

وزارة التعليم العالي و البحث العلمي

BADJI MOKHTAR ANNABA UNIVERSITY  
UNIVERSITE BADJI MOKHTAR ANNABA



جامعة باجي مختار – عنابة -

29/09/2014

كلية العلوم  
معهد الفيزياء  
أطروحة

مقدمة من أجل الحصول على شهادة

دكتوراه علوم

دراسة خواص مميزة في الأكاسيد

Etude des Propriétés remarquables des oxydes

اختصاص: فيزياء المواد

من طرف

بوديار عبيد

أمام اللجنة

رئيسا	جامعة عنابة	أستاذ التعليم العالي	علاق صافية
مقرا	جامعة عنابة	أستاذ التعليم العالي	خان سمير
عضوا	جامعة سطيف	أستاذ التعليم العالي	العيادي عبد الحميد
عضوا	جامعة جيجل	أستاذ التعليم العالي	عميرة عبد الرزاق
عضوا	جامعة تيسة	أستاذ محاضر أ	بومالي عبد المالك

## شكر و تقدير

أتقدم بالشكر الجزيل إلى كل من ساهم من قريب أو بعيد في انجاز هذه الرسالة ،

وأخص بالذكر الأستاذ **خان سمير** على إشرافه وتنبعه المستمر طيلة انجاز هذا

البحث ، وكذلك إرشاداته ونصائحه القيمة ، وتشجيعاته لنا في مسيرة البحث . كما

أتقدم بالشكر الجزيل للأستاذة **علاق صافية** على تفضلها برئاسة لجنة المناقشة ،

وأتقدم بشكري للأستاذة **العيادي عبد الحميد**، **عميرة عبد الرزاق** ، **بومالي عبد**

**المالك** ، وأشكرهم جزيل الشكر على موافقتهم المشاركة في لجنة المناقشة.

## ملخص

يتركز هذا العمل حول دراسة بعض الخواص المميزة في الأكاسيد. حيث تتميز عائلة أكاسيد البيروفسكيت بتنوع كبير في الخصائص المهمة ، وتشمل مجال واسع من المواد مثل أنصاف النواقل ، الكهروحيديدية ، المغناطيسية ، العوازل ، و المواد فائقة الناقلية. وتمتلك المواد فائقة الناقلية ذات درجات الحرارة المرتفعة خواص بنيوية و الكترونية مشتركة مع عائلة أكاسيد البيروفسكيت . قمنا في هذه الأطروحة بتقديم نموذج بسيط للمسارات المشحونة في أكاسيد مركبات الكبريت ، حيث أعطى هذا النموذج نتائج ممتازة لقيم الوسائط الموجودة في بيان الطور ، طول المسارات المشحونة واتجاهها ، قيمة دقيقة لدرجة الحرارة الحرجة . كما يتفق هذا النموذج مع النتائج التجريبية التي تؤكد وجود سلمين مختلفين للطاقة في بيان الطور الخاص بالكبريت . لقد استعملنا هذا النموذج من أجل محاكاة الخواص الترموديناميكية للأكاسيد فوق الناقلية ذات درجات الحرارة المرتفعة مثل السعة الحرارية ، الطاقة الحرة و الأنثروبي. وفي الأخير استنتجنا بأن ظاهرة الناقلية الفائقة ذات درجات الحرارة المرتفعة في هذه الأكاسيد تتم عن طريق تركيب متناسق للخواص الغير خطية للشبكة المغناطيسية بالإضافة إلى الخواص الكهربائية لخزانات الشحنة والمستويات  $CuO_2$ ، أثناء عملية التطعيم بواسطة الثقوب .

الكلمات المفتاحية الأكاسيد ، الكبريت ، المسارات ، ثنائيات ، موجة وحيدة ، بيان الطور

## Résumé

Ce travail étudie certaines propriétés des oxydes. Les pérovskites qui sont à la base de la formation de ces oxydes existent dans les métaux, les semi-conducteurs, les matériaux ferroélectriques, piézoélectriques, magnétiques, isolants et les supraconducteurs à haute température critique. Ces derniers partagent de nombreuses caractéristiques structurales et électroniques avec les pérovskites. Dans ce travail, nous proposons un modèle simple qui décrit les rayures (stripes) dans les cuprates. Il donne les valeurs des paramètres du diagramme de phase, de la longueur de stripes, de leurs orientations et une valeur de la température critique concordant avec les faits expérimentaux. Il prévoit aussi l'existence de deux échelles d'énergie dans le diagramme de phase des cuprates. Ce modèle a été également utilisé pour déterminer quelques propriétés thermodynamiques des supraconducteurs à haute température critique (chaleur spécifique, de l'énergie libre et entropie).

Le phénomène de la supraconductivité à haute température pourrait être expliqué par la combinaison harmonique des propriétés non linéaires du réseau magnétique et les propriétés électriques des réservoirs de charge des plans  $\text{CuO}_2$ .

**Mots-clés :** Oxydes, Cuprates, Rayures, Bisolitons, Dopage, Trous, Diagramme de Phase.

## Abstract

This work is a study of some remarkable properties of oxides. Perovskite family of oxides displays an amazing variety of interesting properties. It includes a vast array of insulators, piezoelectrics, ferroelectrics, metals, semiconductors, magnetic, and superconducting materials. High-TC superconductors share many structural and electronic features with perovskites cells. In this thesis, we propose a simple model of charged stripes in cuprates, which give us excellent values of phase diagram parameters, length of charged stripes and their orientations, an accurate value of the critical temperature. This model predicts the existence of two energy scales in cuprates phase diagram in agreement with experimental results. We used it to find some thermodynamic properties of High-TC superconductors (specific heat, free energy and entropy).

Finally, we believe that the superconducting phenomenon of high-TC oxides could be explained by a harmonic combination of non-linear properties

of the magnetic network and electrical properties of charges reservoir of CuO<sub>2</sub> plans.

Key words :Oxides, Cuprates, Stripes, Bisolitons, doping, hole, Phase-diagram.

