

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشکده: فیزیک

گروه: ماده چگال

انرژی الکتروستاتیکی بین ذرات باردار ناهمسانگرد و بررسی کاربردهای آن در سیستم های ماده چگال

دانشجو: مرضیه عسکری

اساتید راهنما:

دکتر جهانفر ابویی

دکتر سعید حسامی پیلهرود

پایان نامه ارشد جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

شهریور ۱۳۹۱

دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده: فیزیک

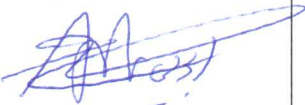
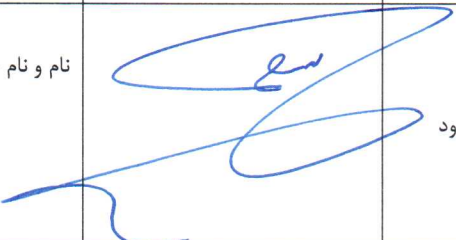
پایان نامه ارشد

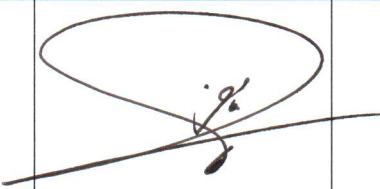
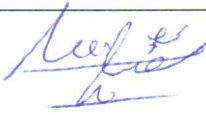
تحت عنوان:

انرژی الکتروستاتیکی بین ذرات باردار ناهمسانگرد و بررسی کاربردهای آن در سیستم های ماده چگال

در تاریخ ۹۰/۶/۲۵ توسط کمیته تخصصی زیر جهت اخذ مدرک کارشناسی ارشد مورد ارزیابی و با

درجه عالی مورد پذیرش قرار گرفت.

امضاء	اساتید راهنما:	امضاء	اساتید مشاور:
	نام و نام خانوادگی: دکتر جهانفر ابویی		نام و نام خانوادگی:
	نام و نام خانوادگی: دکتر سعید حسامی پیلهرود		نام و نام خانوادگی:

امضاء	اساتید داور:	امضاء	نماینده تحصیلات تکمیلی
	نام و نام خانوادگی: دکتر محمد ابراهیم قاضی		نام و نام خانوادگی: دکتر طیبه مولاروی
	نام و نام خانوادگی: دکتر سعید عابدین پور		
	نام و نام خانوادگی:		
	نام و نام خانوادگی:		

تقدیر بہ در داند عالم آفرینش

یکانہ منجی بشریت

حضرت مہدی (عج)

"اللهم عجل لوليک الفرج"

ای صبا کزمتی از خاک به یاریا
کنده روح منم از دهن دوست بگو
تا معطی کنم از لطف نسیم تو مشام
به دفای تو که خاک دهان یار عزیز
کردی از رگبند دوست بگو می ریب
خامی ساده دلی شیو جانباران نیست
سکران را که تو در عسرتی ای مرغ چین
کام جان تلخ شد از صبر که کردم بدست
روزگار است که دل چهره مقصودند
دل حق حاکم به چه رزد بی اشکین کن

بسته ندوده دل فزوده دلداریا
نامه خوش خبر از عالم اسراریا
شده ای از نفحات نفس یاریا
بی غباری که پدید آید از غباریا
بهر آسایش این دیده خونباریا
خبری از بران دلبه عیاریا
به اسیران قفس مرده گلزاریا
عشوه ای آن لب شیرین سکراریا
ساقیان قدح آینه کرداریا
واکنش مست و خراب از سر باریا

بارالها شکر تو کو یمیش
چون نشان دادی به ما را بی ز خویش
«پاس بیکران خداوندی را که به من فرصت داد تا زیارتی را تجربه کنم»

بالطف و عنایت الهی کار تحقیقاتی که برای این دوره در نظر گرفته بودیم، به خوبی به پایان رسید. اما تا به تخریدن کار، عزیزان زیادی مرا یاری کردند که شکر از آن ها حداقل کاری است که می توانم انجام دهم.

از پدر و مادر و خواهران و برادران پاس فراوان دارم که در تک تک صفحات کار صبورانه همراه و مشوق من بودند، به خصوص خواهر عزیزم نجمه که حضورش در شرایط سخت، کار را بر من سهل می کرد. از نگاه خداوند منان، بهترین ها را برایشان آرزو مندم.

از استاد کرانقدرم، دکتر جهانفر ابوبی کمال شکر و سپاسگزاری را دارم که معنای واقعی برای من بودند. ایشان کسی بودند که به من معنای علم تحقیقی را آموختند؛ آموختند که علم برای شهرت نیست، علم برای ثروت نیست، علم برای علم است، علم برای خدمت است، علم برای خدا است. پس مقدس است و صاحب ارزش فراوان؛ و به این ترتیب درسی از عظمت و شکفتی را به روی من گشودند. چگونه می توان شکر چنین نعمتی را به جای آورد، نمی دانم؛ اما بارها و بارها خداوند را سپاس می گویم و بهترین ها را برای استادم نیز خواستارم.

در این مدت، کمک های شایان توجه استاد کرانقدرم دکتر سعید حامی پیل رود، نیز بسیار بود. از ایشان به خاطر تمام همراهی ایشان پاس فراوان دارم. همچنین شکر ویژه ای از دو استاد کرانقدر دیگر نیز دارم؛ سرکار خانم زهرا حسینی علی که مرابا دنیای زیبای زینتی آشنا کردند و جناب آقای سید رضا موسوی، به خاطر نظرات مفیدشان در محاسبات ریاضی.

همچنین از مسئولین محترم دانشگاه صنعتی شاهرود و خصوصاً مسئول محترم تحصیلات تکمیلی دانشگاه، جناب آقای دکتر مرتضی ایزدی فرد، و دانشکده فیزیک که شرایط مناسب را جهت انجام کار تحقیقاتی برای من مهیا کردند، پاس گزارم. و همین طور از مسئولین محترم دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، خصوصاً جناب آقای دکتر حسین فضلی پاس گزارم که به من افتخار حضور سه ماهه در آن مرکز تحقیقاتی را دادند.

عزیزان دیگری نیز بودند که حضورشان و صحبت ایشان مایه دلگرمی من در این راه بود؛ دوستان عزیزم ملیحه ربیعی، فاطمه مخبریان نژاد، هدی رضایی و مرضیه اکبری- نژاد که از آلمان بی نهایت پاس گزارم.

تعهد نامه

اینجانب **مرضیه عسکری** دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته فیزیک – گرایش ماده چگال دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه **انرژی الکتروستاتیکی بین ذرات باردار ناهمسانگرد و بررسی کاربردهای آن در سیستم های ماده چگال** تحت راهنمایی **دکتر جهانفر ابویی** و **دکتر سعید حسامی پیلهرود** متعهد می شوم:

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهشهای محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب مندرج در پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است.
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه صنعتی شاهرود » و یا « Shahrood University of Technology » به چاپ خواهد رسید .
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان نامه تأثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می گردد.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه ، در مواردی که از موجود زنده (یا بافتهای آنها) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری ، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است.

تاریخ : ۱۳۹۱/۰۶/۲۵

امضای دانشجو

مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج ، کتاب ، برنامه های رایانه ای ، نرم افزار ها و تجهیزات ساخته شده است) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد . این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمی باشد.

چکیده

برهم‌کنش‌های الکتروستاتیکی بین اجسام باردار نوارمانند و میله‌ای مانند، نقش مهمی را در بسیاری از سیستم‌های ماده‌چگال و ماده‌چگال نرم همچون مواد همبسته‌ی قوی، کریستال‌های مایع، الکترولیت‌ها، پلیمرها و بیومولکول‌ها ایفا می‌کنند. به عنوان مثال ابررساناها و عایق‌های پادفرومغناطیس مات، دسته‌ی وسیعی از سیستم‌های همبسته‌ی قوی هستند که فازهای کوانتومی آن‌ها به شدت مورد مطالعه است. نتایج بسیاری از گزارشات بر جدایی حاملان بار در نوارهای افت‌وخیز کننده در ابررساناهای کوپرایت دلالت می‌کنند. در نمونه‌های سرامیکی $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ همراه با آلیش Nd، با استفاده از پراکندگی نوترون، نوارهای باردار به عنوان یک شبکه‌ی استاتیک همدوس همراه با ساختار تتراگونال دمای پایین دیده شده‌اند. نیکلایت‌ها ($\text{La}_{2-x}\text{SrNiO}_4$) نمونه‌های تجربی خوبی جهت مشاهده‌ی نوارهای بار در دمای پایین هستند. ارتباط بین همبستگی نوارهای باردار و ابررسانایی دمای بالا به صورت قابل توجهی در نیکلایت‌ها مورد مطالعه قرار گرفته است. با به دست آوردن فرم بسته‌ای برای برهم‌کنش چنین نوارهایی، اطلاعات مفید زیادی در مورد ویژگی‌های فیزیکی سیستم، همچون نظم، همبستگی‌های نوارهای باردار و همین‌طور ویژگی‌های ترمودینامیکی سیستم به دست می‌آوریم. نتایج آزمایشگاهی چنین برهم‌کنش‌هایی در دنیای کلوئیدی نیز دیده شده است. در واقع در محلول‌های کلوئیدی، ماکرومولکول‌هایی همچون DNA، TMV یا ویروس fd، نوارهای V_2O_5 و غیره، ذاتاً ناهمسانگرد بوده و شکل‌های نوارمانند و یا ریان‌مانند دارند. در متن یک گذار فاز جهتی روشن شده است که برهم‌کنش الکتروستاتیک بین پلی‌الکترولیت‌ها منجر به اثر پیچ‌خوردگی می‌شود که غلظت را در گذار فاز همسانگرد به نماتیک (I-N) بالا می‌برد. تلاش‌های زیادی جهت به کار بردن رهیافت‌های عددی و تحلیلی مناسب برای محاسبه‌ی برهم‌کنش الکتروستاتیک دو جسم باردار میله‌ای شکل انجام شده است. اما با وجود همه‌ی رهیافت‌های تحلیلی و عددی، فقدان فرم بسته‌ای برای انرژی برهم‌کنشی چنین ذرات ناهمسانگردي احساس می‌شود. ما در این پایان‌نامه فرم بسته‌ای برای

انرژی برهم‌کنشی دو جسم باردار میله‌ای شکل با طول‌های $2l_1$ و $2l_2$ و جهت‌گیری دلخواه در سه‌بعد که با فاصله‌ی r از هم جدا شده‌اند، به دست آوردیم. با استفاده از فرم بسته، توابع ترمودینامیکی یک زنجیره‌ی 1D از میله‌های باردار که هر میله تنها با دو همسایه‌ی مجاور خود برهم‌کنش می‌کند را مورد مطالعه قرار دادیم. گرچه برهم‌کنش الکتروستاتیک بلندبرد است و درک عملی برای توجیه فرض ما وجود ندارد، اما توانستیم با همین فرض، فهم بیشتری را نسبت به فرم بسته و اثرات مستقیم آن روی رفتار ترمودینامیکی سیستم به دست آوریم. در نهایت رابطه‌ای بین رفتار گرمای ویژه و انرژی برهم‌کنشی الکتروستاتیک به دست آوردیم. در بخش دوم پایان‌نامه، سعی کردیم برهم‌کنش الکتروستاتیک بین دو جسم میله‌ای مانند را در حضور اثر پوششی پیدا کنیم. در واقع یافتن عبارتی تحلیلی برای برهم‌کنش الکتروستاتیک دو میله‌ی باردار، موضوع واضحی نبوده و کاملاً پیچیده است. به هر ترتیب ما توانستیم نتایج مفیدی را با در نظر گرفتن تعدادی چهارقطبی محوری روی میله‌ها و محاسبه‌ی برهم‌کنش الکتروستاتیک آن‌ها برای طول‌های پوششی متفاوت به صورت عددی، به دست آوریم. نتیجه‌ی قابل توجه این بود که جهت‌گیری‌ها با انرژی-های کمینه و بیشینه، با اضافه کردن اثر پوششی تغییری نکرد. این بدان معناست که حضور نمک نمی‌تواند پیکربندی‌های کمینه و بیشینه‌ی انرژی را تغییر دهد. در قسمت پایانی، نتایج خود را جهت مطالعه‌ی ویژگی‌های فیزیکی کوپرایت‌ها به کار بردیم. در این بخش ویژگی‌های ساختاری کوپرایت‌های با آلایش ناچیز حفره را مورد مطالعه قرار دادیم. در نواحی آلایش‌های ناچیز نوارهای بار و اسپین در لایه‌های مختلف Cu-O پدیدار می‌شوند. با در نظر گرفتن نوارهای بار به عنوان اجسام ناهمسانگرد کلاسیکی، جهت‌گیری نوارها با کمینه انرژی برهم‌کنشی را به دست آوردیم. نتایج ما در تطابق خوبی با نتایج تجربی بود. نهایتاً نتیجه گرفتیم که در ناحیه‌ی آلایش‌های ناچیز می‌توان از اثرات کوانتومی صرف‌نظر کرد و ویژگی‌های فیزیکی سیستم را مطالعه کرد.

کلمات کلیدی: برهم‌کنش الکتروستاتیک، اجسام باردار ناهمسانگرد، فرم بسته‌ی انرژی برهم‌کنشی، ویژگی‌های ترمودینامیکی.

در مطالعه‌ی دسته‌ی وسیعی از سیستم‌های ماده چگال، برهم‌کنش‌های الکتروستاتیکی نقشی کلیدی ایفا می‌کنند. یافتن حالت‌های کمینه و بیشینه‌ی انرژی سیستم و اثری که انرژی برهم‌کنشی در توابع پاسخ سیستم از خود به جای می‌گذارد، جزء مواردی است که اهمیت این برهم‌کنش‌ها را نشان می‌دهند. در این بین، سیستم‌هایی که در آن‌ها شاهد ذرات باردار ناهمسانگرد (میله‌ای مانند و یا نوار مانند) هستیم، مورد توجه ویژه‌ای قرار گرفته‌اند. به عنوان مثال عایق‌های آنتی‌فرومغناطیس مات که در دسته‌ی سیستم‌های همبسته‌ی قوی قرار می‌گیرند، از جمله‌ی سیستم‌هایی هستند که در آن‌ها ذرات باردار نوار مانند داریم. با آلایش کردن این سیستم‌ها، نوارهایی از بار ایجاد می‌شوند که بسته به میزان آلایش و دما، آرایش‌های خاصی را به خود می‌گیرند. برهم‌کنش‌های الکتروستاتیکی که در این سیستم‌ها دیده می‌شوند، فاصله‌ی بین نوارهای بار را تنظیم می‌کنند. شناخت نوارهای بار و اطلاع از چگونگی رفتار آن‌ها، در مطالعه‌ی فازهای کوانتومی مختلفی که سیستم تحت آلایش‌ها و دماهای مختلف تجربه می‌کند، تأثیر بسزایی دارد. از بین این سیستم‌ها، کوپرایت‌ها، فازهای کوانتومی بسیار متنوعی را اختیار می‌کنند که فیزیک آن‌ها همچنان ناشناخته است. یکی دیگر از سیستم‌هایی که در آن شاهد برهم‌کنش‌های الکتروستاتیک بین ذرات باردار ناهمسانگرد (میله‌ای مانند) هستیم، سیستم‌های پلیمری هستند. محلول‌های کلئیدی و ماکرومولکول‌هایی مانند DNA، رشته‌های اکتینی در این دسته جای می‌گیرند. به منظور محاسبه‌ی انرژی برهم‌کنشی الکتروستاتیکی، در ابتدا بایستی نسبت به سیستم‌هایی که در آن‌ها چنین برهم‌کنش‌هایی دیده می‌شود، شناخت کافی پیدا کرد. به همین منظور به ترتیب زیر کار را دنبال خواهیم کرد:

در فصل اول با سیستم‌های بیوفیزیکی آشنا خواهیم شد. در ادامه به منظور مطالعه‌ی ابررساناهای دمای بالا که در آن‌ها شاهد فازهای نواری هستیم، به علت اینکه با سیستم‌های همبسته‌ی قوی سروکار خواهیم داشت، ابتدا در فصل دوم با سیستم‌های همبسته‌ی قوی آشنا می‌شویم. پس از آن در فصل سوم نسبت به

پدیده‌ی ابررسانایی دمای بالا و دلایل اهمیت آن‌ها شناخت کافی پیدا کرده و با فازهای نواری و علت تشکیل شدن آن‌ها آشنایی پیدا می‌کنیم. تا بدین جای کار، با سیستم‌هایی که در آن‌ها ذرات باردار ناهمسانگرد دیده می‌شوند، آشنایی پیدا خواهیم کرد. به این ترتیب می‌توانیم به سراغ محاسبات مربوط به این سیستم‌ها رفت. با این وصف در فصل چهارم ابتدا یک سیستم دارای دو میله‌ی باردار را در نظر گرفته و انرژی برهم‌کنشی الکتروستاتیک آن را به دست می‌آوریم. سپس به تحلیل انرژی و به دست آوردن توابع پاسخ سیستمی شامل زنجیره‌ی یک بعدی از میله‌های باردار خواهیم پرداخت. در فصل پنجم، همین محاسبات را، حال برای سیستمی که شامل توزیع گسسته‌ای از بار باشد، انجام خواهیم داد. پس از قیاس با نتایج فصل چهارم، به سراغ یک سیستم واقعی از کوپرایت‌ها رفته و به محاسبه‌ی انرژی برهم‌کنشی الکتروستاتیک آن پرداخته و نتایج آن را مورد بررسی قرار خواهیم داد.

لیست مقالات مستخرج شده از پایان نامه

1. A closed form for the electrostatic interaction between two rod-like charged objects.

J. Phys. Condens. Matter, **23** (2011) 155103.

Research highlight: <http://iopscience.iop.org/0953-8984/labtalk-article/45679>

۲. ظرفیت گرمایی زنجیره‌ی متشکل از ماکرومولکول‌های ناهمسانگرد با برهم‌کنش الکتروستاتیکی.

کنفرانس فیزیک ایران - همدان - ۱۳۸۹

۳. محاسبه‌ی تحلیلی انرژی برهم‌کنش الکتروستاتیکی بین ماکرومولکول‌های باردار میله‌ای شکل در فضا.

پانزدهمین گردهمایی فیزیک ماده چگال - دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان - ۱۳۸۸

فهرست

۱. آشنایی با سیستم‌های بیوفیزیکی	۱
۱.۱ مقدمه	۲
۲.۱ آشنایی با سیستم‌های بیولوژیکی	۲
۳.۱ پلی‌الکترولیت‌های میله‌ای شکل	۷
۲. سیستم‌های همبسته‌ی قوی	۹
۱.۲ مقدمه	۱۰
۲.۲ میدان بلوری	۱۱
۳.۲ برهم‌کنش‌های مغناطیسی	۱۶
۱.۳.۲ برهم‌کنش‌های دوقطبی- دوقطبی	۱۶
۲.۳.۲ برهم‌کنش‌های تبادلی	۱۶
۱.۲.۳.۲ تبادل مستقیم	۱۷
۱.۱.۲.۳.۲ اوربیتال‌های متعامد	۱۸
۲.۱.۲.۳.۲ اوربیتال‌های غیرمتعامد	۲۲
۲.۲.۳.۲ تبادل غیرمستقیم	۲۶
۱.۲.۲.۳.۲ جامدات یونی؛ ابرتبادلی	۲۶
۲.۲.۲.۳.۲ فلزات؛ RKKY	۲۶
۳.۲.۳.۲ تبادل دوگانه	۲۷
۴.۲ هامیلتونی‌های مؤثر	۲۷

۳۰.....	۵.۲ عایق مات
۳۳.....	۳. ابررساناهای دمای بالا
۳۴.....	۱.۳ مقدمه
۳۵.....	۲.۳ تاریخچه
۳۶.....	۳.۳ مواد ابررسانا
۳۷.....	۱.۳.۳ گروه اول: فلزات و آلیاژهای آنها
۳۷.....	۲.۳.۳ گروه دوم: ترکیبات غیرمغناطیسی – ابعاد پایین
۳۸.....	۳.۳.۳ گروه سوم: ترکیبات مغناطیسی – ابعاد پایین
۴۰.....	۴.۳ کوپرایت‌ها
۴۲.....	۱.۴.۳ دیاگرام فازي
۴۴.....	۲.۴.۳ ساختار الکترونی
۴۵.....	۳.۴.۳ فرآیند آلايش
۴۸.....	۴.۴.۳ فازهای نواری
۵۴.....	۴. محاسبه‌ی تحلیلی برهم‌کنش الکتروستاتیکی بین دو جسم میله‌ای شکل باردار
۵۵.....	۱.۴ مقدمه
۵۶.....	۲.۴ محاسبه‌ی تحلیلی انرژی برهم‌کنشی الکتروستاتیک
۶۰.....	۳.۴ تحلیل انرژی برهم‌کنشی بین دو میله
۶۶.....	۴.۴ ظرفیت گرمایی
۷۰.....	۵. محاسبه‌ی عددی برهم‌کنشی الکتروستاتیکی سیستمی شامل اجسام باردار ناهمسانگرد
۷۱.....	۱.۵ مقدمه

- ۲.۵ انرژی برهم‌کنشی الکتروستاتیک - توزیع گسسته‌ی بار ۷۱
- ۱.۲.۵ برهم‌کنش الکتروستاتیک بدون وارد کردن اثر پوششی ۷۲
- ۱.۱.۲.۵ تعداد زوج بار ۷۲
- ۲.۱.۲.۵ تعداد فرد بار ۷۶
- ۲.۲.۵ انرژی برهم‌کنشی در حضور اثر پوششی ۷۸
- ۳.۵ انرژی برهم‌کنشی الکتروستاتیک - کوپرایت‌ها ۸۰
- ۱.۳.۵ توصیف پارامترهای موجود در سیستم ۸۲
- ۲.۳.۵ محاسبه‌ی و تحلیل انرژی برهم‌کنشی ۸۶
- ۱.۲.۳.۵ انرژی برهم‌کنشی - حالت شماره ۱ ۸۸
- ۲.۲.۳.۵ انرژی برهم‌کنشی - حالت شماره ۲ ۸۹
- ۳.۲.۳.۵ افزایش طول نوارها ۹۰
- ۴.۲.۳.۵ افزایش تعداد صفحات ۹۱
- ۳.۳.۵ نتیجه‌گیری ۹۲
- ۴.۵ گرمای ویژه - کوپرایت‌ها ۹۳
- ۱.۴.۵ علت اهمیت مطالعه‌ی گرمای ویژه ۹۳
- ۲.۴.۵ مطالعات تجربی ۹۴
- ۳.۴.۵ محاسبات نظری ۹۷
- پیوست (الف) ۱۰۱
- پیوست (ب) ۱۰۴
- مراجع و کتاب‌شناسی ۱۰۸

فهرست شکل، جدول،

- شکل ۱.۱ معرفی چند قسمت از اجزای یک سلول ۳
- شکل ۲.۱ دورشته‌ای DNA ۴
- شکل ۳.۱ انواع پلیمرها از نظر انعطاف پذیری ۵
- شکل ۴.۱ نمایی از موقعیت پلی‌الکترولیت میله‌ای شکل ۷
- شکل ۱.۲ توزیع زاویه‌ای اوربیتال‌های اتمی s, p, d ۱۱
- شکل ۲.۲ محیط‌های اطراف یون مغناطیسی ۱۲
- شکل ۳.۲ شکافته‌شدن اوربیتال‌های d به علت میدان بلوری ۱۳
- شکل ۴.۲ شکافته‌شدن ترازهای انرژی یون به علت میدان بلوری ۱۴
- شکل ۵.۲ نحوه‌ی اشغال اوربیتال‌های $3d^6$ ۱۵
- شکل ۶.۲ اثر جان-تلر در شکافته‌شدن ترازهای انرژی $3d^4$ ۱۵
- شکل ۷.۲ حالت‌های دو الکترون که به طور فرومغناطیس با هم جفت شده‌اند ۱۷
- شکل ۸.۲ حالت‌های دو الکترون که به طور پادفرومغناطیس با هم جفت شده‌اند ۱۸
- شکل ۹.۲ نمایی از موقعیت سیستم ۱۸
- شکل ۱۰.۲ موقعیت الکترون‌ها و هسته‌ها در مولکول هیدروژن ۲۲
- شکل ۱۱.۲ حالت‌های پایه‌ی سیستم ۲۲
- شکل ۱۲.۲ نمایش برهم‌کنش آبر تبادلی در اکسید منگنز ۲۶
- شکل ۱۳.۲ عایق انتقال بار و عایق مات ۳۲

- شکل ۱۴.۲ نمایی از صفحه‌ی CuO_2 در La_2CuO_4 ۳۲
- شکل ۱.۳ جدول تناوبی عناصر که نشان‌دهنده‌ی عناصر ابررسانا به همراه دمای گذار آن‌هاست ۳۷
- شکل ۲.۳ دیاگرام فازی ابررساناهای دمای بالا ۴۳
- شکل ۳.۳ ساختار الکترونی کوپرایت در صفحه‌ی CuO_2 ۴۵
- شکل ۴.۳ ترازهای انرژی حفره برای حالت‌های مختلف قرارگیری حفره در سیستم ۴۶
- شکل ۵.۳ نمایی از موقعیت ترازهای انرژی در صفحه‌ی اکسیژن- مس ۴۷
- شکل ۶.۳ نمایی از صفحه‌ی اکسیژن- مس در یک کوپرایت ۴۸
- شکل ۷.۳ فرآیند آلایش حفره و اتفاق افتادن جدایی فاز در سیستم و تشکیل فازهای نواری ۴۸
- شکل ۸.۳ نحوه‌ی تغییر فاصله‌ی دو نوار بار از هم با توجه به افزایش میزان آلایش در سیستم ۴۹
- شکل ۹.۳ ساختارهای تتراگونال و اورتورومبیک در دماهای پایین ۵۰
- شکل ۱۰.۳ انظم نواری بار در نیکلایت‌ها ۵۳
- شکل ۱.۴ نمایش جهت‌گیری دو میله در فضای سه بعدی ۵۷
- شکل ۲.۴ انرژی برهم‌کنشی دو میله بر حسب θ و مقادیر مختلف r, ϕ ۶۱
- شکل ۳.۴ رفتار ϕ_{1M}, ϕ_{2M} به عنوان تابعی از فاصله‌ی بین دو میله ۶۴
- شکل ۴.۴ انرژی برهم‌کنشی کولنی بین دو میله به ازای پیکربندی‌های مختلف دو میله ۶۵
- شکل ۵.۴ گرمای ویژه برای زنجیره‌ای از میله‌های برهم‌کنش کننده ۶۸
- شکل ۱.۵ انرژی برهم‌کنشی بر حسب Γ برای سه جهت‌گیری مختلف ۷۳
- شکل ۲.۵ پیکربندی دو میله نسبت به همدیگر ۷۴
- شکل ۳.۵ انرژی برهم‌کنشی بین دو میله بر حسب θ و به ازای تعداد زوج بار ۷۵
- شکل ۴.۵ انرژی برهم‌کنشی بین دو میله بر حسب θ و به ازای تعداد فرد بار ۷۷
- شکل ۵.۵ انرژی برهم‌کنشی بین دو میله بر حسب θ و به ازای طول‌های پوششی متفاوت ۷۹

- شکل ۶.۵ نمایش از موقعیت حفره‌های آرایش شده و یون‌های مس در صفحه‌ی CuO_2 ۸۴
- شکل ۷.۵ انرژی برهم‌کنشی برحسب زاویه‌ی نوارهای صفحه‌ی دوم (حالت ۱) ۸۸
- شکل ۸.۵ انرژی برهم‌کنشی برحسب زاویه‌ی نوارهای صفحه‌ی دوم (حالت ۲) ۸۹
- شکل ۹.۵ انرژی برهم‌کنشی برحسب زاویه‌ی نوارهای صفحه‌ی دوم (افزایش طول) ۹۱
- شکل ۱۰.۵ انرژی برهم‌کنشی برحسب زاویه‌ی نوارهای صفحه‌ی دوم (افزایش تعداد صفحات) ۹۲
- شکل ۱۱.۵ رفتار گرمای ویژه در حجم ثابت و فشار ثابت برای یک نمونه‌ی La_2CuO_4 ۹۴
- شکل ۱۲.۵ نمودار C_p/T برحسب T^2 برای یک نمونه کریستال $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ۹۵
- شکل ۱۳.۵ نمودار C_p/T برحسب T^2 برای یک نمونه کریستال $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.95}$ ۹۶
- شکل ۱۴.۵ ضریب گرمای ویژه‌ی الکترونی بر حسب دما برای نمونه‌ی $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ ۹۶
- شکل ۱۵.۵ رفتار ضریب گرمای ویژه‌ی الکترونی به ازای $n=500$ و طول‌های متفاوت ۹۸
- شکل ۱۶.۵ رفتار ضریب گرمای ویژه‌ی الکترونی به ازای $l=9a$ و n های متفاوت ۹۹
-
- جدول ۱.۳ دسته‌های مختلف ابررساناهای گروه دوم ۳۸
- جدول ۲.۳ ویژگی‌های ناهمسانگرد انواع مختلف کوپرایت‌ها ۴۱
- جدول ۳.۳ کلاس‌های حاضر برای ابررساناهای کوپرایت ۴۱
- جدول ۱.۴ جهت‌گیری‌های کمینه و بیشینه‌ی انرژی برهم‌کنشی میله‌ها در فاصله‌ی $r = 0.2l$ ۶۳

فصل اول

سیستم‌های یوفنریکی

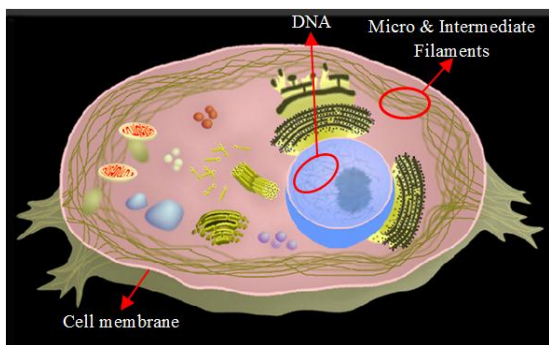
۱.۱ مقدمه

در یک دورنمای تاریخی، فیزیک نگرشی کلی به مواد جهان است، که یک مجموعه‌ی خاص از نظم و ترتیب‌هاست. فیزیک، شیمی را با شیمی- فیزیک؛ علم مواد و متالورژی را با فیزیک مواد؛ اخترشناسی را با اخترفیزیک و بیولوژی را فیزیک بیولوژی توسعه می‌دهد. البته این بدان معنا نیست که فیزیک برتر از سایر رشته‌هاست، بلکه فیزیک ارتباط‌دهنده‌ای بین رشته‌هاست. از لحاظ تاریخی و منطقی، این بدان خاطر است که فیزیک توصیف اجزای اولیه‌ی مواد جهان را مهیا می‌کند و مدل‌های ریاضی بر پایه‌ی تجربه ساخته می‌شوند [۱].

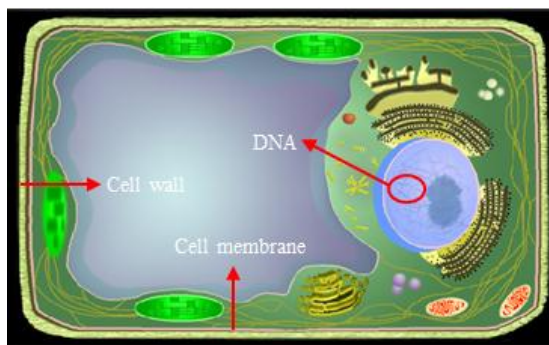
در این فصل بر آن هستیم که با سیستم‌های بیولوژیکی آشنا شویم. البته در این فصل به صورت کاملاً اجمالی به بررسی سیستم‌های بیولوژیکی خواهیم پرداخت، به علت اینکه بحث در این باب به شدت گسترده است و مجال باز کردن تمام مباحث آن نیست. به همین خاطر در ابتدا تنها با بعضی از مفاهیم کلی این سیستم‌ها آشنایی مختصری پیدا می‌کنیم. سپس با آشنا شدن با پلی‌الکترولیت‌ها، به عنوان سیستم‌هایی که در آن‌ها برهم‌کنش کولنی نقش مهمی را ایفا می‌کنند، به بررسی دسته‌ای از کارهایی که فیزیکدانان در این زمینه انجام داده‌اند، خواهیم پرداخت.

۲.۱ آشنایی با سیستم‌های بیولوژیکی

یکی از پیچیده‌ترین سیستم‌ها، سیستم موجودات زنده است. در این سیستم‌ها، سلول به عنوان کوچکترین واحد جامع و کامل حیاتی است که تمام خصوصیات موجود زنده را داراست. بدین معنا که می‌تواند به سوخت و سوز پردازد، تولیدمثل و تکثیر کند، حرکت و تغییر داشته باشد [۲]. یک سلول از اجزای مختلفی تشکیل شده است که هر کدام خصوصیات منحصر به فردی را دارا هستند. به عنوان نمونه یک سلول جانوری و گیاهی را در شکل ۱.۱ می‌بینیم.



(ب)

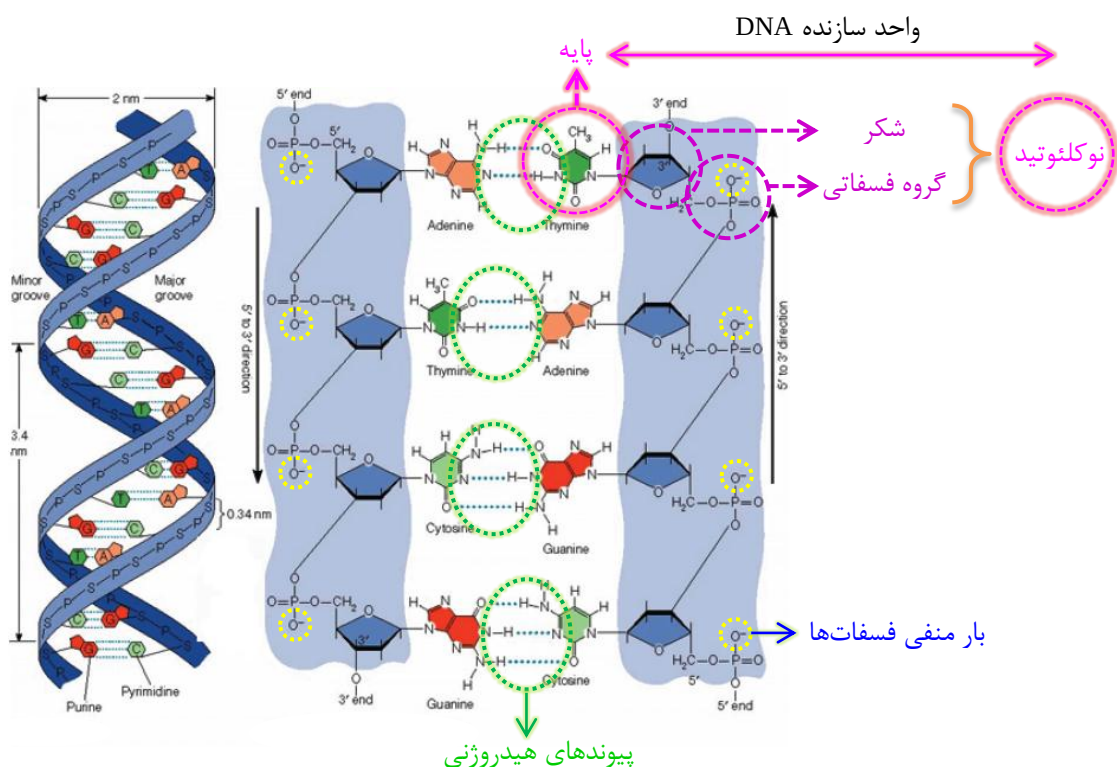


(الف)

شکل ۱.۱: معرفی چند قسمت از اجزای یک سلول (الف) گیاهی، (ب) جانوری [۳].

بیش از ۹۰٪ وزن بسیاری از سلول‌ها (به غیر از آب) از مولکول‌های بزرگی به نام ماکرومولکول‌ها تشکیل شده است [۲]. ماکرومولکول‌های زیستی انواع مختلفی دارند: پروتئین‌ها، اسیدهای هسته‌ای (DNA, RNA)، قندها، چربی‌ها و ... پیوند تشکیل‌دهنده‌ی هر ماکرومولکول، پیوند کوالانی است و نیرویی که ماکرومولکول‌ها را کنار هم نگاه می‌دارد، از نوع نیروهای وان‌دروالسی است. این نیروها در حضور گروه‌های قطبی افزایش و با زیاد شدن فاصله‌ی بین مولکول‌ها کاهش می‌یابند [۴]. جهت آشنایی بیشتر با ماکرومولکول‌ها، DNA را به عنوان یکی از ماکرومولکول‌های مهم در سیستم موجود زنده، مورد بررسی قرار می‌دهیم.

DNA یک پلیمر دورشته‌ای مارپیچ است. DNAها از نوکلئوتیدها به همراه یک پایه تشکیل شده‌اند. هر نوکلئوتید شامل یک گروه فسفاتی و شکر است. آدنین، تیمین، سیتوزین و گوانین پایه‌هایی هستند که با نوکلئوتیدها همراه می‌شوند. توالی پایه‌ها در یک رشته‌ی DNA کاملاً توالی پایه‌ها در رشته‌ی دوم را مشخص می‌کند. به گونه‌ای که همواره آدنین در مقابل تیمین و سیتوزین در مقابل گوانین قرار می‌گیرد [۵]. یکی از ویژگی‌های DNA دارا بودن اطلاعات وراثتی است. با داشتن این ویژگی است که در هنگام تقسیم سلولی نقش مهمی را در انتقال داده‌ها بر عهده دارد.

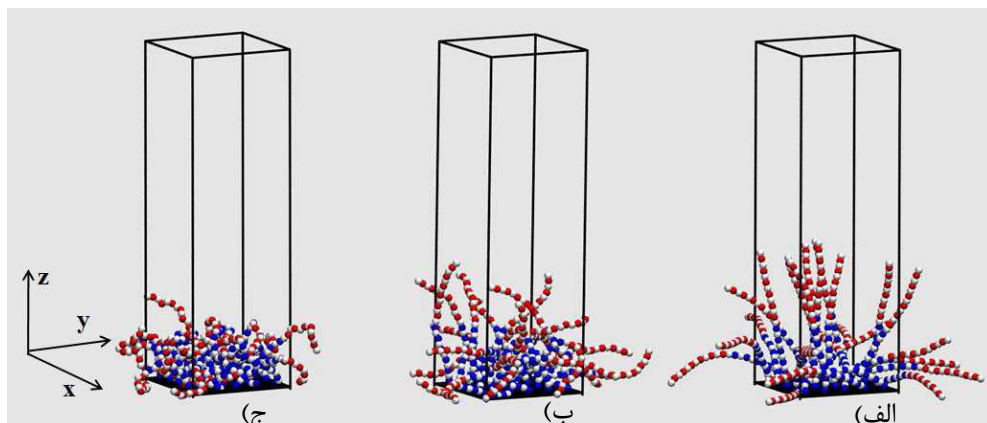


شکل ۲.۱: دورشته‌ای DNA. واحدهای سازنده‌ی آن، پیوندهای هیدروژنی و عامل برهم‌کنش‌های الکتروستاتیکی در شکل به خوبی مشخص شده‌اند [۶].

خواص ماکروسکوپی مواد، که با توجه به آن‌ها مواد کاربردهای خاص خود را پیدا می‌کنند، ناشی از ساختار میکروسکوپی آن‌هاست. شکل و اندازه‌ی مولکول‌ها و نوع برهم‌کنش بین آن‌ها، بخشی از ساختار میکروسکوپی مواد هستند. ماکرومولکول‌ها، اندازه و شکل کاملاً متفاوت با مولکول‌های جامدات، مایعات و گازهای معمولی دارند. به همین دلیل باعث متفاوت شدن ویژگی‌های موادی هستند که از آن‌ها تشکیل شده‌اند.

مواد پلیمری از رشته‌هایی تشکیل یافته‌اند که آن رشته‌ها، زنجیره‌ای از ماکرومولکول‌ها هستند. به همین دلیل مشخصات فیزیکی بسیار متفاوتی نسبت به سایر مواد غیر پلیمری در آن‌ها دیده می‌شود که ناشی از شکل و اندازه‌ی خاص این رشته‌هاست. به دلیل اندازه‌ی بزرگ پلیمرها و قابلیت درهم‌تنیده شدن آن‌ها به یکدیگر، خصوصیتی مانند انعطاف‌پذیری آن‌ها نیز، در رفتار فیزیکی این مواد تأثیر دارد [۷].

پلیمرها از نظر انعطاف پذیری به سه دسته تقسیم می‌شوند. معیار این تقسیم بندی، نسبت طول ایستایی^۱ L_p مولکول‌های پلیمری به طول آن‌هاست. (میزان سختی پلیمرهای بدون بار با طول ایستایی مشخص می‌شود [۸]). اگر $L \ll L_p$ ، پلیمر سخت یا میله‌ای شکل، اگر $L \sim L_p$ ، پلیمر نیمه انعطاف پذیر و اگر $L \gg L_p$ پلیمر انعطاف پذیر خواهد بود [۹].



شکل ۳.۱: انواع پلیمرها از نظر انعطاف پذیری (الف) پلیمر سخت یا میله‌ای شکل، (ب) پلیمر نیمه انعطاف پذیر، (ج) پلیمر انعطاف پذیر [۱۰].

