنیکی در نظریه مهم است.

مطالب این کتاب شامل بخش های زیر می باشد.

فصل اول به معرفی مشخصه ها و اساس وجود نظریه نواری در جامدات؛ مانند روش میدان خود- سازگار هارتری فوک- اسلیر؛ نظریه تابعی چگالی برای خواص حالت پایه جامدات؛ روش تابع گرین و نظریه لاندائو برای توصیف عناصر برانگیختگی از جامدات می پردازد. فصل دوم؛ سوم و چهارم به بررسی خواص الکترونی؛ ساختاری و مغناطو ایتیکی مواد فرومغناطیسی و دیگر ترکیبات که مؤلف بسیاری از آن ها را انجام داده است می پردازد. در این کتاب توجه بسیار زیادی روی حالت کاربردی روش ها شده است. این کتاب برای دانشجویان تحصیلات تکمیلی رشته های علوم و مهندسی و پژوهشگران؛ منبع مفید و ارزشمندی می باشد.

با این حال مسلماً کار بی عیب نیست و در این مورد هیچ ادعایی ندارم؛ بلکه انتظار دارم که همکاران و دانشجویان محترم کمبودهای کار را گوشزد کنند تا در چاپ های بعدی کتاب این کاستی ها را برطرف کنیم. پیشاپیش از همه عزیزانی که در این راه یاریمان کنند سپاسگزاری می کنیم.

حمدا.. صالحی دانشیار دانشگاه شهید چمران

زمستان ۱۳۸۹