## فهرس الأشكال

### الفصل الأول:

- الشكل (1-1) : رسم تخطيطي يظهر النموذج المثالي لبنية الأكاسيد  $ABO_3$  ..... 06
- الشكل (2-1) : كيفية تأثير الحقل البلوري على المستويات الذرية  $Cu\ 3d$  ..... 09
- الشكل (3-1) : أسرطة الطاقة لأكسيد  $ABO_3$  نموذجي بالاعتماد على التفاعل بين الجوار الأقرب ..... 13
- الشكل (4-1) : بيان الطور للأكسيد  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  بدلالة درجة الحرارة ..... 15
- الشكل (5-1) : مواقع الذرات في البنية البلورية للأكسيد  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  ..... 16
- الشكل (6-1) : مواقع الذرات في البنية البلورية للأكسيد  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  ..... 17
- الشكل (7-1) : مقارنة بين بياني الطور الناتجين عن التطعيم الإلكتروني والتطعيم بواسطة الثقوب ..... 18
- الشكل (8-1) : مخطط يظهر البنية الطبقيّة في الأكاسيد فائقة الناقلية من النوع YBCO ..... 19
- الشكل (9-1) : بيان الطور للأكاسيد YBCO في حالة التطعيم بواسطة الثقوب ..... 20
- الشكل (10-1) : تغيير المقاومة للأكسيد  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  من أجل مستويات تطعيم مختلفة ..... 21

### الفصل الثاني:

- الشكل (1-2) : كيفية توزع النتائج التجريبية لقياسات شبه المنطقة ممنوعة  $E_{pg}$  و  $E_{sc}$  ..... 28
- الشكل (2-2) : تغيير شبه المنطقة ممنوعة  $E_{pg}$  و  $E_{sc}$  لعدد من الأكاسيد ..... 29
- الشكل (3-2) : كيفية توزع الشحنات في المستويات  $CuO_2$  بدلالة التطعيم ..... 31
- الشكل (4-2) : كيفية تغيير كثافة المسارات المشحونة في المستويات  $CuO_2$  بدلالة التطعيم ..... 32
- الشكل (5-2) : المناطق المختلفة المتشكلة أثناء التطعيم في المستويات  $CuO_2$  ..... 33
- الشكل (6-2) : كيفية تأثير نظائر الأكسجين في الأكاسيد  $Bi2212$  ، YBCO ، و LSCO ..... 35
- الشكل (7-2) : مخطط يظهر بوضوح وجود طاقتين مختلفتين  $\Delta_p$  و  $\Delta_c$  ..... 39
- الشكل (8-2) : مخطط يظهر ثلاثة سيتاريوهات محتملة لبيان الطور  $(T_c, x)$  ..... 40
- الشكل (9-2) : النمطين الممكنين للتناظر  $(s, d)$  الموجود في وسيط الانتظام ..... 41
- الشكل (10-2) : مخطط يظهر نتائج قياسات  $\chi''(Q, \omega)$  بواسطة تشتت النيوترونات ..... 43
- الشكل (11-2) : (a) القيم التجريبية للتشتت النيوتروني في الأكسيد LSCO ممثلة في الشبكة المعكوسة (b) مخطط يظهر كيفية تغيير طاقة التجاوب بدلالة موقع قمة التجاوب في الأكسيد YBCO ..... 44
- الشكل (12-2) : مخطط يظهر النتيجة التجريبية  $\chi''(Q, \omega)$  ، من أجل  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  ..... 45
- الشكل (13-2) : مخطط نموذجي لمسارات الشحن في المستويات  $(CuO_2)$  من أجل كثافة ثقوب تساوي  $1/8$  ..... 47
- الشكل (14-2) : المنطقة نتائج القياس بواسطة تقنية STM في سلسلة من البلورات الأحادية ..... 48

### الفصل الثالث:

- الشكل (3-1): رسم تخطيطي لبنية أكسيد فوق ناقل متعدد الطبقات.....58
- الشكل (3-2): رسم تخطيطي لنموذج الطبقات المستخدم في النظرية الكهربائية.....59
- الشكل (3-3): رسم تخطيطي لدرجة الحرارة  $T_c^0$  بدلالة  $(\xi/\ell)^{-1}$  من أجل 31 أكسيد.....61
- الشكل (3-4): رسم تخطيطي لدرجة الحرارة  $T_c^0$  بدلالة  $(\xi/\ell)$  من أجل 31 أكسيد.....62
- الشكل (3-5): رسم تخطيطي لتفسير النظرية الكهربائية لعملية تكون الثنائيات.....63
- الشكل (3-6): أحد الأنماط الممكنة لتشكيلات الروابط القصيرة المدى في RVB.....69
- الشكل (3-7): تمثيل تخطيطي لبيان الطور الخاص بنظرية RVB.....73

### الفصل الرابع:

- الشكل (4-1): أنماط الارتباطات الممكنة لشبه جسيم ولأزواج أشباه الجسيمات.....98
- الشكل (4-2): رسم تخطيطي يظهر الكيفية التي تصف بها أعداد فيبوناكي  $F_{n+1}$  الطرق الممكنة من أجل عملية ملئ لوحة شطرنج ذات بعد  $(n \times 2)$  بواسطة قطع دومينو.....99
- الشكل (4-3): رسم تخطيطي يظهر (a) عملية تخامد حركة الثقب بسبب الخلفية المغناطيسية التي يتحرك من خلالها (b) يظهر فيه امكانية تقادي عملية تخامد حركة الثقب.....101

### الفصل الخامس:

- الشكل (5-1): نتيجة النموذج لبيان السعة الحرارية المختزلة بدلالة  $\xi$  من أجل  $\mu = 1$ .....109
- الشكل (5-2): نتيجة النموذج لبيان  $C/\gamma T$  المختزلة بدلالة  $\xi$  من أجل  $\mu = 1$ .....109
- الشكل (5-3): نتيجة النموذج لبيان الطاقة الحرة المختزلة بدلالة  $\xi$  من أجل  $\mu = 1$ .....110
- الشكل (5-4): نتيجة النموذج لبيان الأنتروبي المختزلة بدلالة  $\xi$  من أجل  $\mu = 1$ .....110
- الشكل (5-5): نتيجة النموذج لبيان الطور للطاقة  $E_g$  في الكبريت بدلالة تركيز الثقب  $p$ .....112
- الجدول (5-1): مقارنة وسائط بيان الطور التي توصلنا إليها باستخدام هذا النموذج مع التجربة.....115