پلیمرهایی که دارای گروه‌هایی با قابلیت یونیزه شدن هستند، پلی‌الکترولیت‌ها^۲ را تشکیل می‌دهند. در محلول‌های قطبی مانند آب، این گروه‌ها توانایی تفکیک شدن پیدا کرده و بارهایی که روی زنجیره‌های پلیمری قرار دارند، از زنجیره‌های پلیمری جدا شده و به صورت یون‌هایی با بار مخالف^۳ در محلول آزاد می‌شوند. برهم کنش‌های الکتروستاتیکی که در بین بارها بوجود می‌آید، منجر به رفتارهای متفاوت محلول‌های پلی‌الکترولیتی با سایر پلیمرهای بدون بار می‌شود [۱۱]. مشاهدات آزمایشگاهی نشان می‌دهند که پلی‌الکترولیت‌ها در حالت محلول به دلیل تأثیر متقابل برهم کنش بلندبرد الکتروستاتیک و آثار مربوط به آنروپی، خصوصیات ساختاری و دینامیکی جدیدی از خود نشان می‌دهند [۱۲]. وارونی بار و جذب بارهای مشابه از جمله مواردی است که در این دسته از مواد دیده می‌شود و قابل توجیه با نظریه‌های متداول

^۱ Persistence length

^۲ Polyelectrolyte

^۳ Counterion

نیستند [۱۳]. با افزودن نمک به محلول‌های پلی‌الکترولیتی، برهم‌کنش‌های الکتروستاتیکی به صورت نمایی توسط یون‌های نمک، در مقیاس‌های طولی بزرگتر از طول پوششی دبای κ_D^{-1} ^۴ پوشش داده می‌شوند [۱۴]. κ_D^{-1} طول مشخصه‌ای است که کاهش برهم‌کنش را به صورت نمایی نشان می‌دهد. طول دبای، یک پارامتر با اهمیت در توصیف سیستم‌های آبی که شامل یون‌ها، ذرات کلئیدی باردار، پلی‌الکترولیت‌ها و بیوپلیمرهاست، می‌باشد [۱۵].

پلی‌الکترولیت‌ها، انواع زیست‌شناختی هم دارند و در سلول‌های موجودات زنده، نقش‌های زیست‌شناختی مهمی ایفا می‌کنند. به عنوان نمونه می‌توان به مهمترین و معروفترین این پلی‌الکترولیت‌ها، یعنی رشته‌های DNA اشاره کرد. پلی‌الکترولیت‌های زیست‌شناختی معمولاً از دو دیدگاه مورد مطالعه قرار می‌گیرند: [۷]

۱- با بررسی فیزیک پدیده‌های مربوط به یک رشته‌ی پلی‌الکترولیت زیستی، سعی می‌شود نقش مشخصات فیزیکی آن در فرآیندهای زیست‌شناختی توضیح داده شود. مطالعه‌ی فیزیک رشته‌ی DNA با روش‌های نظری و با استفاده از ابزارهای آزمایشگاهی نظیر انبرک نوری ^۵ از جمله‌ی این بررسی‌هاست.

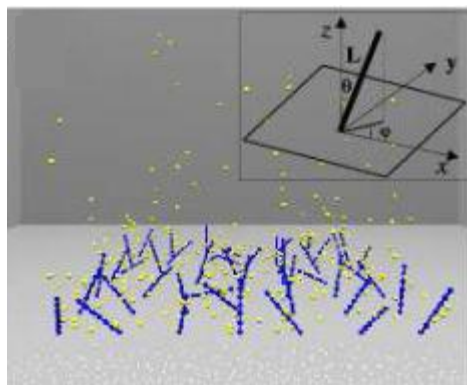
۲- مطالعه‌ی رفتار دسته‌جمعی پلی‌الکترولیت‌های زیست‌شناختی با هدف درک بهتر آرایش‌های جدید پلی‌الکترولیت‌ها در سیستم‌های زیستی و رفتار فازی غنی پلی‌الکترولیت‌ها در محلول مورد مطالعه قرار می‌گیرد.

^۴ Debye Screening Length

^۵ Optical tweezers

۳.۱ پلی‌الکترولیت‌های میله‌ای شکل^۶

اگر پلی‌الکترولیت‌ها به اندازه‌ی کافی کوتاه یا به شدت باردار باشند، آن‌ها به طور مؤثر به صورت میله‌های باردار رفتار می‌کنند [۱۶]. DNA و رشته‌های اکتینی از جمله مثال‌های متداول پلی‌الکترولیت‌های میله‌ای شکل در سیستم‌های بیولوژی هستند [۱۷].



شکل ۴.۱: نمایی از موقعیت یک پلی‌الکترولیت میله‌ای شکل به طول L و دو درجه‌ی آزادی دورانی θ, ϕ . کره‌های زرد رنگ نمایش دهنده‌ی ذرات باردار در محیط محلول هستند [۱۳].

یکی از مواردی که در مورد پلی‌الکترولیت‌ها در بالا مطرح شد، جذب بین بارهای مشابه بود. این مسئله در مورد پلی‌الکترولیت‌های میله‌ای شکل نیز حادث می‌شود. کارهای تجربی [۱۸]، نظری [۱۹] و عددی [۲۰] بسیاری در زمینه‌ی جذب بارهای مشابه بین دو پلی‌الکترولیت میله‌ای شکل صورت گرفته است. آنچه که توجه فیزیکدانان را به سمت پلی‌الکترولیت‌های میله‌ای شکل هدایت کرده، این است که در دنیای کلونیدی اجسام حقیقتاً ناهمسانگرد بوده [۲۱] و شکل‌های میله‌ای مانند و نوار مانند دارند. تلاش‌های زیادی به صورت عددی و تحلیلی برای به دست آوردن انرژی برهم‌کنشی الکتروستاتیک در این سیستم‌ها صورت گرفته است. گروهی برای محاسبه‌ی برهم‌کنش مؤثر بین دو ماکرومولکول ناهمسانگرد، نظریه‌ی^۷ DLVO [۲۲] که برای کلونیدهای همسانگرد صادق است را، برای کلونیدهای ناهمسانگرد تعمیم

^۶ Rod-Like Polyelectrolytes

^۷ The Derjaguin, Landau, Verwey and Overbeek Theory

داده و نتایج این کار را در مورد پلی‌الکترولیت‌های میله‌ای شکل محدود، به کار بردند. این گروه جهت محاسبه‌ی انرژی برهم‌کنشی از بار سطحی کمکی استفاده کرده‌اند و برای به دست آوردن بار سطحی کمکی به صورت عددی عمل کرده‌اند [۲۱]. در مطالعه‌ای دیگر جهت بررسی رقابت بین برهم‌کنش‌های الکتروستاتیکی و همبستگی‌های جهتی، برای سیستمی شامل میله‌های باردار که روی زنجیره‌ای قرار گرفته‌اند، از شبیه‌سازی مونت کارلو استفاده شده است. با استفاده از الگوریتم متروپلیس، سیستمی شامل N_r میله که مراکز آن‌ها روی یک زنجیره ثابت شده‌اند و تنها درجه‌ی آزادی دورانی آن‌ها (θ, φ) است، را شبیه‌سازی کرده‌اند. با فرض اینکه روی هر میله N_q بار نقطه‌ای با علامت یکسان و به صورت متقارن روی میله توزیع شده باشند، انرژی برهم‌کنشی کولنی پوششی سیستم به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$U = \frac{q^2}{\epsilon} \sum_{m>n}^{N_r} \sum_{i,j=1}^{N_q} \frac{e^{-\kappa_D |r_{mi}-r_{nj}|}}{|r_{mi}-r_{nj}|} \quad (۱.۱)$$

که ϵ ثابت دی‌الکتریک، $r_{mi}(r_{nj})$ موقعیت بار $i(j)$ روی میله‌ی $m(n)$ و κ_D^{-1} طول پوششی دبی است [۱۲]. در گزارشی دیگر، گروهی برهم‌کنش الکتروستاتیکی بین مولکول‌های DNA مانند را مورد مطالعه قرار دارند. برای این منظور DNA را به عنوان یک شبکه‌ی یک بعدی از دوقطبی‌ها و بارها مدل کردند که به ترتیب متناظر با جفت‌های پایه و گروه‌های فسفاتی هستند. در این کار، با استفاده از روش‌های عددی پیکربندی‌های کمینه سیستم را به دست آوردند [۵].

چیزی که در تمام مطالعات فوق کمبود آن دیده می‌شود، فرم بسته‌ای برای انرژی برهم‌کنشی بین دو جسم ناهمسانگرد است. با داشتن فرم بسته‌ای برای انرژی برهم‌کنشی می‌توان به صورت مستقیم اثر انرژی برهم‌کنشی را در توابع پاسخ سیستم مورد مطالعه قرار داد. چنین فرم بسته‌ای را ما برای انرژی برهم‌کنشی به دست آورده‌ایم که در فصل ۴ به آن خواهیم پرداخت.

فصل دوم

سیستم‌های همبستگی قوی

۱.۲ مقدمه

یک جامد متشکل از یون‌ها و الکترون‌ها در یک ساختار بلوری سه بُعدی است. به علت اینکه یون‌ها از الکترون‌ها به مراتب سنگین‌تر هستند، اغلب برای توضیح ویژگی‌های الکترونیکی جامد، یون‌ها را به عنوان یک شبکه‌ی استاتیک فرض می‌کنند. در این تقریب دینامیک الکترون‌ها با هامیلتونی زیر توصیف می‌شود:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} + \mathcal{V}_I(x_i) \right) + \sum_{1 \leq i \leq j \leq N} \mathcal{V}_C(x_i - x_j) \quad (۱.۲)$$

که N تعداد الکترون‌ها و $\mathcal{V}_I$ پتانسیل دوره‌ای یون‌ها و $\mathcal{V}_C$ دافعه‌ی کولنی بین الکترون‌هاست [۲۳].

حل هامیلتونی به این فرم مسئله‌ای پیچیده و دشوار است. یک راه‌حل این است که از تقریب الکترون مستقل^۱ استفاده کنیم، یعنی از برهم‌کنش الکترون-الکترون، جمله‌ی دوم هامیلتونی فوق، صرف‌نظر کنیم. در این صورت با استفاده از نظریه‌ی نواری^۲ قادر به توصیف سیستم خواهیم بود. چنین توصیفی از سیستم در حالتی که با سیستم‌های غیرمغناطیسی سروکار داشته باشیم، کاملاً درست است. اما زمانی که بحث سیستم‌های مغناطیسی مطرح می‌شود، دیگر نمی‌توان از برهم‌کنش‌های الکترون-الکترون صرف‌نظر کرد. این سیستم‌ها را سیستم‌های همبسته‌ی قوی^۳ می‌نامند. مباحثی که در مورد این سیستم‌ها مطرح می‌شود، به طور خاصی متفاوت از سایر سیستم‌هاست و جذابیت‌های خاص خود را دارد. در این فصل با مفاهیمی از قبیل میدان بلوری^۴، برهم‌کنش‌های مغناطیسی، هامیلتونی‌های مؤثر^۵ و عایق‌های مات^۶ آشنا خواهیم شد.

^۱ Independent Electron Approximation

^۲ Band Theory

^۳ Strongly Correlated System

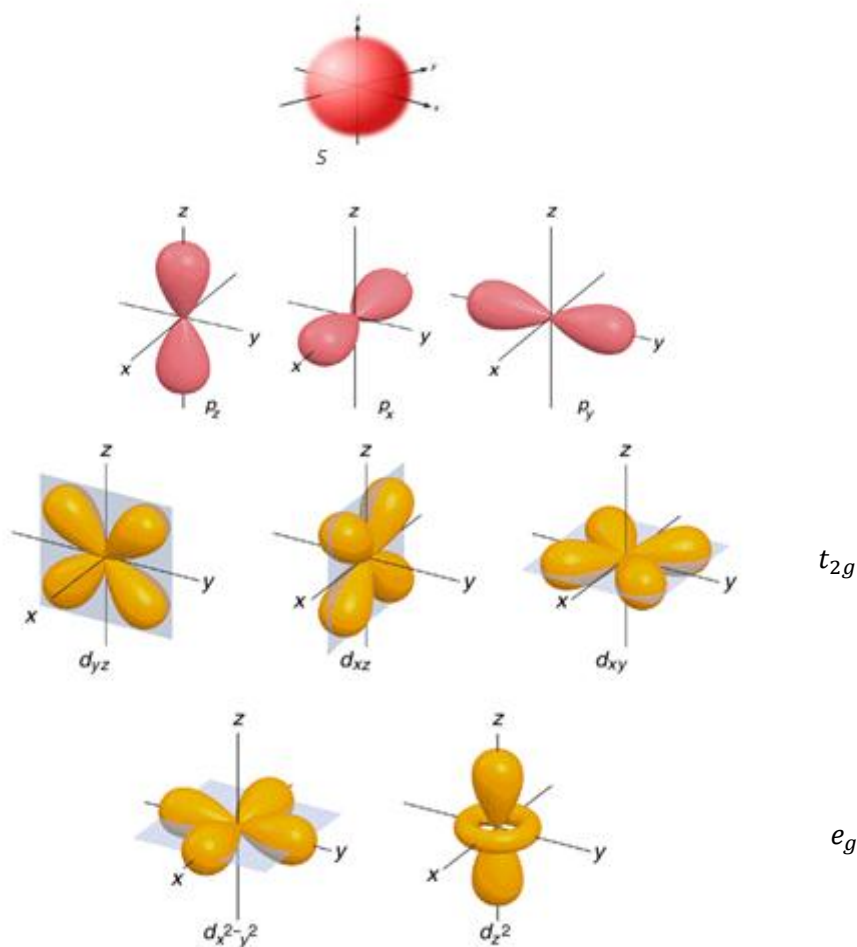
^۴ Crystal Field

^۵ Effective Hamiltonian

^۶ Mott Insulators

۲.۲ میدان بلوری

در بسیاری از مواد می‌توان از برهم‌کنش یون‌ها با همدیگر و یا با محیط اطراف در یک بلور، صرف‌نظر کرد؛ اما در مواد مغناطیسی، نمی‌توان از چنین برهم‌کنش‌هایی صرف‌نظر نمود. برای اینکه بتوان اثر محیط اطراف یک یون در بلور را روی ترازهای انرژی آن درک کرد، ابتدا لازم است که نگاهی به شکل اوربیتال‌های مختلف داشته باشیم. شکل (۱.۲) قسمت زاویه‌ای تابع موج اوربیتال‌های s, p, d را نشان می‌دهد. از میان آن‌ها تنها اوربیتال s است که تقارن کروی دارد. همان‌طور که در شکل می‌بینیم، اوربیتال‌های d به دو دسته تقسیم می‌شوند. اوربیتال‌های t_{2g} که در بین محورهای x, y, z هستند (d_{xy}, d_{xz}, d_{yz}) و

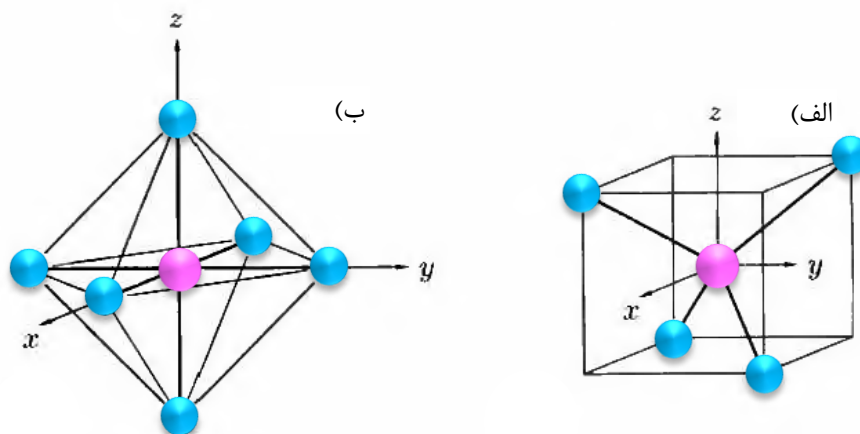


شکل ۱.۲: توزیع زاویه‌ای اوربیتال‌های اتمی s, p, d

اوربیتال‌های e_g که در طول محورهای x, y, z قرار می‌گیرند ($d_{x^2-y^2}, d_{z^2}$).

میدان بلوری، میدان الکتریکی‌ای است که از اتم‌های همسایه در بلور ناشی می‌شود. یون‌های غیرمغناطیسی اطراف یون مغناطیسی در بلور، لیگاند نام دارند. با این تعریف، می‌توان میدان بلوری را ناشی از برهم‌کنش یون با لیگاندها دانست. اثری که میدان بلوری بر روی ترازهای انرژی می‌گذارد، به تقارن محیط اطراف یون مغناطیسی بستگی دارد.

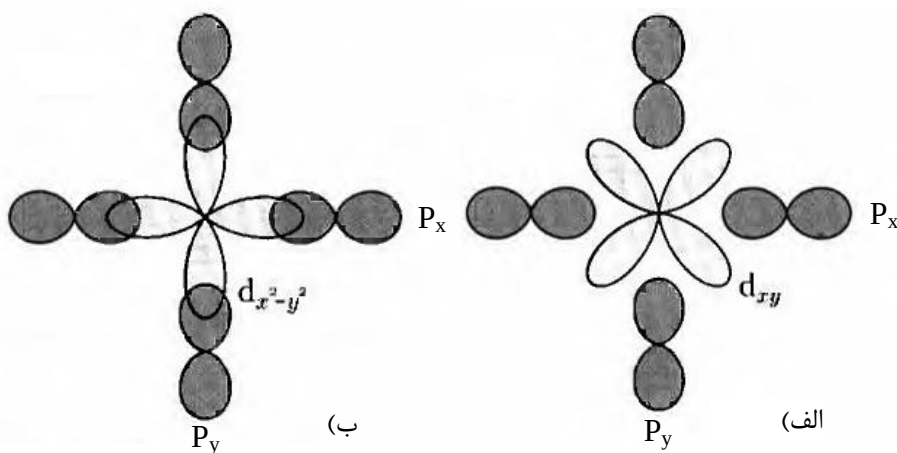
محیط اطراف یون مغناطیسی می‌تواند در آرایش‌های هشت‌وجهی و یا چهاروجهی باشد. البته آرایش هشت‌وجهی بیشتر متداول است، به خاطر اینکه در بیشتر فلزات گذار، چنین آرایشی از لیگاندها دیده می‌شود. یون فلز گذار، در مرکز هشت‌وجهی و یون‌هایی نظیر اکسیژن روی گنج‌های هشت‌وجهی می‌نشینند.



شکل ۲.۲: محیط‌های اطراف یون مغناطیسی. الف) چهاروجهی، ب) هشت‌وجهی.

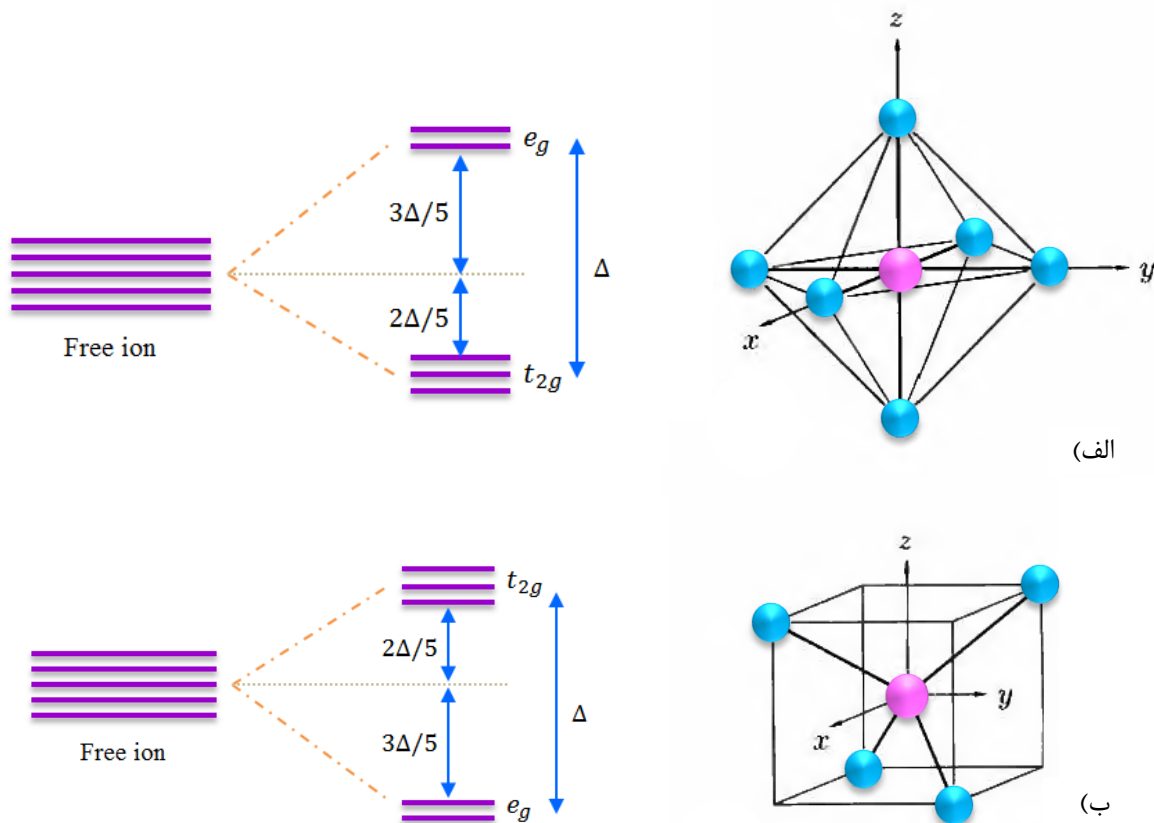
کاتیونی را در مرکز یک کره در نظر بگیرید، با ۱۰ الکترون در اوربیتال d ، که روی کره به صورت یکنواخت توزیع شده‌اند. در این حالت به علت تقارن کروی محیط، اوربیتال‌های d تبهگن هستند. حال فرض کنید که بار روی کره با ۶ بار نقطه‌ای گسسته، که هر کدام روی یک گنج هشت‌وجهی قرار گرفته‌اند، در ارتباط باشد. در این حالت انرژی الکتروستاتیکی کل اوربیتال‌های d تغییری نمی‌کند، اما تبهگنی اوربیتال‌های d از بین می‌رود.

برای نشان دادن اثرات میدان بلوری راه‌های متفاوتی وجود دارد که یکی از آن‌ها نگاه کردن به اوربیتال‌های اتمی در صفحه است. همان طور که در شکل ۳.۲ می‌بینیم، در قسمت (الف) همپوشانی اوربیتال‌های اتمی نسبت به قسمت (ب) کمتر است. در قسمت (الف) با اوربیتال‌های دسته t_{2g} روبرو هستیم که مابین محورهای مختصات هستند و به همین خاطر همپوشانی با اوربیتال‌های p_x, p_y که روی محورهای مختصات قرار می‌گیرند، ندارند. اما در قسمت (ب) اوربیتال‌های دسته e_g هستند که روی محورهای مختصات بوده و همپوشانی آن‌ها با اوربیتال‌های p_x, p_y زیاد است. به همین دلیل انرژی الکتروستاتیکی حالت (الف) از (ب) کمتر است و به این ترتیب تبهگنی اوربیتال‌های d از بین می‌رود. اوربیتال‌های سه‌گانه t_{2g} در سطح انرژی پایین‌تری نسبت به دوگانه e_g قرار می‌گیرند.



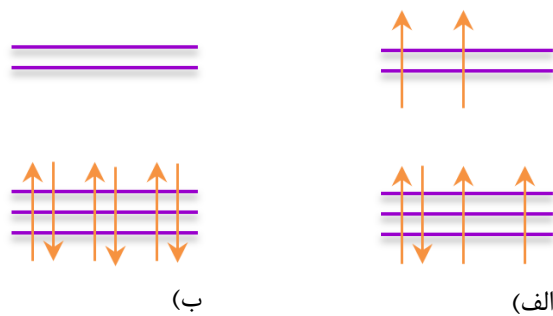
شکل ۳.۲: شکافته شدن تبهگنی اوربیتال‌های d به علت میدان بلوری. به طوری که دیده می‌شود، همپوشانی اوربیتال $d_{x^2-y^2}$ با اوربیتال مجاور خود، بیشتر از اوربیتال d_{xy} است.

اینکه کدام دسته از اوربیتال‌های d در سطح انرژی پایین‌تری قرار بگیرند، به تقارن محیط اطراف یون مورد نظر بستگی دارد. زمانی که به جای آرایش هشت وجهی، آرایش چهاروجهی از اتم‌ها را در سیستم داشته باشیم، قرارگیری سطوح انرژی متفاوت خواهد شد.



شکل ۴.۲: شکافته شدن ترازهای انرژی یون به علت میدان بلوری. نوع شکافته شدن ترازها در آرایش‌های الف) هشت‌وجهی و ب) چهاروجهی با هم متفاوت است. در آرایش هشت‌وجهی، اوربیتال‌های دسته t_{2g} در سطح انرژی پایین‌تری قرار می‌گیرند، اما در آرایش چهاروجهی وضع به گونه‌ی دیگری است. [۲۴]

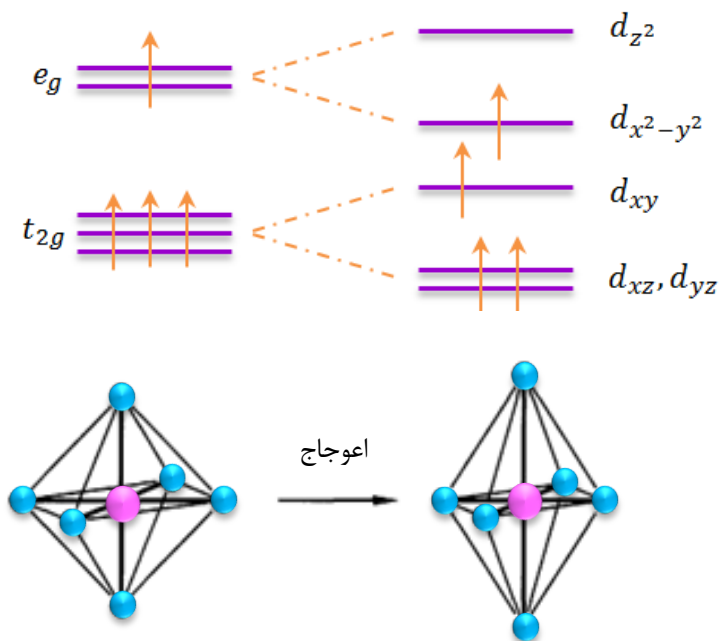
مسئله‌ی دیگر نحوه‌ی پرشدن اوربیتال‌ها است. این موضوع به رقابت بین دو انرژی بستگی دارد: میدان بلوری و انرژی جفت‌شدگی (انرژی کولنی لازم جهت گذاشتن دو الکترون در یک اوربیتال). اگر میدان بلوری از انرژی جفت‌شدگی کمتر باشد، در این صورت دافعه‌ی الکترونی غالب شده و الکترون‌ها بایستی ابتدا به صورت یگانه اوربیتال‌ها را اشغال کنند، سپس الکترون‌ها در اوربیتال‌ها شروع به جفت‌شدن می‌کنند. این حالت میدان بلوری با نام میدان ضعیف شناخته می‌شود. اما اگر میدان بلوری از انرژی جفت‌شدگی بیشتر باشد، در این حالت، الکترون‌ها به صورت جفت جفت، اوربیتال‌ها را اشغال می‌کنند. به این حالت میدان بلوری، میدان قوی می‌گویند.



شکل ۵.۲: نحوه‌ی اشغال اوربیتال $3d^6$. الف) میدان ضعیف، ب) میدان قوی.

شکافتگی دیگری نیز در ترازهای انرژی اتفاق می‌افتد که به اثر یان-تیلر^۷ مشهور است. در این اثر سیستم

دچار یک اعوجاج خودبخودی می‌شود که نتیجه‌ی آن شکافتگی بیشتر ترازهای انرژی خواهد بود [۲۴].



شکل ۶.۲: اثر یان-تیلر در شکافته شدن ترازهای انرژی $3d^4$ [۲۴].

۳.۲ برهم کنش های مغناطیسی

برهم کنش های مغناطیسی به دو دسته تقسیم می شوند: برهم کنش های دوقطبی - دوقطبی و برهم کنش های تبادلی.

۱.۳.۲ برهم کنش دوقطبی - دوقطبی

رابطه کلی برای برهم کنش دوقطبی - دوقطبی به فرم زیر نوشته می شود:

$$E = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} [\mu_1 \cdot \mu_2 - \frac{3}{r^2} (\mu_1 \cdot r)(\mu_2 \cdot r)] \quad (۲.۲)$$

که به فاصله جدایی دو گشتاور از هم و جهت گیری آن ها نسبت به هم بستگی دارد. مرتبه ی بزرگی این اثر برای حالتی که $\mu_1 = \mu_2 \approx 1\mu_B$ ، در فاصله ی جدایی $r \approx 1 \text{ }^\circ A$ ، تقریباً 10^{-23} J است که معادل با یک کلون می باشد. در حالی که در بیشتر موارد، مواد در دماهای بالاتری نظم مغناطیسی دارند. به همین دلیل برهم کنش های دوقطبی - دوقطبی ضعیف تر از آن هستند که بتوانند منشأ نظم های مغناطیسی سیستم ها باشند. البته لازم به ذکر است، در مواردی که به بررسی ویژگی های مواد در مرتبه ی میلی کلون می پردازیم، این برهم کنش ها اهمیت دارند [۲۴].

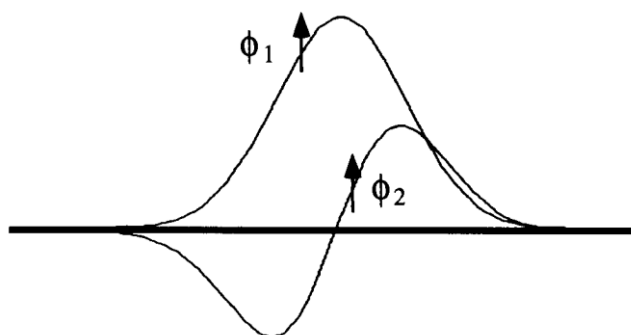
۲.۳.۲ برهم کنش های تبادلی

برهم کنش های تبادلی قلب پدیده های دارای نظم بلندبرد مغناطیسی هستند. برهم کنش های تبادلی چیزی بیش از برهم کنش های الکتروستیک نیستند؛ با نزدیک کردن دو بار با علامت یکسان، انرژی از دست می رود و با دور کردن آن ها از یکدیگر، انرژی ذخیره می شود [۲۴]. برهم کنش های تبادلی انواع مختلفی دارند. تبادلهای مستقیم، غیرمستقیم و دوگانه مواردی هستند که در ادامه به توضیح آن ها خواهیم پرداخت.

در تبادل مستقیم، با جزئیات کامل رابطه‌ی انرژی تبدیلی را به دست خواهیم آورد و به وضوح منشأ الکتروستاتیک آن دیده خواهد شد.

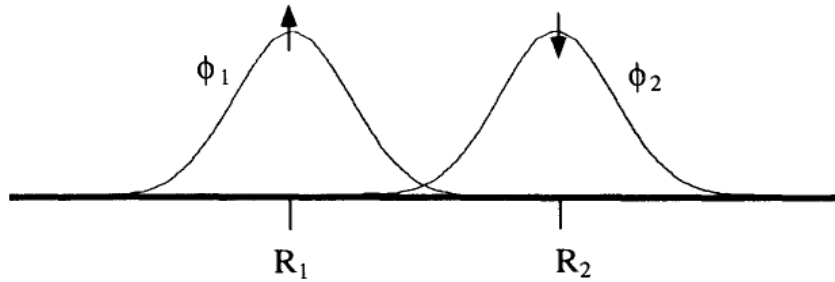
۱.۲.۳.۲ تبادل مستقیم

برای محاسبه‌ی انرژی تبدیلی بایستی توجه داشت که آیا سیستم شامل اتم‌هایی جدا از هم است و یا سیستم شامل مولکول‌هاست. زمانی که با اتم‌ها مواجه باشیم، مثلاً اتم هیدروژن، هر الکترون تنها تحت تأثیر یک هسته یا به عبارتی تحت تأثیر یک چاه پتانسیل می‌باشد. کمینه انرژی سیستم در حالتی است که اسپین‌ها در آرایش موازی قرار بگیرند و چون با یک سیستم فرمیونی سروکار داریم و اسپین‌ها در حالت یکسان هستند، پس دو الکترون از نظر فضایی به قدر کافی دور از هم قرار می‌گیرند. نظامی که سیستم در این حالت اختیار می‌کند، نظم فرومغناطیس نام دارد.



شکل ۷.۲: حالت‌های دو الکترون که به طور فرومغناطیس با هم جفت شده‌اند [۲۵].

اما زمانی که با مولکول‌ها سروکار داریم، مثلاً مولکول هیدروژن، هر الکترون تحت تأثیر دو هسته می‌باشد که به بیانی دیگر تحت تأثیر دو چاه پتانسیل است. در این حالت همپوشانی بین پتانسیل‌های اتمی، ناحیه‌ای را در بین پروتون‌ها بوجود می‌آورد که انرژی پتانسیل آن کم است. الکترون‌ها تمایل دارند که این حالت را اشغال کنند. بنابراین برای رسیدن به کمینه مقدار انرژی پیکربندی پادموازی را برمی‌گزینند. چنین نظامی را نظم پادفرومغناطیس می‌نامند [۲۶].

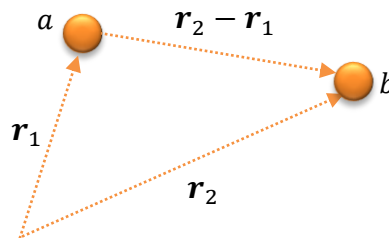


شکل ۸.۲: حالت‌های دو الکترون که به صورت پادفرومغناطیس با هم جفت شده‌اند [۲۵].

قبل از اینکه به سراغ جزئیات محاسبات تبادل مستقیم در دو حالت اوربیتال‌های متعامد و اوربیتال‌های غیرمتعامد برویم، دقت داشته باشیم در حالتی که همپوشانی بین اوربیتال‌های اتمی را داریم، تبادل تنها شامل بحث فوق نمی‌شود و تبادل جنبشی هم مطرح می‌شود که در ادامه به شرح آن خواهیم پرداخت.

۱.۱.۲.۳.۲ اوربیتال‌های متعامد

یک سیستم دو الکترونی را در نظر می‌گیریم، که در فاصله‌های r_1, r_2 نسبت به مبدأ مختصات مطابق شکل ۹.۲ قرار گرفته‌اند.



شکل ۹.۲: نمایی از موقعیت سیستم a, b دو الکترون تشکیل دهنده سیستم هستند که به ترتیب در فواصل r_1, r_2 نسبت به مبدأ قرار گرفته‌اند.

همیلتونی سیستم به فرم زیر نوشته می‌شود:

$$\mathcal{H} = h_0(\mathbf{r}_1) + h_0(\mathbf{r}_2) + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (۳.۲)$$

تابع موج کل سیستم شامل دو بخش اسپینی و فضایی است. چون سیستم، یک سیستم فرمیونی است، باید تابع موج کل در نهایت پادمتقارن باشد.

$$\psi = \varphi(\mathbf{r})\chi(s) \quad (4.2)$$

بخش اسپینی شامل حالت‌های یگانه و سه‌گانه اسپینی می‌باشد.

$$\begin{aligned} & \begin{matrix} |\downarrow\downarrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\} \\ \text{حالت یگانه} \end{matrix} \quad \& \quad \begin{matrix} \frac{1}{\sqrt{2}}\{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\} \\ \text{حالت‌های سه‌گانه} \\ |\uparrow\uparrow\rangle \end{matrix} \quad (5.2) \end{aligned}$$

برای نوشتن قسمت فضایی از دترمینان اسلیتر[^] که برای یک سیستم دو ذره‌ای به فرم زیر نوشته می‌شود، استفاده می‌کنیم.

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \varphi_a(\mathbf{r}_1) & \varphi_a(\mathbf{r}_2) \\ \varphi_b(\mathbf{r}_1) & \varphi_b(\mathbf{r}_2) \end{vmatrix} \quad (6.2)$$

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) + \varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2) \} \quad (\text{الف.7.2})$$

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2) \} \quad (\text{ب.7.2})$$

که رابطه‌ی ۷.۲ الف برای حالت متقارن فضایی و رابطه‌ی ۷.۲ ب برای حالت پادمتقارن فضایی نوشته می‌شود. همان‌طور که اشاره کردیم، تابع موج کل سیستم باید پادمتقارن باشد، بنابراین حالت یگانه‌ی اسپینی به همراه حالت متقارن فضایی و حالت‌های سه‌گانه اسپینی به همراه حالت پادمتقارن فضایی نوشته می‌شوند. به این ترتیب توابع موج سیستم به صورت زیر حاصل می‌شوند:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{2} \{ |\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle \} \{ \varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) + \varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2) \}$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{2} \{ |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle \} \{ \varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2) \}$$

[^] Slater Determinate

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|\uparrow\uparrow\rangle\}\{\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2)\}$$

$$|\psi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|\downarrow\downarrow\rangle\}\{\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2)\} \quad (۸.۲)$$

شرط تعامد به فرم زیر در نظر گرفته می‌شود:

$$\int \varphi_a^*(\mathbf{r})\varphi_b(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 0 \quad (۹.۲)$$

حال با استفاده از توابع موج و شرط تعامد می‌توان به محاسبه‌ی انرژی حالت‌های سه‌گانه و یگانه پرداخت. برای محاسبه‌ی انرژی حالت سه‌گانه، چون انرژی تبه‌گن است، کافیت انرژی را برای یکی از توابع موج $|\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle, |\psi_4\rangle$ به دست آورد.

$$\begin{aligned} \varepsilon_t &= \langle \psi_3 | \mathcal{H} | \psi_3 \rangle = \langle \psi_3 | h_0(\mathbf{r}_1) | \psi_3 \rangle + \langle \psi_3 | h_0(\mathbf{r}_2) | \psi_3 \rangle + \left\langle \psi_3 \left| \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right| \psi_3 \right\rangle \\ &= \varepsilon_a + \varepsilon_b + C_{ab} - J_{ab} \end{aligned} \quad (۱۰.۲)$$

C_{ab} انتگرال کولنی و J_{ab} انتگرال تبادلی نام دارند که به صورت‌های زیر تعریف می‌شوند:

$$C_{ab} = e^2 \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \frac{|\varphi_a(\mathbf{r}_1)|^2 |\varphi_b(\mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (۱۱.۲)$$

$$J_{ab} = e^2 \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \frac{\varphi_a^*(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_b^*(\mathbf{r}_2)\varphi_a(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (۱۲.۲)$$

با توجه به عبارت فوق به وضوح می‌توان منشأ کولنی، انتگرال تبادلی را دید. به همین ترتیب انرژی حالت یگانه به فرم زیر حاصل می‌گردد:

$$\varepsilon_s = \varepsilon_a + \varepsilon_b + C_{ab} + J_{ab} \quad (۱۳.۲)$$

جزئیات محاسبات این بخش در پیوست (الف) آمده است. نهایتاً شکافتگی بین حالت‌های یگانه و سه‌گانه با رابطه‌ی زیر داده می‌شود.

$$\varepsilon_t - \varepsilon_s = -2J_{ab} \quad (۱۴.۲)$$

در اینجا لازم است به این مسئله توجه شود که، همان طور که می بینیم برای محاسبه ی انرژی سیستم، مراحل زیادی طی شد و این تنها در حالی است که با یک سیستم ساده و دو ذره ای روبرو بودیم. حال اگر تعداد ذرات سیستم را افزایش دهیم، طبیعتاً محاسبات پیچیده تر خواهند شد. اینجاست که بحث هامیلتونی های مؤثر مطرح می شود و ما می توانیم به جای کار کردن با هامیلتونی های مانند رابطه ی ۳.۲ با هامیلتونی مؤثر کار کنیم. هامیلتونی مؤثر هایزنبرگ به فرم زیر بیان می شود:

$$\mathcal{H}_{eff.} = \frac{\varepsilon_t + \varepsilon_s}{2} \mathcal{E} - 2J_{ab} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (۱۵.۲)$$

که $\mathcal{E}$ ماتریس واحد 4×4 است. اگر ویژه مقادیر این هامیلتونی را به دست آوریم، دقیقاً به رابطه ی ۱۴.۲ خواهیم رسید. با توجه به اینکه:

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \frac{1}{2} (S^2 - S_1^2 - S_2^2) = \frac{1}{2} (S(S+1) - S_1(S_1+1) - S_2(S_2+1)) \quad (۱۶.۲)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} S=0, \text{ حالت یگانه} & \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = -\frac{3}{4} \\ S=1, \text{ حالت سه گانه} & \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \frac{1}{4} \end{array} \right.$$

ویژه مقادیر انرژی هامیلتونی هایزنبرگ به فرم زیر به دست می آیند:

$$\varepsilon_t = \frac{\varepsilon_t + \varepsilon_s}{2} - 2J_{ab} \left(\frac{1}{4} \right) \quad (۱۷.۲)$$

$$\varepsilon_s = \frac{\varepsilon_t + \varepsilon_s}{2} - 2J_{ab} \left(-\frac{3}{4} \right) \quad (۱۸.۲)$$

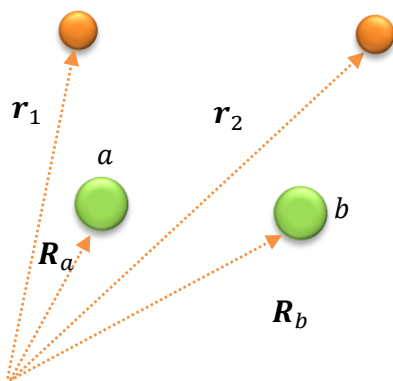
$$\varepsilon_t - \varepsilon_s = -J_{ab} \left(\frac{1}{2} \right) - J_{ab} \left(\frac{3}{2} \right) = -2J_{ab} \quad (۱۹.۲)$$

با توجه به رابطه ی فوق دیده می شود که اختلاف انرژی بین حالت های سه گانه و یگانه در هر دو هامیلتونی یکسان است. به این ترتیب می توان به راحتی با هامیلتونی مؤثر به جای هامیلتونی اصلی کار کرد.

هامیلتونی های مؤثر به طور کامل در قسمت ۴.۲ مورد بحث قرار خواهند گرفت [۲۶].

۲.۱.۲.۳.۲ اوربیتال‌های غیرمتعامد

مولکول هیدروژن را با پیکربندی‌ای که در شکل ۱۰.۲ آورده شده است در نظر می‌گیریم.

