بررسی عددی خواص ارتعاشی شبه بلورها و اثرات عیوب و ناخالصی

سعیده شعاری نژاد: دانشگاه الزهرا
ناصر شاه طهماسبی: دانشگاه فردوسی مشهد

چکیده

شبه بلورها گروه خاصی از مواد با ساختار شبه تناوبی را تشکیل می‌دهند که از هنگام کشف آن‌ها در سال‌های بعد از ۱۹۸۰، خواص ویژه آن‌ها توجه پژوهشگران زیادی را به خود جلب کرده است. وجود نداشتن تناوب انتقالی، محاسبات عددی خواص فیزیکی این جامدات را با مشکلات محاسباتی روبه‌رو می‌سازد. در این پژوهش ما از روش محاسباتی فوم[۱] [۱] که روش نسبتاً سریع و اصولاً ساده‌ای است و برای محاسبه حالات فونونی در جامدات بی‌نظم طراحی شده است، استفاده می‌کنیم. ساختار شبکه شبه تناوبی نیز براساس سری فیبوناچی ساخته می‌شود. در این چارچوب خواص ارتعاشی و حرارتی مدل‌های شبه بلور یک، دو، و سه‌بعدی حاصله، محاسبه و با نتایج تجربی مقایسه می‌شود. علاوه بر این، با همین روش، محاسبات مشابهی نیز برای ساختارهای منظم و کاملاً بی‌نظم انجام می‌دهیم. لذا این امکان به‌وجود می‌آید تا ضمن کسب بینش در زمینه رفتار ارتعاشی سیستم شبه تناوبی، تفاوت‌ها و تشابه‌های خواص مواد شبه بلور را با مواد بلورین و آمورف بررسی کنیم. علاوه بر این، با قرار دادن انواع ناخالصی پیوندی و جایگاهی، تاثیر حضور آن‌ها را در خواص ارتعاشی و طیف چگالی حالات سیستم شبه تناوبی بررسی می‌کنیم.

مقدمه

تقریباً تا دو دهه قبل فیزیک‌دانان بر این باور بودند که هر جامد خالصی، یا بلوری است و یا آمورف. در اوایل دهه هشتاد احتمال وجود فاز جدیدی از ماده جامد مطرح شد که درک ما را از ساختارهای سنتی به طور کلی تغییر می‌داد. در تقسیم‌بندی سنتی در یک ساختار بلورین، یک سلول به تناوب تکرار می‌شود و نظم بسیار زیادی را ایجاد می‌کند. در حالی‌که ساختار بی شکل فاقد چنین نظمی است.اما نظریه‌های جدید، وجود یک فاز میانی را که دارای ساختار شبه تناوبی بود، مطرح می‌ساختند. در همان زمان در پی پژوهش‌های تجربی مستقل، آلیاژ جدیدی به دست آمد که نمونه‌ای از این فاز را آشکار می‌ساخت و دارای ساختار اتمی شبه تناوبی بود. خواص فیزیکی این آلیاژ جدید، که آلومینیم از اجزای اصلی متشکله آن است، آن را از جامدات شناخته شده قبلی

۱-forced oscillator method, Fom

[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-10-12]

متمایز می‌کرد و همین مسئله زمینه توسعه موادی با ساختار شبه بلوری را فراهم ساخت[۲]،[۳]. در پی کشف این فاز جدید کوشش‌های وسیع تجربی و نظری در زمینه بررسی و شناخت خواص مختلف فیزیکی آن‌ها صورت گرفت[٤]،[٥]،[٦]،[٧]. اما هنوز هم زوایای ناشناخت‌های در زمینه خواص این گونه مواد وجود دارد و اصولاً سؤال جالبی که همواره مطرح بوده این است که خواص فیزیکی این مواد بلورین و آمورف چه تفاوت و یا تشابه چشمگیری دارند. از جمله خواص فیزیکی مورد علاقه، خواص ارتعاشی سیستم شبه بلور است که به خواص حرارتی آن مربوط می‌شود. در جامدات بلورین، ارتعاشات اتمی از نوع موج‌گونه است که در سراسر جامد منتشر می‌شود، و طیف فرکانسی آن به صورت پیوسته است. در حالی‌که در جامدات بی‌نظم، ارتعاشات اتمی اصولاً از نوع جای‌گزیده‌اند؛ اما بررسی سیستم‌های شبه تناوبی نشان داده است که این سیستم‌ها می‌توانند دارای سه نوع طیف باشند: طیف پیوسته مربوط به حالات گسترده، طیف نقطه‌ای فشرده مربوط به حالات جای‌گزیده و بالاخره طیف مربوط به حالات بحرانی که حد واسط بین حالت‌های گسترده و جای‌گزیده است. محاسبات طیف ارتعاشی جامدات بلورین معمولاً بسیار پیچیده و وقت‌گیر است. هر گونه انحراف از نظم بلورین به‌شدت میزان مشکلات را می‌افزاید. از این رو دسترسی به مدلی که بتواند با امکانات کامپیوتری موجود و زمان کم‌تر جواب‌های قابل اطمینان به‌دست دهد اهمیت ویژه دارد. کوشش‌هایی که تا کنون در این زمینه انجام شده‌اند تقریبا همگی براساس روش‌های دینامیک شبکه‌ای بوده و بررسی دینامیک اتم‌ها و محاسبه چگالی حالات فونونی در چارچوب مدل‌های نسبتاً ساده به روش‌های مختلف تحلیلی و عددی صورت گرفته‌اند[۸]،[۹]. در این کار پژوهشی، ما با استفاده از یک مدل محاسباتی نسبتاً ساده، چگالی حالات ارتعاشی را برای یک شبکه اتمی در سه حالت منظم، بی‌نظم و شبه تناوبی محاسبه نموده و ویژگی‌های رفتاری سیستم شبه بلور را با دو سیستم قبلی مقایسه و بررسی می‌کنیم و نشان می‌دهیم که این مدل محاسباتی با وجود سادگی، از نظر کیفی با نتایج محاسبات دقیق، موافق است. علاوه بر این، اثر ناخالصی‌ها را نیز در رفتار ارتعاشی شبه بلور بررسی می‌کنیم. در بخش‌های زیر ابتدا خلاصه‌ای از نظم‌های ساختاری ارائه می‌شود؛ سپس روش محاسباتی و نتایج ارزیابی می‌شوند.