## الفهرس

1..... مقدمة عامة

### الفصل الأول: عموميات حول الأكاسيد

5..... مقدمة

6..... 1-1- بنية مركبات الأكاسيد  $ABO_3$

7..... 2-1- النموذج الأيوني لبنية أكسيد  $ABO_3$

7..... 3-1- الكمون الكهروستاتيكي في الأكاسيد  $ABO_3$

10..... 4-1- الامتزاج بين المدارات في الأكاسيد  $ABO_3$

11..... 5-1- أشرطة الطاقة في الأكاسيد  $ABO_3$

14..... 6-1- تأثير التطعيم على الخواص الفيزيائية للأكاسيد

14..... 1-6-1 البنية الشبكية

15..... 6-1- 2- المميزات الأساسية لبيان الطور

16..... 6-1- 3- الأكسيد  $La_{2-x}Sr_xCuO_2$

18..... 6-1- 4- الأكسيد  $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$

19..... 6-1- 5- الأكسيد  $YBa_2Cu_3O_{6+x}$

20..... 7-1- خواص الحالة الطبيعية للأكاسيد فائقة الناقلية

### الفصل الثاني: خواص مميزة في الأكاسيد فوق الناقلية

27..... 1-2- التطعيم وتوزع الشحنة

27..... 1-1-2 العلاقة بين عملية التطعيم ودرجة الحرارة  $T_c$

30..... 2-1-2 ظاهرة عدم تجانس توزيع الشحنة الكهربائية

34..... 2-2- تأثير النظائر على درجات الحرارة المميزة

35..... 3-2- غياب الترابط بين  $\Delta_0$  ودرجة الحرارة  $T_c$

36..... 4-2- ظاهرة عدم تجانس الكتلة الفعالة

36..... 5-2- تأثير الشوائب على درجات الحرارة المميزة

37..... 6-2- علاقة تماسك الطور بدرجات الحرارة المميزة

38..... 7-2- عدد موازين الطاقة يساوي اثنين

40..... 8-2- طبيعة التناظر في وسيط الانتظام

42..... 9-2- الخواص المغناطيسية

46..... 10-2- طور تشكل مسارات الشحن

47..... 11-2- المنطقة الممنوعة الزائفة

48..... 12-2- مستويات التطعيم الخاصة



## الفصل الثالث: نظريات خاصة بفوق الناقلية في الأكاسيد

56	مقدمة
57	1-3- النظرية الكهربائية لفوق الناقلية
58	1-1-3 الإثبات التجريبي للنظرية
60	2-1-3 كثافة الإلكترونات والثقوب
62	3-1-3 تكون الثنائيات من خلال تشتت كومبتون
64	2-3- نظرية مناطق التكافؤ المتجاوبة
64	1-2-3 العوازل ذات الإلكترونات شديدة الارتباط
65	2-2-3 حالات السبين في العوازل ذات الإلكترونات شديدة الارتباط
67	3-2-3 تقريب الحقل المتوسط
71	4-2-3 عوازل Mott- المطعمة
75	3-3- نظرية ثنائية الموجة الوحيدة
75	1-3-3 نموذج ثنائية الموجة الوحيدة
80	2-3-3 حالة الكثافة الصغيرة لناقلات الشحنة المطعمة
81	3-3-3 حالة الكثافة الكبيرة لناقلات الشحنة المطعمة
81	4-3-3 دراسة تأثير التنافر الكهربائي
82	5-3-3 دراسة تأثير استقرار الثنائيات
82	6-3-3 درجة الحرارة الحرجة في النظرية

## الفصل الرابع: اقتراح نموذج خاص بمسارات الشحن في الأكاسيد YBCO

94	مقدمة
95	1-4- النموذج
100	2-4- استنتاج بيان الطور ( $T_c, p$ ) من خلال النموذج المقترح
101	3-4- الحسابات
105	4-4- الخواص الترموديناميكية

## الفصل الخامس: النتائج والمناقشة

108	1-5- الخواص الترموديناميكية
111	2-5- الخواص الإلكترونية
111	1-2-5- حدود المجال الخاص بالتطعيم
111	2-2-5- مجال الطاقة الممنوع الخاص بالناقلية الفائقة
112	3-2-5- نقطة التركيز الكمية الحرجة
113	4-2-5- المناطق شبه الممنوعة
118	النتيجة العامة



## مقدمة عامة

تعتبر الأكاسيد أحد ركائز الثورة التكنولوجية الحديثة ، كما أنها تصنف ضمن المواد الإستراتيجية في بعض الدول ، وتقوم هذه الدول بإنفاق ميزانيات ضخمة على البحوث التي تهتم بتطوير تطبيقات للخواص المميزة لهذه الأكاسيد في ميادين مختلفة من أهمها ميدان الطاقات النظيفة . وتعتبر الأكاسيد من أكثر المركبات تنوعا من حيث الخصائص الفيزيائية ، فعائلة الأكاسيد  $ABO_3$  مثلا تمتلك تنوعا كبير يتوزع على الناقلية الفائقة ، أنصاف النواقل ، العوازل الكهروحرارية ... كما أنها تمتلك تطبيقات مهمة في مجال الطاقات المتجددة ، حيث تعتبر المكون الأساسي لخلايا الأكاسيد الصلبة SOFC التي تستعمل الهيدروجين من أجل إنتاج الكهرباء ، والتي تجد مؤخرا تطبيقا مهم في بطاريات السيارات الكهربائية والسيارات الهجينة . وقد تم اختيار هذا النوع من الأكاسيد بسبب تحمله للاجهادات الميكانيكية ، ودرجات الحرارة المرتفعة . وبسبب التنوع الكبير لعائلة الأكاسيد  $ABO_3$  فيمكن اعتبارها نموذج يمثل معظم الخواص الفيزيائية للأكاسيد مع بعض الاختلافات البسيطة . وتدخل الأكاسيد  $ABO_3$  في البنية الأساسية للأكاسيد فوق الناقلية التي تملك درجات حرارة حرجة مرتفعة مثل YBCO . ولهذا السبب فهذه الأطروحة تهتم بدراسة الخواص المميزة في هذه الأكاسيد . ويعتبر اكتشاف مسارات الشحن في السنوات الأخيرة في هذا النوع من الأكاسيد ، تحد كبير لأي نظرية تحاول تفسير آلية فوق الناقلية في هذا النوع من الأكاسيد ، كما يعتبر هذا الاكتشاف تحد أيضا للتقنيات المستعملة في الدراسة .