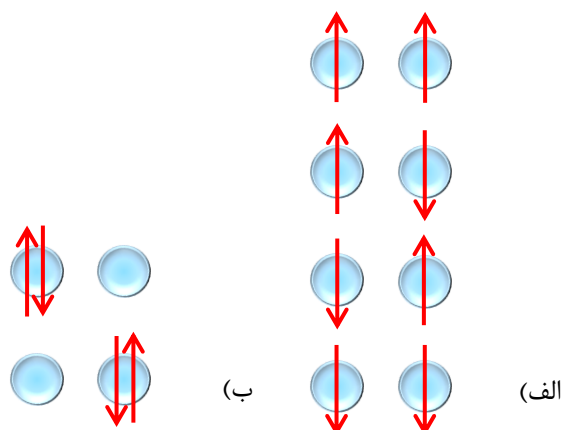


شکل ۱۰.۲: موقعیت الکترون‌ها و هسته‌ها در مولکول هیدروژن. هسته‌های a, b در فواصل R_a, R_b از مبدأ قرار گرفته‌اند و الکترون‌های هر کدام از هسته‌ها در فاصله‌های r_1, r_2 هستند.

هامیلتونی زیر توصیف کننده‌ی سیستم است:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{at}(r_1 - R_a) + \mathcal{H}_{at}(r_2 - R_b) - \frac{e^2}{|r_1 - R_b|} - \frac{e^2}{|r_2 - R_a|} + \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} + \frac{e^2}{|R_a - R_b|} \quad (۲۰.۲)$$

جملات اول و دوم هامیلتونی‌های تک اتمی؛ جملات سوم و چهارم، برهم‌کنش الکترون با هسته‌ی اتم دیگر؛ جمله پنجم، برهم‌کنش الکترون-الکترون و جمله‌ی پایانی برهم‌کنش هسته‌ها با همدیگر می‌باشند. از جمله‌ی پایانی به علت ناچیز بودن صرف‌نظر می‌کنیم. حالت‌های پایه سیستم به صورت طرح‌وار در شکل



شکل ۱۱.۲: حالت‌های پایه‌ی سیستم، (الف) چهارپیکربندی خنثی، (ب) دو پیکربندی یونیزه شده.

۱۱.۲ نمایش داده شده‌اند.

با در نظر گرفتن ساده‌سازی $\varphi_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_a) = \varphi_a(\mathbf{r})$ ، انتگرال همپوشانی را به فرم زیر می‌توان نوشت:

$$\int \varphi_a^*(\mathbf{r}) \varphi_b(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = l \quad (۲۱.۲)$$

چهار حالت خنثی با استفاده از دترمینان اسلیتر به دست می‌آیند. (توابع موج را همانند قسمت قبل با توجه به اینکه یک سیستم فرمیونی داریم که در نهایت باید پادمتقارن باشد، می‌نویسیم.)

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{2\sqrt{1+l^2}} \{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\} \{\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2)\}$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{2\sqrt{1-l^2}} \{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\} \{\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2)\}$$

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(1-l^2)}} \{|\uparrow\uparrow\rangle\} \{\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2)\}$$

$$|\psi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(1-l^2)}} \{|\downarrow\downarrow\rangle\} \{\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2)\} \quad (۲۲.۲)$$

همانند گذشته انرژی حالت‌های سه‌گانه و یگانه را به دست می‌آوریم:

$$\varepsilon_t = \langle \psi_3 | \mathcal{H} | \psi_3 \rangle = 2\varepsilon_{at} + \frac{C_{ab} - I_{ab}}{1-l^2} \quad (۲۳.۲)$$

$$\varepsilon_s = \langle \psi_3 | \mathcal{H} | \psi_3 \rangle = 2\varepsilon_{at} + \frac{C_{ab} + I_{ab}}{1-l^2} \quad (۲۴.۲)$$

به طوری که C_{ab}, I_{ab} به فرم زیر تعریف می‌شوند:

$$C_{ab} = e^2 \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \frac{|\varphi_a(\mathbf{r}_1)|^2 |\varphi_b(\mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - \int d\mathbf{r}_1 \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_b|} |\varphi_a(\mathbf{r}_1)|^2 \\ - \int d\mathbf{r}_2 \frac{e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_a|} |\varphi_b(\mathbf{r}_2)|^2 \quad (۲۵.۲)$$

$$I_{ab} = e^2 \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \frac{\varphi_a^*(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_b^*(\mathbf{r}_2)\varphi_a(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - l \int d\mathbf{r}_1 \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_b|} \varphi_a^*(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_1)$$

$$-l \int dr_2 \frac{e^2}{|r_2 - R_a|} \varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \varphi_a(\mathbf{r}_2) \quad (26.2)$$

در نهایت شکافتگی حالت‌های یگانه و سه‌گانه به فرم زیر به دست می‌آید:

$$\varepsilon_t - \varepsilon_s = 2 \frac{l^2 c_{ab} - I_{ab}}{1 - l^4} = J_{dir}. \quad (27.2)$$

جزئیات محاسبات در پیوست (ب) آمده است.

اما همان‌طور که قبل اشاره کردیم، در حالتی که همپوشانی بین اوربیتال‌های اتمی را داریم، الکترون‌ها از هسته‌ها به قدر کافی دور هستند، اما به یکدیگر خیلی نزدیک‌اند و به همین خاطر برهم‌کنش الکترون-الکترون خیلی قوی است. در این شرایط بزرگ یا کوچک بودن فاصله‌ی بین اتم‌ها مهم می‌شود. اما در حالتی که همپوشانی بین اوربیتال‌ها را نداشته باشیم، این مسئله تأثیرگذار نخواهد بود.

شرایطی را در نظر می‌گیریم که هسته‌ها در فاصله‌ی نزدیکی از هم قرار گرفته باشند. در این شرایط ممکن است که دو الکترون در اوربیتال اتم a و یا هر دو در اوربیتال اتم b قرار بگیرند. دو پیکربندی یونیزه شکل ۱۱.۲ نشان دهنده‌ی این حالت‌هاست. برای نوشتن توابع موج باید دقت داشت، به علت اینکه قسمت فضایی تابع موج متقارن است (دو الکترون در یک اوربیتال قرار گرفته‌اند)، قسمت اسپینی تابع موج باید پادمتقارن باشد، تا تابع موج کل سیستم فرمیونی، پادمتقارن شود. به این ترتیب توابع موج در حالتی که دو الکترون در اوربیتال اتم a و یا b قرار بگیرند به فرم زیر نوشته می‌شوند:

$$|\psi_a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\} \varphi_a(\mathbf{r}_1) \varphi_a(\mathbf{r}_2) \quad (28.2)$$

$$|\psi_b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\} \varphi_b(\mathbf{r}_1) \varphi_b(\mathbf{r}_2) \quad (29.2)$$

که ترکیبی از این دو، تابع موج‌های سیستم در حالت‌های یونیزه (شکل ۱۱.۲) را می‌دهند.

$$|\psi_5\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_a\rangle + |\psi_b\rangle) \quad (30.3)$$

$$|\psi_6\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_a\rangle - |\psi_b\rangle) \quad (31.2)$$

گذاشتن دو الکترون در یک اوربیتال انرژی زیادی را صرف می کند که به آن برهم کنش کولنی On site می گویند و با رابطه ی زیر داده می شود:

$$U = \left\langle \psi_a \left| \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \right| \psi_a \right\rangle = \int dr_1 \int dr_2 |\varphi_a(\mathbf{r}_1)|^2 \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} |\varphi_a(\mathbf{r}_2)|^2 \quad (32.2)$$

و با توجه به اینکه پرش الکترون بین حالت های اوربیتالی مختلف با رابطه ی زیر توصیف می شود:

$$t = \int dr \varphi_{at}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_a) \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_b|} \varphi_{at}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_b) \quad (33.2)$$

می توان به محاسبه ی انرژی های حالت های یگانه و سه گانه پرداخت و شکافتگی آن ها را به دست آورد.

$$\varepsilon_t - \varepsilon_s \approx \frac{4t^2}{U} = J_{kin} \quad (34.2)$$

که به این جمله، انتگرال جنبشی می گویند. به این ترتیب انرژی تبادل در حالتی که اوربیتال های اتمی غیرمتعامد باشند، تنها با استفاده از رابطه ای که برای J_{dir} به دست آوردیم، رابطه ی ۲۷.۲، حاصل نمی شود، بلکه جمله ی تبادل جنبشی نیز به آن باید افزوده شود. بنابراین انرژی تبادل از رابطه ی زیر به دست خواهد آمد [۲۶]:

$$J_{12} \sim J_{dir} + J_{kin} \quad (35.2)$$

به این ترتیب هامیلتونی مؤثر را می توان به صورت زیر نوشت:

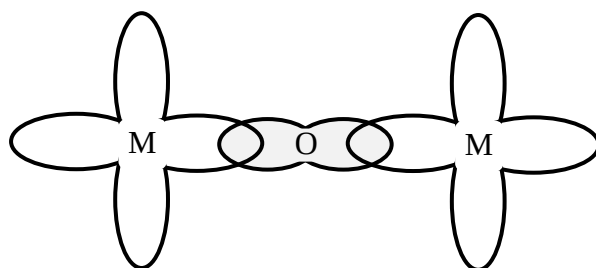
$$\mathcal{H}_{eff.} = \frac{\varepsilon_t + \varepsilon_s}{2} \mathcal{E} + J_{12} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (36.2)$$

همان طور که در قبل هم اشاره شد، $\mathcal{E}$ ماتریس واحد 4×4 می باشد.

۲.۲.۳.۲ تبادل غیرمستقیم

۱.۲.۲.۳.۲ جامدات یونی؛ ابرتبادلی^۹

بعضی از جامدات یونی شامل بعضی از اکسیدها مثل MnO و فلورایدیایی همچون MnF_2 ، حالت پایه‌ی مغناطیسی دارند. اما همان‌طور که در شکل ۱۲.۲ می‌بینیم، همپوشانی مستقیمی بین الکترون‌های یون-های Mn^{3+} وجود ندارد. می‌دانیم که برهم‌کنش تبادلی مستقیم، کوتاه‌برد است؛ در نتیجه باید برهم‌کنش بلندبردی در این حالت وجود داشته باشد که به میزان کافی قوی باشد. مکانیزم تبادلی در این حالت را اُبرتبادلی می‌نامند و به این صورت تعریف می‌شود: برهم‌کنش تبادلی غیرمستقیم، بین دو یون مغناطیسی که همسایه‌ی هم نیستند و بین آن‌ها یک یون غیرمغناطیسی وجود دارد.



شکل ۱۲.۲: نمایش برهم‌کنش اُبرتبادلی در اکسید منگنز.

انتگرال تبادلی در این حالت شامل دو بخش خواهد بود: جمله‌ی تبادلی پتانسیل، که نشان‌دهنده‌ی دافعه‌ی الکترون‌هاست و تمایل به حالت پایه‌ی فرومغناطیس دارد. البته زمانی که یون‌ها به قدر کافی جدا از هم باشند، این جمله کوچک است. جمله‌ی دوم تبادل جنبشی است ($J \sim -\frac{t^2}{U}$) که بستگی به درجه‌ی همپوشانی بین اوربیتال‌ها دارد. بنابراین اُبرتبادلی قویاً به زاویه‌ی پیوند $M-O-M$ بستگی دارد [۲۴].

۲.۲.۲.۳.۲ فلزات؛ RKKY

^۹ Superexchange

در فلزات، برهم‌کنش تبدالی بین یون‌های مغناطیسی با واسطه‌ی الکترون‌های رسانشی ایجاد می‌شود. از آنجا که بین گشتاورهای مغناطیسی، جفت‌شدگی مستقیم وجود ندارد، تبادل غیرمستقیم است. این تبادل با نام $RKKY^{10}$ و یا تبادل سیار^{۱۱} شناخته می‌شود [۲۴].

$$J_{RKKY}(r) \propto \frac{\cos(2k_F r)}{r^3} \quad (37.2)$$

۳.۲.۳.۲ تبادل دوگانه

در بعضی از اکسیدها، یون مغناطیسی توانایی به اشتراک گذاشتن چند ظرفیت خود را داراست و بر همین اساس برهم‌کنش تبدالی فرومغناطیس دارند. مثالی از این تبادل، در منگنیت‌ها^{۱۲} $La_{1-x}Sr_xMnO_3$ دیده می‌شود. کسر x از یون‌های Mn^{4+} و کسر $1-x$ از آن‌ها Mn^{3+} هستند [۲۴].

۴.۲ هامیلتونی‌های مؤثر

همان‌طور که در ابتدای فصل اشاره کردیم، زمانی که با یک سیستم همبسته‌ی قوی سروکار داریم، نمی‌توان از برهم‌کنش الکترون-الکترون موجود در سیستم صرف‌نظر کرد. به همین علت حل هامیلتونی کار پیچیده‌ای خواهد بود. اما در قسمت ۱.۱.۲.۳.۲ دیدیم که می‌توان به جای بررسی هامیلتونی اصلی مسأله، از هامیلتونی مؤثر استفاده کرد.

مدل هابارد^{۱۳} ساده‌ترین هامیلتونی مؤثر بس‌ذره‌ای است که برای توصیف سیستم‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرد. این مدل زمانی که تلاش زیادی جهت فهم مغناطش فلزات گذار می‌شد، توسط گاتزویلر^{۱۴}،

^{۱۰} Ruderman, Kittle, Kasuya, Yosida

^{۱۱} Itinerant Exchange

^{۱۲} Manganite

^{۱۳} Hubbard Model

^{۱۴} Gutzwiller

هابارد^{۱۵} و کنموری^{۱۶} معرفی شد. بسته به اینکه در هر سلول واحد^{۱۷} سیستم مورد بررسی، چند اوربیتال اتمی درگیر باشند، مدل هابارد نام گذاری می شود. بر همین اساس مدل های هابارد چهار- نواری، سه- نواری، دو- نواری و تک نواری مطرح می شوند. به عنوان مثال در بررسی کوپرایت ها که در هر سلول واحد یک اوربیتال $d_{x^2-y^2}$ مس و دو اوربیتال p اکسیژن وجود دارد، مدل سه نواری^{۱۸} مطرح می شود [۲۷]. اما رایج ترین فرم مدل هابارد، تک نواری است که به فرم زیر نوشته می شود:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle j,l \rangle} \sum_{\sigma} (C_{j\sigma}^{\dagger} C_{l\sigma} + C_{l\sigma}^{\dagger} C_{j\sigma}) + U \sum_j \hat{n}_{j\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow} \quad (38.2)$$

که $C_{l\sigma}^{\dagger}$ عملگر خلق (فنا) یک الکترون در حالت و نیر $\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ $\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)$ با اسپین σ است و z (l) مکان شبکه می باشد. $\hat{n}_{j\sigma} = C_{j\sigma}^{\dagger} C_{j\sigma}$ عملگر عدد اشغال است. همچنین t انرژی جنبشی و U انرژی دافعه ی کولنی بین دو الکترون که در یک مکان قرار می گیرند، می باشند. دافعه ی کولنی بین الکترون هایی که در یک اوربیتال قرار می گیرند، با جمله ی برهم کنشی زیر توصیف می - شود.

$$\mathcal{H}_U = U \sum_j \hat{n}_{j\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow} \quad \& \quad U = \int dr_1 \int dr_2 \left| \phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_j) \right|^2 \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \left| \phi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_j) \right|^2 \quad (39.2)$$

جمع روی نزدیک ترین همسایه ها $\langle j, l \rangle$ ، انرژی جنبشی (پرش^{۱۹}) الکترون ها را توصیف می کند:

$$\mathcal{H}_{band} = -t \sum_{\langle j,l \rangle} \sum_{\sigma} (C_{j\sigma}^{\dagger} C_{l\sigma} + C_{l\sigma}^{\dagger} C_{j\sigma}) \quad (40.2)$$

$\mathcal{H}_{band}$ شامل رویدادهایی است که در آن الکترون از یک مکان شبکه، به مکان دیگر پرش انجام می دهد.

^{۱۵} Hubbard

^{۱۶} Kanamori

^{۱۷} Unit Cell

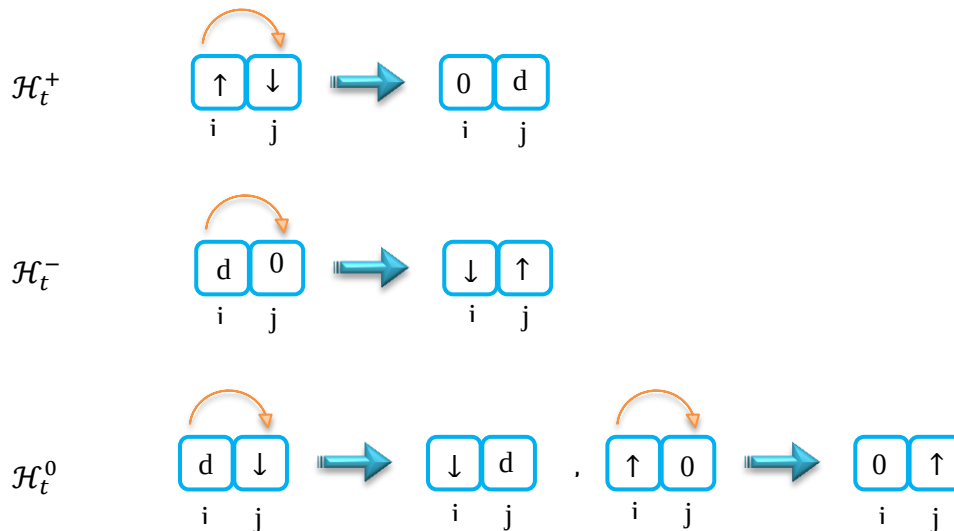
^{۱۸} Three Band Model

^{۱۹} Hopping

رویدادهای پرش را می‌توان دسته‌بندی کرد. اما قبل از آن ابتدا با پایه‌های موضعی^{۲۰} مدل هابارد آشنا می‌شویم. مدل هابارد یک مدل چهار حالتی است، هر مکان شبکه در یکی از حالت‌های پایه‌ی موضعی زیر یافت می‌شوند:

$ 0\rangle_j$	مکان j خالی از الکترون است.	
$ \uparrow\rangle_j = C_{j\uparrow}^\dagger 0\rangle_j$	مکان j با یک الکترون با اسپین $\uparrow$ اشغال شده است.	$\uparrow$
$ \downarrow\rangle_j = C_{j\downarrow}^\dagger 0\rangle_j$	مکان j با یک الکترون با اسپین $\downarrow$ اشغال شده است.	$\downarrow$
$ d\rangle_j = C_{j\uparrow}^\dagger C_{j\downarrow}^\dagger 0\rangle_j$	مکان j دوگانه اشغال شده است.	$\uparrow\downarrow \equiv d$

رویدادهای پرش به سه دسته‌ی زیر تقسیم‌بندی می‌شوند:



به این ترتیب هامیلتونی مؤثر هابارد را به فرم زیر می‌توان نوشت:

$$\mathcal{H}_{eff} = \mathcal{H}_t^+ + \mathcal{H}_t^- + \mathcal{H}_t^0 + \mathcal{H}_U \quad (41.2)$$

با استفاده از عملگرهای هابارد، که توضیح و روابط آن‌ها در این بحث نمی‌گنجد و از آوردن در این مبحث خودداری می‌کنیم، نهایتاً می‌توان هامیلتونی هابارد را به فرم زیر نیز داشت:

$$\mathcal{H}_{eff} = \mathcal{H}_t^0 + \mathcal{H}_U + \frac{1}{U} [\mathcal{H}_t^+, \mathcal{H}_t^-] \quad (42.2)$$

در شرایطی که $\frac{U}{t} \gg 1$ برقرار باشد، انرژی خیلی زیادی باید صرف شود تا دو الکترون بتوانند در یک اوربیتال قرار بگیرند. در این موقعیت احتمال وجود مکان‌هایی با اشغال دوگانه‌ی الکترون ناچیز و قابل صرف‌نظر کردن است. پس جمله‌ی $\mathcal{H}_U$ و یکی از حالت‌های $\mathcal{H}_t^0$ که مربوط به اشغال دوگانه هستند، حذف می‌شوند. در این شرایط هامیلتونی هابارد به هامیلتونی $t - J$ تبدیل می‌شود.

$$\mathcal{H}_{tJ} = -t \sum_{\langle j,l \rangle} \sum_{\sigma} ((1 - \hat{n}_{j-\sigma}) C_{j\sigma}^{\dagger} C_{l\sigma} (1 - \hat{n}_{l-\sigma}) + H.C.) + J \sum_{\langle j,l \rangle} (\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_l - \frac{\hat{n}_j \hat{n}_l}{4}) \quad (43.2)$$

که $J = \frac{4t^2}{U}$ تبادلی جنبشی است و H.C. معرف مزدوج هرمیتی^{۲۱} عبارت قبل است. اگر علاوه بر شرط فوق، شرط نیمه‌پر بودن نوارها^{۲۲} نیز بر سیستم اعمال شود، جمله‌ی $\mathcal{H}_t^0$ به طور کامل حذف می‌شود و هامیلتونی به مدل هایزنبرگ^{۲۳} تبدیل می‌شود:

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle j,l \rangle} \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_l \quad (44.2)$$

که نحوه‌ی رسیدن به هامیلتونی هایزنبرگ را به طریق دیگری در قسمت ۱.۱.۲.۳.۲ مطالعه کردیم [۲۶].

۵.۲ عایق مات

تا مدت‌ها، حالت‌های مختلف ماده شامل رسانا، نیم‌رسانا و عایق با نظریه‌ی نواری توصیف می‌شد. در این نظریه دو فرض بنیادین وجود دارد: الکترون‌ها غیربرهم‌کنشی هستند و جامد به شکل یک بلور است. اما با

^{۲۱} Hermitian Conjugate

^{۲۲} Half-Filled Band

^{۲۳} Heisenberg Model

کارهای مات^{۲۴} در ۱۹۴۹ و اندرسون^{۲۵} در سال ۱۹۵۸ دیدگاه‌های جدیدی در فیزیک ماده چگال گشوده شد و دور از واقعیت بودن آن دو فرض بنیادی نظریه‌ی نواری، اثبات شد. رفتار عایق بودن برخی از مواد کاملاً متفاوت با نظریه‌ی نواری است. در موادی که ما امروزه به عنوان عایق مات می‌شناسیم، رفتار عایق بودن به علت همبستگی‌های الکترون‌ها و در عایق‌های اندرسون، بی‌نظمی شبکه است [۲۸]. زمانی که اساس عایق‌بودن، همبسته بودن الکترون‌ها است، حتی ممکن است اوربیتال‌های اتمی نیمه‌پر باشند و بنابر نظریه‌ی نواری بایستی ماده رسانا باشد، اما دافعه‌ی شدید کولنی بین الکترون‌ها مانع می‌شود که دو الکترون در یک اوربیتال بنشینند. به بیانی دیگر انرژی زیادی باید صرف شود تا دو الکترون بتوانند در یک اوربیتال قرار بگیرند و به همین دلیل ماده رفتار عایق بودن را از خود نشان می‌دهد.

بر اساس کمترین انرژی برانگیختگی^{۲۶} الکترون، عایق‌هایی را که اساس آن‌ها همبستگی الکترون‌هاست، در دو دسته جای می‌گیرند: عایق‌های مات و عایق‌های انتقال بار^{۲۷}. در یک عایق مات، کمترین انرژی برانگیختگی بین دو زیرنوار هابارد^{۲۸} است و در عایق انتقال بار کمترین انرژی برانگیختگی بین نوارهای 2p و زیرنوار بالایی هابارد است. این موضوع به وضوح در شکل‌های ۱۳.۲ و ۱۴.۲ دیده می‌شود [۲۶].

البته باید دقت داشت که علت عایق بودن هر دو نوع عایق‌ها (مات و انتقال بار)، همبسته بودن الکترون‌هاست. بنابراین در یک دید گسترده هر دو، عایق مات هستند. اما زمانی که بخواهیم جزئیات مسئله را مورد بررسی قرار دهیم، جهت جلوگیری از سردرگمی بهتر است که به تفاوت‌های آن‌ها توجه داشت.

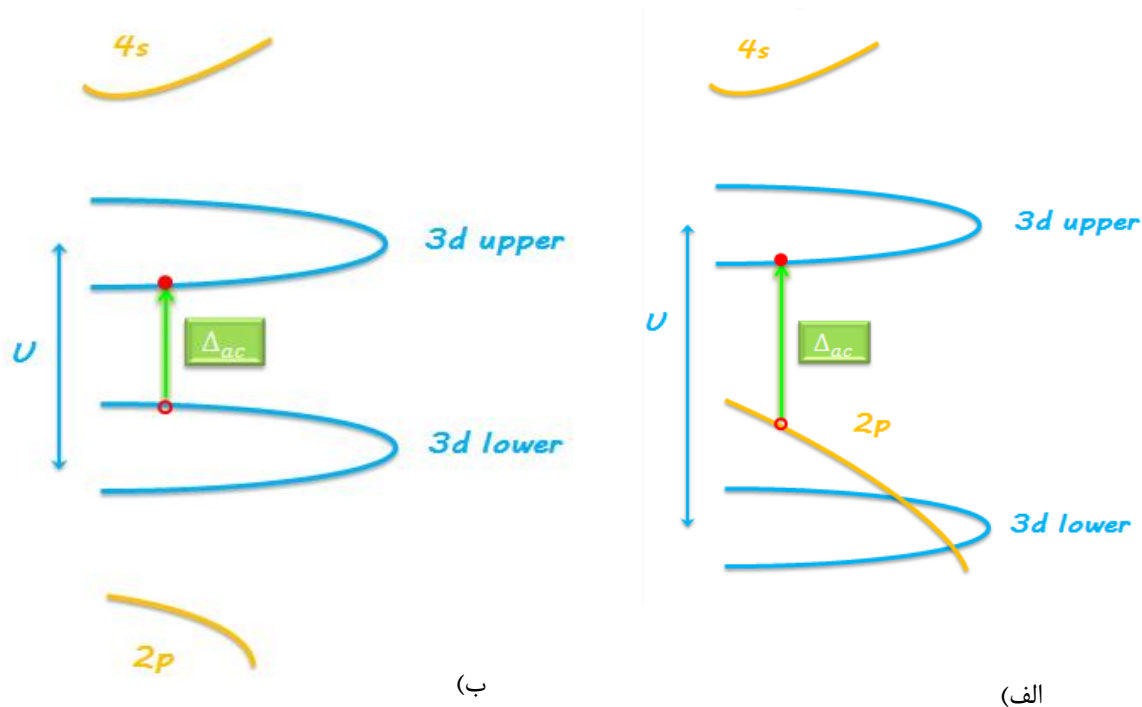
^{۲۴} Mott

^{۲۵} Anderson

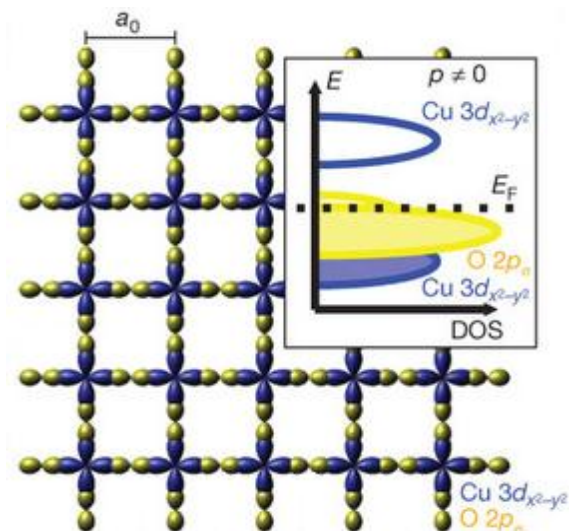
^{۲۶} Excitation Energy

^{۲۷} Charge Transfer Insulators

^{۲۸} Hubbard Subband



شکل ۱۳.۲: الف) عایق انتقال بار، کمترین انرژی برانگیختگی بین نوار 2p و زیرنوار بالایی هابارد است. مانند Δ_{ac} . V_2O_3 ب) عایق مات، کمترین انرژی برانگیختگی بین زیرنوار پایینی و بالایی هابارد است. مانند Δ_{ac} . La_2CuO_4 انرژی فعال‌سازی است که در هر دو قسمت نشان داده شده است.



شکل ۱۴.۲: نمایی از صفحه‌ی CuO_2 در La_2CuO_4 به عنوان یک عایق انتقال بار. به وضوح زیرنوارهای بالایی و پایینی هابارد در شکل مشخص شده‌اند. همان‌طور که می‌بینیم کمترین انرژی برانگیختگی بین نوار 2p و زیرنوار بالایی هابارد است [۲۹].

فصل سوم

ابرسیانهای دامی بالا

۱.۳ مقدمه

بعد از گذشت ۲۵ سال از کشف ابرساناهای دمای بالا، همچنان ماهیت ترکیبات اکسید مس با آلایش حفره، موضوعی بحث برانگیز است و فیزیکدانان به دنبال یافتن نظریه‌ی مناسبی برای توصیف این دسته از مواد هستند. به دست آوردن نظریه‌ای مناسب برای توصیف ابرساناهای دمای بالا، مستلزم داشتن شناخت کافی از ویژگی‌های ماده در ناحیه‌ی قبل از ابرسانایی (حالت بهنجار) است، که این مسئله نیز همچنان در دست بررسی است. زمانی که فیزیک حالت بهنجار مشخص شود، فیزیک حالت ابرسانایی دمای بالا نیز شناخته خواهد شد و این‌ها همه پیش درآمدی است برای رسیدن به ابرسانایی دمای اتاق.

ابرسانایی در دمای اتاق تا مدت‌ها پیش، رویایی بیش نبود. ذخیره‌ی انرژی در حجم کم، دستیابی به میدان‌های مغناطیسی فوق‌العاده بزرگ، ساخت کامپیوترهای کوچک و سریع از جمله مواردی بود که می‌توانست با رسیدن به ابرسانایی در دمای اتاق، به واقعیت تبدیل شود. این آرزو در فیزیکدانان وجود داشت، تا اینکه با کشف ابرساناهایی که دمای بحرانی آن‌ها بیش از ابرساناهای متعارف بود، در سال ۱۹۸۶ توسط بدنورز و مولر^۱ [30]، و بالارفتن مداوم دمای بحرانی ابرساناها طی آزمایش‌های گوناگون، رویای وجود ابرسانایی در دمای اتاق را تبدیل به موضوعی قابل دسترس کرد. هر چند که هنوز به چنین ابرسانایی دست نیافته‌اند، اما تلاش‌ها برای رسیدن به ابرساناهایی که در دمای اتاق باشند، همچنان رو به فزونی است.

در این فصل برآنیم که با فیزیک ابرساناهای دمای بالا آشنا شویم، به همین منظور ابتدا نگاهی تاریخی به سیر کشف ابرسانایی خواهیم داشت. در ادامه با موادی که قابلیت ابرساناهای دمای بالا شدن را دارند، آشنا شده و در نهایت به سراغ کوپرایت‌ها به عنوان ابرساناهای دمای بالا رفته و آن‌ها را مورد مطالعه قرار خواهیم داد.

^۱ Bednorz and Muller

۲.۳ تاریخچه

هیچ‌گاه کسی فکر نمی‌کرد اتفاقی که در خلال چُرت‌زدن یکی از کاردان‌های ماهر آزمایشگاه اونس روی داد، بتواند بیش از یک قرن جزو مسائل اساسی مورد بررسی فیزیکدانان شود. این قضیه به سال ۱۸۸۳ میلادی که مسابقه‌ای برای مایع کردن هلیوم آغاز شد، برمی‌گردد. کارمرلینگ اونس^۲ کسی بود که توانست در سال ۱۹۰۸ جایزه‌ی مایع کردن هلیوم را از آن خود کند. به دنبال آن به همراه همکاران خود، با اطلاع از نظریه‌های رسانش فلزی به سراغ مطالعه‌ی وابستگی دمایی مقاومت ویژه فلزات خالص Pt, Au در دماهای پایین پرداختند. حتی در نزدیک صفر مطلق نیز، این فلزات مقاومت باقی‌مانده‌ای داشتند که قویاً به میزان ناخالصی آن‌ها بستگی داشت. اونس آزمایش‌ها را روی جیوه‌ی جامدی که از تقطیر مکرر در خلأ به دست آورده بود، ادامه داد. تا اینکه در سال ۱۹۱۱ زمانی که پژوهشگران به دنبال علت واقعی صفر شدن مقاومت جیوه بودند، با چُرت‌زدن آزمایشگر، دما از نقطه‌ی جوش هلیوم مایع به حدود 4.2 K افزایش یافت و دمای گذار جیوه پشت سر گذاشته شد و جیوه مقاومت از دست رفته‌اش را بار دیگر به دست آورد و به این ترتیب پدیده‌ی ابررسانایی کشف شد [۳۱].

مایع کردن هلیوم، کشف ابررسانایی، کشف چگالی جریان بحرانی [۳۲]، کشف میدان بحرانی [۳۳] و کشف جریان‌های ماندگار [۳۴] در ابررساناها توسط اونس، بیشترین سهم در پیشبرد علم فیزیک دمای پایین و ابررسانایی را متعلق به وی کرد. به این ترتیب به جرأت می‌توان اونس را پدر فیزیک دمای پایین و ابررسانایی نامید [۳۵].

تحقیق و پژوهش در زمینه‌ی پیدا کردن نظریه‌ای که بتواند ابررسانایی را توصیف کند ادامه داشت، تا اینکه در سال ۱۹۵۷ باردین، کوپر و شرایفر^۳، نظریه‌ی میکروسکوپیکی BCS را مطرح کردند [۳۶].

^۲ Kamerlingh Onnes
^۳ Bardeen, Cooper and Schrieffer

موفقیت‌های نظریه به شدت چشمگیر بود تا جایی که دیوید شوئنبرگ^۴ در کنفرانس ابررسانایی که در سال ۱۹۵۹ در کمبریج برگزار شد درباره‌ی این نظریه جمله‌ای گفت که از همان زمان، شهرت بسیاری یافت: «بگذارید ببینیم تجربه تا چه حد می‌تواند واقعیات نظری را توضیح دهد.» به این ترتیب وضعیت بغرنجی برای فیزیکدانان تجربی بوجود آمده بود. اگر نتایج کارشان مخالف نظریه بود، دیگران فکر می‌کردند که اشتباهی در آزمایش‌های آن‌ها وجود دارد و اگر نتایج آن‌ها موافق با نظریه بود، به هر حال چیز جدیدی را بیان نمی‌کردند، چون سعی در تأیید نظریه‌ای داشتند که خود به صورت یک واقعیت نظری تلقی می‌شد [۳۵]. اما در سال ۱۹۸۶ در موسسه‌ی تحقیقاتی IBM، بدنورز و مولر با کشف ابررساناهای دمای بالا، باعث تحولی شگرف در تاریخ ابررسانایی شدند [۳۰]. نظریه‌ی BCS قادر به توصیف آن نیست و همچنان فیزیکدانان نظری در تلاش برای به دست آوردن نظریه‌ای جهت توصیف ابررساناهای دمای بالا هستند. کشف ابررساناهای دمای بالا نه تنها به علت دمای گذار بالای آن‌ها، بلکه به خاطر اینکه این مواد در حالت عادی خود رساناهای خیلی ضعیفی هستند، بسیار قابل اهمیت بود [۳۷].

نتایج تحقیقات مؤید این مطلب است که رسیدن به ابررسانایی در دمای اتاق، پدیده‌ی دور از انتظاری نیست و با ادامه دادن پژوهش‌ها در این زمینه، ان شاءالله خواهیم توانست شاهد انقلاب بزرگی در صنعت، در زمان خود باشیم [۳۵].

۳.۳ مواد ابررسانا

مکانیزم ابررسانایی در ترکیبات مختلف، متفاوت است. بر این اساس سه نوع مکانیزم ابررسانایی داریم [۳۸]:

- ۱- فلزات و آلیاژهای آن‌ها. (ابررساناهای متعارف^۵)
- ۲- ترکیبات غیرمغناطیسی – ابعاد پایین. (ابررساناهای نیمه‌متعارف یا نیمه‌غیرمتعارف^۶)

^۴ David Shoenberg
^۵ Conventional Superconductors

۳- ترکیبات مغناطیسی – ابعاد پایین. (ابررساناهای غیرمتعارف^۷)

۱.۳.۳ گروه اول: فلزات و آلیاژهای آنها

موادی که در این دسته قرار می‌گیرند، به خوبی با نظریه‌ی BCS توصیف می‌شوند. دمای گذار آنها کمتر از ۱۰ K است. این دسته از ابررساناها به دلیل دما و میدان بحرانی پایین از نظر کاربردی مناسب نیستند. ... As, Ba, Bi, Ce, Cs, Li, Ti, ... جزو موادی هستند که در این دسته جای می‌گیرند. در برخی از موارد خود ماده ابررسانا نیست (Bi)، یا ابررسانا هست اما دمای گذار پایینی دارد (Ti) که با تحت فشار قرار دادن یا در حالت لایه نازک یا تحت تابش، تبدیل به ابررسانا می‌شوند و یا افزایش در دمای گذار آنها را شاهد خواهیم بود [۳۸].

H ?	S	s-d										s-p						He
Li 20 50 GPa	Be 0.026	Elements T _d [K] applied pressure										B 11 250 GPa	C 4 5 GPa	N 5	O 6 120 GPa	F 7	Ne	
Na	Mg											Al 1.19	Si 8.5 12 GPa	P 6 17 GPa	S 17 160 GPa	Cl	Ar	
K	Ca 15 150 GPa	Sc 0.3 21 GPa	Ti 0.4	V 5.3	Cr	Mn	Fe 2 21 GPa	Co	Ni	Cu	Zn 0.9	Ga 1.1	Ge 5.4 11.5 GPa	As 2.7 24 GPa	Se 7 13 GPa	Br 1.4 150 GPa	Kr	
Rb	Sr 4 50 GPa	Y 2.8 15 GPa	Zr 0.6	Nb 9.2	Mo 0.92	Tc 7.8	Ru 0.5	Rh 0.003	Pd	Ag	Cd 0.55	In 3.4	Sn 3.72	Sb 3.6 8.5 GPa	Te 7.4 35 GPa	I 1.2 25 GPa	Xe	
Cs 1.5 5 GPa	Ba 5 15 GPa	La 5.9	Hf 0.13	Ta 4.4	W 0.01	Re 1.7	Os 0.65	Ir 0.14	Pt	Au	Hg 4.15	Tl 2.39	Pb 7.2	Bi 8.5 9 GPa	Po	At	Rn	
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt										



s-f		Ce 1.7 5 GPa	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu 1.1 10 GPa
		Th 1.4	Pa 1.4	U 0.2	Np 0.075	Pu	Am 0.8	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

شکل ۱.۳: جدول تناوبی عناصر که نشان‌دهنده‌ی عناصر ابررسانا به همراه دمای گذار آنهاست؛ در صورتی که تحت فشار ابررسانا شده باشند، فشار آن نیز مشخص شده است [۳۹].

۲.۳.۳ گروه دوم: ترکیبات غیرمغناطیسی – ابعاد پایین

^۶ Half-Unconventional Or Half-Conventional Superconductors

^۷ Unconventional Superconductors

این گروه از مواد با دو زیرسیستم ابررسانای برهم‌کنش کننده، مشخص می‌شوند. یکی از زیرسیستم‌ها با بُعد کم و در دسته‌ی ابررساناهای غیرمتعارف قرار دارد؛ زیرسیستم دیگر سه بُعدی است و ابررسانایی در آن از زیرسیستم اول القا می‌شود و از نوع BCS است. به این گروه از ابررساناها، ابررساناهای نیمه‌متعارف یا نیمه‌غیرمتعارف می‌گویند. دمای گذار ابررسانایی آن‌ها تا 40 K است و میدان مغناطیسی بحرانی آن‌ها بالاست. به همین خاطر از نظر کاربردی مناسب هستند. ترکیباتی که در این گروه جای می‌گیرند را در جدول ۱.۳ دسته‌بندی کرده‌ایم [۳۸].

جدول ۱.۳ : دسته‌های مختلف ابررساناهای گروه دوم. به عنوان نمونه در هر دسته، یک ترکیب آن به همراه دمای گذار گزارش شده است [۳۸].

نام دسته	ترکیب	دمای گذار (کلوین)
ابررساناهای A- ۱۵	Nb_3Ge	۲۳/۲
اکسیدهای فلزی	$Ba_{1-x}K_xBiO_3$	۱۳/۷
-	MgB_2	۳۹
ترکیبات دوتایی - نیترایدها	NbN	۱۷/۳
ترکیبات دوتایی - کرباید	MoC	۱۴/۳
ترکیبات دوتایی - فازهای Laves	ZrV_2	۹/۶
نیمه رساناها	$GeTe$	۰/۱

۳.۳.۳ گروه سوم: ترکیبات مغناطیسی - ابعاد پایین

ترکیباتی که در این گروه جای می‌گیرند، همگی دارای همبستگی‌های قوی مغناطیسی هستند. در این گروه از ابررساناها که ابررساناهای غیرمتعارف نام دارند، افت‌وخیزهای اسپینی باعث ایجاد فازهای همدوس بلندبرد می‌شوند. در تعداد زیادی از ابررساناهایی که در این دسته جای می‌گیرند، همبستگی‌های

مغناطیسی تمایل به نظم پادفرومغناطیس دارند. در مقابل ابررساناهای پادفرومغناطیس، ابررساناهای فرومغناطیس دمای بحرانی پایین‌تری دارند. ترکیبات زیادی از این گروه برای کاربردهای عملی مورد استفاده قرار می‌گیرند. انواع مختلفی از ترکیبات در این گروه قرار دارند، که در زیر چند مورد از آن‌ها را توضیح خواهیم داد [۳۸].

❖ فازهای شورل^۸: کلاس جدیدی از سولفید مولیبدیم سه‌تایی با فرم شیمیایی عمومی $M_xMo_6S_8$ که به جای M، تعداد زیادی از فلزات و گازهای نجیب (نزدیک ۴۰ تا) با $x = 1$ یا 2 می‌توانند قرار بگیرند. بالاترین دمای گذار این دسته مربوط به $PbMo_6S_8$ با ۱۵ K می‌باشد.

❖ کوپرایت‌ها^۹: ترکیباتی که دارای صفحات CuO_2 باشند، در خانواده‌ی اکسیدهای مس (کوپرایت‌ها) جای می‌گیرند. ابررسانایی که در این خانواده هستند، ابررساناهای دمای بالا نامیده می‌شوند. در قسمت ۴.۳ به طور کامل به بررسی این ترکیبات خواهیم پرداخت. بالاترین دمای گذاری که برای این دسته گزارش شده مربوط به $HgBa_2Ca_2Cu_3O_{8+\delta}$ در فشارهای بالا است که ۱۶۴ K است [۲۷].