ساختار اتمی شبه بلورها

مواد بلوری علاوه بر تقارن نقطه‌ای و انتقالی دارای نظم سمتی بلندبرد[۱] نیز هستند. بر خلاف بلورها، مواد آمورف یا بی‌شکل که شیشه یکی از آن‌هاست، نظم مکانی و نظم سمتی بلندبرد ندارند. اما ساختار اتمی شبه بلورها درعین حال که مانند بلورها دارای نظم اتمی نسبتاً زیادی است، به جای تناوبی بودن، شبه تناوبی است و لذا از قضایای اساسی بلورشناسی سنتی تبعیت نمی‌کند. به طور کلی، ساختار شبه تناوبی از دو یا چند سلول

۱-long-range orientational order

[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-10-12]

تشکیل می‌شود که نظم سمتی دارند و هر سلول در امتداد خاصی سمت‌گیری می‌شود. اما با وجود داشتن نظم سمتی و مکانی به طور تناوبی قرار نمی‌گیرند؛ بلکه به صورت شبه تناوبی توزیع می‌شوند. به این معنا که با معلوم بودن مکان و موقعیت یک واحد، مکان واحدهای دیگر مطابق با یک دنباله قابل پیشگویی است. از آن‌جا که دنباله فیبوناچی یک مولد سیستم‌های شبه تناوبی است می‌توان با استفاده از آن ساختار شبه تناوبی شبه بلور را تولید کرد.این دنباله با اعداد $F_0=1, F_1=1, F_2=2, \ldots$ مشخص می‌شود و این اعداد با رابطه $F_{l+1} = F_{l-1} + F_l$ به هم مربوط می‌شوند و یکی از خواص آن‌ها این است که $Lim_{l\to\infty} \frac{F_{l+1}}{F_l} = \tau$ که عدد $\tau = 1/618033\ldots$

موسوم به میانگین طلایی است. در شبه بلورها یک فاصله کوتاه S و یک فاصله بلند L بین صفحات بلوری وجود دارد که ترتیب‌شان مانند دنباله فیبوناچی است. به طور کلی یک تابع شبه تناوبی از برهم‌نهش توابع تناوبی به وجود می‌آید که دوره تناوب آن‌ها نسبت به هم غیرگویا[1] است. یک شبکه شبه بلوری نیز از چند زیر شبکه متناوب، اما ناسازگار، یعنی زیر شبکه‌هایی که نسبت دوره تناوب شان غیرگویاست به وجود می‌آید. اگر یک دنباله با دوره تناوب S به عنوان شبکه‌ای با سلول واحدی به طول S و دنباله دیگری با دوره تناوب L در نظر بگیریم که در آن جای‌گزینی $S \to L$ برقرار باشد و همین‌طور دنباله بعدی با دوره تناوب بزرگ‌تر L-S، معادل با شبکه‌ای به طول سلول واحد بزرگ‌تر، از این روند تکراری با قاعده جای‌گزینی

$$\begin{cases} S \to L \\ L \to L - S \end{cases} \qquad (1)$$

یک شبکه تناوبی با دوره تناوب برابر با l امین عدد فیبوناچی به دست می‌آید. دنباله فیبوناچی در تکرار (l+1) ام عبارت خواهد بود از تلفیق دنباله‌های تکرارهای ۱، (l-۱) به صورت

$$\underbrace{LSLLSL}_{1} \qquad \underbrace{LSL\ldots}_{l-1} \qquad (2)$$

روش محاسبه

شبکه مربعی از جرم‌ها و فنرهای هارمونیک در نظر می‌گیریم در هر جایگاه l شبکه جرم M_1 قرار دارد و ثابت فنربین جایگاه‌های ۱و l' برابر $K_{ll'}$ است. نظم و بی‌نظمی را در این شبکه می‌توان از طریق جرم‌ها یا فنرها و یا هر دو مطرح کرد. اگر تمام جرم‌ها با هم برابر و تمام فنرها نیز یک‌سان باشند، شبکه بلورین و در غیر این صورت بی‌نظم است. اکنون بر اساس روش ساده فوم[۱]،[۱۰] اقدام به محاسبه چگالی حالات ارتعاشی این سیستمN اتمی می‌کنیم. به هر اتم یک نیروی تناوبی $F_l Cos\Omega t$ با فرکانس Ω و دامنه تصادفیF_1 وارد می‌کنیمو سپس تحول زمانی سیستم را بررسی می‌کنیم. معادله حرکت اتم ۱ام به این قرار است:

۱-irrational

[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-10-12]

$$M_1 \ddot{\Psi}_l(t) + \sum_{l'} K_{ll'} \Psi_1(t) = F_1 Cos\ \Omega t \qquad (۳)$$

که در آن Ψ_1 دامنه ارتعاش اتم ۱ام و M_1 جرم آن است. دامنه ارتعاشی را بر حسب مجموعه مدهای نرمال می‌توان به این صورت نوشت:

$$\Psi_1 = \sum_\lambda \phi_\lambda \frac{e(\lambda)}{\sqrt{M_1}} \qquad (٤)$$

که در آن ϕ_λ دامنه مد نرمال λ و $e_1(\lambda)$ بردار قطبش این مد جایگاه ۱ام است.