يتركز عملنا في هذه الأطروحة على تقديم نموذج لميكانيزم الناقلية الفائقة ذات درجات الحرارة المرتفعة في الأكاسيد ، ومن ثم تطبيقه على بعض هذه الأكاسيد من أجل الحصول على نتائج عددية دقيقة ومقارنتها بالتجربة . ولقد حقق هذا النموذج نجاحا ملفتا عند تطبيقه على الأكاسيد YBCO ، حيث أعطى قيمة دقيقة لكل من درجة الحرارة الحرجة  $T_c$  وطول المسارات المشحونة . كما استعملنا النموذج في إيجاد بيان الطور  $(T_c, p)$  حيث تحصلنا من خلاله على قيم دقيقة للمجال الذي يمكن أن يحدث فيه التطعيم-doping بواسطة الثقوب- ، بالإضافة إلى قيمة مطابقة للتجربة بالنسبة للنقطة التي يحدث عندها التطعيم الأمثل . كما استعملنا هذا النموذج في دراسة الخواص الترموديناميكية بجوار درجة الحرارة الحرجة كالسعة الحرارية ، الطاقة الحرة والأنثروبي .

لقد قمنا بتقسيم هذه الأطروحة إلى خمسة فصول مرتبة بشكل منطقي حسب الحاجة لكل فصل ، حيث بدأنا بالتكلم عن الخواص العامة للأكاسيد في الفصل الأول حيث تطرقنا إلى البنية البلورية ، ونماذج التفاعلات المعروفة كالنموذج الأيوني والنموذج الكهروستاتيكي كما تكلمنا عن الدور الذي يلعبه تمازج المدارات الذرية في تحديد خواص أشرطة الطاقة لهذه الأكاسيد . وقد أدخلنا عنصر مهم في هذا الفصل حول تأثير عملية التطعيم على الخواص الفيزيائية لهذه الأكاسيد وعلى الخصائص الناقلية فوق الناقلية من خلال دراسة بيان الطور  $(T_c, p)$  . كما قمنا بمقارنة بسيطة لنوعي التطعيم بالثقوب والالكترونات .

أما الفصل الثاني فقد جعلناه من أجل تحديد الخواص المميزة في الأكاسيد فوق الناقلية ، والتي جعلها مختلفة عن المواد فوق الناقلية المألوفة والتي تخضع لنظرية (BCS) . ومن أهم هذه الخواص المميزة التي تم التطرق إليها نجد ظاهرة عدم التجانس في الكتلة الفعالة وعدم التجانس في توزع الشحن في المستويات  $CuO_2$  أو ما يسمى بمسارات الشحن . والدور الذي تلعبه الفونونات من خلال دراسة تأثير النظائر على درجة الحرارة الحرجة . كما تم التكلم عن وجود منطقة ممنوعة ثانية تختلف في أصل تكونها عن المنطقة ممنوعة الاعتيادية . ودون أن ننسى التكلم عن الخواص المغناطيسية .

وبسبب عدم خضوع ظاهرة فوق الناقلية في هذه الأكاسيد لنظرية (BCS) الاعتيادية ، نجد أن هنالك عدد كبير من النظريات الجديدة والقديمة التي تحاول وضع ميكانيزم لهذه الظاهرة ، إلا أنه لا توجد لحد الآن نظرية متكاملة تستطيع التوافق مع العدد الهائل للنتائج التجريبية ، التي تم التوصل إليها بطرق متعددة ولهذا فقد خصصنا الفصل الثالث كله لذكر ثلاثة نظريات مهمة بسبب نتائجها المميزة وقبولها من طرف الوسط العلمي . حيث تكلمنا على نظرية بسيطة وحديثة هي النظرية الكهربائية أو نظرية Harshman والتي تم نشرها سنة 2011 وقد أعطت قيمة دقيقة لدرجة الحرارة الحرجة  $T_c$  لأكثر من 31 أكسيد .

وتسمى بالنظرية الكهربائية بسبب ارتباط  $T_c$  بعلاقة بسيطة جدا مع التفاعل الكهربائي بين المستويات  $CuO_2$  وخزانات الشحنة الكهربائية المحيطة بها .

كما أننا تطرقنا إلى نظريتين مهمتين هما نظرية مناطق التكافؤ المتجاوبة RVB ونظرية ثنائيات الموجة الوحيدة (bisoliton) ، حيث تمكنت نظرية RVB من توقع منطقة فوق الناقلية في بيان الطور للأكاسيد YBCO قبل أن يتم إثباتها تجريبيا ، كما أن نظرية ثنائيات الموجة الوحيدة تتفق بشكل جيد مع تجارب أخرى . في الناقلية الفائقة ذات درجات الحرارة المرتفعة ، ليست المشكلة في وجود نظريات تخص هذه الظاهرة ، ولكن المشكلة هي في العدد الكبير لهذه النظريات ، ومع ذلك فهي لا تستطيع أن تفسر جميع الملاحظات التجريبية المعروفة ، والمميزة لبعض هذه الأكاسيد فوق الناقلية . كما فعلت نظرية (BCS) بالنسبة للمواد فائقة الناقلية الاعتيادية أو المنخفضة الحرارة .

لقد قمنا في الفصل الرابع باقتراح نموذج خاص بظاهرة مسارات الشحن في الأكسيد YBCO ، حيث اعتبرنا هذه المسارات مكونة نتيجة عملية متناغمة تتحقق بوجود موجة سبين وحيدة أو ما يسمى (soliton) مترافقة مع انتقال الثقوب في المستوي  $CuO_2$  . وقد أدت الحسابات في هذا النموذج إلى تكون ثنائيات أفقية وعمودية سميها VBS أي ثنائية الموجة الوحيدة العمودية و ثنائية الموجة الوحيدة الأفقية HBS . ثم قمنا باستخدام النموذج للحصول على بيان الطور والخواص الترموديناميكية مثل السعة الحرارية ، الأنتروبي وكذلك دالة الطاقة الحرة .

في الفصل الخامس والأخير قمنا بتقديم النتائج التي توصلنا إليها من خلال النموذج الذي قمنا باقتراحه في الفصل الرابع . كما قمنا بتفسير النتائج ومقارنتها بأحدث النتائج التجريبية المتوفرة لدينا . وأخيرا قمنا بتقديم نتيجة عامة لهذا العمل .