❖ ترکیبات آلی انتقال بار^{۱۰}: ترکیبات آلی و پلیمرها معمولاً عایق هستند، اما امروزه بعضی از آن‌ها به عنوان رساناهای خوب شناخته شده‌اند. همه‌ی ابررساناهای آلی ساختار لایه‌ای دارند. ابررساناهای این دسته، شباهت‌های فراوانی با کوپرایت‌ها دارند از جمله همبستگی‌های مغناطیسی، شبکه‌ی ناپایدار، به شدت ناهمسانگرد بودن ویژگی‌های آن‌ها و موارد بسیار دیگری که باعث شده است تا مورد توجه زیادی قرار بگیرند.

^۸ Chevrel Phases
^۹ Cuprates
^{۱۰} Charge Transfer Organic

❖ فولرایدها^{۱۱}، ترکیبات معینی از گرافیت، پلیمرها، نانولوله‌های کربنی و DNA، سیستم‌های فرمیون سنگین، بوروکربایدهای نیکل^{۱۲} و ... ترکیبات دیگری هستند که در این گروه از ابررساناها قرار می‌گیرند.

۴.۳ کوپرایت‌ها

در حال حاضر بیش از ۱۵۰ ترکیب ابررسانا، با دمای گذار (T_c) بالاتر از ۲۳ K (ابررساناهای متعارف) وجود دارد. از این میان تنها کوپرایت‌ها به عنوان ابررساناهای دمای بالا شناخته می‌شوند. به علت اینکه دمای گذار آن‌ها بالاتر از دمای نقطه‌ی جوش نیتروژن مایع (۷۷/۴ K) است؛ و بسیاری از آن‌ها دمای گذار بالاتر از ۱۰۰ K دارند^{۱۳} [۳۸،۲۷]. در جدول ۳.۳ بیشترین دمای گذار ترکیبات متفاوتی از ابررساناهای کوپرایت که در آرایش بهینه و فشار متعارف است، را می‌بینیم.

کوپرایت‌ها ساختاری لایه‌ای دارند. لایه‌های CuO_2 که ابررسانایی در این صفحات اتفاق می‌افتد، معمولاً با لایه‌هایی از Ba, O, Y, Ba, La, ... از هم جدا شده‌اند که این لایه‌ها عایق هستند و منابع بار برای صفحات CuO_2 به حساب می‌آیند. هر چه تعداد صفحات CuO_2 بیشتر باشد، دمای گذار ابررسانایی نیز بیشتر می‌شود. معمولاً تعداد این صفحات، کمتر از ۴ است، اما در فشارهای بالا ممکن است که ترکیباتی با تعداد بیشتری صفحه‌ی CuO_2 سنتز شوند و به همین ترتیب دمای گذار آن‌ها نیز بالاتر رود [۲۷]. ساختار بلوری کوپرایت‌ها به شدت ناهمسانگرد است و همین علت، باعث شده است تا خصوصیات متفاوتی نسبت به ابررساناهای متعارف نشان دهند. این ناهمسانگردی در ویژگی‌های ابررساناهای کوپرایت نیز به خوبی دیده می‌شود. (جدول ۲.۳) [۳۸].

^{۱۱} Fullerides

^{۱۲} Nickel Borocarbides

^{۱۳} قابل ذکر است ترکیب $\text{C}_{60}/\text{CHBr}_3$ که توسط شاون (Schon) و همکارانش ثبت شده است، دمای گذار ۱۱۷ K دارد [۴۰].

جدول ۳.۳: ویژگی‌های ناهمسانگرد انواع مختلف کوپرایت‌ها [۳۸].

<i>Compound</i>	T_c (K)	ξ_{ab} (Å)	ξ_c (Å)	λ_{ab} (Å)	λ_c (Å)	H_{c2}^{ab} (T)	H_{c2}^c (T)
NCCO	24	58	3.5	1200	260 000	10	-
LSCO	38	33	2.5	2000	20 000	62	15
YBCO	93	15	2	1450	6000	120	40
Bi2212	95	20	1	1800	7000	100	30
Bi2223	110	15	1	2000	10 000	250	30
Tl1224	128	14	1	1500	—	160	-
Hg1223	135	13	2	1770	30 000	190	-

جدول ۳.۳: دسته‌های حاضر برای ابررساناهای کوپرایت [۴۱].

Superconducting compounds	$T_c^{\max}$ (K)
<i>LMCO-type compounds</i>	
$\text{La}_{2-x}\text{M}_x\text{CuO}_4$ (LMCO) $\text{M} = \text{Ba, Sr, Ca}$	39
$\text{La}_2\text{CuO}_{4+y}$	45
$\text{Ca}_{2-x}\text{Na}_x\text{CuO}_2\text{Cl}_2$	26
$\text{R}_{2-x}\text{M}_x\text{CuO}_4$ (RMCO) (electronically doped cuprates)	24
$\text{R} = \text{Pr, Nd, Sm, Eu, M} = \text{Ce, Th, Ce+Sr}$	
$\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ (ladder compound)	12
– superconducting under high pressure at $x = 13.6$	
<i>YBCO-type compounds</i>	
$\text{RBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ ($x > 0.4$) (R-123) $\text{R} = \text{Y, La, Ca, RE}$; $\text{RE} = \text{Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu}$	93
$\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ (Y-124)	80
$\text{YBa}_2\text{Cu}_{3.5}\text{O}_{8-y}$ (Y-247)	87
$\text{Pb}_2\text{Sr}_2\text{ACu}_3\text{O}_{8+y}$, $\text{A} = \text{R + Sr, R + Ca}$	80
$\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CaCu}_2\text{O}_8$	60
$\text{RuSr}_2\text{GdCu}_2\text{O}_{8-\delta}$ (Ru-1212) (superconducting ferromagnet)	46
<i>Bi-, Tl-, Hg-type compounds</i>	
$\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+4+\delta}$ Bi-22($n-1$) n^a ($n = 1-3$)	
$\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_{6+\delta}$	10
$\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10+\delta}$	110
$\text{Tl}_m\text{Ba}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+m+2+\delta}$ Tl- $m2(n-1)n^a$ ($m = 1, 2; n = 1-4$)	
$\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_{6+\delta}$	93
$\text{Tl}_1\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{9+\delta}$	133
$\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10+\delta}$	125
$\text{HgBa}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+2+\delta}$ Hg-12($n-1$) n^a ($n = 1-5$)	
$\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$	98
$\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$	135
$\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$ (under pressure of 30 GPa)	164

^aThe sequential numbers represent the composition ratio of the cations

ترکیب مادر کوپرایت‌ها عایق مات است و با آلایش شدن توسط حاملان بار تبدیل به ابررسانا می‌شود. با آلایش شدن، شبکه به شدت ناپایدار می‌شود و همین ناپایداری دلیل ابررسانا شدن ماده خواهد بود [۳۸]. که در قسمت‌های ۳.۴.۳ و ۴.۴.۳ با رویدادهایی که در حین آلایش شدن برای ماده اتفاق می‌افتد، آشنا خواهیم شد.

۱.۴.۳ دیاگرام فازی

اشاره کردیم که چندین نوع ترکیب ابررسانای دمای بالا داریم که همگی آن‌ها ساختاری لایه‌ای دارند و از یک یا چند صفحه‌ی مس-اکسیژن تشکیل شده‌اند. تمامی آن‌ها دیاگرام فازی مشابه آنچه که در شکل ۲.۳ می‌بینیم، را از خود بروز می‌دهند [۴۲]. پیش‌تر مطرح شد که کوپرایت‌ها با آلایش کردن، تبدیل به ابررسانا می‌شوند. آلایش هم با الکترون و هم با حفره امکان پذیر است و در دو حالت شاهد فاز ابررسانایی خواهیم بود. در شکل ۲.۳ دیاگرام فازی در هر دو حالت آلایش با حفره و الکترون، به ازای دو ترکیب از کوپرایت‌ها دیده می‌شود.

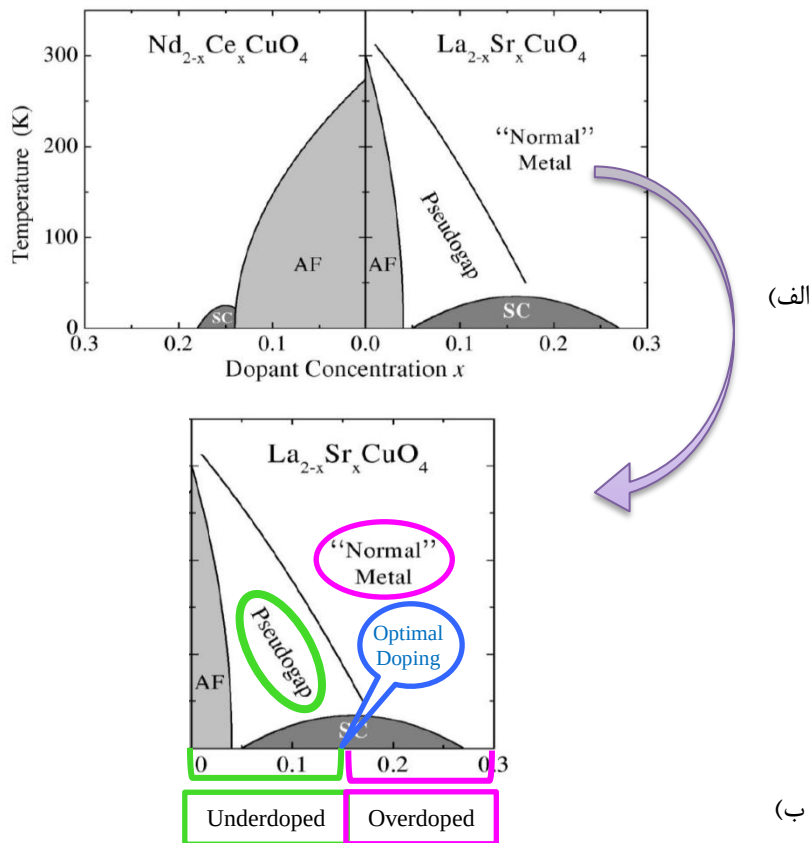
تفاوت‌هایی که در آلایش کردن با حفره و الکترون دیده می‌شود را می‌توان به شرح زیر بیان کرد:

- ❖ ناحیه‌ی عایق پادفرومغناطیس در حالتی که با الکترون آلایش شود، در گستره‌ی وسیع‌تری از آلایش ($x = 0 - 0.14$) نسبت به زمانی که با حفره آلایش شود ($x = 0 - 0.02$) دیده می‌شود. جایگزیدگی حاملان بار در آلایش با الکترون بیشتر از آلایش با حفره است [۴۲].
- ❖ ناحیه‌ی شبه‌گپ^{۱۴} (که در ادامه به توضیح آن خواهیم پرداخت) در آلایش با الکترون دیده نمی‌شود.

- ❖ ابررسانایی دمای بالا در آلایش با حفره در گستره‌ی آلایشی $x = 0.05 - 0.25$ دیده می‌شود که به مراتب از آلایش با الکترون بیشتر است. همچنین دمای گذار ابررسانایی نیز بیشتر از حالتی

^{۱۴} Pseudogap

است که با الکترون آلیش کنیم. [۳۸،۴۲]



شکل ۲.۳: دیاگرام فازي ابررساناهای دمای بالا. الف) با آلیش حفره (سمت راست) و آلیش الکترون (سمت چپ) [۴۳]. ب) دیاگرام فازي برای آلیش با حفره شامل فازهای عایق پادفرومغناطیس، شبه‌گپ، ابررسانایی و فلز عادی که به ترتیب در نواحی آلیش‌های پایین و بهینه و آلیش‌های بالا دیده می‌شوند.

با توجه به موارد ذکر شده، به خصوص مورد آخر، فیزیکدانان بیشتر به مطالعه‌ی سیستم‌هایی که با حفره آلیش می‌شوند، می‌پردازند. در ادامه‌ی بحث، ما نیز روی چنین سیستم‌هایی متمرکز شده و به توصیف آن‌ها خواهیم پرداخت. در دیاگرام فازي آلیش با حفره شکل ۲.۳. ب با ۳ ناحیه مواجه هستیم:

$$\leftarrow \text{ناحیه‌ی آلیش‌های پایین } x < x_{\text{optimal}}$$

در دماهای بالاتر از T_c ماده رفتار فلزی از خود نشان می‌دهد اما در عین حال سیستم با گاف انرژی مواجه است، که در شرایط عادی چنین گافی نباید وجود داشته باشد. این ناحیه شبه‌گپ نام دارد. ویژگی‌های غیرعادی زیادی در این ناحیه‌ی آلیشی دیده می‌شود که تاکنون در هیچ فلزی

دیده نشده بود [۴۲]. در این ناحیه به طور همزمان سه فاز ابررسانایی، شبه‌گپ و پادفرومغناطیس در آلایش بحرانی $x = 0.05$ وجود دارد. همین امر سبب شده است که این ناحیه به شدت مورد توجه فیزیکدانان قرار بگیرد [۴۴].

مطالعات بسیاری در ناحیه‌ی آلایش‌های پایین صورت گرفته است، اما همچنان یکی از موضوعات بحث برانگیز فیزیک ماده چگال به حساب می‌آید و نظریه‌ی واحدی برای توصیف آن به دست نیامده است [۴۲، ۴۵، ۴۶].

◀ $x = x_{Optimal}$ آلایش بهینه

در این آلایش، دمای گذار ابررسانایی بیشترین مقدار خود را داراست.

◀ $x > x_{Optimal}$ ناحیه‌ی آلایش‌های بالا

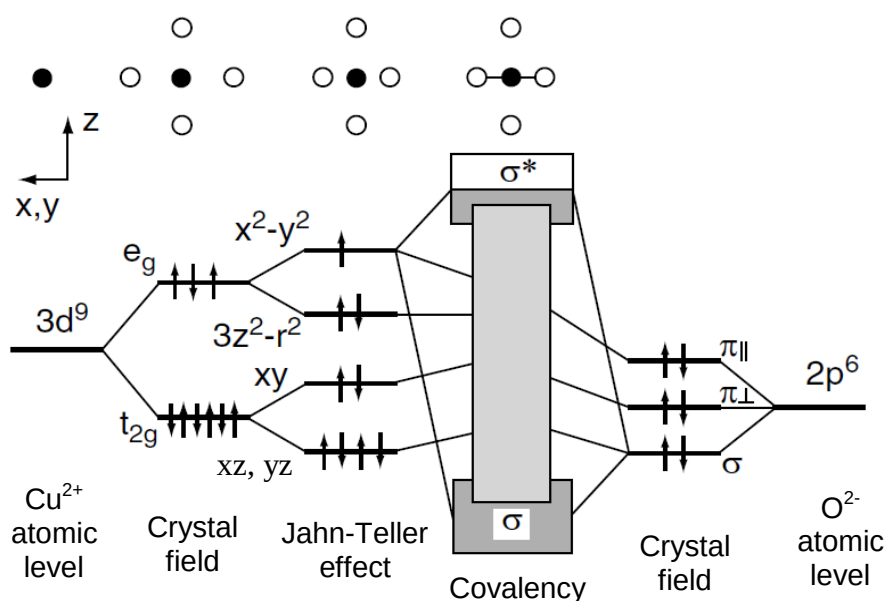
در دماهای بیش از T_c ، ماده به عنوان فلز عادی شناخته می‌شود، اما ویژگی‌های آن غیرعادی است. به عنوان مثال ضریب هال وابستگی دمایی دارد [۴۷]. این ناحیه‌ی غیرعادی که در آلایش-های بیشتر از آلایش بهینه است، فلز شگرف^{۱۵} نام دارد. اطلاعات بسیار کمی از این ناحیه‌ی آلایشی موجود است [۴۲].

۲.۴.۳ ساختار الکترونی

جهت بررسی در این قسمت، ترکیب La_2CuO_4 را در نظر می‌گیریم. نظم پادفرومغناطیس سیستم نتیجه‌ی دافعه‌ی کولنی قوی بین الکترون‌هایی است که در یک اوربیتال $3d_{x^2-y^2}$ می‌باشد [۴۸] و بر هم-کنش مغناطیسی مؤثر با مکانیزم اَبَر‌تبادلی که در بخش ۱.۲.۲.۳.۲ مطالعه کردیم، مشخص می‌شود [۴۹]. سلول واحد این ترکیب، از دو تتراگونال روی هم تشکیل شده است، که در کل بلور تکرار می‌شود. این ترکیب را به عنوان ساختار ۲۱۴ نیز می‌شناسند، به علت اینکه در ترکیب ۲ عدد لانتانیم، ۱ عدد مس و

^{۱۵} Strange Metal

۴ عدد اکسیژن وجود دارد. البته گاهی با توجه به سلول واحد نیز نام‌گذاری می‌کنند که در این صورت به عنوان ساختار ۴۲۸ معرفی می‌شود [۳۸]. در شکل ۳.۳ ساختار الکترونی صفحه‌ی CuO_2 را می‌بینیم. دو نوع شکافتگی که یکی به علت میدان بلوری و دیگری اثر یان-تیلر است را در ساختار الکترونیکی به خوبی می‌توان دید. (مباحث مربوط به شکافتگی‌های ایجاد شده به خاطر میدان بلوری و اثر یان-تیلر در فصل دوم بخش ۲.۲ آورده شده است).



شکل ۳.۳: ساختار الکترونی کوپرایت در صفحه‌ی CuO_2 [۲۷]. شکافتگی‌هایی که در ترازهای انرژی سیستم اتفاق می‌افتد، نشان داده شده است.

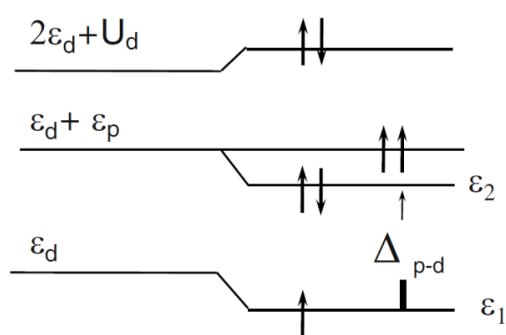
۳.۴.۳ فرآیند آلایش

به دنبال آلایش ماده با حفره بودیم، پس بایستی ترکیب را با ماده‌ای که الکترون ظرفیت آن از La کمتر است، آلایش کنیم. Sr در جدول تناوبی، در گروه قبل از La است و بنابراین یک الکترون ظرفیت از La کمتر دارد. زمانی که ماده را آلایش می‌کنیم، $(La_{2-x}Sr_xCuO_4)$ استرانسیوم که حال جای لانتانیم را گرفته است، بایستی سه پیوند برقرار کند، در حالی که دو الکترون ظرفیت دارد. بنابراین نیاز به یک الکترون ظرفیت دارد که آن را از اکسیژن‌های موجود در صفحه‌ی مس-اکسیژن می‌گیرد. به این ترتیب

تعداد الکترون‌هایی که در صفحه‌ی مس- اکسیژن هستند، کم می‌شوند [۴۲]. پس می‌توان گفت که در فرآیند آلاش، کسر کوچکی از الکترون‌های عایق پادفرومغناطیس حذف می‌شوند [۳۷]. به بیان دیگر، در نمایش حفره، تعداد حفره‌هایی که در صفحه هستند، افزایش می‌یابند.

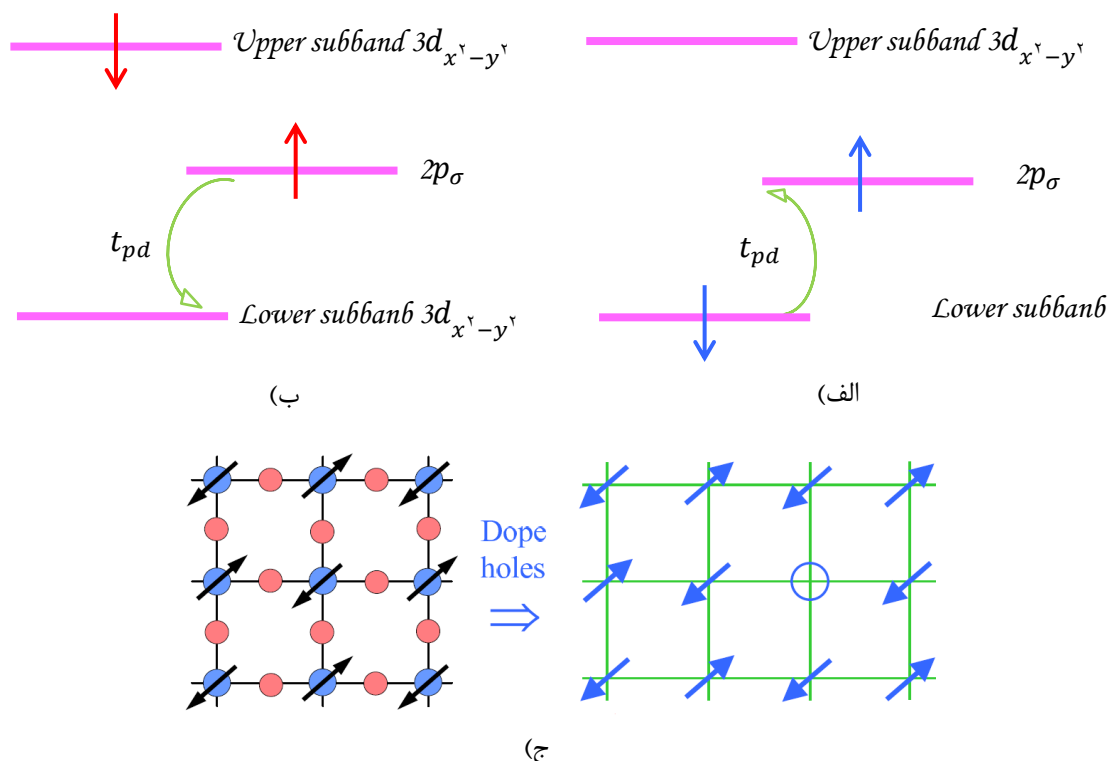
حفره‌ای که آلاش شده است، به علت تقارن انتقالی بین چهار یون اکسیژن که در اطراف مس هستند، نوسان می‌کند و اسپین آن با اسپین حفره‌ی مس به فرم یک حالت یگانه در می‌آید [۴۲]. این حالت یگانه به نام، یگانه‌ی ژنگ-رایس^{۱۶} شناخته می‌شود [۵۰]. اما علت اینکه چرا به فرم حالت یگانه در می‌آیند را می‌توان با توجه به شکل ۴.۳ فهمید.

ε_d انرژی لازم برای یک حفره‌ی در اوربیتال مس، $\varepsilon_p + \varepsilon_d$ انرژی لازم برای ایجاد دو حفره در اوربیتال‌های مس و اکسیژن و $2\varepsilon_d + U_d$ انرژی لازم برای اینکه دو حفره در اوربیتال مس قرار بگیرند، می‌باشند. سطح انرژی لازم برای قرارگیری دو حفره در اوربیتال اکسیژن بالاتر از همه قرار می‌گیرد که از نمایش دادن آن در شکل خودداری شده است. همان طور که می‌بینیم دو حفره در صورتی که در حالت یگانه، یکی در اوربیتال مس و دیگری در اوربیتال اکسیژن قرار بگیرند، کمترین انرژی را خواهند داشت؛ بنابراین سیستم این حالت را اختیار می‌کند.



شکل ۴.۳: ترازهای انرژی حفره برای حالت‌های مختلف قرارگیری حفره در سیستم. ε_d تراز انرژی حفره مس و ε_p تراز انرژی حفره اکسیژن [۲۷].

کمترین انرژی برای انتقال بار از اوربیتال p اکسیژن به d مس (در نمایش حفره)، t_{pd} است که برابر 2 eV می‌باشد. با به دست آوردن این انرژی، یگانه ژنگ-رایس شکافته می‌شود و یک مکان خالی در صفحه‌ی اکسیژن - مس مطابق شکل ۵.۳ ظاهر می‌شود [۴۲، ۵۱].

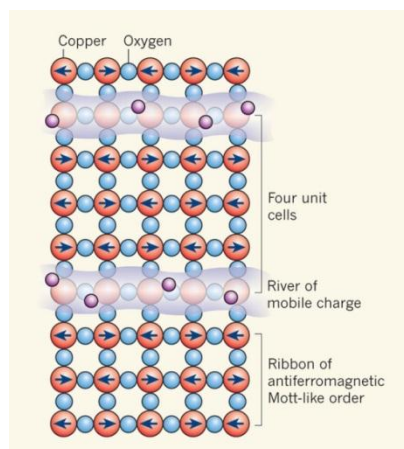


شکل ۵.۳: نمایی از موقعیت ترازهای انرژی در صفحه‌ی اکسیژن - مس. یگانه ژنگ-رایس در (الف) نمایش الکترون، (ب) نمایش حفره. (ج) نمایی از صفحه‌ی اکسیژن - مس. سمت چپ: دایره‌های کوچک (قرمز) نماینده‌ی اکسیژن‌ها و دایره‌های بزرگتر (آبی) یون‌های مس هستند که با یک الکترون در لایه‌ی ظرفیت خود مشخص شده‌اند؛ سمت راست: تنها اسپین تک الکترون مس نمایش داده شده است، به همراه مکان خالی الکترون یکی از مس‌ها که پس از آرایش و برانگیختگی بوجود می‌آید. [۴۲]

مسئله‌ی دیگری که در فرآیند آرایش حائز اهمیت می‌باشد، آرایش کپه‌ای^{۱۷} است. زمانی که یک نیمرسانا را آرایش می‌کنیم، توزیع بار کاملاً به صورت همگن است، اما در حالتی که یک عایق پادفرومغناطیس را آرایش می‌کنیم، توزیع بار به صورت همگن نیست. این مسئله موجب می‌شود که در یک بُعد، سالیتون‌ها، در دو بُعد، رودخانه‌هایی از بار و در سه بُعد صفحاتی از بار را داشته باشیم.

^{۱۷} Bulk

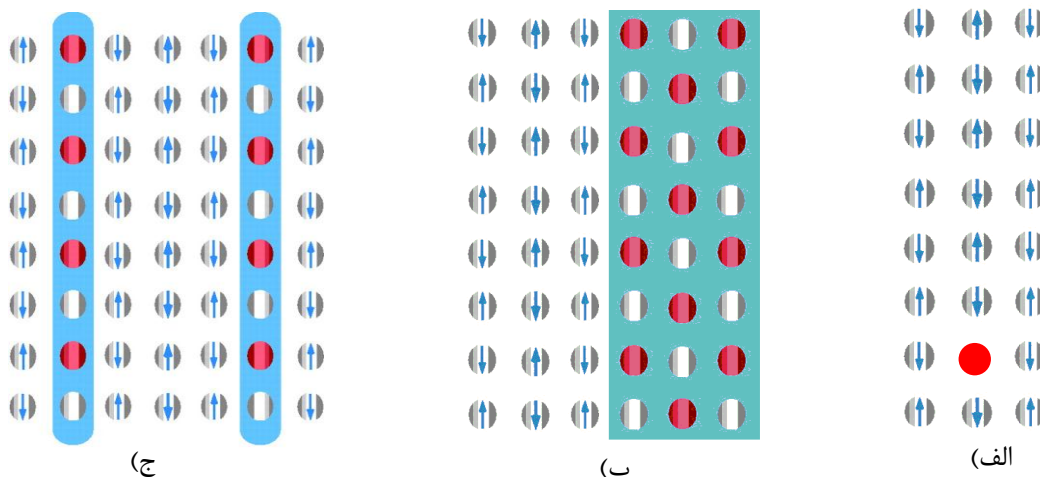
ابرسانا‌های آلی برای سالتون‌ها، کوپرایت‌ها و نیکلایت‌ها برای رودخانه‌های بار، شکل ۶.۳، و منگنایت‌ها برای صفحاتی از بار، به عنوان مثال‌هایی از این دست قرار می‌گیرند [۳۷].



شکل ۶.۳: نمایی از صفحه‌ی اکسیژن-مس در یک کوپرایت. توزیع ناهمگن بار که به صورت رودخانه‌هایی از بار در دو بُعد نمایان شده‌اند. [۵۲]

۴.۴.۳ فازهای نواری

در ابتدا که آلایش کردن آغاز می‌شود، همان‌طور که در شکل ۷.۳ الف دیده می‌شود، اگر حفره‌ها حرکت کنند، نظم پادفرومغناطیس سیستم دچار مشکل شده و سیستم درمانده می‌شود. به همین دلیل حفره‌ها

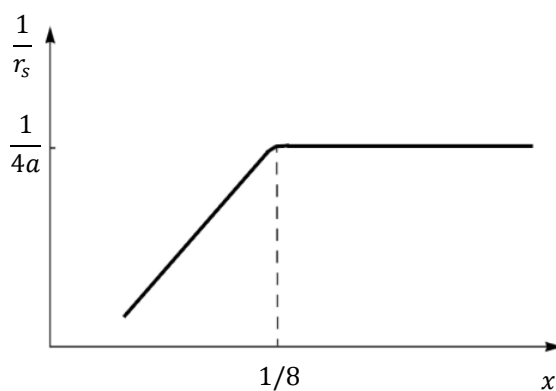


شکل ۷.۳: فرآیند آلایش حفره و اتفاق افتادن جدایی فاز در سیستم و تشکیل فازهای نواری که به ترتیب در قسمت الف) آلایش حفره، ب) جدایی فاز بار و اسپین و ج) تشکیل فازهای نواری بار و اسپین را مشاهده می‌کنیم. یکی در میان نشان دادن حفره‌ها در تصاویر به دلیل تأکید بر این مطلب است که نسبت حفره به مس، ۱ به ۲ است [۵۳].

بدون حرکت باقی می‌مانند، سیستم عایق خواهد ماند و نظم بلندبرد پادفرومغناطیس در سیستم باقی می‌ماند. این وضعیت تا $x = 0.02$ ادامه پیدا می‌کند [۴۵، ۵۱]. اما با افزایش بیشتر آلودگی، حفره‌ها توانایی حرکت پیدا کرده و سیستم برای رفع درماندگی، راه‌حل جدایی فاز را انتخاب می‌کند. به این ترتیب فاز بار و اسپین از هم جدا می‌شوند، شکل ۷.۳ ب. اما سیستم همچنان درگیر یک نوع رقابت دیگر نیز می‌باشد، که برهم‌کنش بلندبرد کولنی بین حفره‌های آلودگی شده و تبادل کوتاه‌برد پادفرومغناطیس است. برای اینکه سیستم بتواند بر این رقابت نیز غلبه کند، بهترین راه‌حل فازهای نواری است، که آن را برمی‌گزیند [۵۴]. شکل ۷.۳ ج. به این ترتیب در سیستم نظم نواری اتفاق می‌افتد و نوارهای بار و اسپین را خواهیم داشت [۴۵]. وجود فازهای نواری هم به صورت نظری [۴۵، ۵۶، ۵۵] و هم تجربی [۳۷، ۵۳، ۵۷، ۵۸] تأیید شده است.

وجود نوارهای اسپینی، مستلزم وجود نوارهای بار است؛ اما زمانی که نوارهای بار وجود دارند، الزامی بر وجود نوارهای اسپینی نیست [۴۵]. نوارهای اسپینی در دماهای بالا وجود ندارند، در حالی که نوارهای بار هم در دماهای بالا و هم پایین هستند. بنابراین با افزایش دما، حالتی را داریم که نوارهای اسپینی دیده نمی‌شوند و تنها نوارهای بار را داریم.

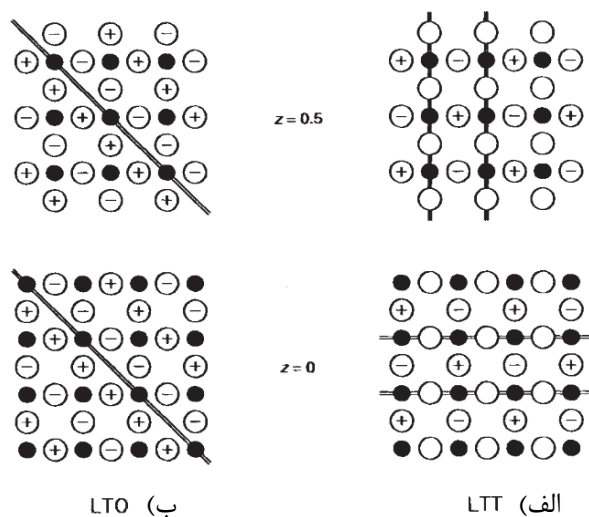
فاصله‌ی بین نوارهای بار هر صفحه‌ی اکسیدمس، به میزان آلودگی بستگی دارد. هر چه میزان آلودگی



شکل ۸.۳: نحوه‌ی تغییر فاصله‌ی دو نوار بار از هم با توجه به افزایش میزان آلودگی در سیستم. r_s فاصله‌ی نوارهای بار از همدیگر و x میزان آلودگی در سیستم است [۳۸].

سیستم بالاتر رود، فاصله‌ی بین نوارهای بار کاهش می‌یابد. این کاهش فاصله تا آرایش $x = 0.125$ ادامه پیدا می‌کند و فاصله‌ی بین نوارهای بار به $4a$ ، که a فاصله‌ی بین یون‌های مس مجاور است، می‌رسد. نمودار وابستگی این دو پارامتر به هم در شکل ۸.۳ نمایش داده شده است [۳۸].

مسئله‌ی دیگری که حائز اهمیت است، نحوه‌ی قرارگیری نوارها در هر صفحه و در صفحات مجاور است. نوارها در هر صفحه باید نسبت به همدیگر، در حالت موازی باشند تا انرژی سیستم کمینه شود [۳۸]. اما اینکه چه جهت‌گیری را در صفحه بر می‌گزینند، به میزان آرایش سیستم بستگی دارد. به علت اینکه سیستم با افزایش میزان آرایش دستخوش گذار فاز ساختاری می‌شود. تا $x < 0.05$ سیستم در ساختار اورتورومبیک است و چون در دماهای پایین هستیم به نام اورتورومبیک دمای پایین^{۱۸} شناخته می‌شود. در این ساختار با توجه به شکل ۹.۳ ب می‌بینیم که آرایش نوارها در راستاهای قطری است و در صفحات متوالی نسبت به هم موازی هستند. با گذر از آرایش بحرانی ($x = 0.05$)، سیستم دچار گذار فاز ساختاری شده و ساختار ماده تتراگونال می‌شود و در دماهای پایین تتراگونال دمای پایین^{۱۹} و در دماهای بالا،



شکل ۹.۳: ساختارهای (الف) تتراگونال و (ب) اورتورومبیک دمای پایین. شکل‌های بالایی و پایینی دو صفحه‌ی متوالی اکسیژن-مس را در سیستم نشان می‌دهد. دایره‌های پر (خالی) نشان‌دهنده‌ی یون‌های مس (اکسیژن) هستند. علامت-های + و - نشان‌دهنده‌ی خارج از صفحه بودن اکسیژن‌هاست [۵۳].

^{۱۸} Low Temperature Orthorhombic (LTO)

^{۱۹} Low Temperature Tetragonal (LTT)

تتراگونال دمای بالا^{۲۰} نامیده می‌شوند. زمانی که ماده ساختار تتراگونال را برمی‌گزیند، نوارهای بار چرخش ۴۵ درجه‌ای انجام داده و در راستاهای عمودی و یا افقی قرار می‌گیرند. مطابق شکل ۹.۳ الف دیده می‌شود که نوارها در هر صفحه نسبت به صفحه‌ی قبل خود ۹۰ درجه می‌چرخد [۵۹]. همچنین لازم به ذکر است که در ناحیه‌ی آرایش‌های خیلی پایین $0.02 < x < 0.05$ و در دماهای معمولی و بالا، حفره‌های آایشی شده حرکت دارند و رفتار فلزی از خود نشان می‌دهند. اما در دماهای پایین در همین ناحیه‌ی آایشی، حفره‌ها جایگزیده هستند و توانایی حرکت ندارند. به همین دلیل در این ناحیه‌ی آایشی در دماهای بالا، صحبت از دینامیک نوارهای بار و در دماهای پایین، صحبت از استاتیک نوارهای بار است [۶۰].

همان‌طور که می‌بینیم، در سیستم جدایی فازهای بار و اسپین را داریم. در این شرایط هامیلتونی سیستم را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_c + \mathcal{H}_s \quad (۱.۳)$$

یعنی در هامیلتونی سیستم سهم‌های مربوط به بار و اسپین به صورت جداگانه وارد می‌شوند. البته این در شرایطی است که از جفت‌شدگی‌هایی که بین زنجیره‌هاست، صرف نظر کرده باشیم. این فرض در صورتی که در دماهای بیشتر از T_c باشیم، کاملاً درست است. اما زمانی که در دماهای کمتر از دمای بحرانی برسیم، جفت‌شدگی‌های بین زنجیره‌ها حائز اهمیت می‌شود و دیگر نمی‌توان آن‌ها را نادیده گرفت. به این ترتیب جمله‌ای که شامل این جفت‌شدگی است، به هامیلتونی سیستم باید اضافه شود [۶۱].

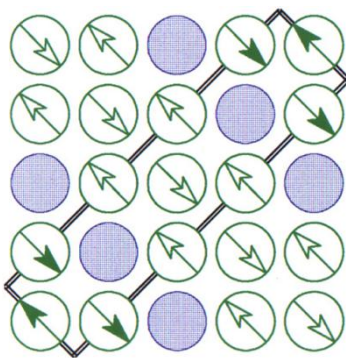
به هر ترتیب با توجه به بحث فوق، می‌توان هامیلتونی هر قسمت را به صورت جداگانه مورد مطالعه قرار داد و نهایتاً مجموع آن‌ها، هامیلتونی کل را به دست دهد. زمانی که ما می‌توانیم هامیلتونی سیستم را به صورت تفکیک بخش‌های اسپینی و بار بنویسیم، به این معناست که می‌توانیم تابع پارش هر قسمت را نیز جداگانه حساب کنیم و انرژی داخلی سیستم را نیز به صورت تفکیک بخش‌های بار و اسپین ببینیم. جدا

^{۲۰} High Temperature Tetragonal (HTT)

در نظر گرفتن سهم‌های مربوط به بار و اسپین در کار ژائو^{۲۱} و همکاران که به مطالعه‌ی وابستگی آلایش ویژگی‌های ترمودینامیکی در ابررساناهای کوپرایت پرداخته‌اند، به وضوح دیده می‌شود. این گروه، انرژی داخلی سیستم را به صورت زیر در نظر گرفتند:

$$U_{total}(T, \delta) = U_{charge}(T, \delta) + U_{spin}(T, \delta) \quad (۲.۳)$$

به این ترتیب در نمایش جدایی بار و اسپین، انرژی داخلی را به دو بخش تقسیم کردند [۶۲].
جدایی فازهای بار و اسپین و جداگانه در نظر گرفتن سهم مربوط به هر یک در مطالعه‌ی سیستم تنها در سیستم‌های ابررساناهای دمای بالا اتفاق نمی‌افتد. بلکه در ترکیبات اکسید فلزات گذار لایه‌ای مانند $La_{2-x}Sr_xNiO_4$ [۵۳, ۵۵, ۵۶] و $La_{2-x}Sr_xCoO_4$ [۶۳] نیز این پدیده کاملاً متداول هست. در این میان نیکلایت‌ها، پس از کشف احتمال وجود رابطه‌ای بین نوارهای بار و ابررسانایی دمای بالا در سیستم‌های کوپرایت که از نظر ساختاری مشابه نیکلایت‌ها بودند، مورد توجه ویژه‌ای قرار گرفتند [۵۳]. در نیکلایت‌ها نوارهای بار در دماهای پایین اتفاق می‌افتد و به عنوان کاندیدای مناسبی برای مطالعه‌ی رابطه‌ی بین نظم بار و ابررسانایی است. هرچند که در این سیستم‌ها آلایشی وجود ندارد که به ازای آن در ماده شاهد پدیده‌ی ابررسانایی باشیم و سیستم عایق است [۶۴]. نوارهای بار در نیکلایت‌ها به صورت قطری قرار می‌گیرند. شکل ۹.۳. همان‌طور که دیدیم در کوپرایت‌ها ابتدا نوارهای بار قطری هستند، اما با زیاد شدن آلایش در حالت‌های عمودی و یا افقی قرار می‌گرفتند اما چنین اتفاقی برای نیکلایت‌ها نمی‌افتد. تفاوت کلیدی که در کوپرایت‌ها مشاهده می‌شود، وجود یون مغناطیسی مس است که یک الکترون جفت نشده در 3d، با اسپین $\frac{1}{2}$ دارد که اساساً منجر به حرکت حاملان بار می‌شود [۵۱].



شکل ۱۰.۳: نظم نواری بار در نیکلایته‌ها. نوارهای بار در راستاهای قطری قرار می‌گیرند [۵۳].

به این ترتیب با این فصل، با ابررساناهای دمای بالا و سازوکار آن‌ها آشنا شدیم و کوپرایت‌ها را به عنوان ابررساناهای دمای بالا شناختیم. لازم به ذکر است که دسته‌ی جدیدی از ابررسانا با پایه‌ی آهن در سال ۲۰۰۶ کشف شده‌اند [۶۵] که رفتار آن‌ها بسیار شبیه کوپرایت‌هاست، به این معنا که لایه‌ای هستند؛ لایه‌هایی عایق و رسانا دارند و با آلودگی کردن ماده ابررسانا می‌شود و با افزایش فشار می‌توان دمای گذار آن‌ها را افزایش داد. اما تفاوتی که با کوپرایت‌ها دارند و آن‌ها را مورد توجه ویژه‌ای قرار داده است، این است که افزایش دمای گذار آن‌ها با فشار، بسیار بیشتر از کوپرایت‌هاست. به همین دلیل انتظار بر این است که این دسته از مواد، به دماهای گذاری بالاتر از کوپرایت‌ها، دست پیدا کنند [۶۶].