با قرار دادن معادله (٤) در (۳) رابطه ویژه مقداری زیر به دست می‌آید.

$$\sum_{l'} K_{ll} e_{l'}(\lambda)(M_1 M_1)^{-\frac{1}{2}} = \omega^2{}_\lambda e_1(\lambda) \qquad (٥)$$

که در آن ω_λ فرکانس مد λ است. انرژی کل اتم‌ها (مجموع انرژی جنبشی و پتانسیل) به این صورت است:

$$E = \frac{1}{2}\sum_l M_1 \dot{\Psi}^2 \lambda + \frac{1}{2}\sum M_1 \omega_1^2 \Psi_1 \Psi_1 \qquad (٦)$$

با در نظر گرفتن $F_1 = F_0\sqrt{M_1} Cos(\varphi_1)$ که در آن F_o یک مقدار ثابت و φ_1 یک مقدار کتره‌ای است و با میانگین‌گیری روی تمام مقادیر φ_1 و استفاده از خاصیت تعامد مدها با انرژی متوسط به این صورت درمی‌آید:

$$< E >= \frac{F_0^2}{4}\sum_\lambda \frac{Sin^2[[(\omega_\lambda - \Omega)/2]t]}{(\omega_\lambda - \Omega)^2} \qquad (۷)$$

مدهایی که در این جمع سهیم هستند فرکانس شان در گستره $\Omega \pm \frac{2\pi}{t}$ قرار دارند. در شرایطی که تنها نوار باریکی از مدها با ω_λ حول Ω در این جمع شرکت داشته باشند، مقدار<E> بیشینه خواهد شد و با استفاده از تعریف چگالی حالات، نشان داده می‌شود[۱۱].

$$g(\Omega) = \frac{8 < E >}{\pi t F_o^2 N} \qquad (۸)$$

اگرسیستم را برای مدت زمان طولانی t برانیم، نیروی تناوبی فقط مدهایی را تحریک می‌کند که فرکانس شان به Ω نزدیک باشد. بنا بر این هنگامی که فرکانس Ω نیروی خارجی با یکی از مدهای ω_λ شبکه برابر شود تشدید حاصل می‌شود و دامنه این مد خطی با زمان افزایش می‌یابد. در این صورت، قسمت اعظم انرژی سیستم در تعداد محدودی از مدهای نرمال متمرکز می‌شود و توزیع انرژی در سیستم ناهمگن خواهد بود؛ به نحوی که نواحی با چگالی انرژی ناچیز و نواحی با چگالی انرژی زیاد خواهیم داشت که درآن مدهای برانگیخته جای‌گزیده هستند. و چون تعداد مدهای برانگیخته کم هستند، احتمال هم‌پوشانی آن‌ها کم است لذا می‌توان فرض کرد که هر ناحیه با چگالی زیاد توسط یک تک مد ایجاد شده است. دراین صورت بین فرکانس‌های حقیقی مدهای تشدیدی و فرکانس تحریک رابطه $\omega_\lambda = \frac{2}{\Delta t} Sin(\frac{\Omega \Delta t}{2})$ برقرار است. این روش اصولاً برای سیستم‌های

[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-10-12]

بی‌نظم که حالات جای‌گزیده در آن‌ها حضور دارند بسیار مفید است؛ اما می‌توان نشان داد که در مورد بلورها نیز موفق است[۱]،[۱۰]،[۱۱].

این جا نشان داده می‌شود که با افزایش زمان محاسبات چگالی هر $\omega_\lambda = \Omega$ به تدریج از سایر مدهای مجاور خود جدا می‌شود؛ به طوری که پس از زمان طولانی محاسبه چگالی حالات دقیق خواهد بود. برای محاسبه تحول زمانی هر یک از اتم‌های شبکه نیز روش استانداردی وجود دارد که در آن زمان t با n گام زمانی Δt جای‌گزین می‌گردد که Δt درمقایسه با مقیاس زمانی مشخصه سیستم یا زمان تناوب مربوط به مد با بیش‌ترین فرکانس کوچک اختیار می‌شود. همان طور که گفته شد در این مدل ساده هر نوع بی‌نظمی فیزیکی یا ساختاری از نمونه واقعی را می‌توان از طریق بی‌نظم کردن جرم‌ها یا پیوندها در مدل درون سازی کرد. در بخش‌های زیر نتایج کاربرد روش فوق را در مورد مدل‌های بلورین(منظم) و بی‌نظم و نیز شبه بلور ارائه می‌کنیم.

بررسی نتایج جامد یک بعدی

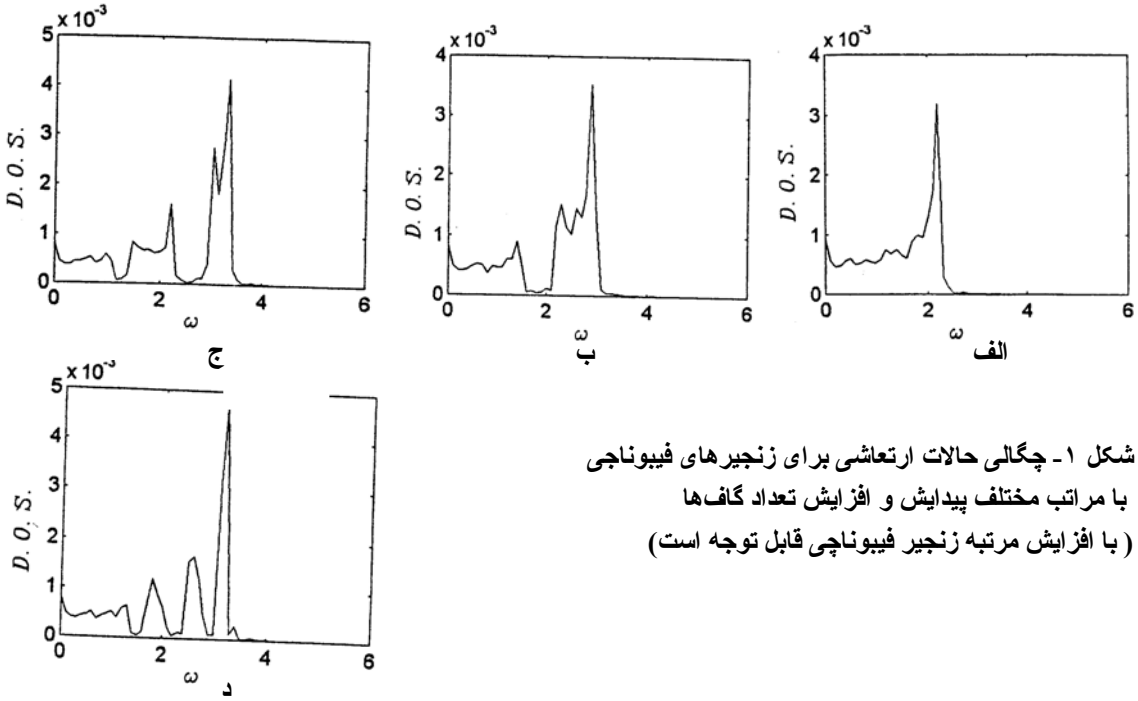
در این حالت یک زنجیر اتمی شامل N اتم با جرم‌ها و فواصل بین اتمی یکسان در نظر می‌گیریم. برهم‌کنش اتم‌ها از طریق ثابت فنر، $K_{ll'}$ بین جایگاه‌های ۱ و l'. مشخص می‌شود. چنانچه همه $K_{11'}$ ها یکسان باشد، زنجیر ما منظم و بلورین خواهد بود. اما در شبه بلورها یک فاصله کوتاه S و یک فاصله بلند L بین صفحات بلوری وجود دارد که ترتیب آن‌ها از طریق دنباله فیبوناچی با قاعده جای‌گزینی(۱) آرایش می‌یابد. برای این‌که زنجیر به حالت شبه بلور تبدیل شود متناظر با S و L در بالا دو نوع پیوند به صورت K_S و K_L (به ترتیب پیوند ضعیف و قوی) در نظر می‌گیریم که ترتیب پیوندها در زنجیر بر اساس دنباله فیبوناچی مشخص می‌شود. بنا بر این شبه بلورهایی با مراتب مختلف فیبوناچی در اختیار خواهیم داشت. سپس چگالی حالات ارتعاشی DOS را برای زنجیره‌های اتمی حاصله در مراتب مختلف فیبوناچی و نیز تحت شرایط مختلف بلوری و بی‌نظم محاسبه می‌کنیم که نتایج حاصل به شرح زیر است:

الف- از بلور به شبه بلور

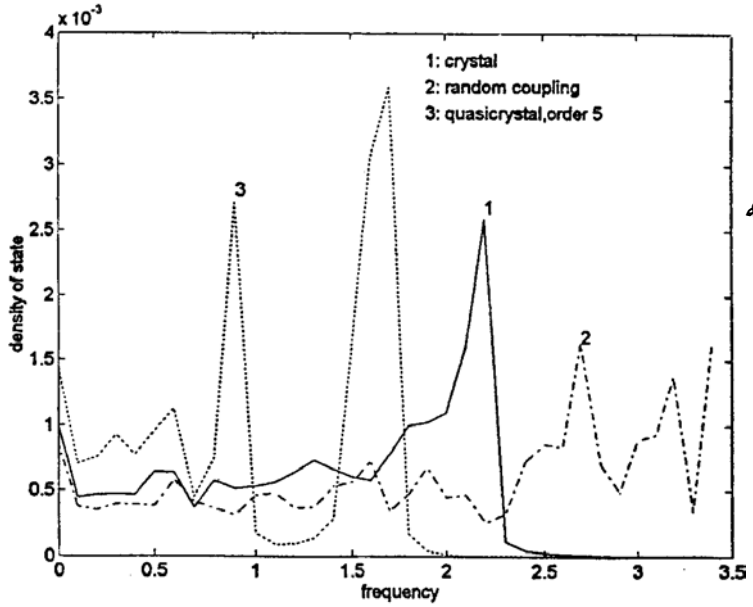
ابتدا DOS را برای زنجیر اتمی بلورین(مرتبه n=۱ فیبوناچی) یعنی همه M=۱ و همه K=۱ محاسبه کردیم (شکل۱-الف). سپس ترتیب K_S=۱ و K_L=۲ را مطابق دستور(۱) در زنجیر تعیین کردیم و DOS را برای زنجیره‌های شبه بلور با مراتب مختلف n فیبوناچی محاسبه کردیم که به عنوان نمونه نتایج برای دو حالت n=۲ و n=۳ در شکل۱(ب وج) ارائه شده‌اند. ملاحظه می‌شود که هنگامی که بلور به شبه بلور تبدیل می‌شود، بارزترین نشانه آن پیدایش گاف‌های انرژی در طیف چگالی حالات ارتعاشی است. دومین مرتبه فیبوناچی شبیه سیستم دو اتمی (مثلاً CLNa) است که DOS دارای شاخه صوتی و اپتیکی است و زنجیر مرتبه

[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-10-12]

n=۳ دارای سه شاخه است که یکی صوتی است و دو تای دیگر اپتیکی هستند. بنا بر این ملاحظه می‌شود که با افزایش مرتبه شبه بلور متناسب با مرتبه n به تعداد گاف‌ها (و در نتیجه تعداد شاخه‌های ω_λ) افزوده می‌شود که بدان معنی است که تأثیر ساختار شبه تناوبی که به صورت ترکیب پیوندهای L و S در سلول رخ می‌دهد واحد مشابه با افزایش حضور اتم‌های ناهمسان در یک سیستم بلورین است. علاوه بر این، ما محاسبه چگالی حالات را برای یک زنجیر بی‌نظم (توزیع K=۱ و K=۲ در زنجیر به صورت کتره‌ای با احتمال ۵۰%) انجام دادیم. نتایج سیستم بلور و شبه بلور و بی‌نظم در شکل ۲ با یکدیگر مقایسه شده‌اند.



شکل ۱- چگالی حالات ارتعاشی برای زنجیرهای فیبوناچی با مراتب مختلف پیدایش و افزایش تعداد گاف‌ها (با افزایش مرتبه زنجیر فیبوناچی قابل توجه است)



شکل ۲- چگالی حالات ارتعاشی برای سه نمونه زنجیر اتمی بلورین بی‌نظم و شبه بلور مرتبه ۵

[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-10-12]