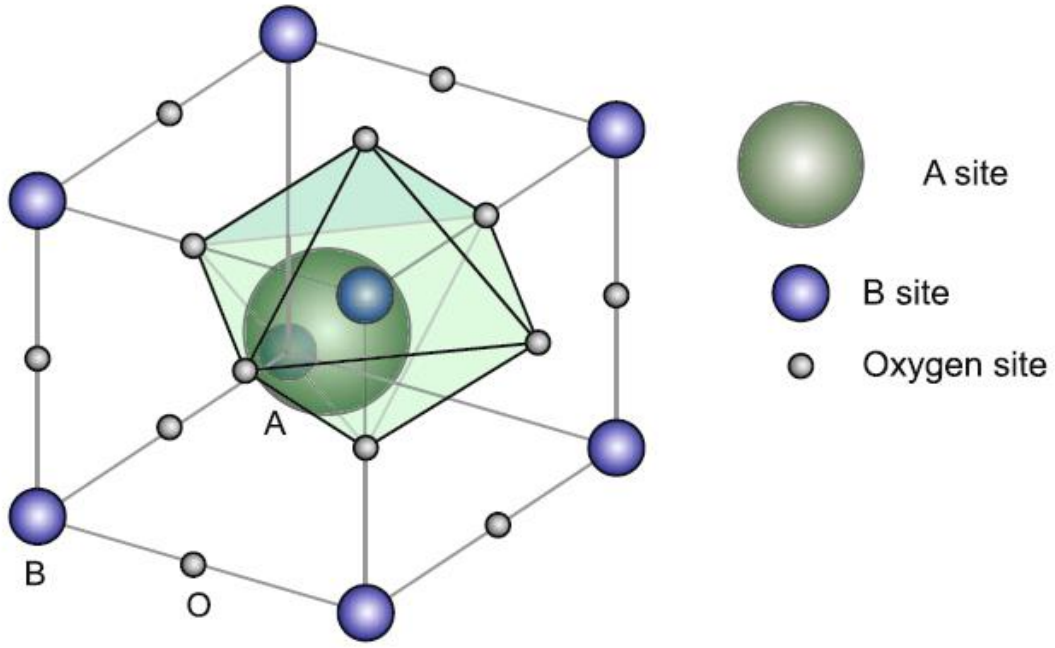
# الفصل الأول

عموميات حول الأكاسيد

## مقدمة:

تعتبر الأكاسيد ركيزة أساسية في الثورة التكنولوجية من الالكترونيات إلى النانو، لهذا فقد لقيت عناية خاصة من قبل الباحثين في فيزياء المواد. وبسبب العدد الكبير من مركبات الأكاسيد، والتي يستحيل التكلم عن جميع خصائصها في رسالة دكتوراه، فقد وجدنا مجموعة من عائلات الأكاسيد التي تلعب دورا مهما في الصناعات والبحوث الجديدة، كما أنها عائلات واسعة تتنوع خصائصها الفيزيائية من الناقلية الفائقة، المغناطيسية، العوازل و المعادن .. ومن بين هذه العائلات نجد عائلة Perovskites . هذه المركبات عبارة عن أكاسيد معدنية تمتلك بنية مكعبة الشكل أو شبه مكعبة، وهي تملك الصيغة  $ABO_3$  . وهي تشمل العديد من المركبات التي تملك العديد من الخواص الملفتة للانتباه. إن عائلة البيروفسكيت تشمل المعادن، العوازل، والمواد فوق الناقلية، المواد المغناطيسية، وأنصاف النواقل بالإضافة إلى تشكيلة واسعة من الظواهر الفيزيائية في فيزياء الحالة الصلبة [1-5]. لقد تم اكتشاف الفلزات  $CaTiO_3$  في جبال اللأورال من طرف الجيولوجي C. Rose سنة 1839 وأعطاه اسم Perovskites تكريما لأحد العلماء الروس. وقد أصبح هذا الاسم يستعمل الآن للدلالة على أي فرد من العائلة الواسعة التي تملك التركيبة  $ABC_3$  حيث يحاط الأيون B بثماني وجوه مكون من الأيونات C كما يظهر في الشكل (1-1) ومعظم مركبات البيروفسكيت تملك بنية مكعبة أو شبه مكعبة وهي تمر بطور بنية أو أكثر في درجات الحرارة المنخفضة، حيث إن أصل الأيون B عبارة عن معدن انتقالي و بالتالي فان البيروفسكيت تنتمي إلى عائلة الأكاسيد المعدنية الانتقالية.

إن أكاسيد البيروفسكيت تجلب الكثير من الانتباه بسبب التنوع الكبير في الظواهر الفيزيائية التي تظهرها كجسم صلب. بعضها تملك أشرطة طاقة غير متوضعة و البعض يملك الكترونات متوضعة والبعض الآخر يتصرف كحالة انتقالية بينهما [6] . إن العديد من مركبات البيروفسكيت منتظمة مغناطيسيا كما يمكن إيجاد تنوع كبير في البنية المغناطيسية. بالإضافة إلى أن أشرطة الطاقة الالكترونية للبيروفسكيت غير اعتيادية حيث أنها تظهر ببعدين فقط وهذا يقود إلى بنية موحدة في الخواص مثل كثافة الحالة الالكترونية و سطوح فرمي و طيف الانبعاث الفوتوني ومقادير أخرى كثيرة. تمتلك مركبات البيروفسكيت عدة تطبيقات صناعية مهمة حيث تستعمل البيروفسكيت في التطبيقات الكهروكيميائية كالمعالجة الكهروضوئية للماء لإنتاج الهيدروجين. وفي خلايا الوقود التي تستعمل الأكاسيد الصلبة SOFC. [7,8] ، لقد درس العلماء مركبات البيروفسكيت لعدة سنوات ماضية وخاصة البرونز و التنغستين الذين درسا مبكرا سنة 1923. و مع ذلك فالبنية الالكترونية من الناحية النظرية والتجريبية لم تتوفر بشكل جيد إلا في السنوات الأخيرة. فحسابات عصابت الطاقة ومعطيات أخرى مثل انعراج النترونات [9] ومعطيات التصادمات غير المرنة و طيف الانبعاث هي الآن متوفرة لمواد مثل تلك الممثلة في الشكل (1-1) ولتركيبات متنوعة من البيروفسكيت [10].