فصل چهارم

محاسبه‌ی تخلیعی برهم‌کنش الکتروستاتیکی

بین دو جسم میله‌ای شکل باردار

۱.۴ مقدمه

در فصل‌های پیشین با سیستم‌هایی که در آن‌ها شاهد اجسام باردار ناهمسانگرد هستیم، آشنا شدیم. پلی‌الکترولیت‌ها، به خصوص نوع میله‌ای شکل آن، که در دسته‌ی وسیعی از مطالعات بیوفیزیکی قرار می‌گیرند و نوارهای بار در صفحات CuO_2 که بسیاری از حوادث غیر معمول در سیستم، به علت به وجود آمدن این نوارهای بار است، نمونه‌هایی از اجسام باردار ناهمسانگرد در سیستم‌های مختلف بودند. به علت باردار بودن اجسام، برهم‌کنش‌های الکتروستاتیکی نقش مهمی را در این سیستم‌ها ایفا می‌کنند و به علت ناهمسانگرد بودن، پارامترهای بیشتری در محاسبات وارد می‌شود و دشواری حل مسئله را بالا می‌برد. در این فصل به دنبال به دست آوردن این برهم‌کنش‌ها در سیستم هستیم، اما نه با رهیافتی عددی و یا شبیه سازی و نه با دید مکانیک کوانتومی؛ بلکه به صورت کاملاً تحلیلی و کلاسیکی. شایان ذکر است که تاکنون هیچ حل تحلیلی برای برهم‌کنش‌های الکتروستاتیکی در چنین سیستم‌هایی وجود نداشته است. با داشتن فرم بسته‌ای برای برهم‌کنش الکتروستاتیکی می‌توان تابع پارش و از روی آن توابع پاسخ سیستم را به دست آورد.

این فصل را این طور پیش خواهیم برد که، ابتدا روش حل تحلیلی به دست آوردن برهم‌کنش الکتروستاتیکی برای سیستمی شامل دو میله‌ی باردار که در فضای سه بُعدی جهت‌گیری کرده‌اند، را به طور کامل شرح داده و فرم بسته‌ای برای انرژی برهم‌کنشی برحسب فاصله‌ی جدایی مراکز دو میله از هم و جهت‌گیری نسبی آن‌ها نسبت به همدیگر به دست می‌آوریم. سپس به بحث و بررسی و مشخص کردن نقاط کمینه و بیشینه‌ی انرژی برهم‌کنشی می‌پردازیم. پس از آن با داشتن فرم بسته‌ی انرژی برهم‌کنشی، ویژگی‌های ترمودینامیکی یک سیستم یک بُعدی از اجسام باردار میله‌ای شکل را مورد مطالعه قرار داده و ارتباط آن را با انرژی برهم‌کنشی بررسی می‌کنیم.

۲.۴ محاسبه‌ی تحلیلی انرژی برهم‌کنشی الکتروستاتیک

سیستمی شامل دو میله‌ی باردار در فضای سه بُعدی، با طول‌های $2l_2, 2l_1$ که مراکز آن‌ها در فاصله‌ی r نسبت به هم قرار گرفته‌اند، را در نظر می‌گیریم. انرژی برهم‌کنشی کولنی پوشش داده شده، از رابطه‌ی متعارف زیر به دست می‌آید:

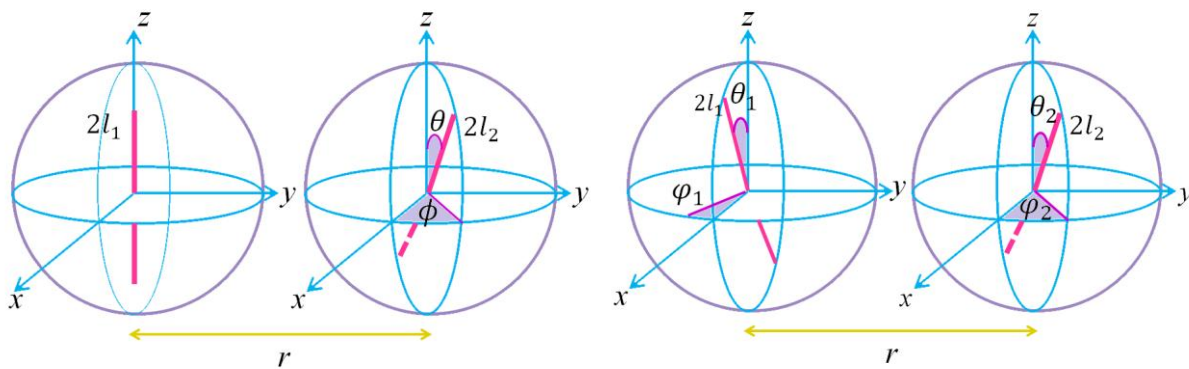
$$E_{int.} = \frac{\lambda_1 \lambda_2}{4\pi\epsilon} \int_{-l_1}^{l_1} \int_{-l_2}^{l_2} \frac{e^{-\kappa_D |r_2 - r_1|}}{|r_2 - r_1|} dl_1 dl_2 \quad (۱.۴)$$

که در آن λ_1, λ_2 چگالی‌های خطی بار روی میله‌ی اول (دوم) می‌باشد. ϵ ضریب دی‌الکتریک محیط و $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ بردار مکان المان بار روی میله‌ی اول (دوم) و $dq_1 = \lambda_1 dl_1$ و $dq_2 = \lambda_2 dl_2$ المان بار روی میله‌ی اول (دوم) است. آخرین پارامتر مورد استفاده κ_D ، که عکس طول پوششی دبای است و میزان افت پتانسیل را در محیط نشان می‌دهد. همان‌طور که در فصل یک نیز با آن آشنا شدیم، هر چه این پارامتر (κ_D) بزرگتر باشد، به معنای پوشش بیشتر پتانسیل الکتروستاتیکی است و هر میله تعداد همسایه‌های کمتری را می‌بیند. برای حل مسئله به سراغ دستگاه مختصات کروی^۱ رفته که در آن درجات آزادی چرخشی میله‌ها به ترتیب $\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2$ تعریف می‌شوند. (شکل ۱.۴.الف). برای ساده‌تر شدن محاسبات و بدون از دست دادن کلیت مسئله، محور z ها را در راستای یکی از میله‌ها در نظر می‌گیریم [۶۷] و با جهت‌گیری نسبی دو میله که به صورت زیر نوشته می‌شود [۶۷]، محاسبات را انجام خواهیم داد. (شکل ۱.۴.ب).

$$\phi = \varphi_2 - \varphi_1,$$

$$\theta = \cos^{-1}[\cos[\theta_1]\cos[\theta_2] - \sin[\theta_1]\sin[\theta_2]\cos[\phi]] \quad (۲.۴)$$

^۱ فیکسمن (Fixman) و اسکولنیک (Skolnick) با در نظر گرفتن دستگاه مختصات قطبی، پتانسیل کولنی پوششی در حالتی که طول میله‌ها خیلی بزرگتر از طول پوششی دبای باشد، را محاسبه کرده‌اند [۶۸].



شکل ۱.۴: نمایش جهت‌گیری دو میله با طول‌های $2l_1, 2l_2$ در فضا که در فاصله‌ی r نسبت به هم قرار دارند. الف) θ_1, θ_2 به ترتیب زاویه‌های قطبی میله‌های اول و دوم، ϕ_1, ϕ_2 زاویه‌های سمتی میله‌های اول و دوم می‌باشند. ب) θ, ϕ زاویه‌های سمتی و قطبی میله‌ی دوم نسبت به میله‌ی اول.

برای حل مسئله، با صرف‌نظر کردن از اثرات پوششی، یعنی در حد $\kappa_D \rightarrow 0$ به سیستم نگاه می‌کنیم. با در نظر گرفتن موارد فوق، رابطه‌ی انرژی برهم‌کنشی به صورت زیر حاصل می‌شود:

$$E_{int.} = \frac{q_1 q_2 r}{4 \pi \varepsilon (2l_1)(2l_2)} W, \quad (۳.۴)$$

$$W = \int_0^{\ell_1} \int_0^{\ell_2} \sum_{i=1,2; \alpha=\pm} \frac{dz_1 dz_2}{\sqrt{z_2^2 J^2 + (1 - (-1)^i z_2 H)^2 + (z_2 \cos[\theta] + \alpha(-1)^i z_1)^2}}. \quad (۴.۴)$$

که W بی‌بعد است و پارامترهای استفاده شده در آن به شرح زیر هستند:

$$H = \sin[\theta] \sin[\phi], \quad J = \sin[\theta] \cos[\phi], \quad \ell_{1(2)} = \frac{l_{1(2)}}{r}, \quad dz_{1(2)} = \frac{dq_{1(2)}}{r \lambda_{1(2)}}. \quad (۵.۴)$$

با جایگذاری پارامترهای معرفی شده در رابطه‌ی فوق و باز کردن جمع، W شامل چهار جمله خواهد شد. (صرفاً جهت مختصرنویسی انرژی را به صورت رابطه‌ی ۴.۴ نوشتیم.) چهار جمله، از آنجا ناشی می‌شوند که ما هر میله را به دو قسمت مساوی تقسیم کرده‌ایم و سپس برهم‌کنش بین هر نیمه از یک میله را با دو نیمه‌ی میله‌ی دیگر را در نظر گرفته‌ایم. برای حل انتگرال‌ها به صورت تحلیلی از تبدیلاتی استفاده کرده و نهایتاً توانستیم که فرم بسته‌ای را برای انرژی برهم‌کنشی به دست آوریم. از آنجا که حل چهار انتگرالی که

با آن‌ها روبرو هستیم، مشابه هم هستند، در اینجا به سراغ یکی از چهار انتگرال، w_1 ، که با در نظر گرفتن $\alpha = +$ و $i = 1$ حاصل می‌شود، رفته و جزئیات حل آن را مورد بررسی قرار می‌دهیم.

$$w_1 = \int_0^{\ell_2} dz_2 \int_0^{\ell_1} \frac{dz_1}{\sqrt{z_2^2 J^2 + (1+z_2 H)^2 + (z_2 \cos[\theta] - z_1)^2}} \quad (۶.۴)$$

با انتگرال گیری روی z_1 خواهیم داشت:

$$w_1 = \int_0^{\ell_2} dz_2 \left(\ln \left[z_2 \cos[\theta] + \sqrt{1 + z_2^2 + 2z_2 H} \right] - \ln \left[z_2 \cos[\theta] - \ell_1 + \sqrt{1 + z_2^2 + \ell_1^2 + 2z_2 H - 2\ell_1 z_2 \cos[\theta]} \right] \right). \quad (۷.۴)$$

قسمت اول انتگرال فوق با جمله‌ای مشابه آن، اما با علامت مخالف در انتگرال‌های دیگر، حذف می‌شود که در اینجا آورده نشده است. قسمت دوم انتگرال فوق با استفاده از روش جزءبه‌جزء حل می‌شود و عبارت زیر نتیجه‌ی آن است:

$$w_1 = \ell_2 \left(1 - \ln \left[\ell_2 \cos[\theta] - \ell_1 + \sqrt{\ell_2^2 + u^2 + \ell_2 x} \right] \right) - \int_0^{\ell_2} dz_2 \frac{\frac{xz_2}{2} + u^2 - \ell_1 f(z_2)}{f(z_2)(z_2 \cos[\theta] - \ell_1 + f(z_2))}, \quad (۸.۴)$$

که $x = 2(H - \ell_1 \cos[\theta])$ و $u^2 = 1 + \ell_1^2$ و $f(z_2) = \sqrt{z_2^2 + u^2 + z_2 x}$ از نظر ریاضی به علت اینکه $(u^2 - \frac{x^2}{4}) > 0$ ، اجازه‌ی استفاده از تغییر متغیر زیر را برای حل انتگرال رابطه‌ی ۸.۴ داریم.

$$z_2 + \frac{x}{2} = \sqrt{u^2 - \frac{x^2}{4}} \left(\frac{2y}{1-y^2} \right), \quad (۹.۴)$$

که y یک متغیر کمکی است. با استفاده از این تغییر متغیر می‌توانیم به راحتی انتگرال را حل کنیم. نتیجه‌ی حل انتگرال به صورت ساده شده، در رابطه‌ی زیر آورده شده است.

$$w_1 =$$

$$\begin{aligned} & \ell_2 \left(1 - \ln \left[\ell_2 \cos[\theta] - \ell_1 + \sqrt{\ell_1^2 + \ell_2^2 + 1 - 2\ell_2(H + \ell_1 \cos[\theta])} \right] \right) + \sum_{n=0}^1 \left[\frac{H}{1+(-1)^n \cos[\theta]} - \right. \\ & \left. (-1)^n \ell_1 \right] \times \ln \left[\frac{\tanh \left[\frac{1}{2} \sinh^{-1} \left[\frac{\ell_2 + H - \ell_1 \cos[\theta]}{P^+} \right] \right] - (-1)^n}{\tanh \left[\frac{1}{2} \sinh^{-1} \left[\frac{H - \ell_1 \cos[\theta]}{P^+} \right] \right] - (-1)^n} \right] + \\ & \frac{2 \cos[\phi]}{\sin[\phi]} \sum_{n=0}^1 (-1)^n \tan^{-1} \left[\frac{1}{J} \left(A \tanh \left[\frac{1}{2} \sinh^{-1} \left[\frac{n\ell_2 + H - \ell_1 \cos[\theta]}{P^+} \right] \right] + P^+ \cos[\theta] \right) \right] + \\ & \frac{\sin[\phi]}{\sin[\theta]} \ln \left[\frac{(A \tanh \left[\frac{1}{2} \sinh^{-1} \left[\frac{H - \ell_1 \cos[\theta]}{P^+} \right] \right] + P^+ \cos[\theta])^2 + J^2}{(A \tanh \left[\frac{1}{2} \sinh^{-1} \left[\frac{\ell_2 + H - \ell_1 \cos[\theta]}{P^+} \right] \right] + P^+ \cos[\theta])^2 + J^2} \right] \end{aligned} \quad (10.4)$$

که در آن:

$$\begin{aligned} A &= P^+ + \ell_1 \sin[\theta]^2 + \frac{F}{2}, \\ P^+ &= \sqrt{G + \ell_1 F}, \quad F = \sin[2\theta] \sin[\phi], \quad G = 1 - \sin[\theta]^2 (\sin[\theta]^2 - \ell_1^2) \end{aligned}$$

همان طور که ذکر شد با استفاده از روشی مشابه بالا، می توانیم ۳ انتگرال دیگر را نیز حل کنیم. بدین ترتیب توانستیم فرم بسته ای را برای انرژی برهم کنشی بر حسب طول میله ها، فاصله ی جدایی آن ها و زاویه های θ, ϕ به دست آوریم که در رابطه ی ۱۱.۴ آورده شده است.

$$E_{int.} = \frac{q_1 q_2 r}{4 \pi \varepsilon (2l_1)(2l_2)} w, \quad (11.4)$$

$$\begin{aligned} w &= \ell_2 \sum_{n=0}^1 \ln \left[\{ \ell_2 \cos[\theta] + \ell_1 + \sqrt{\ell_1^2 + \ell_2^2 + 1 + 2\ell_2((-1)^n H + \ell_1 \cos[\theta])} \} \{ \ell_2 \cos[\theta] - \right. \\ & \left. \ell_1 + \sqrt{\ell_1^2 + \ell_2^2 + 1 - 2\ell_2((-1)^n H + \ell_1 \cos[\theta])} \}^{-1} \right] + \\ & \sum_{n,m=0}^1 \sum_{j,k=1}^2 (-1)^{n+m} \left[\frac{H}{1+(-1)^k \cos[\theta]} + (-1)^{k+m} \ell_1 \right] \times \\ & \ln \left[\tanh \left[\frac{1}{2} \sinh^{-1} \left[\frac{n\ell_2 + (-1)^{j+m} H + (-1)^j \ell_1 \cos[\theta]}{P_2^m} \right] \right] - (-1)^k \right] + \\ & \frac{2 \cos[\phi]}{\sin[\theta]} \sum_{n,m=0}^1 \sum_{j=1}^2 (-1)^{n+j} \tan^{-1} \left[\frac{1}{J} \left([P_1^m + (-1)^j \ell_1 \sin[\theta]^2 + (-1)^{j+m} \frac{F}{2}] \times \right. \right. \\ & \left. \left. \tanh \left[\frac{1}{2} \sinh^{-1} \left[\frac{n\ell_2 + (-1)^{j+m} H - (-1)^j \ell_1 \cos[\theta]}{P_1^m} \right] \right] + P_1^m \cos[\theta] \right) \right] + \\ & \frac{\sin[\phi]}{\sin[\theta]} \sum_{m,n=0}^1 \ln \left[\left\{ \left(A_{m,n} \tanh \left[\frac{1}{2} \sinh^{-1} \left[\frac{m\ell_2 + (-1)^{n+m} H - (-1)^n \ell_1 \cos[\theta]}{P_1^m} \right] \right) + P_1^m \cos[\theta] \right\}^2 + \right. \\ & \left. J^2 \right\} \left\{ \left(B_{m,n} \tanh \left[\frac{1}{2} \sinh^{-1} \left[\frac{m\ell_2 - (-1)^{n+m} H - (-1)^n \ell_1 \cos[\theta]}{P_2^m} \right] \right) + P_2^m \cos[\theta] \right\}^2 + J^2 \right\}^{-1} \right], \end{aligned} \quad (12.4)$$

که در آن

$$A_{m,n} = P_1^m + (-1)^n \ell_1 \sin[\theta]^2 + (-1)^{n+m} \frac{F}{2},$$

$$B_{m,n} = P_2^m + (-1)^n \ell_1 \sin[\theta]^2 - (-1)^{n+m} \frac{F}{2},$$

$$P_1^m = (1 - m)P^+ + mP^-,$$

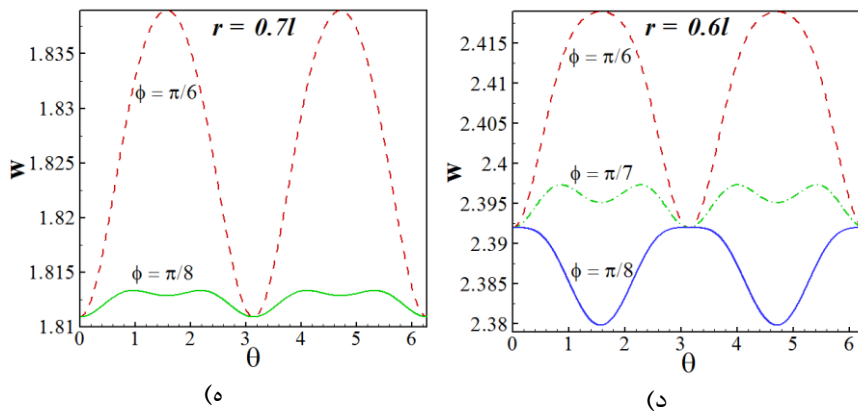
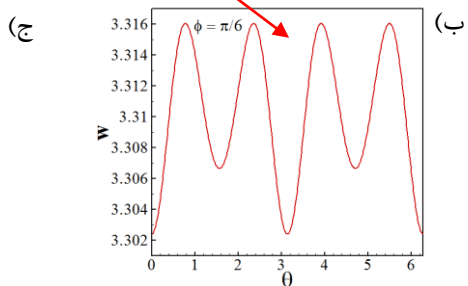
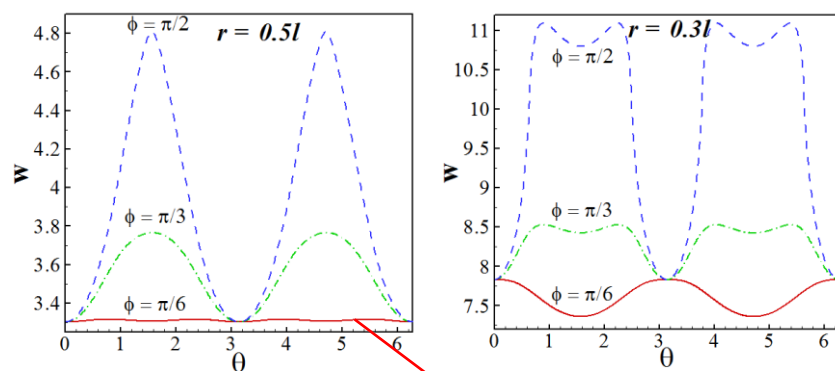
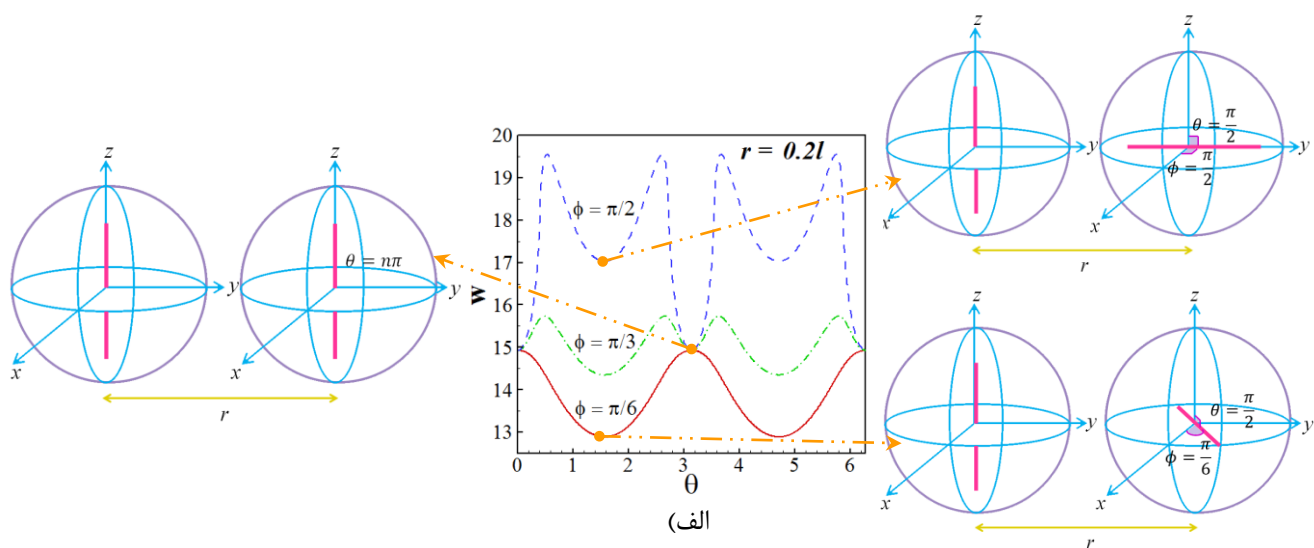
$$P_2^m = (1 - m)P^- + mP^+,$$

$$P^\pm = \sqrt{G \pm \ell_1 F}.$$

فرم بسته‌ای که برای انرژی برهم‌کنشی به دست آوردیم، نقطه‌ی شروعی برای بیشتر محاسبات در زمینه-های ماده چگال و ماده چگال نرم، مانند سیستم‌های همبسته‌ی قوی و سیستم‌های بیوفیزیکی است. با به کار بردن فرم بسته‌ی انرژی برهم‌کنشی، رابطه‌ی ۱۲.۴، می‌توان با دقت به مطالعه‌ی ویژگی‌های ترمودینامیکی سیستم پرداخت. البته باید دقت داشت که رابطه‌ی فوق برای حالتی اعتبار دارد که فاصله‌ی بین میله‌ها بسیار بیشتر از قطر میله‌ها باشد.

۳.۴ تحلیل انرژی برهم‌کنشی بین دو میله

انرژی برهم‌کنشی بی‌بُعد شده بر حسب θ و به ازای ϕ ها و فاصله‌های مختلفی که دو میله از هم می‌توانند اختیار کنند، در شکل ۲.۴ رسم شده است. پیکربندی‌های متعامد و موازی میله‌ها را نیز در شکل مشخص کرده‌ایم. نمودار $\phi = \frac{\pi}{6}$ از قسمت الف شکل ۲.۴ را در نظر می‌گیریم. با معرفی n به عنوان عدد صحیح، دیده می‌شود که انرژی برهم‌کنشی به ازای $\theta = n\pi$ نسبت به حالت‌هایی که در آن $\theta \neq n\pi$ است، مقدار بیشتری دارد. اما انرژی برهم‌کنشی به ازای $\theta = \frac{2n+1}{2}\pi$ نسبت به موقعیت‌هایی که $\theta \neq \frac{2n+1}{2}\pi$ است، مقدار کمتری را اختیار کرده است. در نتیجه به ازای فاصله‌ی $r = 0.2l$ و زاویه‌ی



شکل ۲.۴: انرژی برهم‌کنشی بین دو میله با طول‌های برابر $2l_1 = 2l_2 = l = 8$ بر حسب θ و مقادیر مختلف r, ϕ . پیکربندی حالت‌های موازی و متعامد نیز نشان داده شده است.

سمتی $\phi = \frac{\pi}{6}$ ، کمینه و بیشینه انرژی برهم‌کنشی سیستم به ترتیب در $\theta = \frac{2n+1}{2}\pi$ و $\theta = n\pi$ است. به همین ترتیب می‌توان موقعیت‌های کمینه و بیشینه‌ی انرژی برهم‌کنشی را به ازای فواصل و زوایای مختلف دید. همان‌طور که در نمودارها دیده می‌شود، با افزایش ϕ ، انرژی برهم‌کنشی نیز افزایش می‌یابد؛ البته به غیر از موقعیت‌هایی که در آن‌ها $\theta = n\pi$ است. موقعیتی که در آن $\theta = n\pi$ است، معادل با پیکربندی موازی میله‌ها نسبت به هم می‌باشد. بنابراین واضح است که تغییر کردن زاویه‌ی سمتی (ϕ) در اندازه‌ی انرژی برهم‌کنشی تفاوتی ایجاد نمی‌کند. علت اینکه با افزایش ϕ در موقعیت‌هایی که با $\theta \neq n\pi$ مشخص می‌شوند، افزایش انرژی برهم‌کنشی را داریم، این است که یک انتهای میله‌ی دوم به میله‌ی اول نزدیک‌تر از انتهای دیگر آن میله به میله‌ی اول می‌شود، به همین خاطر شاهد افزایش انرژی برهم‌کنشی در این پیکربندی‌ها هستیم.

در موقعیت‌هایی که $r \leq 0.5l$ باشد، با افزایش ϕ احتمال تلاقی دو میله مطرح خواهد شد. در این حالت‌ها فرض بر این است که به جای میله‌ای صلب تنها با یک توزیع بار خطی سروکار داریم که در این حالت می‌توانند از هم عبور کنند. با عبور آن‌ها از هم یا به عبارتی با تلاقی میله‌های فرضی، ممکن است که توزیع بار آن‌ها تغییر کند. در این جا نیز فرض می‌کنیم که با گذشت زمان، سیستم به تعادل می‌رسد و هر میله دوباره توزیع بار اولیه‌ی خود را به دست می‌آورد.^۲

مسئله‌ی دیگری که با افزایش ϕ با آن روبرو می‌شویم، ظاهرشدن دو کمینه، کلی^۳ و موضعی^۴ در انرژی برهم‌کنشی است. دو کمینه‌ی انرژی برهم‌کنشی، یکی در موقعیت $\theta = n\pi$ (پیکربندی موازی میله‌ها) و دیگری در موقعیت $\theta = \frac{2n+1}{2}\pi$ (پیکربندی متعامد میله‌ها نسبت به هم) دیده می‌شوند. سیستم بسته به اینکه در چه موقعیتی از نظر زاویه و فاصله قرار گرفته باشد، پیکربندی موازی و یا متعامد را برمی‌گزیند.

^۲ در صورتی که چنین فرض‌هایی را در نظر نگیریم، در هر حالت مسئله قابل بررسی خواهد بود.

^۳ Global

^۴ Local

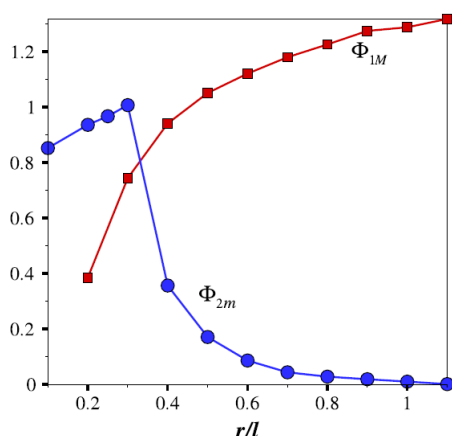
جدول ۱.۴: جهت‌گیری‌های کمینه و بیشینه‌ی انرژی برهم‌کنشی برای میله‌ها زمانی که در فاصله‌ی $r = 0.2l$ از هم قرار گرفته باشند. G-Min معرف کمینه کلی و L-Min معرف کمینه موضعی است. از نظر مقداری، کمینه کلی کمتر از کمینه موضعی است.

ϕ	$[0, \frac{\pi}{5}]$	$(\frac{\pi}{5}, \frac{\pi}{2})$	$[\frac{\pi}{2}, \frac{5\pi}{8})$	$[\frac{5\pi}{8}, \frac{3\pi}{4}]$	$(\frac{3\pi}{4}, \pi]$
$\theta = n\pi$	Max.	L-Min.	G-Min	L-Min	Max.
$\theta = (2n + 1)/2 \pi$	Min.	G-Min.	L-Min	G-Min	Min.

در جدول ۱.۴ به ازای زاویه‌های سمتی مختلف، می‌بینیم که در بازه‌هایی سیستم پیکربندی موازی و در بعضی موارد پیکربندی متعامد را ترجیح می‌دهد. به عنوان نمونه در $\phi \in [\frac{\pi}{2}, \frac{5\pi}{8})$ کمینه کلی در $\theta = n\pi$ است، در نتیجه سیستم پیکربندی موازی را برمی‌گزیند. باید دقت داشت که این بازه‌ها کلی نبوده و بسته به فاصله‌ی جدایی دو میله از هم تغییر می‌کنند.

با افزایش فاصله‌ی دو میله از هم، کم‌کم کمینه‌هایی که در سیستم دیده می‌شدند، شروع به ناپدیدشدن می‌کنند به گونه‌ای که باید آن‌ها را در ϕ های کوچک جستجو کرد. در شکل ۲.۴ ج دیده می‌شود که در $r = 0.5l$ کمینه‌های موضعی که در $\phi = \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{3}$ شاهد بودیم، ناپدید شده و تنها در $\phi = \frac{\pi}{6}$ باقی‌مانده است که آن هم بسیار ناچیز است. با افزایش بیشتر فاصله به ازای $r = 0.6l, 0.7l$ شکل ۲.۴ د و ه دیده می‌شود که در ϕ های کمتری شاهد دیده شدن کمینه‌ها هستیم و اگر به همین ترتیب افزایش فاصله ادامه پیدا کند، کمینه‌ها از بین خواهند رفت. زمانی که فاصله‌ی جدایی دو میله از هم به $0.7l$ می‌رسد، پیکربندی‌هایی که با $\theta = n\pi, \phi$ مشخص می‌شوند همواره کمینه مقدار انرژی برهم‌کنشی را شامل می‌شوند و پیکربندی‌های $\theta = \frac{2n+1}{2}\pi, \phi$ بیشینه‌ی انرژی برهم‌کنشی سیستم هستند. ثابت شدن موقعیت‌هایی که در آن‌ها سیستم همواره یک حالت (کمینه یا بیشینه) را اختیار می‌کند، با افزایش بیشتر فاصله نیز همچنان دیده می‌شود. بنابراین به ازای $r \geq 0.7l$ ، کمینه انرژی برهم‌کنشی سیستم در پیکربندی موازی میله‌ها است. دقت داریم که چنین نتیجه‌گیری را هیچ‌گاه نمی‌توان در مورد $r < 0.7l$ به کار برد، زیرا با توجه به جهت‌گیری‌های متفاوت، پیکربندی کمینه و بیشینه‌ی سیستم تغییر می‌کند.

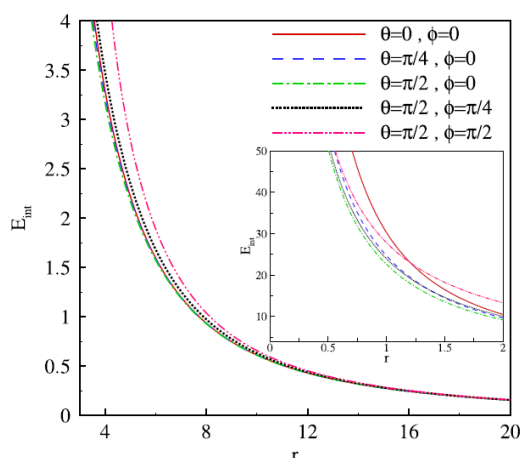
در این قسمت به معرفی دو پارامتر که اطلاعات ارزشمندی در مورد پیکربندی‌های کمینه و بیشینه انرژی به ما می‌دهند می‌پردازیم. ϕ_{1M} معرف بازه‌ای از ϕ است که در آن جهت‌گیری $(\theta = n\pi, \phi)$ کمینه کلی است و ϕ_{2M} معرف بازه‌ای است که در آن دو کمینه ظاهر می‌شود. (شکل ۳.۴). ϕ_{1M} با افزایش فاصله، زیاد شده و تقریباً در $r \sim 0.8l$ به حالت اشباع می‌رسد. یعنی با افزایش r ، سیستم پیکربندی موازی را به عنوان کمینه انرژی برهم‌کنشی اختیار می‌کند. اما ϕ_{2M} با افزایش r ، ابتدا تا $r \sim 0.3l$ افزایش و پس از آن شروع به کاهش می‌کند. این کاهش تا حدی ادامه پیدا می‌کند که دیگر پس از $r > 0.8l$ مقدار آن قابل در نظر گرفتن نمی‌باشد. به این معنا که حضور دو کمینه در انرژی سیستم کمرنگ می‌شود. همان‌طور که می‌بینیم، با افزایش فاصله‌ی بین دو میله، کم‌کم اکسترم‌های موضعی ناپدید می‌شوند و پیکربندی موازی میله‌ها به عنوان حالت تعادل سیستم انتخاب می‌شود.



شکل ۳.۴: رفتار ϕ_{1M}, ϕ_{2M} به عنوان تابعی از فاصله‌ی بین دو میله

به این ترتیب با توجه به این پارامترها می‌توان فهمید تا زمانی که اکسترم‌های موضعی حضور داشته باشند، سیستم نمی‌تواند یک حالت کمینه یا بیشینه‌ی مشخص داشته باشد و تحت ϕ, r ‌های مختلف، پیکربندی‌های متفاوتی حالت تعادل سیستم را تشکیل می‌دهند. اما زمانی که اکسترم موضعی از بین می‌رود، کمینه‌ی کلی سیستم، یک پیکربندی مشخص می‌شود. این پارامترها زمانی که به مطالعه‌ی توابع پاسخ آرایه‌ای یک بُعدی از میله‌های برهم‌کنش‌کننده خواهیم پرداخت، هم وارد می‌شوند.

آخرین مسئله‌ای که می‌خواهیم در مورد انرژی برهم‌کنشی مورد بحث قرار دهیم، رابطه‌ی آن با فاصله‌ی بین دو میله است که در شکل ۴.۴ به ازای پیکربندی‌های مختلف دو میله نمایش داده شده است. رفتار کلی انرژی برهم‌کنشی، کاهش آن با افزایش فاصله است که امر واضحی است. اما اتفاقی که می‌افتد این است که با افزایش زیاد فاصله‌ی بین دو میله، دیگر جهت‌گیری‌های میله‌ها در اندازه‌ی انرژی برهم‌کنشی تأثیری نمی‌گذارد و جهت‌گیری‌های مختلف بر هم منطبق می‌شوند. در این حالت مسئله مانند حالتی است که بخواهیم انرژی برهم‌کنشی بین دو بار نقطه‌ای را محاسبه کنیم. یعنی میله‌ها در این شرایط همچون بارهای نقطه‌ای عمل می‌کنند. این مسئله به طور کامل با کارهایی که تریزاک^۵ و همکاران در این زمینه انجام داده‌اند، تطابق دارد [۶۹].



شکل ۴.۴: انرژی برهم‌کنشی کولنی بین دو میله به ازای پیکربندی‌های مختلفی که می‌توانند اختیار کنند.

تا بدین جا، بحث مربوط به حالتی بود که $\kappa_D \rightarrow 0$ ، اما زمانی که نتوان چنین فرضی را در نظر گرفت، باید اثر پوششی را وارد مسئله کرد. یعنی رابطه‌ی ۱.۴ به طور کامل باید مورد بررسی قرار بگیرد. برای حل انتگرال آن به صورت تحلیلی تلاش‌های زیادی انجام دادیم، اما نتیجه‌ای را در بر نداشت. البته با روش‌های عددی می‌توان این اثر را وارد محاسبات کرد، که در فصل آینده این موضوع را مورد بررسی قرار خواهیم داد.

۴.۴ ظرفیت گرمایی

آرایه‌ای یک‌بُعدی از میله‌های باردار که با هم برهم‌کنش دارند را در نظر می‌گیریم. میله‌ها در فواصل ثابت r نسبت به همدیگر قرار گرفته‌اند. فرض می‌کنیم که هر میله تنها همسایه‌ی اول خود را می‌بیند و از برهم‌کنش بین همسایه‌های دوم به بعد صرف‌نظر می‌کنیم. هرچند که می‌دانیم در عمل برهم‌کنش کولنی بلندبرد است و چنین فرضی واقعیت ندارد. اما دلیلی که اهمیت این فرض را نشان می‌دهد این است که با این کار می‌توانیم تأثیر مستقیم فرم بسته‌ی انرژی برهم‌کنشی را که در رابطه‌ی ۱۲.۴ به دست آوردیم، در ویژگی‌های ترمودینامیکی سیستم ببینیم.

انرژی برهم‌کنشی سیستمی شامل N میله‌ی باردار که هر میله تنها همسایه‌ی اول خود را می‌بیند، مطابق رابطه‌ی ۳.۴ به فرم زیر نوشته می‌شود:

$$\mathcal{E}_{tot.} = \mathcal{E}_{1,2} + \mathcal{E}_{2,3} + \mathcal{E}_{3,4} + \dots$$

$$\mathcal{E}_{tot.} = \frac{q_1 q_2 r}{4 \pi \varepsilon (2l_1)(2l_2)} w_{1,2} + \frac{q_2 q_3 r}{4 \pi \varepsilon (2l_2)(2l_3)} w_{2,3} + \frac{q_3 q_4 r}{4 \pi \varepsilon (2l_3)(2l_4)} w_{3,4} + \dots \quad (13.4)$$

با فرض $q_1 = q_2 = q_3 = \dots = q$ و $2l_1 = 2l_2 = 2l_3 = \dots = l$ که از کلیت مسئله نمی‌کاهند، و $\ell = \frac{l}{r}$ ، می‌توان رابطه‌ی انرژی برهم‌کنشی را به فرم زیر نوشت:

$$\mathcal{E}_{tot.} = \frac{q^2}{4 \pi \varepsilon r \ell^2} (w_{1,2} + w_{2,3} + w_{3,4} + \dots) \quad (14.4)$$

با توجه به موارد فوق $w_{1,2} = w_{2,3} = w_{3,4} = \dots = w$ است. به علت اینکه انرژی برهم‌کنشی بی‌بُعد شده بین هر دو میله تابعی از طول میله‌ها، فاصله‌ی آن‌ها از همدیگر و جهت‌گیری نسبی آن‌ها است، رابطه ۱۲.۴، واضح است که همه‌ی جملات انرژی برهم‌کنشی بین هر دو میله با هم برابر هستند. بنابراین می‌توان انرژی را به فرم زیر نوشت:

$$\mathcal{E}_{tot.} = \frac{q^2 r}{4 \pi \varepsilon l^2} \sum_{i=1}^N w. \quad (15.4)$$

با توجه به این موارد می‌توان به سراغ به دست آوردن تابع پارش سیستم رفت.

$$\begin{aligned} Z &= \int \int e^{-\beta \varepsilon_{tot.}} \prod_{i=1}^N d(\cos[\theta_i]) d\phi_i = \int \int e^{-\beta \frac{q^2}{4\pi\epsilon r \ell^2} \sum_{i=1}^N w} \prod_{i=1}^N d(\cos[\theta_i]) d\phi_i \\ &= [\int \int e^{-\beta \frac{q^2}{4\pi\epsilon r \ell^2} w} d(\cos[\theta]) d\phi]^N = [z_1]^N \end{aligned} \quad (۱۶.۴)$$

با به دست آوردن تابع پارش به محاسبه‌ی انرژی داخلی سیستم می‌پردازیم.