ب- جای‌گزیدگی حالات

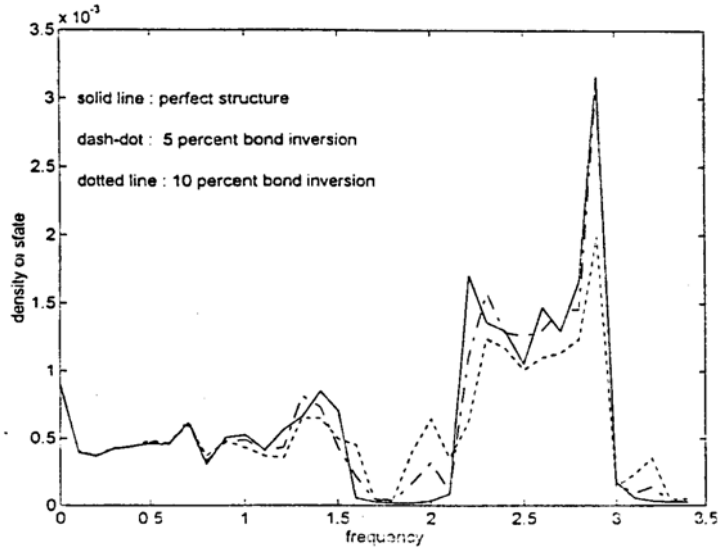
در حالت شبه بلوری به خاطر پیدایش نوعی بی‌نظمی در مقایسه با حالت بلورین،تعدادی حالات جای‌گزیده در فرکانس‌های بالا پیدا می‌شوند که محاسبه دامنه مدها در فرکانس‌های مختلف مؤید پیدایش حالات جای‌گزیده در فرکانس‌های بالا بود (شکل ۳ و ٤).

ج- حالات گسترده

بررسی نتایج حاصله نشان می‌دهد (شکل‌های ۱-٤) که اصولاً در گستره فرکانس‌های پائین رفتار عمومی DOS تغییر خاصی نمی‌کند و به رفتار شبکه تناوبی نزدیک است (حالات گسترده) که طبیعتاً به خاطر آن است که در طول موج‌های بلند ساختار موضعی تاثیر خاصی ندارد.

د- آثار ناخالصی

در این قسمت برای بررسی آثار عیوب و ناخالصی‌ها در طیف ارتعاشی شبه بلور یک بعدی یک زنجیر اتمی ۱۰۰۰ اتمی را با تناوب ۲ فیبوناچی در نظر می‌گیریم و چگالی حالات ارتعاشی را برای آن حساب می‌کنیم. سپس به ترتیب ٥ و۱۰ درصد از پیوندها را بی‌نظم می‌کنیم(bond inversion) و مجدداً DOS را برای سیستم‌های حاصل محاسبه می‌کنیم. نتایج در شکل ۳ ارائه و مقایسه شده‌اند. مشاهده می‌شود که بارزترین اثر ناخالصی‌ها پیدایش حالات جای‌گزیده در فرکانس‌های بالا و در داخل گاف است. البته با افزایش ناخالصی به تدریج گاف انرژی از بین می‌رود.



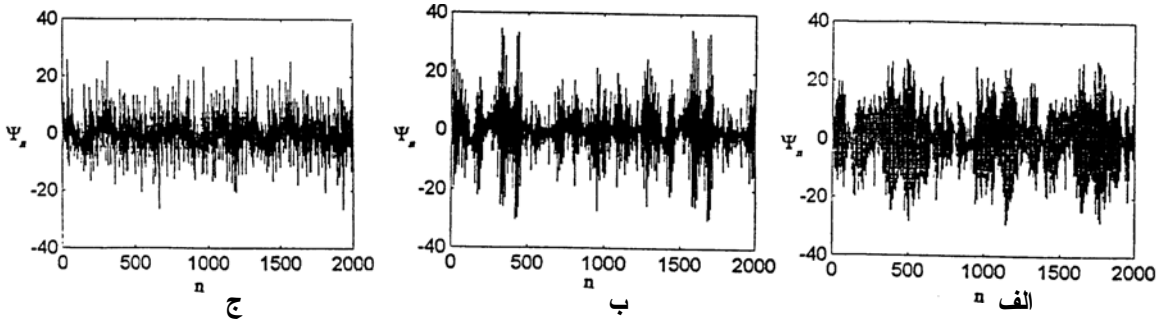
شکل ۳- اثر ناخالصی چگتلی حالات ارتعاشی یک زنجیر فیبوناجی در این حالت ٥ و ۱۰ درصد از پیوندها بی‌نظم شده‌اند تأثیر این بی‌نظمی‌ها را به صورت پیدایش حالات جدید در داخل گاف ملاحظه می‌کنیم

ه- از بلور تا آمورف

به طور خلاصه، نتایج شکل۲ نشان می‌دهد که در مقایسه رفتار ارتعاشی شبه بلور با مواد بلورین و آمورف یک بعدی رفتار DOS در فرکانس‌های پایین برای هر سه نوع ساختار مشابه است. اما تفاوت‌ها در ناحیه فرکانس‌های متوسط و بالا رخ می‌دهد. پیدایش گاف‌ها و حالات جای‌گزیده از ویژگی‌های شبه بلورهاست. علاوه

[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-10-12]

براین، تأثیر حضور ناخالصی در شبه بلور یک بعدی باعث حضور حالات جای‌گزیده در گاف‌های انرژی می‌شود. که در نهایت با افزایش ناخالصی گاف‌ها از بین می‌رود و سیستم اصولاً رفتار سیستم بی‌نظم را خواهد داشت. این نتایج با نتایج به دست آمده از روش‌های محاسباتی دیگر، از قبیل ماتریس انتقال کاملاً موافق است[۸]



شکل ٤ـ دامنه ارتعاشات در زنجیر اتمی فیبوناچی برای فرکانس‌های مختلف
الف) طرح گسترده ب) طرح بحرانی ج) طرح جای‌گزیده