الشكل رقم (1-1) : رسم تخطيطي يظهر النموذج المثالي لبنية الأكاسيد  $ABO_3$  [11]

### 1-1- بنية الأكاسيد $ABO_3$ :

بنية وحدة الخلايا من البيروفسكيت مكعب أو شبه مكعب وهي تأخذ العبارة  $ABO_3$  حيث  $A$  و  $B$  هما شاردتين معدنيتين مهبطيتين و  $O$  هي شاردة أكسجين مصعديه. إن البنية الموضحة في الشكل رقم (1-1) هي بنية مكعب بسيط مع خمسة ذرات في وحدة الخلايا و ثابت الشبكة  $2a$  قريب من  $4A^0$  لأغلب أكاسيد  $ABO_3$ . المهبط  $B$  هو أيون معدن انتقالي وهي متوضعة في مركز ثماني الوجوه المكون من المصاعد الأكسجينية. كما أن موقع الأيون  $B$  يملك مجموعة تناظر  $O_h$ . المهبط  $A$  يمكن أن يكون أحادي التكافؤ، ثنائي التكافؤ أو ثلاثي التكافؤ لأيون معدني. والأيونات  $A$  محاطة باثني عشرة أيون من الأكسجين متماثلة المسافة. كما أن مواضع  $A$  تمتلك زمرة من النمط  $O_h$ .

إن  $BaTiO_3$ ،  $KTaO_3$  و  $SrTiO_3$  هي أمثلة معروفة لمركبات الأكاسيد  $ABO_3$  المكعبة. كما أن العديد من مركبات الأكاسيد التي نريد دراستها هي منحرفة بعض الشيء عن الشكل المثالي المكعب. فإذا كان الانحراف معتدل أي ليس صغيراً أو كبيراً فالملامح العامة لن تكون مختلفة كثيراً عن البنية المكعبة، فكل من  $BaTiO_3$  و  $SrTiO_3$  كلاهما يملك بنية ذات قابلية للانتقال إلى التناظر من النوع Tetragonal عند درجات حرارة معينة. إن الانحرافات من النوع Tetragonal و Orthogonal هي ظاهرة مشتركة أو عامة بين مختلف مركبات الأكاسيد  $ABO_3$ .

هناك أقسام أخرى من المركبات التي هي شبه أكاسيد  $ABO_3$  تملك تركيبية وحدوية  $BO_3$ . هذه المركبات تملك نفس البنية باستثناء هو أن الموقع  $A$  يكون فارغ. وكمثال على ذلك المركبين  $WO_3$ ،  $ReO_3$ . كما يمكن تكوين قسم وسط من الأكسيد ذو البنية  $WO_3$  بإضافة أيون قلوي في المكان الفارغ ل  $A$ . هذه المركبات تمتلك وحدة خلايا من الشكل  $A_xWO_3$  حيث يتغير  $x$  من 0 إلى 1 بينما يكون  $A$  هو  $(H, Li, K, Na, Cs, Rb)$ ، فالمركب  $NaWO_3$  تملك بنية مكعبة بينما يصبح  $A_xWO_3$  مكعب عندما يأخذ  $x$  قيم أكبر من 0.5. كما أن هناك مركبات من الشكل  $(A_x^1A_{1-x}^2)(B_y^1B_{1-y}^2)O_3$  و هذا القسم من التركيبات واسع جداً وهو غني بالظواهر الفيزيائية المعروفة في فيزياء الجسم الصلب. [7]

### 2-1 النموذج الأيوني لبنية أكسيد $ABO_3$ :



إن الأكاسيد  $ABO_3$  شديدة التأين ولكنها في المقابل تملك خواص مهمة ومميزة و النموذج الأيوني هو الأكثر بساطة ولكنه يخدمنا كثيرا كنقطة بداية عند التفكير في الخواص الالكترونية . إن النموذج الأيوني يعتبر أن المهبطيتين (A, B) تخسران الكترونات لصالح مصعدية الأكسجين  $O^{-2}$  لإنتاج  $O^{-2}$ . فإذا كانت  $Q_B$  هي شحنة B و  $Q_A$  هي شحنة A فان  $Q_B = (6 - Q_A)$  حيث  $30^{-2} = 6$  [12]. إن حالة الشحنة للأيون B تحدد العدد d للتشكيلة الالكترونية. وكمثال على ذلك المركب  $SrTiO_3$  حيث لدينا  $(O^{-2}, Sr^{+2})$  هذا يعني أن  $Ti^{(++)}$  ، حيث أن تشكيلة التيتانيوم المحايدة هي  $(Ar)3d^24s^2$ . ولتشكيل  $Ti^{(++)}$  ينبغي فقط أخذ الالكترونات العليا فيبقى فقط جسم الأروغون (Ar). وبما أن  $O^{-2}$  تمتلك تشكيلة (Ne) فان جميع أيونات  $SrTiO_3$  تمتلك طبقات خارجية مغلقة .

إن تشكيلة W هي  $(Xe)5d^46s^2$  حيث يمتلك الايون  $W^{++}$  داخل  $WO_3$  طبقة خارجية مغلقة بجسم Xe. وبناء على النموذج الأيوني فانه عندما تملك جميع الأيونات بنية خارجية مغلقة فان المعدن يصبح عازل. و إذا احتفظ الأيون B بالالكترونات فان الأكاسيد  $ABO_3$  يمكن أن تصبح ناقل معدني كما يعتمد هذا على عوامل أخرى سوف نناقشها لاحقا . فعلى سبيل المثال فان كل من  $ReO_3$  و  $NaWO_3$  يملك التشكيلة  $d^1$  وهما معدنين جيدين. ففي حالة  $Na_xWO_3$  فانه نعتبر في وحدة الخلايا ، حيث يعطي Na إلكترونه وتعمل الكترونات الأيونات W الباقية لتكوين أيونات  $O^{-2}$ . يمكن تخيل وجود  $(1 - x)W^{++}$  و  $xW^{++}$  أيون تنغستين موزعة بشكل عشوائي أو طريقة غير منتظمة كل أيون يملك تكافؤ متوسط  $W^{+(6-x)}$ .