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln[Z] = -N \frac{\partial}{\partial \beta} \ln[z_1] \quad (۱۷.۴)$$

$$\frac{U}{N} = U(\text{Per Particle}) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln[z_1] = \frac{\int \int \left(\frac{q^2}{4\pi\epsilon r \ell^2} w \right) e^{-\beta \frac{q^2}{4\pi\epsilon r \ell^2} w} d(\cos[\theta]) d\phi}{\int \int e^{-\beta \frac{q^2}{4\pi\epsilon r \ell^2} w} d(\cos[\theta]) d\phi} \quad (۱۸.۴)$$

جهت ساده‌تر شدن محاسبات بهتر است که آن را بی‌بعد کنیم؛ به همین منظور از مقیاسی برای بی‌بعد کردن دما استفاده می‌کنیم که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$t = \frac{K_B T}{\frac{q^2}{4\pi\epsilon r \ell^2}} \quad (۱۹.۴)$$

که در آن T دما و K_B ثابت بولتزمن^۶ می‌باشند. دمای مقیاس شده را می‌توان بر حسب طول Bjerrum که به صورت $\ell_B = \frac{e^2}{4\pi\epsilon K_B T}$ تعریف می‌شود، نیز بیان کرد. (برای آب در دمای اتاق $\ell_B = 7 \text{ \AA}$ است.) طول مشخصه‌ای است که به ازای آن برهم‌کنش کولنی بین دو بار بنیادی e در یک دی‌الکتریک با ثابت دی‌الکتریک ϵ برابر با انرژی گرمایی $K_B T$ است [۱۴]. با تعریف n به عنوان تعداد بارهای بنیادی، رابطه‌ی دما را به فرم زیر می‌توان نوشت:

$$t = \frac{K_B T}{\frac{(ne)^2}{4\pi\epsilon r \ell^2}} = \frac{r}{\ell_B} \left(\frac{\ell}{n} \right) \quad (۲۰.۴)$$

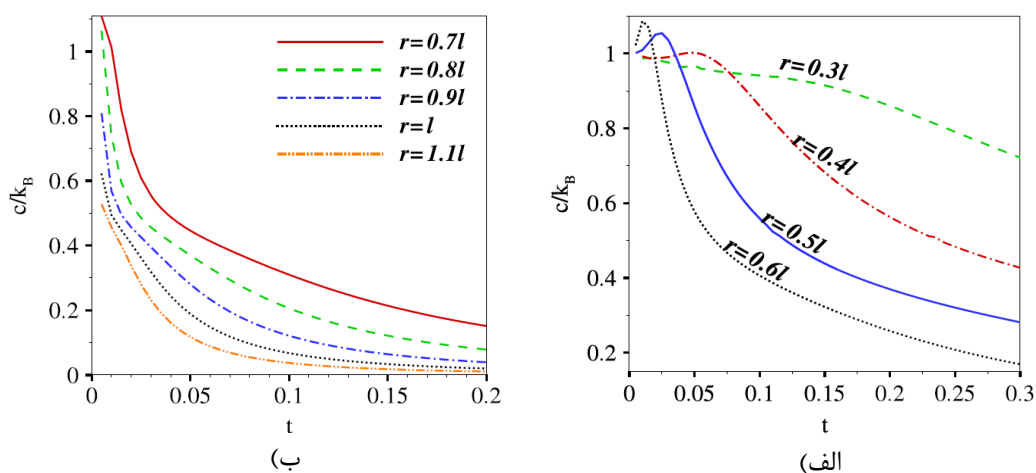
^۶ Boltzmann Constant

حال می‌توانیم انرژی داخلی را به صورت بی‌بعد نوشته و به راحتی ظرفیت گرمایی سیستم را به صورت بی‌بعد به دست آوریم:

$$\frac{U(\text{Per Particle})}{\frac{q^2 r}{4 \pi \varepsilon l^2}} = u = \frac{\int \int w e^{-\frac{w}{t}} d(\cos[\theta]) d\phi}{\int \int e^{-\frac{w}{t}} d(\cos[\theta]) d\phi} \quad (21.4)$$

$$C_v = \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{(\int \int \frac{w^2}{t^2} e^{-\frac{w}{t}} d(\cos[\theta]) d\phi)(\int \int e^{-\frac{w}{t}} d(\cos[\theta]) d\phi)}{(\int \int e^{-\frac{w}{t}} d(\cos[\theta]) d\phi)^2} - \frac{(\int \int \frac{w}{t^2} e^{-\frac{w}{t}} d(\cos[\theta]) d\phi)(\int \int w e^{-\frac{w}{t}} d(\cos[\theta]) d\phi)}{(\int \int e^{-\frac{w}{t}} d(\cos[\theta]) d\phi)^2} \quad (22.4)$$

با حل انتگرال‌های فوق، گرمای ویژه سیستم به دست می‌آید که رفتار آن بر حسب دمای مقیاس شده در شکل ۵.۴ آورده شده است.



شکل ۵.۴: گرمای ویژه برای زنجیره‌ای از میله‌های برهم‌کنش کننده که تنها برهم‌کنش همسایه اول آن‌ها در نظر گرفته شده است. الف) به ازای $r \geq 0.7l$ و ب) به ازای $r < 0.7l$ گرمای ویژه رسم شده است.

همان‌طور که در شکل ۵.۴ می‌بینیم، گرمای ویژه را در دو نمودار جدای از هم رسم کرده‌ایم. در نمودار الف. در فواصلی هستیم که به ازای آن‌ها در انرژی برهم‌کنشی دو کمینه می‌بینیم و حالت کمینه‌ی انرژی برهم‌کنشی بسته به موقعیت‌های مختلف متفاوت می‌شود. در این حالت‌ها در گرمای ویژه‌ی سیستم در دماهای پایین، شاهد حضور پیک خواهیم بود. اما به ازای فواصل $r \geq 0.7l$ که دو کمینه در انرژی کوچک شده و

دیگر حالت کمینه‌ی انرژی ثابت شده است، در دماهای پایین پیک ناپدید می‌شود. مورد دیگری که قابل توجه است، پهنای پیک است. پهنای پیک‌ها به طور مستقیم با ϕ_{2M} رابطه دارد، یعنی هر چه مقدار ϕ_{2M} بیشتر، پهنای پیک پهن‌تر می‌شود و با کاهش مقدار ϕ_{2M} ، پیک ظاهر شده، باریک‌تر می‌شود. به این ترتیب دیده می‌شود که رفتار انرژی برهم‌کنشی کولنی چگونه اثر خود را در تابع پاسخ سیستم، که در اینجا ظرفیت گرمایی را مورد بررسی قرار دادیم، می‌گذارد [۷۰].

فصل پنجم

محاسبه‌ی عددی برهم‌کنش الکتروستاتیکی

سیستمی متشکل از اجسام باردار ناهمسانگرد

۱.۵ مقدمه

ما در این پایان نامه به دنبال به دست آوردن انرژی برهم کنشی الکتروستاتیکی در سیستم‌هایی با ذرات باردار ناهمسانگرد هستیم. به همین منظور در فصل گذشته به محاسبه‌ی این انرژی پرداختیم. اما در سیستم‌هایی که در تجربه دیده می‌شوند، توزیع باری که روی میله‌های بار وجود دارد، گسسته است؛ در حالی که ما تنها با توزیع خطی بار کار کردیم. در این فصل به دنبال این خواهیم بود که اگر سیستمی با توزیع گسسته‌ای از بار داشته باشیم، انرژی برهم کنشی آن به چه صورت خواهد بود و قیاسی بین رفتار انرژی برهم کنشی در این حالت (توزیع گسسته) و حالت قبل (توزیع خطی بار) خواهیم داشت. همان‌طور که دیدیم با رهیافت تحلیلی، حل مسئله با در نظر گرفتن اثرات پوششی امکان‌پذیر نبود؛ حال در این فصل با در نظر گرفتن توزیع گسسته‌ی بار، اثرات پوششی را وارد محاسبات کرده و نتیجه‌ی ورود آن را به سیستم مورد مطالعه قرار خواهیم داد. پس از آن به سراغ یک نمونه‌ی واقعی از سیستم‌هایی که در آن‌ها چنین برهم کنش‌هایی دیده می‌شود رفته و انرژی برهم کنشی را به دست می‌آوریم. سپس با مطالعه‌ی سیستم و به دست آوردن کمینه‌ها و بیشینه‌های انرژی به قیاس نتایج با تجربه خواهیم پرداخت.

۲.۵ انرژی برهم کنشی الکتروستاتیک - توزیع گسسته‌ی بار

سیستمی شامل دو میله به طول‌های $2l_2 = 2l_1 = l = 8$ ، با جهت‌گیری کلی در فضای سه بُعدی را در نظر می‌گیریم. به جای اینکه مانند قبل توزیع خطی بار را روی هر میله داشته باشیم، توزیع گسسته‌ای از بار را روی میله‌ها در نظر می‌گیریم. بارهایی که روی هر میله در نظر می‌گیریم را به صورت یکنواخت روی میله‌ها توزیع می‌کنیم، در این صورت تنها تفاوت آن با حالت قبل گسسته شدن بار خواهد بود. به این ترتیب انرژی برهم کنشی الکتروستاتیک بین دو میله‌ی باردار با تعداد مشخصی بار روی هر میله از رابطه‌ی متعارف زیر به دست می‌آید:

$$E_{int.} = \frac{1}{4\pi\epsilon} \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} \frac{q_1^i q_2^j e^{-\kappa_D |r_1^i - r_2^j|}}{|r_1^i - r_2^j|} = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon} \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} \frac{\frac{1}{n_1 n_2} e^{-\kappa_D |r_1^i - r_2^j|}}{|r_1^i - r_2^j|} \quad (۱.۵)$$

که در آن κ_D عکس طول پوششی دبی، r_1^i بردار مکان i -امین (j-امین) بار روی میله‌ی اول (دوم) و n_1 (n_2) تعداد بارهایی که روی میله‌ی اول (دوم) به طور یکنواخت توزیع شده است، می‌باشند. بدون از دست دادن کلیت مسئله، فرض‌های زیر را می‌توان در نظر گرفت:

$$q_1^i = \frac{q}{n_1}, \quad q_2^j = \frac{q}{n_2}, \quad \frac{q^2}{4\pi\epsilon} = 1 \quad (۲.۵)$$

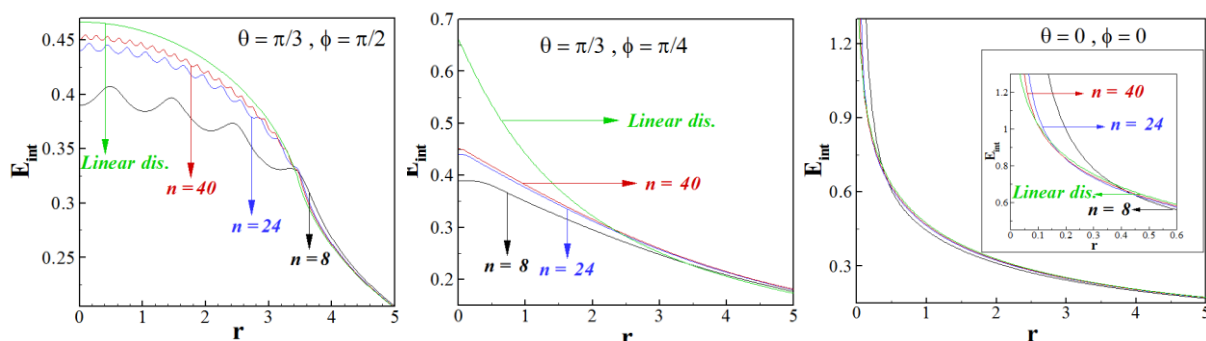
تعداد بارهایی که روی هر میله در نظر می‌گیریم، می‌توانند زوج و یا فرد باشد. در صورتی که با تعداد زوجی بار روی هر میله، به مطالعه‌ی سیستم بپردازیم، این حالت معادل خواهد بود با حالتی که تعدادی چهارقطبی محوری روی هر میله در نظر بگیریم و انرژی برهم‌کنشی بین این چهارقطبی‌ها را به دست آوریم. جهت بررسی مسئله ابتدا در حالتی که $\kappa_D \rightarrow 0$ یعنی اثر پوششی ناچیز باشد، انرژی برهم‌کنشی را به دست می‌آوریم. به این ترتیب می‌توان نتایج حاصل را با نتایج حاصل از توزیع خطی بار که در فصل گذشته به بررسی آن پرداختیم، قیاس کرد. پس از آن اثرات پوششی را وارد مسئله خواهیم کرد.

۱.۲.۵ برهم‌کنش الکتروستاتیک بدون وارد کردن اثر پوششی

۱.۱.۲.۵ تعداد زوج بار

تعدادی چهارقطبی محوری که معادل با تعداد زوجی بار است را روی هر میله در نظر می‌گیریم. انرژی برهم‌کنشی الکتروستاتیک را برای تمامی فواصل و زاویه‌ها با استفاده از رابطه‌ی ۱.۵ برای سیستم به دست می‌آوریم. به این ترتیب که برهم‌کنش بین هر بار از میله‌ی اول با تمام بارهایی که روی میله‌ی دوم است را در نظر می‌گیریم. از آنجا که محاسبات در این حالت، به صورت تحلیلی بسیار طولانی می‌شود، به سراغ روش‌های عددی می‌رویم. برای نوشتن برنامه از زبان برنامه‌نویسی فترن استفاده می‌کنیم. انرژی برهم-

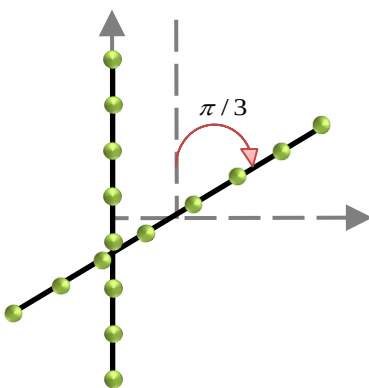
کنشی بر حسب فاصله‌ی بین دو میله و به ازای $n_1 = n_2 = n = 8, 24, 40$ که تعداد بارهایی است که روی هر میله قرار می‌گیرد، در شکل ۱.۵ رسم شده است. انرژی برهم‌کنشی را در سه جهت‌گیری $(\theta = 0, \phi = 0)$ ، $(\theta = \pi/3, \phi = \pi/4)$ و $(\theta = \pi/3, \phi = \pi/2)$ رسم کرده‌ایم. در این شکل‌ها علاوه بر موارد فوق، نمودار انرژی برهم‌کنشی را در حالتی که توزیع پیوسته‌ای از بار نیز داشته باشیم را جهت قیاس کردن، رسم کرده‌ایم.



شکل ۱.۵: انرژی برهم‌کنشی بر حسب r برای سه جهت‌گیری مختلف.

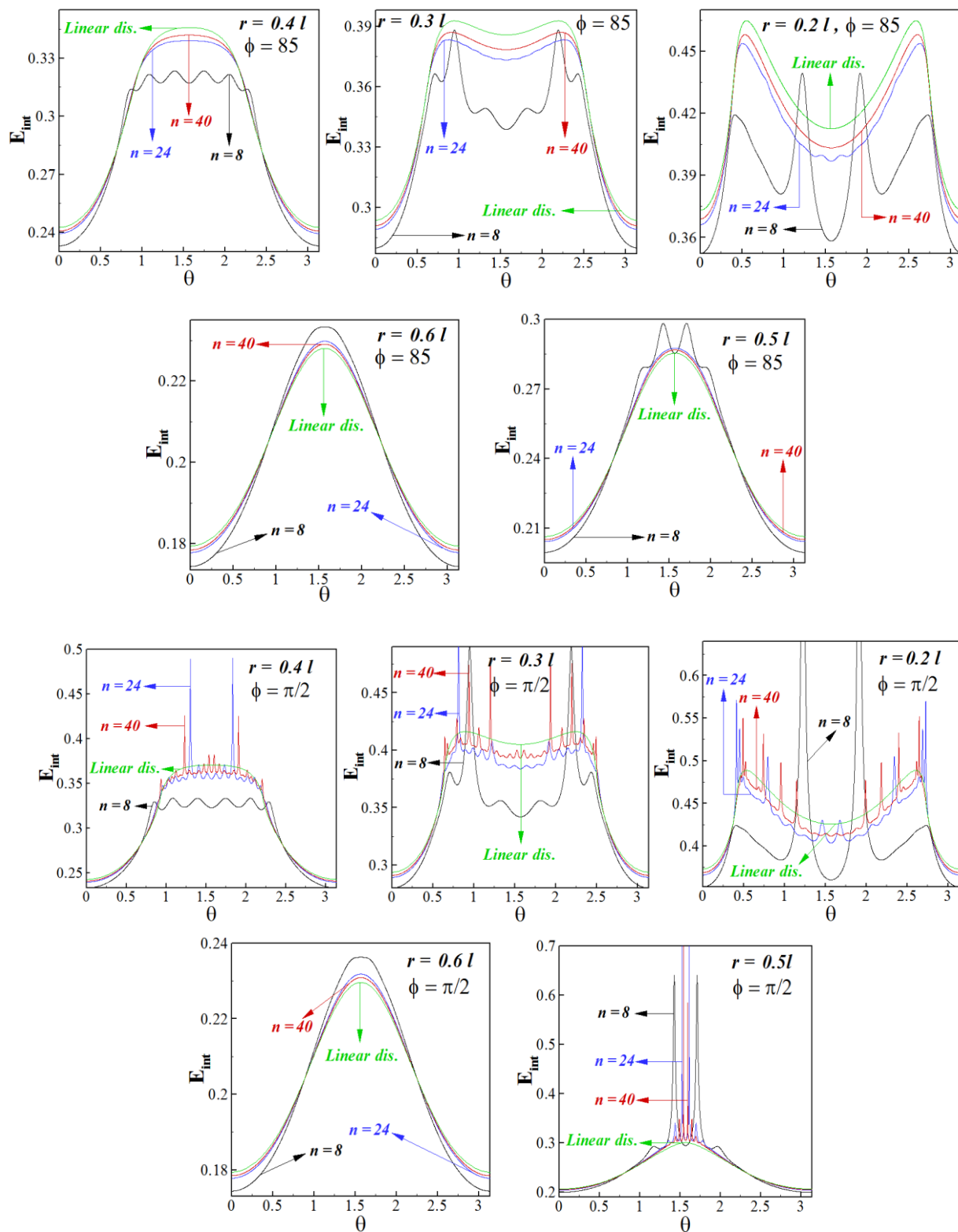
به ازای $r > 0.5l$ بین دو حالت توزیع گسسته و خطی بار، تفاوت چندانی در رفتار انرژی برهم‌کنشی دیده نمی‌شود. به این ترتیب در این محدوده‌ی فاصله، می‌توان به جای کارکردن با توزیع خطی بار، تعداد کمی چهارقطبی محوری در نظر گرفته و به نتایج دقیقاً یکسانی برسیم. اما زمانی که $r < 0.5l$ است، تفاوت‌های قابل ملاحظه‌ای بین دو حالت مورد بررسی دیده می‌شود. این تفاوت‌ها در حالتی که پیکربندی میله‌ها در محدوده‌ی $\theta = \pi/3, \phi = \pi/2$ باشد، بیشتر می‌شود. در این حالت‌ها شاهد ظاهر شدن قله‌هایی در انرژی برهم‌کنشی هستیم. در این فاصله‌ها با هر تعداد دلخواه از چهارقطبی روی هر میله، نمی‌توان به نتایج یکسانی با حالت توزیع خطی بار رسید و تعداد چهارقطبی‌ها و یا به عبارتی تعداد بارهایی که روی هر میله در نظر می‌گیریم، حائز اهمیت می‌شود. علت دیده شدن تفاوت بین این حالت‌ها، با شکل ۲.۵ واضح می‌شود.

در شکل ۲.۵ روی هر میله دو چهارقطبی محوری که معادل با ۸ بار است، در نظر گرفته‌ایم. همان‌طور که می‌بینیم، زمانی که فاصله‌ی بین دو میله از $0.5l$ کمتر می‌شود، $\phi = \pi/2$ ، دو میله با هم تلاقی خواهند داشت. در این شرایط یک بار از میله‌ی اول با یک بار از میله‌ی دوم در فاصله‌ی خیلی کمی از هم قرار می‌گیرند. به همین علت شاهد افزایش در انرژی برهم‌کنشی در آن شرایط هستیم و در انرژی برهم‌کنشی در این حالت شاهد حضور قله خواهیم بود. این اتفاق برای این تعداد از چهارقطبی‌ها، چهار دفعه اتفاق می‌افتد. با بررسی کردن این مسئله در مورد تعداد بارهای بیشتر می‌بینیم که همواره به تعداد نصف بارهایی که روی هر میله در نظر می‌گیریم، قله‌ای در انرژی وجود می‌آید.



شکل ۲.۵: پیکربندی دو میله نسبت به همدیگر. ($\theta = \pi/3, \phi = \pi/2$)

همان‌طور که در شکل ۱.۵ دیده می‌شود، تنها زمانی که $\phi = \frac{\pi}{2}$ است، شاهد قله‌هایی در انرژی هستیم. در حالتی که $\phi = \frac{\pi}{4}$ است، چنین چیزی دیده نمی‌شود. برای بهتر دیده شدن این موضوع و بررسی دقیق‌تر، رفتار انرژی برهم‌کنشی را بر حسب θ به ازای ϕ های مختلف، در فاصله‌هایی متفاوت نگاه می‌کنیم. شکل ۳.۵ به ازای حالتی که ۲، ۶ و ۱۰ چهارقطبی محوری روی هر میله داشته باشیم که به ترتیب معادل با ۸، ۲۴ و ۴۰ بار روی هر میله است، انرژی برهم‌کنشی را مورد مطالعه قرار داده‌ایم. در این شکل به وضوح دیده می‌شود، زمانی که ϕ از $\phi = \pi/2$ کمی تغییر می‌کند، اکسترمم‌هایی که در انرژی برهم‌کنشی نیز دیده می‌شوند، به طرز قابل توجهی کاهش می‌یابند. که این مسئله با توضیحی که با شکل ۲.۵ دادیم، به طور کامل واضح خواهد بود. هر چه که دو میله به هم نزدیک‌تر شوند، زمان‌هایی که بارهای روی آن‌ها



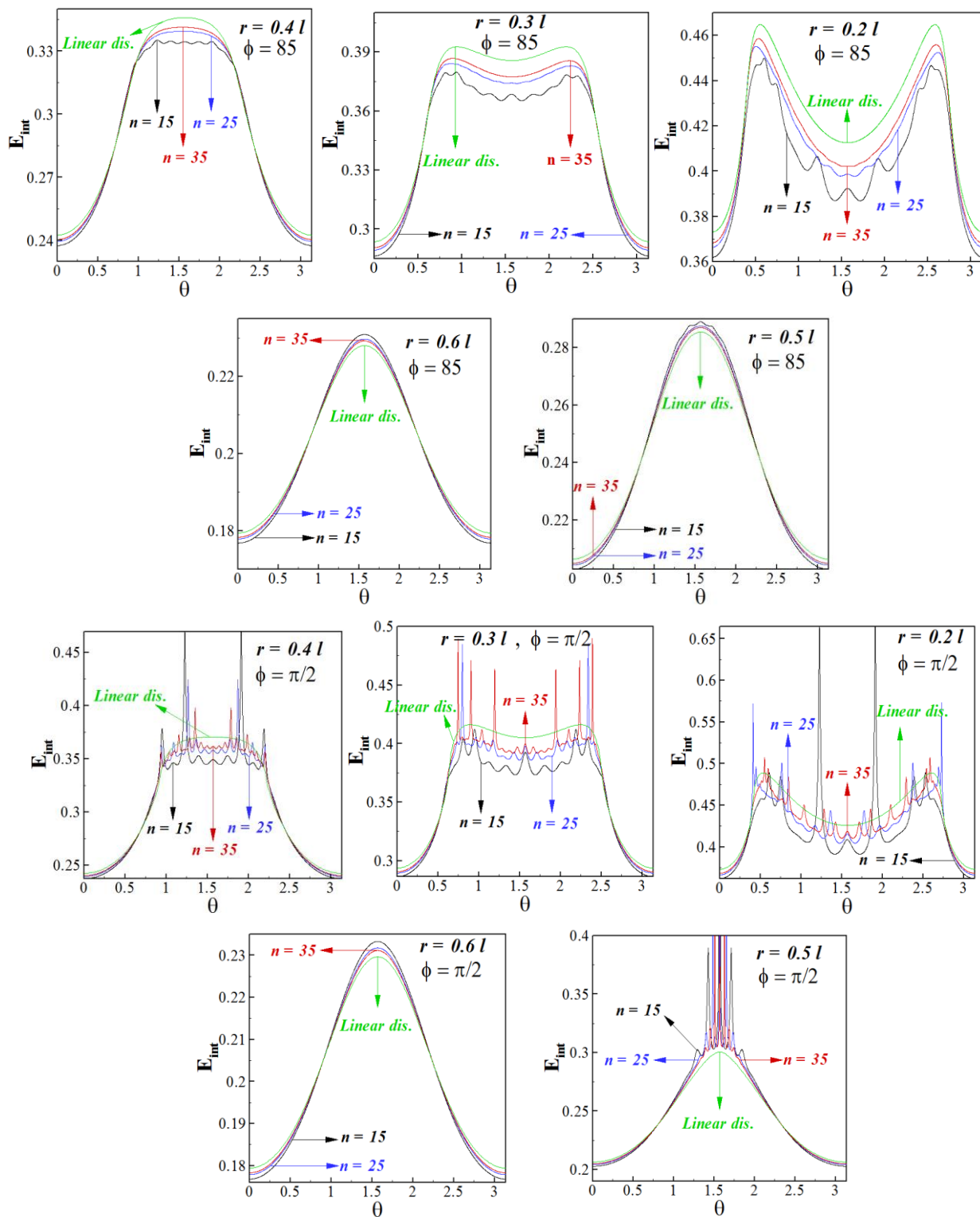
شکل ۳.۵: انرژی برهم‌کنشی بین دو میله بر حسب θ و برای ϕ های مختلف و به ازای تعداد زوج بار. θ, ϕ جهت-گیری میله‌ی دوم نسبت به میله‌ی اول است. انرژی برهم‌کنشی در فواصل مختلفی که دو میله نسبت به هم اختیار می‌کنند، رسم شده است. با افزایش فاصله، تفاوت بین این حالت با حالتی که توزیع خطی بار داریم، کم می‌شود.

در فواصل کمی نسبت به همدیگر قرار می‌گیرند، بیشتر می‌شود و شاهد قله‌هایی در انرژی برهم‌کنشی خواهیم بود. این قله‌ها در $\phi = \pi/2$ که فاصله‌ی بین بعضی بارهایی که روی میله‌های اول و دوم هستند، بسیار ناچیز می‌شود، واگرا می‌شود. این مسئله کاملاً طبیعی است، چون انرژی با عکس فاصله نسبت مستقیم دارد. با توجه به این نمودارها نیز می‌بینیم که در فواصل $r > 0.5l$ رفتار انرژی برهم‌کنشی در حالتی که توزیع گسسته‌ای از بارها را داشته باشیم به ازای تعداد کمی چهارقطبی با رفتار انرژی برهم‌کنشی در حالت تحلیلی همخوانی دارد. به این معنا که کمینه‌ها و بیشینه‌های انرژی برای دو حالت، در موقعیت‌های یکسانی اتفاق می‌افتند. اما با کاهش فاصله‌ی بین دو میله به ازای $r \leq 0.5l$ ، رفتار انرژی برهم‌کنشی تفاوت زیادی با حالتی که توزیع خطی بار داشته باشیم، را نشان می‌دهد و دیگر نمی‌توان با تعداد کمی چهارقطبی محوری، نتیجه‌ای که از توزیع خطی بار می‌گیریم، را به دست آوریم. به این معنا، باید تعداد بیشتری بار روی هر میله در نظر بگیریم تا بتوانیم نتایجی که از نظر کیفی با حالت توزیع خطی بار یکسان است را به دست آوریم. پس به عنوان نتیجه‌ی کلی می‌توان گفت که برای مطالعه‌ی ویژگی‌های فیزیکی یک سیستم، شامل میله‌های باردار برهم‌کنش کننده به صورت عددی، تعداد بارهایی که در نظر می‌گیریم بسته به فاصله‌ای که دو میله از هم اختیار کرده‌اند، متفاوت است. در فواصل کم این تعداد حائز اهمیت است، اما در فواصل زیاد، با تعداد کمی از چهارقطبی‌ها هم می‌توان به نتایج مطلوب رسید.

۲.۱.۲.۵ تعداد فرد بار

در شکل ۴.۵ انرژی برهم‌کنشی بر حسب θ و زوایای مختلف ϕ همانند قسمت قبل، اما این بار برای تعداد فرد بار آورده شده است. همان‌گونه که دیده می‌شود، در بررسی مسئله زوج و یا فرد بودن تعداد بارهایی که روی هر میله در نظر می‌گیریم، تفاوتی ایجاد نمی‌کند و نتایج مشابهی به دست می‌آوریم:

◀ در $r \leq 0.5l$ تعداد بارها در رسیدن به جوابی مشابه آنچه که در حالت توزیع خطی بار داشتیم، اهمیت پیدا می‌کند. به ازای تعداد بار بیشتری به برابری جواب‌ها خواهیم رسید.



شکل ۴.۵: انرژی برهم‌کنشی بین دو میله بر حسب θ و برای ϕ های مختلف و به ازای تعداد فردی بار.

◀ در $r > 0.5l$ اهمیت تعداد بارهایی که روی هر میله فرض می‌شود، از بین می‌رود. به ازای تعداد کمی بار، شاهد تطابق خوبی بین حالت‌های مختلف مورد بررسی (توزیع گسسته و توزیع خطی بار) خواهیم بود.

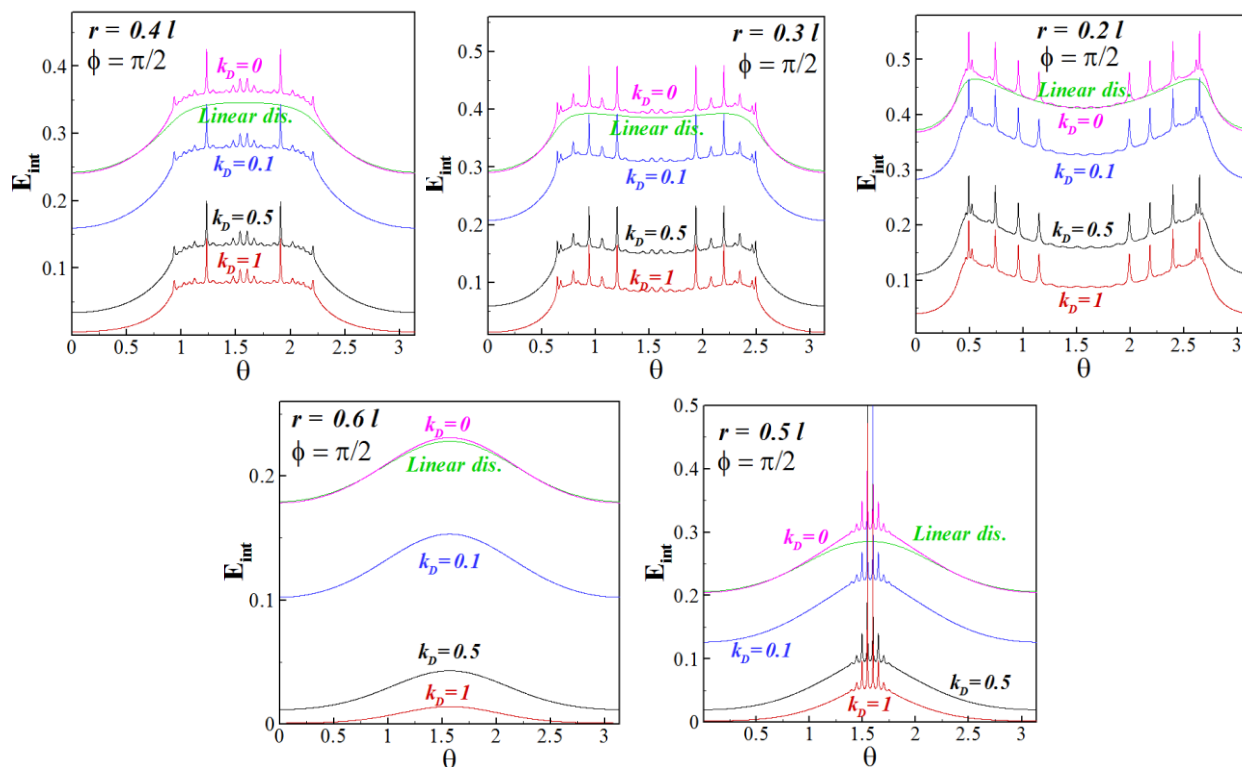
◀ در $\phi = \pi/2$ به ازای بعضی از جهت‌گیری‌های θ ، شاهد حضور قله‌هایی و همچنین در بعضی موارد واگرایی در انرژی برهم‌کنشی هستیم. این موارد ناشی از نزدیک شدن بارهایی از میله‌ی اول به میله‌ی دوم می‌باشد؛ در صورتی که این نزدیکی خیلی زیاد باشد، واگرایی اتفاق می‌افتد. با تغییر ϕ از این مقدار، واگرایی در انرژی برهم‌کنشی دیده نمی‌شود و قله‌ها نیز کم‌کم ناپدید می‌شوند.

به این ترتیب می‌توان نتیجه گرفت که تعداد زوج و یا فرد بودن بارهایی که روی میله‌ها در نظر می‌گیریم، مهم نیست. پس می‌توانیم همواره تعداد زوجی بار که معادل با تعدادی چهارقطبی محوری است را در نظر بگیریم. در نتیجه برای بررسی ویژگی‌های ترمودینامیکی دو میله‌ی باردار، می‌توان هم به صورت عددی و هم تحلیلی مسئله را مورد بررسی قرار داد و به نتایج یکسانی نیز دست یافت. بنابراین با در نظر گرفتن مواردی که در آن نتایج یکسانی را برای انرژی برهم‌کنشی در دو حالت مورد بررسی داریم، می‌توان از فرم بسته‌ای که برای انرژی برهم‌کنشی به صورت تحلیلی به دست آورده بودیم، برای توصیف سیستم در حالتی که توزیع گسسته‌ای از بار هم داشته باشیم استفاده کنیم.

۲.۲.۵ انرژی برهم‌کنشی در حضور اثر پوششی

در این قسمت در حضور اثر پوششی به محاسبه‌ی انرژی برهم‌کنشی الکتروستاتیک می‌پردازیم. همان‌طور که اشاره شد، به دست آوردن برهم‌کنش الکتروستاتیک به صورت تحلیلی ممکن نبود. اما در اینجا با در نظر گرفتن تعدادی چهارقطبی محوری به محاسبه‌ی آن با روش‌های عددی می‌پردازیم. در شکل ۵.۵ انرژی برهم‌کنشی الکتروستاتیک پوششی به ازای $n_1 = n_2 = n = 40$ و بر حسب θ رسم شده است. در

این شکل به ازای دو زاویه‌ی سمتی و فاصله‌های مختلف، اثر مقدارهای مختلف κ_D را روی انرژی برهم-کنشی می‌بینیم. همان‌طور که مشخص است با اضافه شدن اثر پوششی تنها اتفاقی که می‌افتد، آن است که انرژی برهم‌کنشی از نظر مقداری کاهش می‌یابد. انرژی از نظر کیفی با حالتی که اثر پوششی را وارد نکرده-ایم، تفاوتی ندارد. یعنی مکان‌هایی که در آن انرژی کمینه و بیشینه می‌شوند، تغییری نکرده است.



شکل ۵.۵: انرژی برهم‌کنشی بین دو میله بر حسب θ و برای $\phi = \pi/2$ و $n = 40$ بار و به ازای طول‌های پوششی متفاوت. همان‌طور که دیده می‌شود با افزایش κ_D تنها شاهد کاهش مقداری انرژی برهم‌کنشی هستیم و رفتار انرژی تغییری نمی‌کند.

از آنجا که به ازای تعداد مشخصی چهارقطبی روی میله‌ها، به جواب یکسانی با حالتی که توزیع خطی بار روی میله‌ها داشتیم، رسیدیم؛ می‌توان همین نتیجه را برای حالتی که توزیع خطی بار را داریم نیز، انتظار داشته باشیم. به این ترتیب با اینکه قادر به حل تحلیلی انرژی برهم‌کنشی الکتروستاتیک پوششی نیستیم اما با استفاده از این موضوع که نتایج آن با حالت گسسته یکی است، نتیجه‌ی ورود اثر پوششی در حالت تحلیلی را با توجه به حالت گسسته، می‌دانیم.

۳.۵ انرژی برهم‌کنشی الکتروستاتیک – کوپرایت‌ها

ابرسیابی یک پدیده‌ی کوانتومی در مقیاس ماکروسکوپیکی است [۳۸]. همان‌طور که در فصل سوم، با این پدیده آشنا شدیم، این مواد با آلایش کردن، به علت حرکت حفره‌ی آلایش شده، دچار درماندگی می‌شدند که با جدایی فاز بار و اسپین بر این درماندگی غلبه می‌کردند. اما همین مسئله باعث به وجود آمدن درماندگی دیگری که به علت برهم‌کنش بلندبرد کولنی و تمایل به نظم پادفرومغناطیس بود، در سیستم می‌شد. نهایتاً سیستم با انتخاب فازهای نواری بار و اسپین می‌توانست بر درماندگی غلبه کند. به این ترتیب نظم حاکم در سیستم، نظم نواری بود. نوارهای بار بسته به اینکه در چه آلایش و دمایی قرار می‌گرفتند، آرایش‌های قطری و عمودی یا افقی را در حالت‌های استاتیک و دینامیک تجربه می‌کردند. در آلایش‌های $x \geq 0.05$ ، نوارها در راستاهای عمودی و یا افقی قرار می‌گرفتند که این جهت‌گیری از صفحه‌ای به صفحه‌ی دیگر با چرخش ۹۰ درجه‌ای همراه بود. (به یاد داریم که ساختار کوپرایت‌ها لایه‌ای است). نوارهای بار در این آلایش‌ها دینامیک بودند که همین یکی از علل اصلی ابرسانا شدن کوپرایت‌ها بود. اما زمانی که در آلایش‌های $x < 0.05$ قرار داشته باشیم، نوارهای بار به صورت قطری (در زاویه‌ی ۴۵ درجه) هستند و بسته به اینکه در چه دمایی باشیم، استاتیک و یا دینامیک خواهند بود. در دماهای بالا، حفره‌های آلایش شده حرکت داشتند و همین مسئله باعث می‌شد تا رفتار فلزی از خود نشان دهند. اما در دماهای پایین نوارهای بار استاتیک بودند. همان‌طور که اشاره شده بود، در این ناحیه با فاز شبه‌گپ مواجه هستیم که فیزیک آن همچنان ناشناخته است و یکی از مسائل بحث برانگیز در فیزیک دوران ماست.

فیزیکدانان برای بررسی پدیده‌ی ابررسیابی و یافتن فیزیک حاکم بر آن، همواره از مکانیک کوانتومی بهره برده‌اند. هر چند که در موارد نادری، در توصیف بعضی از قسمت‌ها از مکانیک کلاسیک نیز استفاده شده است. به عنوان مثال در بررسی دینامیک دیواره‌های حوزه‌ی پادفرومغناطیس، زَن^۱ و همکاران با

^۱ J. Zaanen

معرفی پارامتر بی‌بعد μ ، در شرایطی که $1 \ll \mu$ باشد، از افت و خیزهای کوانتومی صرف نظر کرده و با استفاده از مکانیک کلاسیک سیستم را توصیف کرده‌اند [۷۱]. ما نیز سعی داریم بفهمیم که آیا می‌توان با رهیافت کلاسیکی به سیستم نگاه کرد و خصوصیات سیستم را از این طریق متوجه شد. همان‌طور که بیان کردیم، به دنبال به دست آوردن انرژی برهم‌کنشی الکتروستاتیکی در سیستم‌های مختلف بودیم. در این بخش نیز می‌خواهیم که انرژی برهم‌کنشی الکتروستاتیک یک سیستم کوپرایت آرایش شده را به صورت کلاسیکی مورد محاسبه قرار دهیم. برای این منظور از رابطه‌ی ۱.۳ فصل سوم بهره می‌جوییم.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_c + \mathcal{H}_s \quad (۳.۵)$$

در فصل سوم، توضیح دادیم که در این سیستم‌ها زمانی که جدایی فاز بار و اسپین اتفاق می‌افتد، می‌توان سهم بار و اسپین را به صورت جداگانه در هامیلتونی سیستم وارد کرد. حتی در زمانی که جفت‌شدگی بین زنجیره‌ها هم اتفاق بیفتد، باز هم جدایی سهم‌های بار و اسپین برقرار است و فقط جمله‌ای که شامل جفت‌شدگی است، وارد هامیلتونی می‌شود. البته جمله‌ای که مربوط به جفت‌شدگی است، تنها زمانی که در ناحیه‌ی ابررسانایی باشیم، یعنی $T < T_c$ ، قابل در نظر گرفتن است.

ما برای بررسی خود در این بخش، ناحیه‌ی آلاشی $0.02 < x < 0.05$ ، در دماهای پایین را برمی‌گزینیم.^۲ ناحیه‌ی آلاش‌های پایین، به دلیل وجود ۳ فاز با هم در یک آرایش بحرانی $x_c = 0.05$ ، از اهمیت ویژه‌ای برخوردار می‌باشند [۷۲] و همچنان علت از بین رفتن ابررسانایی در ناحیه‌ی $x < x_c$ از موضوعات مورد بحث می‌باشد [۷۳]. در این ناحیه همان‌طور که اشاره شد، نوارهای بار استاتیک هستند و این نوارها به صورت قطری در صفحات قرار گرفته‌اند. در نتیجه در ناحیه‌ی مورد بررسی ما، جمله‌ی سوم که مربوط به اثرات جفت‌شدگی بود، وارد نمی‌شود. زیرا در ناحیه‌ی ابررسانایی قرار نگرفته‌ایم. به این ترتیب می‌توان به صورت جداگانه، سهم بار و همین‌طور سهم اسپین را محاسبه کرد و نهایتاً با استفاده از مجموع

^۲ در فصل سوم اشاره شد که برای شناخت ناحیه‌ی ابررسانایی ابتدا لازم است که ناحیه‌ی قبل آن شناخته شود تا بتوان دید صحیحی نسبت به ناحیه‌ی ابررسانایی پیدا کرد.

آن‌ها هامیلتونی کل را نوشت. ما در این قسمت، تنها بخش اول هامیلتونی که شامل سهم بار است ($\mathcal{H}_c$) را مورد مطالعه و محاسبه قرار خواهیم داد و سیستم را با در نظر گرفتن سهم بار مورد بررسی قرار می‌دهیم. به این ترتیب میزان اثر سهم اسپینی در هامیلتونی، مشخص خواهد شد. رهیافتی که برای به دست آوردن هامیلتونی سیستم دنبال خواهیم کرد، رهیافت پدیده‌شناختی^۳ است. زمانی که برای بررسی مسئله و پیدا کردن نظریه‌ای مناسب برای توصیف آن، از داده‌های تجربی که وجود دارد، استفاده کنیم، رهیافت مورد استفاده‌ی ما رهیافت پدیده‌شناختی خواهد بود. در این رهیافت زمانی که نتایج نظریه با تجربه همخوان شود، صحت نظریه‌ای که به توصیف مسئله می‌پردازد تأیید می‌شود. در نتیجه در این قسمت، ما ابتدا به طور کامل اطلاعاتی را که از تجربه در مورد این ناحیه‌ی آلایشی است را مورد بررسی قرار می‌دهیم تا سیستم به طور مشخص توصیف شود، سپس به محاسبه‌ی انرژی برهم‌کنشی خواهیم پرداخت.