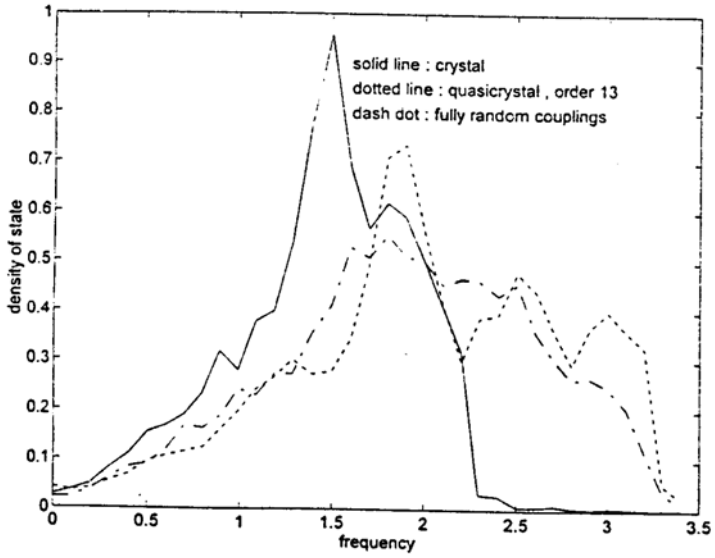
حالت‌های دو و سه بعدی

در این قسمت شبکه مربعی و مکعبی را به ترتیب برای مدل‌سازی حالات ۲ و ۳ بعدی در نظر می‌گیریم. بار دیگر اتم‌هایی با جرم‌های یکسان M=۱ در جایگاه‌های شبکه قرار می‌دهیم و هر گونه انحراف از حالت منظم بلورین را از طریق تغییرات در ثابت‌های فنر K اعمال می‌کنیم. در حالت بلوری برای همه پیوندها K=۱ اختیار می‌شود. اما در حالت شبه بلور دو نوع پیوند K_s=۱ و K_L=۲ اختیار می‌کنیم توزیع این پیوندها در شبکه در هر کدام از راستاهای z,y,x طبق سری فیبوناچی با مرتبه nام انجام می‌گردد. در حالت آمورف نیز همین پیوندها با احتمال ۵۰% از هرکدام به طور کتره‌ای در بلور توزیع می‌شوند. بدین ترتیب با استفاده از روش مذکور در بخش (۳) چگالی حالت‌های ارتعاشی سیستم‌های بلوری، شبه بلوری و آمورف بالا را محاسبه کردیم که نتایج به این شرح است:

در شکل ۵ نتایج چگالی حالات برای سه سیستم بلور، شبه بلور و آمورف در حالت دو بعدی با ۳٦۰۰ اتم رسم و مقایسه شده‌اند. در این‌جا نیز مشاهده می‌شود که در ناحیه فرکانس‌های پائین $\omega < 1$ رفتار ارتعاشی سه سیستم به طور کیفی مشابه است این موضوع بیان‌گر آن است که در طول موج‌های بلند ساختار میکروسکوپی نقش ویژه‌ای ندارد. همان طور که شکل نشان می‌دهد تفاوت رفتاری در فرکانس‌های متوسط و بالا به طور مشهود رخ می‌دهد. به این ترتیب که اولاً با حضور پیوندهای قوی‌تر دامنه طیف به سمت ωهای بالاتر می‌رود دیگر این که در چگالی حالات شبه بلور نواحی شبه گاف[۱] به وجود می‌آید؛ ضمن آن که حالات پیدا شده در ناحیه بالای طیف عموماً از نوع جای‌گزیده‌اند. برای آزمودن این مسئله، دامنه ارتعاشات در فرکانس $\omega = ۳/۲$ برای

۱-pseudogap

[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-10-12]



شکل ۵- چگالی حالات ارتعاشی برای یک جامد دوبعدی ۶۰×۶۰ اتمی در سه حالت بلورین، آمورف و شبه بلور مرتبه ۱۳

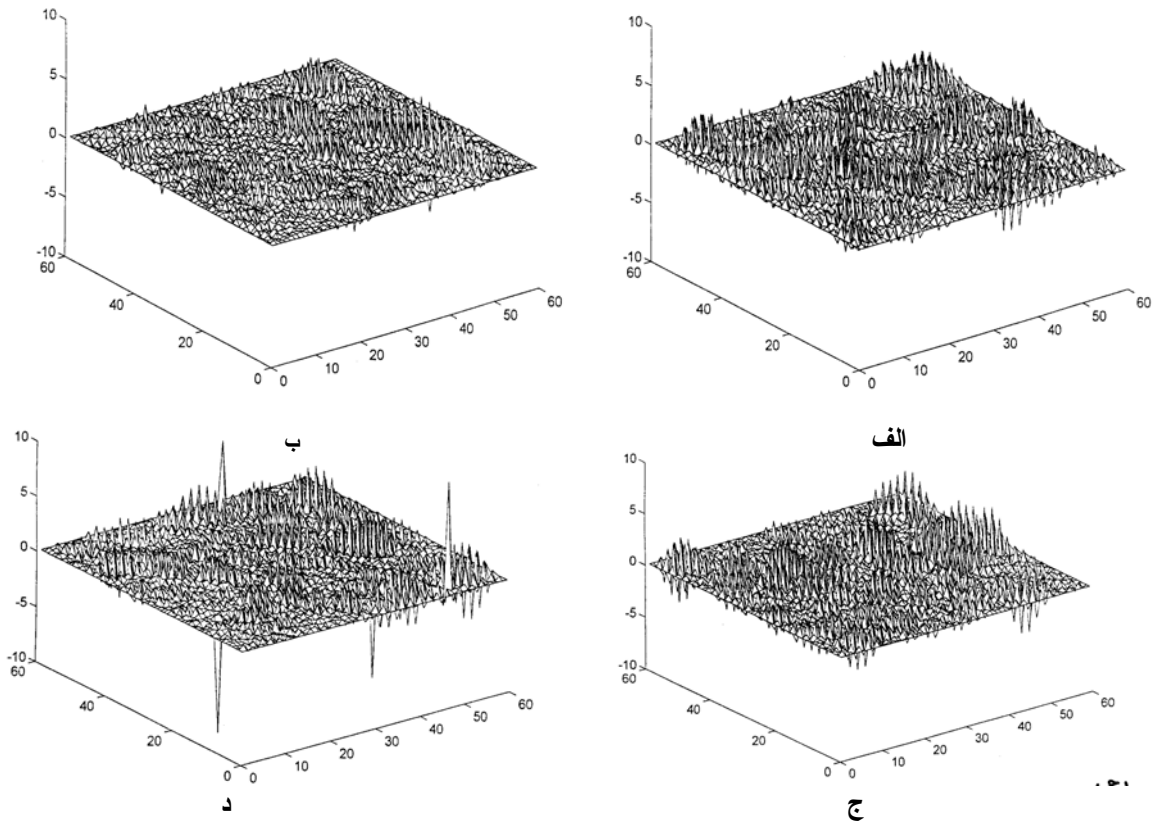
شبه بلورهای با تناوب ۲، ۵، ۸ و۱۳محاسبه شد (شکل۶ الف- د) که به تدریج در حالت ۱۳ بیش‌ترین جای‌گزیدگی در این فرکانس مشاهده می‌شود. در حالی که در تناوب‌های پایین رفتار شبیه حالت بحرانی است. البته برای تناوب‌های بالاتر از ۱۳ با بزرگ شدن سلول واحد به تدریج از میزان جای‌گزیدگی کاسته و حالات گسترده مشاهده می‌شود و نهایتاً وقتی انتظار داریم هیچ حالت جای‌گزیده‌ای نداشته باشیم که مشخصه حالت‌های بحرانی است. نتایج چگالی حالات برای یک نمونه سه بعدی در سه حالت شبه بلور با مرتبه‌های فیبوناچی ۵، ۸ و ۱۳ که با دستور بالا ساخته شده‌اند و حاوی ۱۵۶۲۵ اتم هستند محاسبه و در شکل ۷ ارائه شده است علاوه بر این، چگالی حالت ارتعاشی همین نمونه، اما در حالت بلور و آمورف نیز در شکل ۸ آمده است. در این شکل‌ها مقایسه بین چگالی حالات سیستم بلورین و آمورف تفاوت چشم‌گیر این نتایج را نشان می‌دهد البته بار دیگر رفتار کیفی در حوالی ω کوچک برای هر سه حالت مشابه است اما تفاوت‌ها در فرکانس‌های متوسط و بالا رخ می‌دهد. از طرفی به خاطر حضور پیوندهای قوی‌تر دامنه طیف DOS آمورف به سمت ω بالاتر کشیده شده است. نتایج DOS شبه بلور برای چند تناوب فیبوناچی ۵، ۸ و ۱۳ در شکل آمده بیانگر پیدایش شبه گاف نیز است که با افزایش تناوب فیبوناچی بارزتر می‌شود.