### 3-1 الكمون الكهروستاتيكي في الأكسيد $ABO_3$ :

بالانطلاق من النموذج الأيوني . هناك تأثيرات أخرى تحدد الخواص الالكترونية التي يمكن إضافتها. إن النموذج الأيوني الذي وصفناه سابقا يمكن أن يطبق على الأيونات المعزولة أو الحرة. إن الأيونات ليست معزولة ولكنها تتفاعل بطرق مختلفة. وأحد تلك الطرق هي عبر الحقل الكهروستاتيكي من خلال الشحن الأيونية . حيث أن الأيونات (A, B) محاطة بشحن أكسجين سالبة . فعلى سبيل المثال نجد أن الكمون الكهروستاتيكي أو ما يسمى بكمون مادلينغ عند الموقع المتوسط عند  $\vec{R}_B^0$  يكون بالشكل التالي :

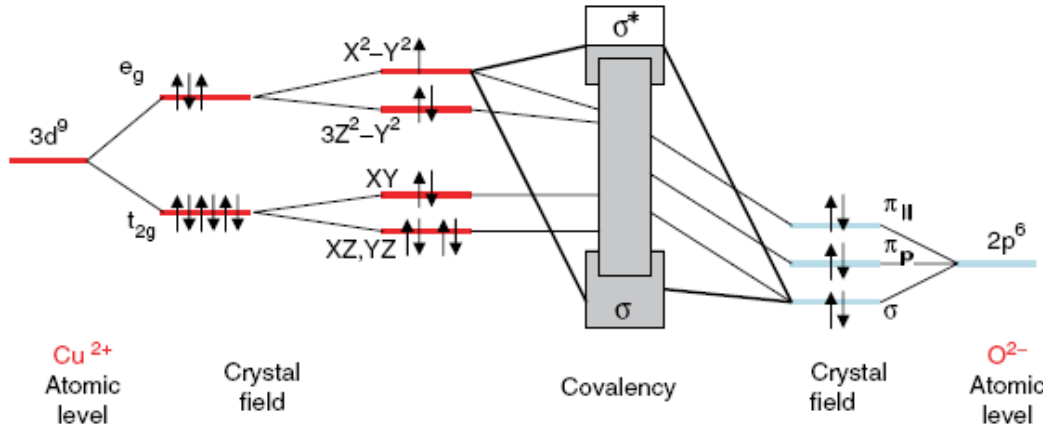
$$V_M(\vec{R}_B^0) = \sum_{\vec{R}_0} \frac{e^2|q_0|}{|\vec{R}_B^0 - \vec{R}_0|} - \sum_{\vec{R}_A} \frac{e^2|q_A|}{|\vec{R}_B^0 - \vec{R}_A|} - \sum_{\vec{R}_B \neq \vec{R}_B^0} \frac{e^2|q_B|}{|\vec{R}_B^0 - \vec{R}_B|} \quad (1.1)$$

حيث  $eq_0, eq_A, eq_B$  هي الشحن على الأكسجين و الأيونات (A, B). أما  $\vec{R}_B^0, \vec{R}_A, \vec{R}_0$  فهي أشعة موضع الخلايا. إن كمون مادلينغ يأخذ قيم كبيرة جدا في حالة الأكاسيد  $ABO_3$  حيث أنها بين 30 إلى 50 إلكترون فولط عند الموقع B وهذا بسبب كبر الشحنة الأيونية. ففي حالة  $A^{+2}B^{+4}O_3^{-2}$  نجد القيم التالية  $V_M(O) = -23.8 \text{ eV}$  ،  $V_M(A) = +19.9 \text{ eV}$  ،  $V_M(B) = +45.6 \text{ eV}$  [8]. إن الاستقرار الكبير في بنية الأكاسيد  $ABO_3$  يعود الى الطاقة المرافقة لكمون مادلينغ، حيث أن كمون التجاذب بين مواقع الأكسجين تسمح لأيونات الأكسجين بربط زوج من الالكترونات و بالانتقال إلى الإلكترون d فانه يرتبط بالأيون  $Ti^{++}$  بطاقة تأين  $-45 \text{ eV}$ . في غياب موقع مادلينغ الذي يسبب التنافر نجد أن إعطاء إلكترون من  $Ti^{+3}$  إلى  $O^{-}$  في  $SrTiO_3$  يصبح غير مفضل من الناحية الطاقية . إن كمون الموقع لمادلينغ سوف يضاف إلى طاقة التأين لذلك فالإلكترون d سوف يملك طاقة ارتباط  $2.6 \text{ eV} = (-43 + 45.6)$  من اجل  $SrTiO_3$  مع شحنة أيونية كاملة. من خلال هذا نستنتج أن كمون مادلينغ هو المسؤول عن التشكيلة الالكترونية للأيون. وبغرض تحديد التأثير الكامل للحقل الكهروساكن على حالة الإلكترون نحتاج إلى معرفة تصرف الحقل كدالة للموضع بجوار كل مواقع الأيونات :

$$V(\vec{R}) = \frac{-e^2|q_B|}{|\vec{r} - \vec{R}_B^0|} + V_{es}(\vec{r}) \quad (2.1)$$

$$V_{es}(\vec{r}) = - \sum_{\vec{R}_B \neq \vec{R}_B^0} \frac{e^2 |q_0|}{|\vec{r} - \vec{R}_B|} - \sum_{\vec{R}_A} \frac{e^2 |q_A|}{|\vec{r} - \vec{R}_A|} + \sum_{\vec{R}_0} \frac{e^2 |q_0|}{|\vec{r} - \vec{R}_0|} \quad (3.1)$$

الكمون بجوار  $\vec{R}_B^0$  يمكن إيجاده بنشر  $V_{es}(\vec{r})$  بدلالة حدود مكونة من الدوال التوافقية الكروية المتمركزة عند  $\vec{R}_B^0$ . والكمون  $V_{es}(\vec{r})$  يأخذ حينئذ شكل نشر متعدد الأقطاب. وأحاديات القطب فيه هي مجرد كمون مادلينغ للموقع. إن متعددات الأقطاب ذات الدرجات الأعلى تنتج حقل كهروساكن مرتبط بزمرة تناظر نقطية للموقع وهذا ما يقود إلى رفع الانحلال في مستويات الطاقة. إن مفعول الحقل الكهروساكن المكعب على موقع الأيون B هو شطر الحالة d إلى مجموعتين كما في الشكل (2-1).