۱.۳.۵ توصیف پارامترهای موجود در سیستم

برای نوشتن هامیلتونی سیستم، دقت داریم که در ناحیه‌ی مورد نظر به علت اینکه تنها نوارهای بار استاتیک را داریم، تنها جمله‌ای که ظاهر خواهد شد، جمله‌ی پتانسیل است و جمله‌ای شامل بخش انرژی جنبشی نخواهیم داشت. به همین دلیل در این بخش پارامترهایی که برای نوشتن انرژی برهم‌کنشی سیستم، که جمله‌ی پتانسیلی هامیلتونی را تشکیل می‌دهد، مورد مطالعه قرار می‌دهیم.

$$\leftarrow \text{نوارهای بار در صفحه قرار دارند. } \phi = \frac{\pi}{2}$$

هر چند که نوارهای اسپینی می‌توانند در بیرون صفحه هم قرار بگیرند، اما نوارهای بار همواره در صفحات قرار دارند [۳۸، ۵۳].

$$\leftarrow \text{نوارهایی که در هر صفحه قرار دارند، با هم موازی هستند. } \theta \text{ های برابر در یک صفحه.}$$

با قرار گرفتن نوارها به صورت موازی هم در هر صفحه، کمینه‌ی انرژی سیستم را خواهیم داشت. چنین آرایشی از نوارها در تجربه دیده شده است [۵۳، ۳۸]. جهت سهولت در انجام محاسبات در قسمت‌های بعدی کار، بدون از دست دادن کلیت مسئله، نوارهای بار که به صورت قطری هستند را ۴۵ درجه چرخانده و در راستای زاویه‌های $\theta = n\pi$ قرار می‌دهیم.

طول نوارهای بار. l

طول مشخصه‌ای که برای نوارهای بار از تجربه گزارش شده است، در حدود $110-80^\circ A$ می‌باشد [۷۴] طول هر نوار و باقی پارامترهایی که در ادامه توضیح داده خواهند شد را می‌توان بر حسب فاصله‌ی بین هر دو یون مس مجاور هم، که برابر a است، نیز بیان کرد. به این ترتیب طول هر نوار برابر با $21-28a$ خواهد شد.

فاصله‌ی نوارهای بار از هم در یک صفحه. r_s

مطابق نمودار ۸.۳ (فصل سوم)، می‌دانیم که در آلایش‌های پایین، فاصله‌ی بین نوارهای بار بیشتر از آلایش‌های بالاست. در این محدوده‌ی آلایشی که ما به دنبال بررسی آن هستیم، فاصله‌ی بین نوارهای بار، برابر با $8a$ است. به این ترتیب در بین هر دو نوار بار ۷ نوار اسپینی قرار دارد.

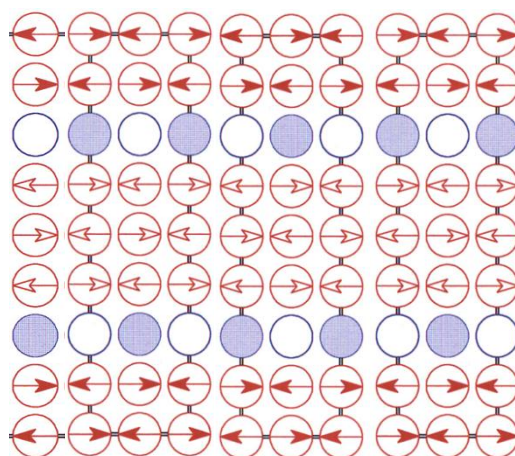
تعداد نوارهای بار در هر صفحه. n_s

با توجه به اینکه در این ناحیه‌ی آلایشی فاصله‌ی بین نوارهای بار $8a$ است، و با توجه به ابعادی که برای صفحه در نظر می‌گیریم، می‌توان به راحتی تعداد نوارهای باری که در هر صفحه قرار می‌گیرند را به دست آورد. به عنوان مثال برای نمونه‌ی $90a$ ، تعداد نوارهای بار به صورت زیر به دست می‌آید.

$$n_s = \frac{90a}{8a} \sim 12$$

تعداد بارهایی که روی هر نوار قرار می‌گیرد. n_c

یکی از مسائل مهم، نسبت حفره‌های آلاینش شده به تعداد مس‌های موجود در هر صفحه است. اما می‌توان با استفاده از یک محاسبه‌ی ساده، این نسبت را به دست آورد. می‌دانیم که در آلاینش بهینه $x \sim 16\%$ است و نسبت حفره‌ها به مس در نوارهای مجاور ۱ به ۲ است. [۵۳] مطابق شکل ۶.۵ می‌بینیم که به ازای هر دو یون مس در نوار، در نوار مجاور که جای حفره‌هاست، تنها یک حفره آلاینش شده است. در این آلاینش $r_s = 4a$ می‌باشد، بنابراین اگر ما طول هر نوار را به عنوان نمونه $10a$ در نظر بگیریم، می‌بینیم که بین هر دو نوار بار 30 یون مس وجود دارد. در این حالت 16% معادل با حدوداً 5 حفره به ازای هر 30 یون مس است. شکل ۶.۵ به این ترتیب می‌توان با توجه به درصد آلاینشی که وجود دارد، نسبت تعداد حفره‌ها را به تعداد یون‌های مس به دست آورد.



شکل ۶.۵: نمایی از موقعیت حفره‌های آلاینش شده و یون‌های مس در صفحه‌ی CuO_2 [۵۳]. حفره‌ها با دایره‌های توپر مشخص شده‌اند و دایره‌های توخالی صرفاً جهت تأکید بر نسبت ۱ به ۲ حفره به یون مس می‌باشد.

در محدوده‌ی آلاینشی مورد بررسی ما، با آلاینش‌های 0.02 ، 0.03 ، 0.04 مواجه هستیم و با توجه به اینکه $r_s = 8a$ ، حدوداً 2 حفره به ازای هر 70 یون مس خواهیم داشت. (۷ ردیف 10 تایی یون مس) این نسبتی که در اینجا بدست آوردیم، نزدیکی خوبی با تعدادی که در مقالات گزارش می‌شود، دارد [۷۵]. (در این مقاله به ازای 256 یون مس، 8 عدد حفره گزارش شده است. ما با توجه

به محاسبات خود مقدار $\sim 7/3$ را به دست می‌آوریم که حدوداً برابر ۷ حفره می‌توان در نظر گرفت.) به این ترتیب برای نمونه‌ی $a=90^\circ$ ، از آنجا که به ازای هر ۷ ردیف ۱۰ تایی، ۲ حفره داریم؛ پس به ازای هر ۷ ردیف ۹۰ تایی یون مس، حدوداً ۲۰ حفره خواهیم داشت. همچنین حفره‌های آلایش‌شده را به صورت یکنواخت روی نوارها در نظر می‌گیریم [۵۳].

◀ فاصله‌ی صفحات بار از هم. d

فاصله‌ی صفحات بار از هم، طبق اطلاعاتی که از سلول واحد کوپرایت‌ها موجود است، برابر با $6.6^\circ A$ که معادل با $1.71a$ می‌باشد [۵۳، ۳۸].

◀ تعداد صفحات موجود در سیستم. n_p

تعداد صفحاتی که می‌توان در نظر گرفت به نمونه‌ای مورد بررسی، بستگی دارد.

حال که با پارامترهای توصیف‌کننده‌ی سیستم آشنا شدیم، باید بررسی کنیم که کدام یک از آن‌ها می‌توانند تغییر کنند و کدام یک ثابت هستند. فاصله‌ی بین صفحات، d ، به ساختار ماده بستگی دارد. از آنجا که در این ناحیه‌ی آلایشی ساختار ماده تغییری نمی‌کند، بنابراین d ثابت می‌ماند. از آنجا که باز هم در یک ناحیه‌ی آلایشی خاص قرار داریم، فاصله‌ی بین نوارهای باری که در هر صفحه قرار می‌گیرند، r_s ، نیز همواره ثابت می‌ماند؛ $r_s = 8a$. زاویه‌ی سمتی نوارها نیز همواره $\frac{\pi}{2}$ است. اما زاویه‌ی قطبی نوارها بسته به اینکه در کدام صفحه باشیم، می‌توانند فرق داشته باشد. البته این در حالتی است که در تمام ناحیه‌ی آلایشی باشیم، حال که تنها در ناحیه‌ی آلایش‌های پایین هستیم، زاویه‌ی قطبی تمام نوارهایی که در هر صفحه قرار دارد، برابر با 45° درجه می‌باشد. اما باقی پارامترها، شامل n_c, n_s, n_p, l ، می‌توانند تغییر کنند. البته لازم به ذکر است که نحوه‌ی تغییر پارامترهای n_s, n_c متناسب با نحوه‌ی تغییر طول نوارها می‌باشد. (در قسمت فوق که هر یک از پارامترها را توضیح می‌دادیم، این مسأله واضح دیده می‌شود.)

همان‌طور که می‌بینیم ما با نوارهای بار به صورت آرایه‌هایی یک بُعدی برخورد کردیم. صحت این مطلب با توجه به مطالعات انجام شده درست است [۷۶]. اما زمانی که دینامیک نوارهای بار مطرح شود، در دماهای بالاتر و یا آلایش‌های بیشتر، دیگر یک‌بُعدی در نظر گرفتن نوارها کار درستی نخواهد بود و نوارها به صورت شبه یک بُعدی خواهند بود [۳۸،۴۵].

۲.۳.۵ محاسبه و تحلیل انرژی برهم‌کنشی

برای محاسبه‌ی انرژی برهم‌کنشی سیستم، بایستی یکی از پارامترهای معلوم مسئله را به صورت مجهول در نظر بگیریم، تا با محاسبات خود برای آن مقداری را به دست آوریم. به این ترتیب می‌توانیم صحت یا عدم صحت محاسبات خود را دریابیم.^۴ به همین منظور سه صفحه ($n_p = 3$) در سیستم در نظر می‌گیریم که زاویه‌ی قطبی، تنها در صفحات اول و سوم مشخص و در صفحه‌ی دوم متغیر باشد. ابتدا در حالتی که طول نوارها کم باشد، مسئله را بررسی می‌کنیم. سپس اثر افزایش طول هر نوار و همچنین افزایش تعداد صفحات را نیز بررسی خواهیم کرد. (افزایش این پارامترها سبب افزایش زیاد زمان محاسبات می‌شود، به همین علت ابتدا با طول‌های کم مسئله را مورد بررسی قرار می‌دهیم).

با این اوصاف پارامترهای توصیف کننده‌ی سیستم به شرح زیر بیان می‌شوند:

$$l = 90a, n_s = 12, n_c = 20, n_p = 3, r_s = 8a, d = 1.71a. \quad (۴.۵)$$

حال می‌توانیم به محاسبه‌ی انرژی برهم‌کنشی سیستم پردازیم. البته حالت‌های مختلفی همچنان برای در نظر گرفتن پیکربندی سیستم، وجود دارد. همان‌طور که در شکل ۶.۵ می‌بینیم، موقعیت بارهایی که روی نوارهای مجاور هستند، دقیقاً روبروی هم نیست. البته باید دقت داشت که پیکربندی نشان داده شده در شکل، صرفاً نمایی فرضی از سیستم است. همان‌طور که قبل هم اشاره شد، تنها به طور دقیق می‌دانیم

^۴ به یاد داریم که رهیافتی که برای حل مسئله انتخاب کرده بودیم، رهیافت پدیده‌شناختی بود. به همین علت است که به این شیوه به محاسبه‌ی انرژی برهم‌کنشی می‌پردازیم.

که پخش شدن حفره‌ها روی نوارها، به صورت یکنواخت است و اطلاعاتی از مکان دقیق آرایش شدن آن‌ها نیست. به همین خاطر باید در محاسبه‌ی انرژی برهم‌کنشی، هم حالتی که در آن بارها در موقعیت‌های روبروی هم باشند و هم حالتی که این چنین نباشند، را بررسی کنیم. مسئله‌ی دیگری که نیز مورد توجه قرار خواهیم داد، این است که چه برهم‌کنش‌هایی را در سیستم وارد کنیم. به این معنا که انرژی برهم‌کنشی می‌تواند شامل دو بخش باشد؛ برهم‌کنش بین بارهایی که روی هر نوار قرار دارند و برهم‌کنش بین بارهایی که روی نوارهای مختلف وجود دارند. در قسمت‌های قبل ما تنها برهم‌کنش بین بارهایی که روی نوارهای مختلف قرار داشتند را مورد مطالعه قرار دادیم. در این قسمت می‌خواهیم اثر وارد شدن یا نشدن برهم‌کنش بین بارهایی که روی هر نوار قرار دارند را نیز مطالعه کنیم. بدین ترتیب انرژی برهم‌کنشی را در حالت‌های مختلف زیر بررسی می‌کنیم:

۱- انرژی برهم‌کنشی در حالتی که موقعیت بارهایی که روی نوارهای مجاور هستند، دقیقاً روبروی هم نباشند؛ در دو حالت:

الف) با در نظر گرفتن تمام برهم‌کنش‌ها؛ شامل برهم‌کنش بین بارهایی که روی هر نوار است و برهم‌کنش بین بارهایی که روی نوارهای مختلف است.

ب) با در نظر گرفتن تنها برهم‌کنش بین بارهایی که روی نوارهای مجاور است.

۲- انرژی برهم‌کنشی در حالتی که موقعیت بارهایی که روی نوارهای مجاور هستند، روبروی هم باشند؛ در دو حالت:

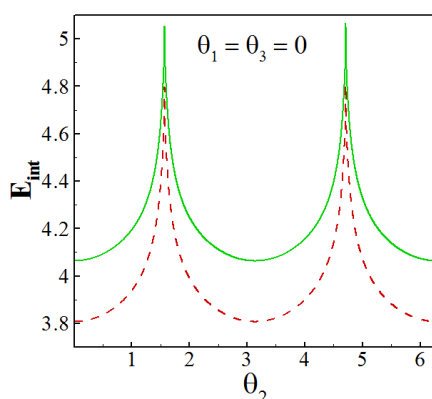
الف) با در نظر گرفتن تمام برهم‌کنش‌ها؛ شامل برهم‌کنش بین بارهایی که روی هر نوار است و برهم‌کنش بین بارهایی که روی نوارهای مختلف است.

ب) با در نظر گرفتن تنها برهم‌کنش بین بارهایی که روی نوارهای مجاور است.

همان‌طور که در بخش ۱.۲.۵ نیز بیان شد، محاسبه‌ی انرژی برهم‌کنشی سیستم، با استفاده از روش‌های تحلیلی زمان زیادی صرف می‌کند و در نتیجه مطلوب نیست. بنابراین برای حل از روش‌های عددی استفاده می‌کنیم.

۱.۲.۳.۵ انرژی برهم‌کنشی - حالت شماره ۱

با توجه به شکل ۶.۵، فرض می‌کنیم که هر بار نسبت به بار متناظر خود در نوارهای مجاور به اندازه‌ی a جابجا شده باشد. با این فرض به محاسبه‌ی انرژی برهم‌کنشی در دو حالت (الف) و (ب) می‌پردازیم. شکل زیر نتیجه‌ی این بررسی است:



شکل ۷.۵: انرژی برهم‌کنشی بر حسب زاویه‌ی نوارهای صفحه‌ی دوم. زاویه‌ی نوارهای صفحات اول و سوم در زاویه‌ی ۰ درجه ثابت شده‌اند. نمودار خط‌پر انرژی برهم‌کنشی در شرایط (الف) و نمودار خط‌چین در شرایط (ب) رسم شده‌اند.

همان‌طور که دیده می‌شود، نوع رفتار انرژی برهم‌کنشی در دو حالت (الف) و (ب) تغییری نمی‌کند. با در نظر گرفتن تمام برهم‌کنش‌ها تنها اتفاقی که روی می‌دهد، آن است که انرژی برهم‌کنشی سیستم از نظر مقداری افزایش می‌یابد. حالت کمینه‌ی انرژی برهم‌کنشی سیستم نیز در موقعیت $\theta = n\pi$ (که n عددی صحیح است) دیده می‌شود، یعنی در حالتی که نوارهای صفحه‌ی دوم همگی به موازات نوارهایی که در صفحه‌های اول و سوم هستند، قرار بگیرند و این همان چیزی است که در تجربه دیده شد. پیشتر دیدیم که در این ناحیه‌ی آلاشی، آرایش نوارها در تمام صفحات مشابه هم است. البته اشاره کرده بودیم که

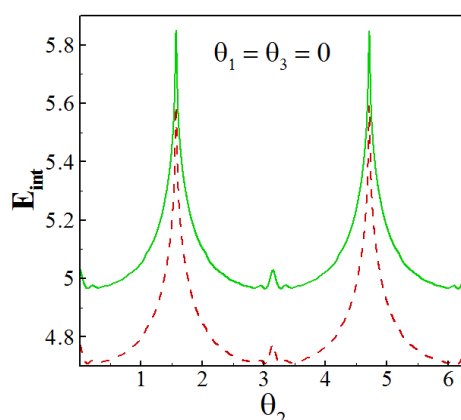
جهت سهولت در محاسبات، بدون از دست دادن کلیت مسئله، نوارهای بار که به صورت قطری هستند را

۴۵ درجه چرخانده و در راستای زاویه‌های $\theta = n\pi$ قرار می‌دهیم.

۲.۲.۳.۵ انرژی برهم‌کنشی - حالت شماره ۲

در این حالت فرض بر این بود که هر بار روی نوار، روبروی بار متناظر خود در نوار مجاور قرار بگیرد.

بدین ترتیب انرژی برهم‌کنشی به صورت زیر حاصل می‌گردد:



شکل ۸.۵: انرژی برهم‌کنشی بر حسب زاویه‌ی نوارهای صفحه‌ی دوم، زاویه‌ی نوارهای صفحات اول و سوم در زاویه‌ی ۰ درجه ثابت شده‌اند. نمودار خط‌پر انرژی برهم‌کنشی در شرایط (الف) و نمودار خط‌چین در شرایط (ب) رسم شده‌اند.

نتیجه کلی مشابه قسمت قبل است؛ یعنی با در نظر گرفتن تمامی برهم‌کنش‌ها، تنها تفاوت در مقدار

انرژی برهم‌کنشی است نه در رفتار آن. اما مسئله‌ی دیگری که در این قسمت با آن مواجه هستیم، ظاهر

شدن یک بیشینه‌ی موضعی در $\theta = n\pi$ است که علت آن در زیر به طور کامل شرح داده می‌شود.

در محاسبه‌ی انرژی برهم‌کنشی، تعداد زیادی جمله داریم که در بین آن‌ها چندین جمله‌ی $\frac{1}{d}$ هم دیده

می‌شود. این جملات به علت اینکه بارهایی داریم که دقیقاً در مکان‌هایی مشابه هم قرار دارند، بوجود می‌-

آیند. به همین دلیل، چنین جملاتی در حالت ۱ دیده نمی‌شوند. d فاصله‌ی بین صفحات بود که برابر با

$1.71 a = 6.6^\circ A$ است و این مقدار همان طور که می‌بینیم بسیار کوچک است. بنابراین $\frac{1}{d}$ عدد خیلی

بزرگی خواهد شد. همین امر سبب می‌شود که در انرژی برهم‌کنشی افزایش ناگهانی انرژی را شاهد باشیم.

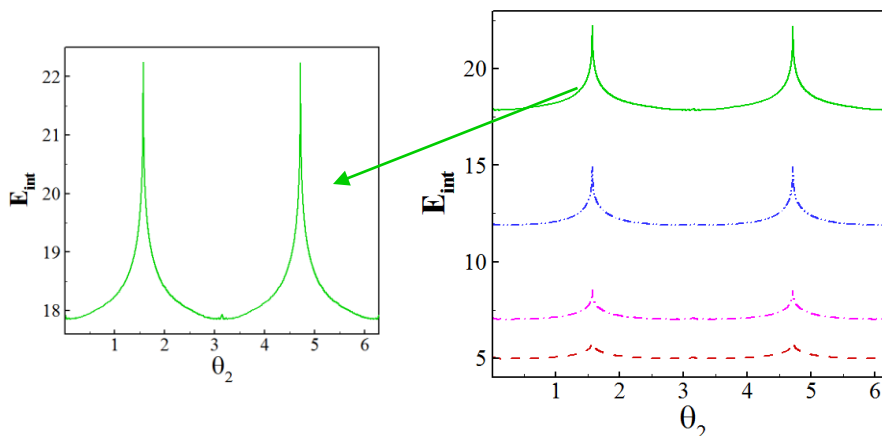
حال هر چه تعداد جملات انرژی الکتروستاتیکی بیشتر باشد، اثر این جملات در انرژی کل کمتر می شود و به همین ترتیب اگر تعداد جملات انرژی کل کم باشد، اثر این جملات محسوس می شود. تعداد جملاتی که در انرژی برهم کنشی ظاهر می شوند، به طول نوارهایی که در سیستم در نظر می گیریم، بستگی مستقیم دارند؛ هر چه طول نوارها بیشتر باشد، تعداد جملاتی که در انرژی ظاهر می شوند بیشتر خواهند بود و به ازای طول های کوچک تر، تعداد جملات کمتری در انرژی ظاهر می شود. به همین دلیل انتظار خواهیم داشت که به ازای طول های بیشتر، بیشینه ی موضعی دیده شده در انرژی برهم کنشی کاهش پیدا کند که در قسمت بعدی به بررسی آن می پردازیم.

در حالت ۲ نیز تقریباً می توان گفت که کمینه انرژی برهم کنشی سیستم در حالتی است که $\theta \sim n\pi$. اما همان طور که واضح است، با قیاس کردن دو حالت می بینیم که حالت ۱ با آنچه که در تجربه دیده می شود، کاملاً سازگار است.

اما همان گونه که قبل بیان کردیم، پارامترهای دیگری همچون طول نوارها و فاصله ی بین صفحات مختلف نیز در مسئله وجود داشتند، که می توانستند تغییر کنند. این تغییرات را می توان در دو حالت ۱ و ۲ بررسی کرد. اما از آنجا که نوع رفتار انرژی برهم کنشی در هر دو حالت ۱ و ۲ یکسان است و علت دیده شدن بیشینه ی موضعی در انرژی نیز به طور واضح مشخص شده است؛ در نتیجه هر نوع تغییری که در رفتار انرژی برهم کنشی با تغییر دادن پارامترهای فوق صورت پذیرد، انتظار بر این است که در هر دو حالت یکسان باشد. (این بررسی در دو حالت صورت گرفته است، و برابر بودن آن ها محرز شده است.) ما در این قسمت تنها بررسی در حالت ۲ را بیان می کنیم و از آوردن بررسی های انجام شده در حالت ۱، صرف نظر می کنیم.

۳.۲.۳.۵ افزایش طول نوارها

تا بدین جا با طول $l = 90a$ کار کردیم، در حالی که در واقعیت ممکن است حالت‌هایی را نیز داشته باشیم که در آن‌ها طول نوارها بیشتر از این مقدار باشد. به همین منظور انرژی برهم‌کنشی را با در نظر گرفتن حالت ۲ در حالی که تمام برهم‌کنش‌ها را وارد کرده باشیم، به ازای طول‌های بزرگتری از نوارها، مورد بررسی قرار می‌دهیم.



شکل ۹.۵: انرژی برهم‌کنشی بر حسب زاویه‌ی صفحه‌ی دوم. زاویه‌ی نوارهای صفحات اول و سوم در زاویه‌ی 0° درجه ثابت شده‌اند.

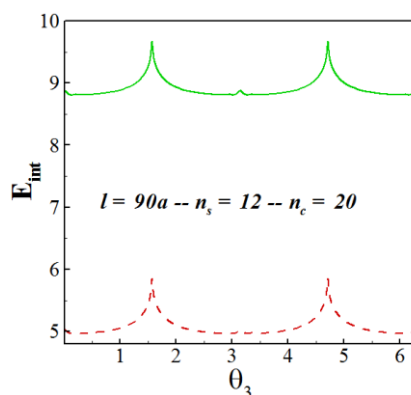
نمودار خط‌چین، $l = 90a, n_s = 12, n_c = 20$ ؛ نمودار خط‌چین-نقطه، $l = 135a, n_s = 17, n_c = 30$ ؛ نمودار خط‌چین-دو نقطه، $l = 225a, n_s = 28, n_c = 50$ ؛ نمودار خط‌پر، $l = 259a, n_s = 33, n_c = 52$.

با توجه به شکل دیده می‌شود که با افزایش طول نوارها، همان‌طور که انتظار می‌رفت، بیشینه‌ی موضعی دیده شده، کاهش می‌یابد. اما تغییری در نوع رفتار انرژی برهم‌کنشی را شاهد نخواهیم بود. در نتیجه می‌توان با طول‌های کم نیز کار کرد و مطمئن بود که نوع رفتار انرژی برهم‌کنشی را همواره درست به دست می‌آورد. این نتیجه گیری از آنجا که محاسبه‌ی انرژی برهم‌کنشی در حالتی که طول نوارها زیاد باشد، زمان‌بر است، بسیار حائز اهمیت می‌باشد.

۴.۲.۳.۵ افزایش تعداد صفحات

آخرین پارامتری که می‌توان تغییرات آن را مورد بررسی قرار داد، افزایش تعداد صفحات است. در این حالت انرژی برهم‌کنشی به صورت شکل ۱۰.۵ حاصل می‌گردد.

با افزایش تعداد صفحات مورد بررسی هیچ تفاوتی در نوع رفتار انرژی برهم‌کنشی سیستم دیده نمی‌شود. تنها انرژی افزایش مقداری پیدا می‌کند که نتیجه‌ی دور از انتظاری نیز نیست. به این ترتیب، استفاده از تعداد صفحات کم در محاسبه‌ی انرژی برهم‌کنشی ما را به نتایج کاملاً درستی راهنمایی می‌کند. در نتیجه خیلی راحت می‌توان با انتخاب تعداد کمتری صفحه به بررسی سیستم پرداخت.



شکل ۱۰.۵: انرژی برهم‌کنشی بر حسب تغییرات زاویه‌ی صفحه‌ی سوم. زاویه‌ی بقیه‌ی صفحات در ۰ ثابت شده‌اند. نمودار خط‌چین برای حالتی است که ۳ صفحه در نظر بگیریم. نمودار خط‌پر برای حالتی است که ۴ صفحه در نظر بگیریم.

۳.۳.۵ نتیجه‌گیری

با توجه به مطالعات فوق دیدیم که استفاده از پارامترهایی که در رابطه‌ی ۴.۵ بیان شدند، کاملاً درست است و ما را به نتایج درستی رهنمون می‌شوند. نتیجه‌گیری کلی که می‌توان در این قسمت مطرح کرد، این است که ما توانستیم با استفاده از رهیافتی کلاسیکی سهم مربوط به بار هامیلتونی را به دست آوریم و با استفاده از این بخش هامیلتونی، پیکربندی کل سیستم را به دست آوریم. این بدان معناست که حضور نوارهای اسپینی در پیکربندی تعادل سیستم، نقش چندانی ندارند و می‌توان از آن‌ها صرف نظر کرد. اما نکته‌ی مهم این است که ما توانستیم با رهیافتی کلاسیکی پیکربندی سیستم را توصیف کنیم، به گونه‌ای که به طور کامل با نتایج تجربی در توافق است. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که اثرات کوانتومی در بروز پیکربندی تعادل سیستم در ناحیه‌های آلایش‌های خیلی پایین، نقش زیادی ندارد.

این محاسبات و نتیجه‌گیری را می‌توان در مورد نیکلایتها که در فصل سوم با آنها نیز آشنا شدیم، به کار برد. همان‌طور که به یاد داریم، در نیکلایتها نوارهای بار قطری و استاتیک بودند.

۴.۵ گرمای ویژه – کوپرایتها

۱.۴.۵ علت اهمیت مطالعه‌ی گرمای ویژه

از بین ویژگی‌های ترمودینامیکی سیستم، گرمای ویژه در بحث ابررساناهای دمای بالا از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. به گونه‌ای که هر نظریه‌ای که در این باب مطرح می‌شود باید اطلاعاتی راجع به گرمای ویژه داشته باشد، چون گرمای ویژه نسبت به تمام برانگیختگی‌های دمای پایین حساس است [۷۷] و ابررسانایی پدیده‌ای در مقیاس دماهای پایین است. از جمله‌ی این برانگیختگی‌ها می‌توان به برانگیختگی‌های الکترونی، فونونی، افت و خیزهای اسپینی و یا مغناطیسی، ناهنجاری‌های شاتکی و ... اشاره کرد. علاوه بر این، موارد زیر نیز جزء دلایل اهمیت خاص گرمای ویژه به حساب می‌آیند:

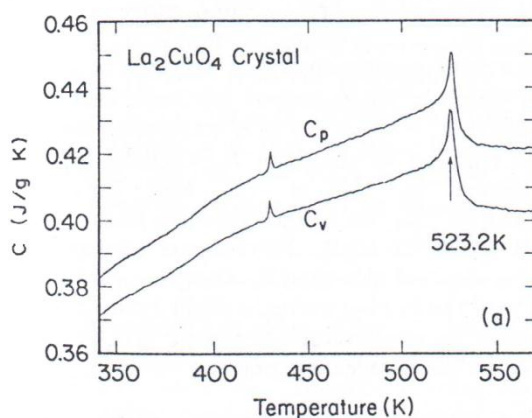
- گرمای ویژه و رسانندگی گرمایی محدود به گستره‌ی خاصی از دما نبوده و در کل محدوده‌ی دمایی پاسخ‌گو هستند.
- به دلیل اینکه اندازه‌گیری برای محاسبه‌ی این موارد به صورت کُپه‌ای صورت می‌گیرد، پاسخ کل نمونه را داریم.
- پایداری در ابررساناها در به کار بردن آنها بسیار حائز اهمیت است. اندازه‌گیری گرمای ویژه، اطلاعات مناسبی در این باب می‌دهد. زیرا با اندکی تغییر دما مواد ابررسانا، ناپایدار می‌شوند [۳۵].

۲.۴.۵ مطالعات تجربی

اغلب اندازه‌گیری‌های گرمای ویژه در فشار ثابت انجام می‌گیرد، یعنی C_p به دست می‌آید، در حالی که در اغلب مباحث و محاسبات نظری ترمودینامیکی از C_v ، گرمای ویژه در حجم ثابت استفاده می‌شود. اختلاف C_p ، C_v از رابطه‌ی زیر [۷۸] به دست می‌آید:

$$C_p - C_v = \beta^2 B V T \quad (۵.۵)$$

که در آن β ضریب انبساط حجمی، B مدول کپهای و V حجم نمونه است. اختلاف C_p ، C_v را در یک نمونه‌ی کوپرایت، می‌توان در کار سان^۵ و همکاران [۷۹] دید.



شکل ۱۱.۵: رفتار گرمای ویژه در حجم ثابت و فشار ثابت برای یک نمونه‌ی La_2CuO_4 .

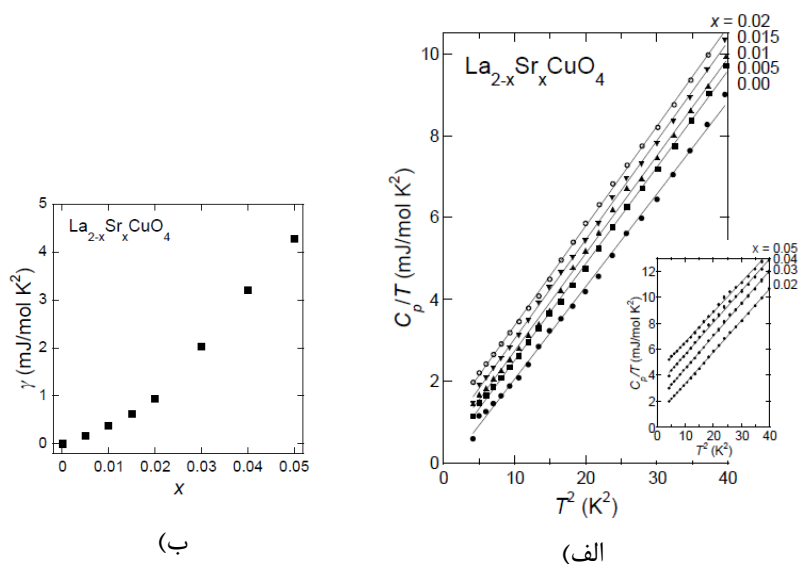
با توجه به شکل می‌بینیم که نوع رفتار C_p ، C_v مشابه هم بوده و تنها تفاوتی که دیده می‌شود در اندازه‌ی گرمای ویژه است. با این اوصاف می‌توان به راحتی، نتایج حاصل از تجربه را با نتایج حاصل از محاسبات نظری قیاس کرد.

مسئله‌ی حائز اهمیت در بررسی گرمای ویژه، در سیستم‌های ابررساناهای دمای بالا، تفاوت بین رفتار گرمای ویژه در حالت غیرابرسانایی (حالت بهنجار) و حالت ابرسانایی است. در مطالعه‌ی گرمای ویژه در

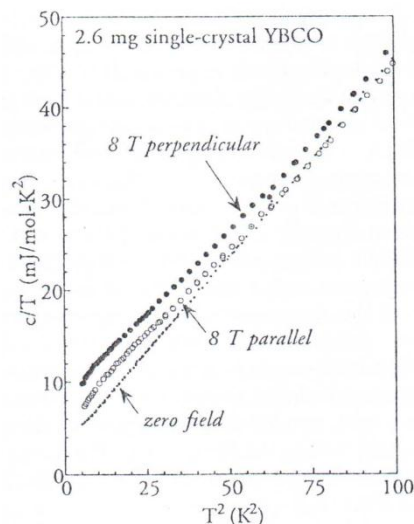
حالت بهنجار، در رسم داده‌ها، معمولاً $\frac{C_p}{T}$ را به صورت تابعی از T^2 نشان می‌دهند که به صورت یک خط است.

$$\frac{C_p}{T} = \gamma + \beta T^2 \quad (۶.۵)$$

در این نمودار محل تقاطع خط با محور $\frac{C_p}{T}$ ، مقدار γ (ضریب گرمای ویژه الکترونی) را به دست می‌دهد و شیب خط مقدار β (ضریب گرمای ویژه، سهم فونونی) را می‌دهد. تعیین این پارامترها از آنجا که در یافتن سازوکار ابررسانایی راهنمای خوبی هستند، حائز اهمیت می‌باشد [۳۵]. برای دو نمونه از کوپرایت‌ها، نمودار فوق را می‌توان در شکل‌های ۱۲.۵ و ۱۳.۵ دید. همان‌گونه که در شکل ۱۲.۵ ب. می‌بینیم، ضریب گرمای ویژه الکترونی با افزایش آلایش، افزایش می‌یابد.



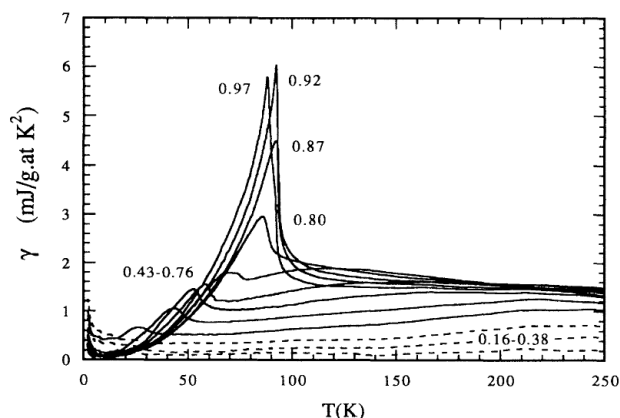
شکل ۱۲.۵: (الف) نمودار C_p/T بر حسب T^2 برای یک نمونه بلور $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ در قسمت اصلی گرمای ویژه برای آلایش‌های $0.00 < x < 0.02$ و در نمودار داخلی برای آلایش‌های $0.02 \leq x \leq 0.05$ رسم شده است. (ب) رفتار ضریب گرمای ویژه الکترونی بر حسب آلایش‌های پایین رسم شده است [۸۰].



شکل ۱۳.۵: نمودار C_p/T بر حسب T^2 برای یک نمونه بلور $YBa_2Cu_3O_{6.95}$ [۷۷].

اما همان‌طور که بیان شد در دماهایی که زیر دمای گذار هستند، یعنی در حالت ابررسانایی رفتار گرمای ویژه با حالت بهنجار متفاوت می‌شود [۳۵]. این تفاوت در شکل ۱۴.۵ به وضوح، در ضریب گرمای ویژه الکترونی دیده می‌شود.

YBCO در آلایش $x \sim 0.4$ گذار به حالت ابررسانایی دارد. با توجه به شکل ۱۴.۵ می‌بینیم که در آلایش‌های کمتر از این مقدار، که ماده در حالت بهنجار است، قله‌ای در رفتار ضریب گرمای ویژه ظاهر نمی‌شود اما به ازای آلایش‌های بیشتر قله ظاهر می‌شود. این قله با افزایش میزان آلایش، افزایش می‌یابد.



شکل ۱۴.۵: ضریب گرمای ویژه الکترونی بر حسب دما برای نمونه‌ی $YBa_2Cu_3O_{6+x}$. اعداد نوشته شده در نمودار، میزان آلایش x هستند [۸۱].

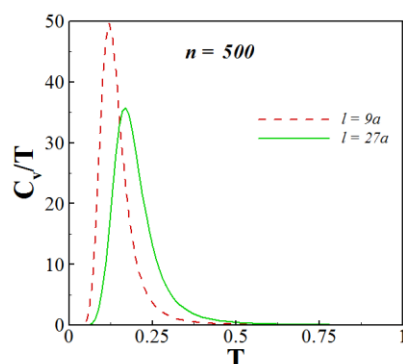
۳.۴.۵ محاسبات نظری

ما در کار خود در ناحیه‌ی آرایش‌های بسیار پایین هستیم، جایی که ماده در حالت بهنجار است. یعنی انتظار می‌رود که رفتار گرمای ویژه مطابق با شکل‌های ۱۲.۵ و ۱۳.۵ توصیف شود. از آنجا که ما تنها سهم مربوط به بار را در هامیلتونی سیستم مطالعه کرده‌ایم، در این بخش می‌توانیم ضریب گرمای ویژه‌ی الکترونی را که با شکل ۱۴.۵ نمایش داده می‌شود، مورد مطالعه و محاسبه قرار دهیم. (شکل ۱۴.۵ در آرایش‌های کمتر از 0.4 مد نظر می‌باشد.) به یاد داریم که در این ناحیه‌ی آلاشی با افزایش دما، حفره‌های آرایش شده توانایی حرکت پیدا کرده و دینامیک خواهند داشت. مسئله‌ای که اهمیت دارد، چگونگی وارد کردن این دینامیک در محاسبات است. روش‌های متفاوتی برای وارد کردن این اثر می‌تواند وجود داشته باشد که تک به تک، بایستی مورد مطالعه قرار بگیرند. ما در این کار، دینامیک را به صورت جابجایی هر حفره، تنها در راستای z وارد محاسبات کرده‌ایم. در محاسبه‌ی گرمای ویژه نیز، مانند انرژی برهم‌کنشی پارامترهایی دخیل هستند که تغییرات آن‌ها حائز اهمیت است. این پارامترها، طول نوارها l و میزان دقت انتگرال گیری^۶ n می‌باشند. (به ازای $n \geq 500$ ، حاصل یک انتگرال با این روش انتگرال گیری دقیقاً برابر جواب تحلیلی آن می‌شود.) در این بخش زمان انجام محاسبات بسیار بیشتر از زمان انجام محاسبات در انرژی برهم‌کنشی سیستم است، به همین دلیل بایستی با شناخت پیدا کردن نسبت به نحوه‌ی تغییر رفتار گرمای ویژه با تغییر پارامترهای مرتبط، به دنبال شرایطی بود که بتوان با صرف زمان کم، به نتیجه‌ی مطلوب دست یافت.

◀ اثر تغییر طول نوارها

^۶ برای انتگرال گیری از روش سیمپسون استفاده کرده‌ایم.

با توجه به شکل رسم شده می‌بینیم که با افزایش طول نوارها، نوع رفتار ضریب گرمای ویژه الکترونی تغییری نمی‌کند، یعنی در آن همچنان شاهد حضور قله‌ای در دماهای پایین هستیم. اما قله‌ای که در آن ظاهر شده است به سمت دماهای بالاتر حرکت کرده و ارتفاع آن کاهش می‌یابد. بنابراین می‌توان رفتار ضریب گرمای ویژه الکترونی را به راحتی در طول‌های بیشتر نیز پیش‌بینی کرد. در نتیجه می‌توان به سادگی با طول‌های کم کار کرد و نوع رفتار را در طول‌های بزرگ نیز دانست. به این ترتیب سرعت انجام محاسبات به طرز قابل توجهی کاهش می‌یابد. (علت انتخاب طول‌های خیلی کمتر از طول‌هایی که در قسمت محاسبه‌ی انرژی برهم‌کنشی داشتیم، به این علت است که محاسبات در این بخش با افزایش طول نوارها به شدت افزایش می‌یابد و بنابراین زمان انجام محاسبات به صورت قابل توجهی رشد می‌کند).

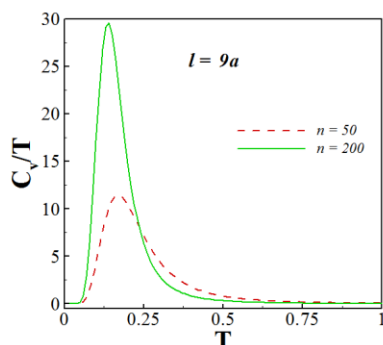


شکل ۱۵.۵: رفتار ضریب گرمای ویژه‌ی الکترونی به ازای $n=500$ و طول‌های متفاوت.

◀ اثر تغییر n

n نیز پارامتری است که هر چه کوچکتر اختیار شود، زمان انجام محاسبات کم‌تر خواهد شد، اما از آنجا که با کاهش آن دقت انتگرال‌گیری کاهش پیدا می‌کند، در نتیجه بایستی به دقت مورد مطالعه قرار بگیرد. همان‌طور که در شکل ۱۶.۵ می‌بینیم، با کاهش دادن مقدار n همچنان در ضریب گرمای ویژه‌ی الکترونی شاهد حضور قله هستیم، اما این قله از نظر مقداری کاهش پیدا

کرده و به سمت دماهای بالاتر حرکت می‌کند. در نتیجه مانند حالت قبل، می‌توان با n های کمتر کار کرد اما نوع تغییراتی که در آن به ازای افزایش n دیده خواهد شد را نیز مد نظر داشت.