توافق کیفی این نتایج با نتایج به دست آمده از روش‌های حل ماتریس دینامیکی[۸]، شکل۹ نشان می‌دهد که می‌توان از روش محاسباتی FOM با استفاده از پارامترهای واقعی سیستم رفتار ارتعاشی شبه بلورهای واقعی را به طور نسبتاً دقیق محاسبه و بررسی کرد.

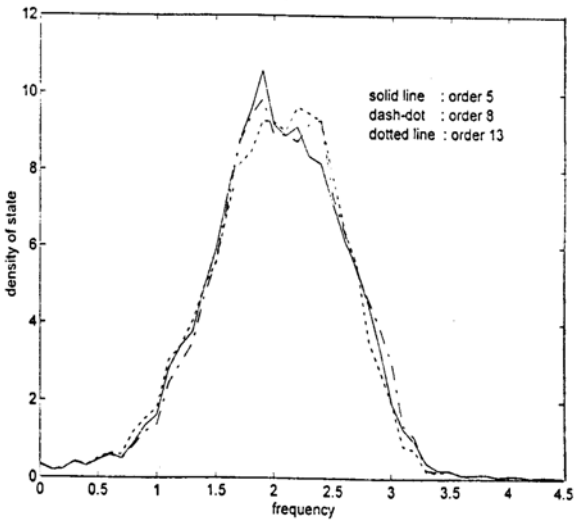
گرمای ویژه

در این قسمت با داشتن چگالی حالات ارتعاشی، گرمای ویژه یک نمونه در سه حالت بلورین، آمورف و شبه بلور با استفاده از رابطه زیر [۱۲]

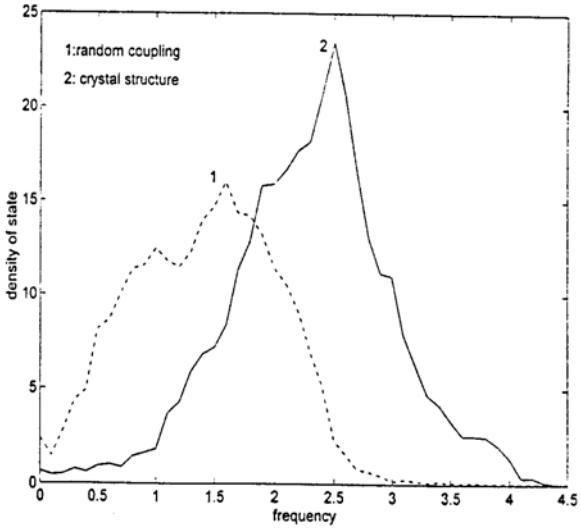
[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-10-12]



شکل ٦- دامنه مدهای ارتعاشی در یک شبکه شبه بلور دوبعدی برای فرکانس ω=۳/۲ در چند تناوب فیبوناجی ۳،۵،۸ و ۱۳(حضور حالات بحرانی در سه حالت اول و حالات برگزیده در حالت د ملاحظه می‌شود)



شکل۷- چگالی حالات ارتعاشی در یک شبه بلور سه بعدی ۲۵×۲۵×۲۵ اتمی در سه حالت با تناوب‌های فیبوناجی ۵، ۸ و ۱۳. (بارزتر شدن شبه گاف با افزایش تناوب فیبوناجی قابل توجه است)

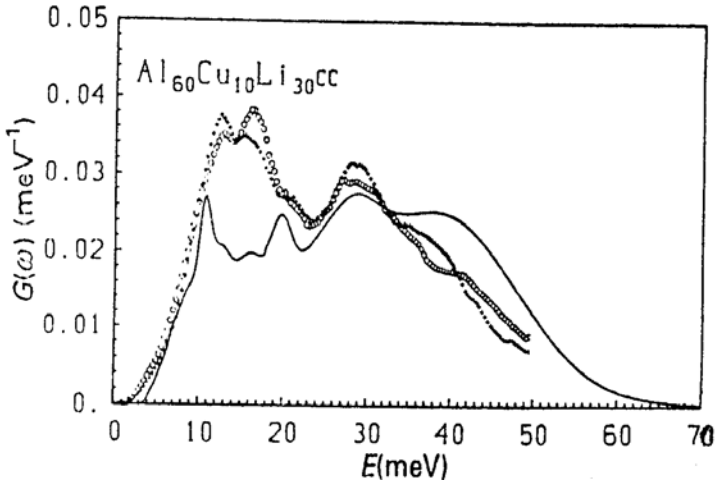


شکل۸- مقایسه چگالی حالات ارتعاشی نمونه مربوط به شکل ۷ در دو حالت بلورین و آمورف

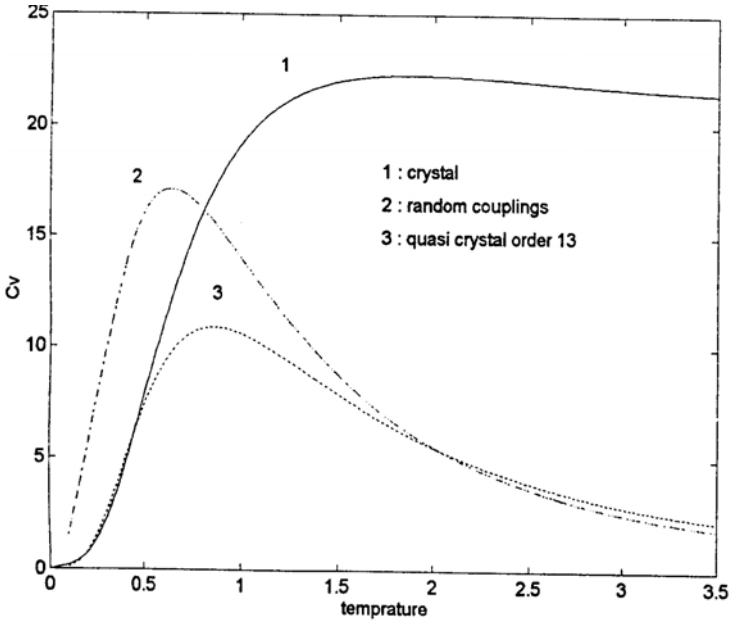
[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-10-12]

$$C_V = \frac{1}{(2T)^2}\int \omega^2 g(\omega) Sech^2(\frac{\omega}{2T}) d\omega \qquad (۹)$$

محاسبه شد. نتایج در شکل ۱۰ ارائه شده است. بار دیگر متوجه می‌شویم که در فرکانس‌های کوچک رفتار گرمای ویژه شبیه گرمای ویژه دبای است در حالی که در فرکانس‌های بالا رفتار شبه بلور به مواد آمورف نزدیک‌تر می‌شود و اصولاً گرمای ویژه شبه بلور کم‌تر از حالت بلورین و آمورف است که مؤید رسانایی حرارتی ضعیف این مواد است.



شکل ۹- چگالی حالات برای سیستم ALLicu نتایج نظری (خط پر)، نتایج تجربی برای فاز R و تقریب (t) و فاز شبه بلور ایکوساهدرال[٦]



شکل ۱۰- گرمای ویژه یک نمونه سه بعدی ۲۵×۲۵×۲۵ اتمی در سه حالت بلورین، آمورف و شبه بلور مرتبه ۱۳

نتیجه‌گیری

با استفاده از روش محاسباتی ساده حالت‌های ارتعاشی مدل‌های سیستم شبه بلوری در چارچوب دنباله فیبوناچی محاسبه شد. نتایج ما در توافق با نتایج تجربی نظری پیچیده، شکل ۹، موید آن است که رفتار ارتعاشی

[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-10-12]

شبه بلورها در فرکانس‌های پایین مشابه بلور(مدل دبای) است؛ اما در فرکانس‌های بالا تفاوت‌هایی مشاهده می‌شود. پیدایش گاف‌ها در حالت یک بعدی و شبه گاف‌ها و نیز حالات جای‌گزیده از ویژگی‌های شبه بلورهاست. حضور ناخالصی باعث از بین رفتن گاف‌های انرژی می‌شود. در مدل‌های مورد استفاده کمیت‌های جرم و فنر و نیز فرکانس‌ها به صورت به هنجار شده در نظر گرفته شدند. موفقیت کیفی نتایج نشان‌گر آن است که در صورت انتخاب این کمیت‌ها متناسب با نمونه واقعی نتایج دقیق‌تر به دست می‌آیند. علاوه بر این، مدل محاسباتی سریع و ساده‌ای که بکار بردیم، می‌تواند در پیش‌بینی خواص سیستم به عنوان یک گام اولیه استفاده شود.

References

1. T. Nakayama, K. yakubo, Physics Reports 349, 239 (2001).
2. Levine D. and Steinhardt P.J. Quasicrystals: the new class of ordered structures, Phys. Rev. Lett., 53, 247 (1984).
3. Di. Vincenzo, D. P. Steinhardt,: Qausicrystals, the state of art, world Scientihic (1991).
4. Zbigneiw, M., Stadnik, Physical properties of quasicrystals, Spriager- verlag Berlin, Heidelberg (1999).
5. K. Kimura and S.Takeuchi, Exprimental studies of electronic transport in quasicrystals, world scientific, 313 (1991).
6. T. Fujiwara and H. Tsunetsugu, Electronic structure and transport of quasicrystals, world scientific, 343-360 (1991).
7. A. E. Carlsson and R. Phillips, Electronic structure and total energy calculation for quasicrystals and related crystals, world scientific, 361- 398 (1991).
8. C. Janot, Quasicrystals, Oxford, Clarendon Press (1994).
9. T.Janssen, Computer simulations of lattice dynamics in quasicrystals, Springer , Berlin (2002) .
10. M. L. Williams and H.J. Maris, Numerical Study of Phonon localization in disordered systems, Phys. Rev. B, 31, (7) 4508- 4515 (1985).

۱۱- سعیده شعاری‌نژاد، ناصر شاه طهماسبی، ۱۳۸۰،مقاله نامه کنفرانس بلورشناسی ایران

12. S. E. Regan and G. J. Morgan, The Phonon density of states obtained from inverting specific heat data, J. Phys., Condens Matter 4 ,199 (1991).

[Downloaded from c4i2016.khu.ac.ir on 2024-10-12]