شکل ۱۴.۵: رفتار ضریب گرمای ویژه الکترونی به ازای $l=9a$ و n های متفاوت.

در نتیجه حال که نسبت به نوع تغییرات رفتار ضریب گرمای ویژه، بر حسب تغییر پارامترهای مؤثر در سیستم شناخت کافی پیدا کردیم، می‌توانیم به ازای طول‌های بزرگتر (که متناظر با تجربه خواهد بود) و n مناسب، رفتار ضریب گرمای ویژه الکترونی، را بیان کنیم. به این معنا که شاهد قله‌ای در آن خواهیم بود که پس از آن، این ضریب شروع به کاهش قابل توجهی نسبت به افزایش دما می‌کند. این نوع رفتار از ضریب گرمای ویژه، قابل انتظار نیز هست. همان‌طور که می‌دانیم در یک ماده زمانی که از حالت عایق به رسانا گذار انجام می‌دهد، γ کاهش می‌یابد [۸۲] و این دقیقاً رفتاری است که با توجه به نمودارهای فوق دیده می‌شود. در سیستم مورد مطالعه‌ی ما، دقیقاً در این ناحیه‌ی آلایشی با افزایش دما، حفره‌ها توانایی حرکت پیدا کرده و رفتار فلزی را از خود نشان می‌دهند. به این ترتیب یعنی باید با افزایش دما، شاهد کاهش مقدار γ باشیم که با توجه به محاسبات خود این را می‌بینیم. تا بدین‌جا رفتار ضریب گرمای ویژه الکترونی با شکل ۱۴.۵ که از تجربه است، کاملاً همخوانی دارد. در شکل ۱۴.۵ می‌بینیم که با افزایش دما شاهد کاهش در γ هستیم، اما با افزایش بیشتر دما، γ شروع به افزایش ناچیزی در مقدار خود می‌کند که این مسئله در جواب ما دیده نمی‌شود. در کار ما با زیاد شدن بیشتر دما، نوع رفتار تغییری نمی‌کند. این مسئله به نوع در نظر گرفتن دینامیک حفره‌ها برمی‌گردد. از آنجا که ما خود را تنها محدود به حرکت در

یک راستا کرده بودیم، با این کار، محدودیتهایی در حرکت حفره‌ها اعمال کرده‌ایم. در ادامه‌ی مطالعه در این قسمت بایستی انواع مختلف دینامیک که حفره‌ها می‌توانند اختیار کنند را برای آن‌ها در نظر گرفت، تا بتوان توصیف صحیحی از سیستم ارائه کرد. این کار در برنامه‌ی آتی ما قرار دارد.

پوست (الف)

تبادل مستقیم در اوربیتال‌های متعامد

همان‌طور که دیدیم برای به دست آوردن انرژی تبدلی در حالتی که اوربیتال‌های اتمی متعامد باشند، نیاز به داشتن انرژی حالت‌های سه‌گانه و یگانه است. به علت متعامد بودن توابع موج، ثابت بهنجارش آن‌ها برابر ۱ می‌باشد. بنابراین به طور مستقیم به سراغ محاسبه‌ی انرژی‌ها خواهیم پرداخت.

$$\varepsilon_t = \langle \psi_3 | \mathcal{H} | \psi_3 \rangle = \langle \psi_3 | h_0(\mathbf{r}_1) | \psi_3 \rangle + \langle \psi_3 | h_0(\mathbf{r}_2) | \psi_3 \rangle + \left\langle \psi_3 \left| \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right| \psi_3 \right\rangle \quad (\text{الف. ۱})$$

$$\langle \psi_3 | h_0(\mathbf{r}_1) | \psi_3 \rangle = \varepsilon_a, \quad \langle \psi_3 | h_0(\mathbf{r}_2) | \psi_3 \rangle = \varepsilon_b \quad (\text{الف. ۲})$$

$$\begin{aligned} & \left\langle \psi_3 \left| \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right| \psi_3 \right\rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle \uparrow\uparrow | \uparrow\uparrow \rangle \iint \{ \varphi_a^*(\mathbf{r}_1) \varphi_b^*(\mathbf{r}_2) - \varphi_b^*(\mathbf{r}_1) \varphi_a^*(\mathbf{r}_2) \} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \{ \varphi_a(\mathbf{r}_1) \varphi_b(\mathbf{r}_2) - \\ & \quad \varphi_b(\mathbf{r}_1) \varphi_a(\mathbf{r}_2) \} \quad (\text{الف. ۳}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \\ & \frac{e^2}{2} \left(\iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \varphi_a^*(\mathbf{r}_1) \varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \varphi_a(\mathbf{r}_1) \varphi_b(\mathbf{r}_2) - \right. \\ & \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \varphi_a^*(\mathbf{r}_1) \varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \varphi_b(\mathbf{r}_1) \varphi_a(\mathbf{r}_2) - \\ & \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \varphi_b^*(\mathbf{r}_1) \varphi_a^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \varphi_a(\mathbf{r}_1) \varphi_b(\mathbf{r}_2) + \\ & \left. \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \varphi_b^*(\mathbf{r}_1) \varphi_a^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \varphi_b(\mathbf{r}_1) \varphi_a(\mathbf{r}_2) \right) \quad (\text{الف. ۴}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{e^2}{2} \left(2 \iint dr_1 dr_2 |\varphi_a(\mathbf{r}_1)|^2 \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} |\varphi_b(\mathbf{r}_2)|^2 \right. \\
&\quad \left. - 2 \iint dr_1 dr_2 \varphi_a^*(\mathbf{r}_1) \varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \varphi_b(\mathbf{r}_1) \varphi_a(\mathbf{r}_2) \right) \\
&= C_{ab} - J_{ab} \tag{الف.۵}
\end{aligned}$$

به همان ترتیبی که در فصل اشاره شد، C_{ab} انتگرال کولنی و J_{ab} انتگرال تبادلی است. بدین طریق انرژی حالت سه‌گانه به فرم زیر حاصل می‌شود:

$$\varepsilon_t = \varepsilon_a + \varepsilon_b + C_{ab} - J_{ab} \tag{الف.۶}$$

برای به دست آوردن انرژی حالت یگانه نیز مشابه بالا عمل می‌کنیم.

$$\varepsilon_s = \langle \psi_1 | \mathcal{H} | \psi_1 \rangle = \langle \psi_1 | h_0(\mathbf{r}_1) | \psi_1 \rangle + \langle \psi_1 | h_0(\mathbf{r}_2) | \psi_1 \rangle + \left\langle \psi_1 \left| \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right| \psi_1 \right\rangle \tag{الف.۷}$$

$$\langle \psi_1 | h_0(\mathbf{r}_1) | \psi_1 \rangle = \varepsilon_a, \quad \langle \psi_1 | h_0(\mathbf{r}_2) | \psi_1 \rangle = \varepsilon_b \tag{الف.۸}$$

$$\begin{aligned}
&\left\langle \psi_1 \left| \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right| \psi_1 \right\rangle \\
&= \\
&\frac{1}{4} \{ \langle \uparrow\downarrow | - \langle \downarrow\uparrow | \} \{ | \uparrow\downarrow \rangle - | \downarrow\uparrow \rangle \} \iint \{ \varphi_a^*(\mathbf{r}_1) \varphi_b^*(\mathbf{r}_2) + \varphi_b^*(\mathbf{r}_1) \varphi_a^*(\mathbf{r}_2) \} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \{ \varphi_a(\mathbf{r}_1) \varphi_b(\mathbf{r}_2) + \varphi_b(\mathbf{r}_1) \varphi_a(\mathbf{r}_2) \} \\
&\tag{الف.۹}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \\
&\frac{e^2}{2} \left(\iint dr_1 dr_2 \varphi_a^*(\mathbf{r}_1) \varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \varphi_a(\mathbf{r}_1) \varphi_b(\mathbf{r}_2) + \right. \\
&\quad \left. \iint dr_1 dr_2 \varphi_a^*(\mathbf{r}_1) \varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \varphi_b(\mathbf{r}_1) \varphi_a(\mathbf{r}_2) + \right.
\end{aligned}$$

$$\iint dr_1 dr_2 \varphi_b^*(\mathbf{r}_1) \varphi_a^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \varphi_a(\mathbf{r}_1) \varphi_b(\mathbf{r}_2) +$$

$$\iint dr_1 dr_2 \varphi_b^*(\mathbf{r}_1) \varphi_a^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \varphi_b(\mathbf{r}_1) \varphi_a(\mathbf{r}_2) \quad (\text{الف. ۱۰})$$

$$= \frac{e^2}{2} \left(2 \iint dr_1 dr_2 |\varphi_a(\mathbf{r}_1)|^2 \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} |\varphi_b(\mathbf{r}_2)|^2 \right.$$

$$\left. + 2 \iint dr_1 dr_2 \varphi_a^*(\mathbf{r}_1) \varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \varphi_b(\mathbf{r}_1) \varphi_a(\mathbf{r}_2) \right)$$

$$= C_{ab} + J_{ab} \quad (\text{الف. ۱۱})$$

نهایتاً انرژی حالت یگانه به صورت زیر حاصل می‌شود:

$$\varepsilon_s = \varepsilon_a + \varepsilon_b + C_{ab} + J_{ab} \quad (\text{الف. ۱۲})$$

پوست (ب)

تبادل مستقیم در اوربیتال‌های غیرمتعامد

در حالتی که اوربیتال‌های اتمی غیرمتعامد هستند، بین آن‌ها همپوشانی وجود دارد. همان‌طور که در فصل دیدیم، این همپوشانی برابر با l می‌باشد. در نتیجه برای محاسبه‌ی انرژی حالت‌های یگانه و سه‌گانه در ابتدا باید ثابت بهنجارش توابع موج را به دست آوریم و سپس به محاسبه‌ی آن‌ها بپردازیم.

برای تابع موج $|\psi_3\rangle$ ، ثابت بهنجارش (A) را به دست می‌آوریم.

$$|\psi_3\rangle = \frac{A}{\sqrt{2}}\{|\uparrow\uparrow\rangle\}\{\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2)\} \quad (ب.۱)$$

$$\langle\psi_3|\psi_3\rangle = \frac{A^2}{2}\{|\uparrow\uparrow|\uparrow\uparrow\rangle\} \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \{\varphi_a^*(\mathbf{r}_1)\varphi_b^*(\mathbf{r}_2) - \varphi_b^*(\mathbf{r}_1)\varphi_a^*(\mathbf{r}_2)\}\{\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2)\} \quad (ب.۲)$$

$$1 = \frac{A^2}{2} \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \{\varphi_a^*(\mathbf{r}_1)\varphi_b^*(\mathbf{r}_2) - \varphi_b^*(\mathbf{r}_1)\varphi_a^*(\mathbf{r}_2)\}\{\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2)\} \quad (ب.۳)$$

$$1 = \frac{A^2}{2} (\iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \varphi_a^*(\mathbf{r}_1)\varphi_b^*(\mathbf{r}_2)\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \varphi_a^*(\mathbf{r}_1)\varphi_b^*(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2) - \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \varphi_b^*(\mathbf{r}_1)\varphi_a^*(\mathbf{r}_2)\varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) + \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \varphi_b^*(\mathbf{r}_1)\varphi_a^*(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2)) \quad (ب.۴)$$

$$1 = \frac{A^2}{2} (\int d\mathbf{r}_1 |\varphi_a(\mathbf{r}_1)|^2 \int d\mathbf{r}_2 |\varphi_b(\mathbf{r}_2)|^2 - \int d\mathbf{r}_1 \varphi_a^*(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_1) \int d\mathbf{r}_2 \varphi_b^*(\mathbf{r}_2)\varphi_a(\mathbf{r}_2) - \int d\mathbf{r}_1 \varphi_b^*(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_1) \int d\mathbf{r}_2 \varphi_a^*(\mathbf{r}_2)\varphi_b(\mathbf{r}_2) + \int d\mathbf{r}_1 |\varphi_b(\mathbf{r}_1)|^2 \int d\mathbf{r}_2 |\varphi_a(\mathbf{r}_2)|^2) \quad (ب.۵)$$

$$1 = \frac{A^2}{2}(2 - 2l^2) \quad (6.ب)$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{1-l^2}} \quad (7.ب)$$

به همین ترتیب برای باقی حالت‌های سه‌گانه نیز ثابت بهنجارش همین مقدار به دست می‌آید. به طریق مشابه برای حالت یگانه نیز ثابت بهنجارش را می‌توان بدست آورد، که مقدار زیر برای آن حاصل می‌گردد:

$$B = \frac{1}{\sqrt{1+l^2}} \quad (8.ب)$$

در نتیجه توابع موج در این حالتی که با اوربیتال‌های غیرمتعامد سروکار داشته باشیم، به صورتی که در رابطه‌ی ۲۲.۲ نوشته شدند، بهنجار می‌شوند. حال می‌توان به محاسبه‌ی انرژی حالت‌های سه‌گانه و یگانه پرداخت. مانند پیوست (الف) ابتدا به محاسبه‌ی انرژی حالت سه‌گانه خواهیم پرداخت. در این قسمت، فرض بر این است که $\varepsilon_a = \varepsilon_b = \varepsilon_{at}$ است. هامیلتونی که در رابطه‌ی ۲۰.۲ بیان شده بود را به فرم زیر در نظر می‌گیریم:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{at} + \mathcal{H}_{t-at}$$

$$\mathcal{H}_{at} = \mathcal{H}_{at}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_a) + \mathcal{H}_{at}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_b)$$

$$\mathcal{H}_{t-at} = -\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_b|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_a|} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (9.ب)$$

$$\varepsilon_t = \langle \psi_3 | \mathcal{H} | \psi_3 \rangle = \langle \psi_3 | \mathcal{H}_{at} | \psi_3 \rangle + \langle \psi_3 | \mathcal{H}_{t-at} | \psi_3 \rangle \quad (10.ب)$$

$$\langle \psi_3 | \mathcal{H}_{at} | \psi_3 \rangle = 2\varepsilon_{at} \quad (11.ب)$$

$$\langle \psi_3 | \mathcal{H}_{t-at} | \psi_3 \rangle$$

$$= \frac{1}{2(1-l^2)} \langle \uparrow\uparrow | \uparrow\uparrow \rangle \iint \{ \varphi_a^*(\mathbf{r}_1) \varphi_b^*(\mathbf{r}_2) - \varphi_b^*(\mathbf{r}_1) \varphi_a^*(\mathbf{r}_2) \} \mathcal{H}_{t-at} \{ \varphi_a(\mathbf{r}_1) \varphi_b(\mathbf{r}_2) - \varphi_b(\mathbf{r}_1) \varphi_a(\mathbf{r}_2) \} \quad (\text{ب.۱۲})$$

$$= \frac{1}{2(1-l^2)} (\iint dr_1 dr_2 \varphi_a^*(\mathbf{r}_1) \varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \mathcal{H}_{t-at} \varphi_a(\mathbf{r}_1) \varphi_b(\mathbf{r}_2) - \iint dr_1 dr_2 \varphi_a^*(\mathbf{r}_1) \varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \mathcal{H}_{t-at} \varphi_b(\mathbf{r}_1) \varphi_a(\mathbf{r}_2) - \iint dr_1 dr_2 \varphi_b^*(\mathbf{r}_1) \varphi_a^*(\mathbf{r}_2) \mathcal{H}_{t-at} \varphi_a(\mathbf{r}_1) \varphi_b(\mathbf{r}_2) + \iint dr_1 dr_2 \varphi_b^*(\mathbf{r}_1) \varphi_a^*(\mathbf{r}_2) \mathcal{H}_{t-at} \varphi_b(\mathbf{r}_1) \varphi_a(\mathbf{r}_2)) \quad (\text{ب.۱۳})$$

جمله‌های اول و چهارم، دوم و سوم دو به دو با هم برابر هستند. پس تنها جمله‌های اول و دوم را بررسی می‌کنیم. جمله‌ی اول برابر است با:

$$\begin{aligned} & \iint dr_1 dr_2 \varphi_a^*(\mathbf{r}_1) \varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \mathcal{H}_{t-at} \varphi_a(\mathbf{r}_1) \varphi_b(\mathbf{r}_2) \\ &= \int dr_2 |\varphi_b(\mathbf{r}_2)|^2 \int dr_1 |\varphi_a(\mathbf{r}_1)|^2 \left(\frac{-e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_b|} \right) \\ &+ \int dr_1 |\varphi_a(\mathbf{r}_1)|^2 \int dr_2 |\varphi_b(\mathbf{r}_2)|^2 \left(\frac{-e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_a|} \right) \\ &+ \iint dr_1 dr_2 |\varphi_a(\mathbf{r}_1)|^2 \left(\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right) |\varphi_b(\mathbf{r}_2)|^2 \\ &= - \int dr_1 |\varphi_a(\mathbf{r}_1)|^2 \left(\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_b|} \right) - \int dr_2 |\varphi_b(\mathbf{r}_2)|^2 \left(\frac{e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_a|} \right) \\ &\quad + \iint dr_1 dr_2 |\varphi_a(\mathbf{r}_1)|^2 \left(\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right) |\varphi_b(\mathbf{r}_2)|^2 = C_{ab} \quad (\text{ب.۱۴}) \end{aligned}$$

و جمله‌ی دوم:

$$\begin{aligned} & \iint dr_1 dr_2 \varphi_a^*(\mathbf{r}_1) \varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \mathcal{H}_{t-at} \varphi_b(\mathbf{r}_1) \varphi_a(\mathbf{r}_2) \\ &= \int dr_2 \varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \varphi_a(\mathbf{r}_2) \int dr_1 \varphi_a^*(\mathbf{r}_1) \left(\frac{-e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_b|} \right) \varphi_b(\mathbf{r}_1) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \int dr_2 \varphi_a^*(\mathbf{r}_1) \varphi_b(\mathbf{r}_1) \int dr_2 \varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \left(\frac{-e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_a|} \right) \varphi_a(\mathbf{r}_2) \\
& + \iint dr_1 dr_2 \varphi_a^*(\mathbf{r}_1) \varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \left(\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right) \varphi_b(\mathbf{r}_1) \varphi_a(\mathbf{r}_2) \\
& = -l \int dr_1 \varphi_a^*(\mathbf{r}_1) \left(\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_b|} \right) \varphi_b(\mathbf{r}_1) - l \int dr_2 \varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \left(\frac{e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_a|} \right) \varphi_a(\mathbf{r}_2) \\
& \quad + \iint dr_1 dr_2 \varphi_a^*(\mathbf{r}_1) \varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \left(\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right) \varphi_b(\mathbf{r}_1) \varphi_a(\mathbf{r}_2) = I_{ab} \tag{ب.۱۵}
\end{aligned}$$

بنابراین حاصل انرژی سه گانه به صورت زیر حاصل خواهد شد:

$$\varepsilon_t = 2\varepsilon_{at} + \frac{C_{ab} - I_{ab}}{1 - l^2} \tag{ب.۱۶}$$

مشابه همین روش برای انرژی حالت یگانه نیز می توان نوشت. به این ترتیب انرژی حالت یگانه نیز به این

صورت نوشته می شود:

$$\varepsilon_s = 2\varepsilon_{at} + \frac{C_{ab} + I_{ab}}{1 - l^2} \tag{ب.۱۷}$$

[۱] F. Henrik, (1997), *Physics of biological systems from molecules to species*, Berline Springer.

[۲] فیلیپ شیلر، (۱۳۷۳)، زیست‌شناسی سلولی و مولکولی، فتح الله فتحي آذربایجانی

[۳] http://cells.alive.com/cells/cell_models

[۴] Ferdinand Rodrigues, (1970), *Principle of Polymer Systems*, Hemisphere Publishing Corporation.

[۵] V. L. Golo, E. I. Kats, S. A. Kuznetsova and Yu. S. Volkov, (2010), *Symmetry of Electrostatic Interaction Between Pyrophosphate DNA Molecules*, Eur. Phys. J. E **31**, 59-67.

[۶] <http://51protocol.com/PCR/RTPCR/20070307/5555.html>.

[۷] فضلی، ح، (۱۳۸۴)، رساله‌ی دکتری، دانشکده فیزیک، مرکز تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان

[۸] بزرگی، ب، (۱۳۸۲)، پایان‌نامه ارشد، خمش بی‌هنجار پلی‌الکترولیت‌ها، دانشکده فیزیک، مرکز تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان.

[۹] Ranjith, P., (2005), PhD thesis, *Statistical Mechanics of Semiflexible Polymers: A study of Single Filaments*, Department of Physics, Indian Institute of Technology Madras.

[۱۰] Majid Baratlo and Hossein Fazli, (2009), *Brushes of flexible, semiflexible and rodlike diblock polyampholytes: Molecular dynamics simulation and scaling analysis*, arXiv: 0910.3962v2.

- [١١] A. V. Dobrynin and M. Rubinstein, (2005), *Theory of polyelectrolytes in solutions and at surfaces*, Prog. Polym. Sci. **30**, 1049; and references therein.
- [١٢] H. Fazli, R. Golestanian, M. R. Kolahchi, (2005), *Orientational Ordering and Dynamics of Rodlike Polyelectrolytes*, Phys. Rev. E. **72**, 011805.
- [١٣] H. Fazli, R. Golestanian, P.L. Hansen², and M.R. Kolahchi, (2007), *Rod-like Polyelectrolyte Brushes with Mono- and Multivalent Counterions*, Europhys. Lett., **73**, 429-435.
- [١٤] A. V. Dobrynin, (2005), *Electrostatic Persistence Length of Semiflexible and Flexible Polyelectrolytes*, Macromolecules **38**, 9304-9314.
- [١٥] R. Tadmor, E. H. n.-Zapata, N. Chen, P. Pincus and J. N. Israelachvili, (2002), *Debye Length and Double-Layer Forces in Polyelectrolyte Solutions*, Macromolecules, **35**, 2380-2388.
- [١٦] P. Guenoun and et al., (1998), *Rodlike Behavior of Polyelectrolyte Brushes*, Phys. Rev. Lett. **81**, 3872-3875.
- [١٧] V. A. Bloomfield, (1991), *Condensation of DNA by multivalent cations: considerations on mechanism*, Biopolymers **31**, 1471; J. X. Tang, S. Wong, P. T. Tran, and P. A. Janmey, (1996), Ber. Bunsenges. Phys. Chem. **100**, 796.
- [١٨] J. C. Butler, T. Angelini, J. X. Tang and C. L. Wong, (2003), *Ion Multivalence and Like-Charge Polyelectrolyte Attraction*, Phys. Rev. Lett. **91**, 028301.
- [١٩] B. -Y. Ha and A. J. Liu, 1997, *Counterion-Mediated Attraction Between Two Like-Charged Rods*, Phys. Rev. Lett. **79**, 1289-1292.
- [٢٠] H. Fazli and R. Golestanian, (2007), *Aggregation Kinetics of Stiff Polyelectrolytes in the Presence of Multivalent Salt*, Phys. Rev. E, **76**, 041801.

- [२१] D. Chapot, L. Bocquet and E. Trizac, (2004), *Interaction Between Charged Anisotropic Macromolecules: Application to Rod-Like Polyelectrolytes*, Journal of Chemical Physics **120**, 8, 39693982.
- [२२] E. J. W. Verwey and J. T. G. Overbeek, *Theory of the Lyophobic Colloids*, (1948), Elsevier, Amsterdam.
- [२३] F. H. L. Essler, H. Frahm, F. Gohmann, A. Klumper and V. E. Korepin, (2005), *The One Dimension Hubbard Model*, Cambridge University Press.
- [२४] S. Blundell, (2001), *Magnetism in Condensed Matter*, Oxford University Press Inc., New York.
- [२५] A. Auerbach, (1994), *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, Springer-Verlag, New York, Inc.
- [२६] P. Fazekas, (1999), *Lecture Note on Electron Correlation and Magnetism*, vol. 5, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd.
- [२७] N. Plakida, (2010), *High-Temperature Cuprate Superconductors, Experiment, Theory and Application*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [२८] R. Resta, (2011), *The Insulating State of Matter: a Geometrical Theory*, Eur. Phys. J. B **79**, 121-137
- [२९] M. J. Lawler, K. Fujita, J. Lee, A. R. Schmidt, Y. Kohsaka, C. K. Kim, H. Eisaki, S. Uchida, J. C. Davis, J. P. Sethna and E.-A. Kim, (2010), *Intra-Unit-Cell Electronic nematicity of The high- T_c Copper-Oxide Pseudogap States*, Nature **466**, 347-351.
- [३०] J. G. Bednorz and K. A. Muller, (1986), *Possible High T_c Superconductivity in the Ba-La-Cu-O system*, Z. Phys. B-Condensed Matter **64**, 189-193.

[۳۱] H. K. Onnes, (1911), Comm. Leiden 1206; 122b; 124b.

[۳۲] H. K. Onnes, (1913), Comm. Leiden 133a.

[۳۳] H. K. Onnes, (1913), Comm. Leiden 139f.

[۳۴] H. K. Onnes, (1914), Comm. Leiden 140b.

[۳۵] محمد اخوان، زهراسادات یمنی، (۱۳۸۱)، پیشرفت‌های ابررسانایی دمای بالا، جلد اول، انتشارات
دانشگاه صنعتی شریف

[۳۶] J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer, (1957), *Microscopic Theory of Superconductivity*, Phys. Rev. **108**, 162; *Theory of Superconductivity*, Phys. Rev. **108**, 1175.

[۳۷] V. J. Emery, S. A. Kivelson, and J. M. Tranquada, (1999), *Stripe Phases in High-Temperature Superconductors*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, **96**, 8814-8817.

[۳۸] A. Marouchkine, (2004), *Room Temperature Superconductivity*, Cambridge International Science Publishing.

[۳۹] W. Buckel, R. Kleiner, (2004), *Supraleitung – Grundlagen und Anwendungen*, WILEY-VCH Verlag, Weinheim; W. Buckel, R. Kleiner, (2004), *Superconductivity - Fundamentals and Applications*, WILEY-VCH Verlag, Weinheim ; T. H. Geballe, (2001), Science **293**, 223; E. A. Ekimov, V. A. Sidorov, E. D. Bauer, N. N. Mel'nik, N. J. Curro, J. D. Thompson, S. M. Stishov, (2004), Nature **428**, 542; C. Buzea, T. Yamashita, (2001), Supercond. Sci. Techn. **14**, R115.

[۴۰] J. H. Schon, Ch. Kloc, B. Batlogg, (2001), Science **293**, 2432.

[۴۱] H. Eisaki, N. Kaneko, D.L. Feng, A. Damascelli, P.K. Mang, K.M. Shen, Z.-X. Shen, M. Greven, (2004), Phys. Rev. B **69**, 064512.

- [୧୧] Patrick A. Lee, Naoto Nagaosa, and Xiao-Gang Wen, (2006), *Doping a Mott Insulator: Physics of High Temperature Superconductivity*, Rev. Mod. Phys. **78**, 17-85.
- [୧୨] A. Damascelli, Z. Hussain and Z.-X. Shen, (2003), *Angle Resolved Microscopy Photoemission Spectroscopy of the Cuprate Superconductors*, Rev. Mod. Phys. **75**, 473.
- [୧୩] L. Li, J. G. Checkelsky, S. Komiya, Y. Ando and N. P. Ong, (2007), *Low-Temperature Vortex Liquid in $La_{2-x}Sr_xCuO_4$* , Nature Physics **3**, 311-314.
- [୧୪] E. W. Carlson, V. J. Emery, S. A. Kivelson, and D. Orgad, (2002), Concepts in High Temperature Superconductivity, arXiv:Cond-mat/0206217.
- [୧୫] T. M. Rice, K.-Y. Yang and F. C. Zhang, (2012), *A Phenomenological Theory of the anomalous Pseudogap Phase in Underdoped Cuprates*, Rep. Prog. Phys. **75**, 016502; J. L. Cohn, C. P. Popoviciu, Q. M. Lin and C. W. Chu, (1999), *Hole Localization in Underdoped Cuprate Near 1/8 Doping*, Phys. Rev. B **59**, 3823-3826; M. B. Silva Neto, (2011), *Anisotropy of Acceptor States in Lightly Doped Cuprate Superconductors*, J. Phys.:Condens. Matter **23**, 365601.
- [୧୬] C.-T. Chien, P. L. Bartel, R. Sternglanz and S. Fields, (1999), *The Two-Hybrid System: A Method to Identify and Clone Genes for Proteins that Interact with a Protein of Interest*, Proc. Natl. Acad. Sci. **88**, 9578-9582.
- [୧୭] M. A. Kastner, R. J. Birgeneau, G. Shirane and Y. Endoh, (1998), *Magnetic, transport, and optical properties of monolayer copper oxides*, Rev. Mod. Phys. **70**, 897-928.
- [୧୮] P. W. Anderson, (1987), *The Resonating Valence Bond State in La_2CuO_4 and Superconductivity*, Science **235**, 1169.
- [୧୯] F. C. Zhang, and T. Rice, (1988), *Effective Hamiltonian for the superconducting Cu oxides*, Phys. Rev. B **37**, 3759-3761.

[Δ١] J. M. Tranquada, (2012), *Stripes and Superconductivity in Cuprates*, Physica B **407**, 1771.

[Δ٢] K. A. Moler, (2010), *High-temperature superconductivity: How the cuprates hid their stripes*, Nature **468**, 643–644.

[Δ٣] J. M. Tranquada, B. J. Sternlieb, J. D. Axe, Y. Nakamura and S. Uchida, (1995), *Evidence for stripe correlations of spins and holes in copper oxidesuperconductors*, Nature **375**, 561-563.

[Δ٤] V. J. Emery, S. A. Kivelson, and H. -Q. Lin, (1990), *Phase separation in the t-J model*, Phys. Rev. Lett. **64**, 475-478; S. A. Kivelson and V. J. Emery, in Strongly Correlated Electronic materials: The Los Alamos Symposium (1993), edited by K. S. Bedell et al. Addison-Wesley, Redwood City, (1994), p. 619; U. Low, V. J. Emery, K. Fabricius, and S. A. Kivelson, (1994), *Study of an Ising model with competing long- and short-range interactions*, Phys. Rev. Lett. **72**, 1918; C. Castellani et al., (1995), *Singular Quasiparticle Scattering in the Proximity of Charge Instabilities*, Phys. Rev. Lett. **75**, 4650.

[ΔΔ] S.-H. Lee, and S.-W. Cheong, (1997), *Melting of Quasi-Two-Dimensional Charge Stripes in $La_{5/3}Sr_{1/3}NiO_4$* , Phys. Rev. Lett. **79**, 2514–2517; H. Yoshizawa, T. Kakeshita, R. Kajimoto, T. Tanabe, T. Katsufuji, and Y. Tokura, (1999), e-Print archive, cond-mat/9904357.

[Δ٤] H. Yoshizawa, T. Kakeshita, R. Kajimoto, T. Tanabe, T. Katsufuji and y. Tokura, (2000), *Stripe Order at Low Temperatures in $La_{2-x}Sr_xNiO_4$ with $0.289 \leq x \leq 0.5$* , Phys. Rev. B **61**, R854; J. M. Tranquada, D. J. Buttrey, V. Sachan and J. E. Lorenzo, (1994), *Simultaneous Ordering of Holes and Spins in $La_2NiO_{4.125}$* , Phys. Rev. Lett. **73**, 1003–1006.

[Δ٧] G. Seibold, M. Grilli and J. Lorenzana, (2012), arXiv:Cond-mat/1202.1615; Cheong, S. W., Aeppli, G., Mason, T. E., Mook, H. A., Hayden, S. M., Canfield, P. C., Fisk, Z., Clausen, K. N. and Martinez, J. L. (1991), *Incommensurate magnetic fluctuations in $La_{2-x}Sr_xCuO_4$* , Phys. Rev. Lett. **67**, 1791–1794.

- [ΔΛ] Hayden, S. M., Lander, G. H., Zaretsky, J., Brown, P. J., Stassis, C., Metcalf, P. & Honig, J. M. (1992), *Incommensurate magnetic correlations in $\text{La}_{1.8}\text{Sr}_{0.2}\text{NiO}_4$* , *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1061–1064; Chen, C. H., Cheong, S.-W. & Cooper, A. S. (1993), *Charge modulations in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_{4+y}$: Ordering of polarons*, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2461–2464.
- [Δ¶] Y. Liu, A. Li, H. Shen and Y. Wang, (2002), *Fingerprints of Charge Ordering in Anelastic Spectra of Underdoped $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$* , *Europhys. Lett.* **59**(1), 128-131.
- [Æ·] A. N. Lavrov, Y. Ando, S. Komiya and I. Tsukada, (2001), *Unusual Magnetic Susceptibility Anisotropy in Untwinned $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ Single Crystals in the Lightly Doped Region*, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 017007; Y. Ando, K. Segawa, A. N. Lavrov and S. Komiya, (2003), *Journal of Low Temperature Physics* **131**, 793; Y. Ando, Y. Kurita, S. Komiya, S. Ono and K. Segawa, (2004), *Evolution of the Hall Coefficient and the Peculiar Electronic Structure of the Cuprate Superconductors*, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 197001.
- [Æ\] E. W. Carlson and D. Orgad, S. A. Kivelson, V. J. Emery, (2000), *Dimensional crossover in quasi-one-dimensional and high- T_c superconductors*, *Phys. Rev. B* **62**, 3422.
- [Æ¶] H. Zhao, L. Kuang, S. Feng, (2012), *Doping dependence of thermodynamic properties in cuprate superconductors*, *Physica C* **478**, 49.
- [Æ¶] N. Sakiyama, I. A. Zaliznyak, S.-H. Lee, Y. Mitsui, and H. Yoshizawa, (2008), *Doping-dependent charge and spin superstructures in layered cobalt perovskites*, *Phys. Rev. B* **78**, 180406; M. Cwik, M. Benomar, T. Finger, Y. Sidis, D. Senff, M. Reuther, T. Lorenz, and M. Braden, (2009), *Magnetic Correlations in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_4$ Studied by Neutron Scattering: Possible Evidence for Stripe Phases*, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 057201.
- [Æ¶] M. E. Ghazi, P. D. Spencer, S. B. Wilkins, P. D. Hatton, D. Mannix, D. Prabhakaran, A. T. Boothroyd and S.-W. Cheong, (2004), *Incommensurate Charge Stripe Ordering in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_4$ for $x = (0.33, 0.30, 0.275)$* , *Phys. Rev. B* **70**, 144507.

[۶۵] Y. Kamihara, H. Hiramatsu, M. Hirano, R. Kawamura, H. Yanagi, T. Kamiya H. Hosono, (2006), *Iron-Based Layered Superconductor: LaOFeP*, *J. Am. Chem. Soc.*, **128** (31), 10012–10013.

[۶۶] H. Takahashi, K. Igawa, K. Arii, Y. Kamihara, M. Hirano and H. Hosono, (2008), *Superconductivity at 43 K in an iron-based layered compound LaO_{1-x}F_xFeAs*, *Nature* **453**, 376-378.

ج. آرفکن، (۱۳۷۷)، *روشهای ریاضی در فیزیک*، جلد اول، اعظم پور قاضی، چاپ ششم، مرکز نشر دانشگاهی

[۶۸] M. Fixman and J. Skolnick, (1987), *Polyelectrolyte Excluded Volume Paradox*, *Macromolecules* **11**, 863.

[۶۹] D. Chapot, L. Bocquet and E. Trizac, (2004), *Interaction between charged anisotropic macromolecules: Application to rod-like polyelectrolytes*, *J. Chem. Phys.* **120**, 3969.

[۷۰] M. Askari, J. Aboiue, (2011), A closed form for the electrostatic interaction between two rod-like charged objects, *J. Phys.: Condens. Matter* **23**, 155103.

[۷۱] J. Zaanen, M. L. Horbach and W. v. Saarloos, (1996), *Charged domain-wall dynamics in doped antiferromagnets and spin fluctuations in cuprate Superconductors*, *Phys. Rev. B* **53**, 8671.

[۷۲] L. Li, J. G. Checkelsky, S. Komiya, Y. Ando and N. P. Ong¹, (2007), *Low-temperature vortex liquid in La_{2-x}Sr_xCuO₄*, *Nature Physics* **3**, 311-314.

[۷۳] P. Nikolić and S. Sachdev, (2006), *Effective action for vortex dynamics in clean d-wave superconductors*, *Phys. Rev. B* **73**, 134511.

[۷۴] C. Howald, H. Eisaki, N. Kaneko, M. Greven, and A. Kapitulnik, (2003), *Periodic density-of-states modulations in superconducting Bi₂Sr₂CaCu₂O_{8+δ}*, *Phys. Rev. B* **67**,

014533; M. Fujita, H. Goka, and K. Yamada, (2002), *Structural effect on the static spin and charge correlations in $La_{1.875}Ba_{0.125-x}Sr_xCuO_4$* , Phys. Rev. B **66**, 184503.

[$\nabla\Delta$] G. Seibold, M. Capati, C. Di Castro, M. Grilli and J. Lorenzana, (2012), *Hidden Ferronematic Order in Underdoped Cuprates*, arXiv:cond-mat.super-con:1204.2119.

[$\nabla\hat{\epsilon}$] A. Jánossy, K. L. Nagy, T. Fehér, L. Mihály and A. Erb, (2007), *Search for stripes in antiferromagnetic lightly hole-doped $YBa_2Cu_3O_6$: An electron spin resonance and infrared transmission study*, Phys. Rev. **B** 75, 024501.

[$\nabla\nabla$] K. A. Moler, D. J. Baar, J. S. Urbach, R. Liang, W. N. Hardy and A. Kapitulnik, (1994), *Magnetic Field Dependence of the Density of States of $YBa_2Cu_3O_{6.95}$ as Determined from the Specific Heat*, Phys. Rev. Lett **73**, 2744.

[$\nabla\wedge$] C. Kittel, (1971), *Introduction to Solid State Physics*, Forth ed., John Wiley & Sons, Inc. New York.

[$\nabla\eta$] K. Sun, J. H. Cho, F. C. Chou, W. C. Lee, L. L. Miller and D. C. Johnston, (1991), *Heat capacity of single-crystal La_2CuO_4 and polycrystalline $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ ($0\leq x\leq 0.20$) from 110 to 600 K*, Phys. Rev. **B** 43, 239.

[$\wedge\bullet$] S. Komiya and I. Tsukada, (2009), *Doping Evolution of the Electronic Specific Heat Coefficient in Slightly-Doped $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ Single Crystals*, J. Phys.: Conf. Ser. **150**, 052118.

[$\wedge$] J. W. Loram, K. A. Mirza, J. R. Cooper and W. Y. Liang, (1993), *Electronic Specific Heat of $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ from 1.8 to 300 K*, Phys. Rev. Lett. **71**, 1740.

[$\wedge\sharp$] N. W. Ashcroft, N.D. Mermin, (1976), *Solid State Physics*, Harcourt, Inc.

Abstract

Electrostatic interactions between rod-like and stripe-like charged objects play a substantial role in the many systems of condensed matter and soft condensed matter physics such as strongly correlated materials, liquid crystals, electrolytes, polymers and bio-molecules. For example, superconductors and antiferromagnetic Mott insulators are a large class of strongly correlated systems whose quantum phases have been studied intensively. Many results signifying the segregation of charged carriers into fluctuating stripes in cuprate superconductors have been reported. In the ceramic samples $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ co-doped with Nd, the charged stripes are seen by neutron diffraction as a static lattice modulation coherent with low-temperature tetragonal modulation. Nickelates ($\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{NiO}_4$) are the other good empirical realities for observing the charged stripes at low temperatures. The relationship between correlations of charged stripes and high- T_c superconductivity has been studied intensively in nickelates. More physical insights are gained by obtaining a closed-form formula for the interaction of such stripes. Indeed, the closed form gives us much useful information on the physical properties of the system, such as orderings and correlations of the charged stripes and also the thermodynamic properties of the system. Experimental evidence of such interactions is also observed in the colloidal world. Actually, in the colloidal solutions, macromolecules such as DNA molecules, TMV or the fd virus, V_2O_5 ribbons, crystalline Boehmite (AlOOH) rods, etc, are intrinsically extremely anisotropic and have rod-like and ribbon-like shapes. In the context of an orientational phase transition, it has been elucidated that the electrostatic interaction between the polyelectrolytes leads to a twisting effect which enhances the concentration at the isotropic to nematic (I–N) phase transition. More findings are attained by making use of the form of the interaction energy between such objects. Many efforts have been made to employ the analytical and numerical approaches for computing the electrostatic interaction of two rod-like charged objects.

Despite all simulations and analytical approaches, the lack of a closed-form formula for the interaction energy of such anisotropic particles is felt. In this thesis we have obtained a closed-form formula for the interaction energy of two rod like charged objects with lengths $2l_1$ and $2l_2$ and arbitrary orientations in three dimensions, separated by r . By using the closed-form formula we have computed the thermodynamic functions of a 1D array of charged rods in which each rod interacts only with two nearest neighbors. Although the electrostatic interaction is long range and there are no practical realizations to vindicate our assumption, one can get more insight about our finding of the closed-form formula and its direct effects on the thermodynamic behavior of a

system. Finally the relationship between the behavior of the specific heat and the electrostatic interaction energy is investigated.

In the second part of this thesis we have tried to find the electrostatic interaction of two rod-like objects at the presence of screening effects. Actually finding an analytical expression for the screened electrostatic interaction of two charged rods is not a trivial task and is a conundrum. However, we can obtain useful results by considering a number of axial quadrupole on the rods and investigate their electrostatic interaction for different screening lengths, numerically. The noticeable result is that the orientations with minimum and maximum energies are not changed by adding the screening effects. It means that the presence of any salt cannot change the Min and Max configurations.

In the last part of this thesis, we employed our results to discuss the physical properties of the Cuprates. We have studied the structural properties of lightly hole doped cuprates. At lightly doped regions, charge and spin stripes are emerged in different Cu-O layers. Considering charge stripes as classical anisotropic objects, we have obtained the orientations of stripes with minimum interaction energy. Our results are in good agreement with the experimental ones. Finally we have concluded that in the lightly doped regime one can neglect the quantum effects and study the physical properties of the system.



Shahrood University of Technology
Physics Department

Master of Science Thesis

In

Condensed Matter

***Electrostatic Interaction of Charged Anisotropic
Particles and its Applications on Different
Condensed Matter Systems***

Marziyeh Askari

Supervisors:

Dr. Jahanfar Abouie

Dr. Saeid Hessami Pilehrood

September 2012