الشكل (2-1): مخطط يبين كيفية تأثير الحقل البلوري على المستويات الذرية Cu 3d. [13]

المجموعة  $e_g$  مضاعفة الانحلال ويعود ذلك إلى امتلاك المدارات d دوال موجة ذات تناظر زاوي  $(x^2 - y^2)r^{-2}$  و كذلك  $(3Z^2 - r^2)r^{-2}$ ، أما الانحلال الثلاثي في المجموعة  $t_{2g}$  فيعود إلى الحالات  $xyr^{-2}$  و  $xzr^{-2}$  و  $zyr^{-2}$ . الحالة 2p للأكسجين تنتشر بفعل حقل كهروساكن محوري إلى مستوى مضاعف الانحلال  $p_{\perp}$  وآخر  $p_{\parallel}$  حيث يعبر الرمزان  $(p_{\parallel}, p_{\perp})$  على توجه المدار بشكل موازي للمحور الرابط بين الأيونين B - O أو يكون عمودي عليه. الحالة السفلى الغير مشغولة للأيون A هي الحالة s. حيث تنسحب طاقتها بواسطة كمون مادلينغ أحادي القطب. ولكنها لا تتأثر ببقية حدود متعدد الأقطاب لأنها غير منحلة فضائياً. مع تناظر كروي في المواقع التي تشكل تناظر من النمط المكعب إن ترتيب المستويات الفرعية في الشكل (2-1) يمكن فهمه باعتبار توجه المدارات بالنسبة لتوزيعات الشحنة على الأيونات المجاورة. المدارات  $e_g$  تمتلك فصوص متجهة على طول المحور B - O أو مباشرة إلى سحابة الشحنة السالبة لأيونات الأكسجين. أما المدارات  $t_{2g}$  تمتلك فصوص متوضعة عمودياً على المحور B - O بين الأيونات السالبة للأكسجين. وكنتيجة لذلك فإن الحالات  $e_g$  حسب التجربة تكون أكثر تناظراً من الحالات  $t_{2g}$ ، وبالتالي تترابط عند الطاقات العليا. وأيضاً لنفس السبب السابق فإن الحالات  $p_{\parallel}$  ترتبط أسفل  $p_{\perp}$  عندما تلاحظ أن جسم الأيون B يظهر على شكل شحنة كهربائية متمركزة، فعلى

سبيل المثال في الأكسيد  $SrTiO_3$  تكون الحالات  $p$  ممتلئة كلياً بينما الحالات  $d$  تكون فارغة كلياً. وفارق الطاقة بين  $t_{2g}$  و  $p_{\perp}$  يساوي بالتقريب عرض شريط الطاقة. [9]

إن المعادن وأنصاف النواقل تملك الحالة  $d$  نصف ممتلئة، فمثلاً  $ReO_3$  و  $NaWO_3$  يملكان إلكترون واحد في الحالة  $t_{2g}$ . في معظم وليس كل حالات عصابات الطاقة التي تشمل الحالة  $s$  للأيون  $A$  هي ذات طاقة أكثر ارتفاعاً مقارنة بالتكافؤ الأول في عصابة الطاقة للأكاسيد  $ABO_3$  ولذلك فهذه الحالات تكون غير مشغولة. و كنتيجة لهذا فإن الحالة  $s$  للأيون  $A$  عادة لا تلعب أي دور فعال في تحديد الخواص الإلكترونية. وهذا لا يعني أن الأيون  $A$  غير مهم لأن الأيون يملك تأثير كبير على طاقة شريط التكافؤ ( $p - d$ ) و شريط النقل. وعلى هذا فإن حجم الأيون  $A$  عامل مهم في تحديد ما إذا كانت بنية البلورة منحرفة عن البنية المكعبة. مع أن البنية الإلكترونية للأكاسيد  $ABO_3$  معطاة، فإنه عادة يمكننا التخلي عن استعمال مدارات الحالة  $A$  عند قيامنا بحساب البنية الإلكترونية. وهذا سوف يقود إلى تبسيط أكثر في الحساب لأن الخواص الإلكترونية للأكاسيد  $ABO_3$  يمكن أن تظهر فقط من الجزء  $BO_3$  للبنية  $ABO_3$ . كما أن هذا يؤدي مثلاً إلى كون بنية  $BaTiO_3$  و  $SrTiO_3$  ينبغي أن تكون نفسها. ولنفس السبب فإن بنية  $Na_xWO_3$  ينبغي أن تكون مستقلة عن القيمة التي يأخذها المتغير  $x$ . وهذا لا يعني أن الخواص نفسها. فعلى سبيل المثال  $WO_3$  يختلف كلياً عن  $NaWO_3$  الذي هو عازل بينما الأول عبارة عن معدن.

#### 4-1 الامتزاج بين المدارات في الأكاسيد $ABO_3$ :

بالإضافة إلى التفاعل الكهروستاتيكي فإن الأيونات يمكن أن تتفاعل بسبب تقاطع دوال الموجة الإلكترونية. وهذا يؤدي إلى تهجين بين المدارات  $p$  والمدارات  $d$  و تكوين مناطق تقاطع بين أيونات المعدن الانتقالي وأيونات الأكسجين. و عادة تعتبر مناطق التقاطع في العوازل مثل  $SrTiO_3$  -مهملة وهذا غير صحيح لأن جميع الخواص الفيزيائية والكيميائية تظهر تأثيراً بفعل الامتزاج. و من أجل فهم ذلك نعتبر تجمع من الأيونات لذرات المعادن الانتقالية والشكل الثماني لأيونات الأكسجين بحيث تكتب دوال الموجة لتجمع الذرات بالشكل التالي:

$$\Psi_n(\vec{r}) = \sum_{\alpha} a_{\alpha}^{(n)} \varphi_{d\alpha}(\vec{r}) + \sum_{R_i} \sum_{\beta} b_{i\beta}^{(n)} \varphi_{p\beta}(\vec{r} - \vec{R}_i) \quad (4.1)$$

حيث  $\Psi_n(\vec{r})$  دالة الموجة لتجمع الذرات للحالة رقم  $n$ ، أما  $\varphi_{d\alpha}(\vec{r})$  فهو المدار  $d$  على الأيون  $B$  من النوع  $\alpha = \{xy, yz, \dots\}$  حيث  $\alpha = \{xy, yz, \dots\}$  أما  $\varphi_{p\beta}(\vec{r} - \vec{R}_i)$  فهو المدار  $p$  المتمركز حول أيون الأكسجين المتوضع في  $\vec{R}_i$  من النمط  $\beta$  حيث  $\beta = \{x, y, z\}$ . المعاملات  $a_{\alpha}^{(n)}$  و  $b_{i\beta}^{(n)}$  هي ثوابت تصف السعات التي تخص المدارات المختلفة التي تشكل الحالة رقم  $n$ . في النموذج الأيوني الدوال الموجية إما أن تكون المدارات  $d$  أو المدارات  $p$  فقط أي أن  $a_{\alpha}^{(n)}$  معدومة.

الاختلاط يأتي بسبب التقاطع بين المدارات  $d$  المتمركزة على المهبطية والمدارات  $p$  المتمركزة حول أيونات الأكسجين المجاورة. هناك نوعين من التقاطع بين المدارات، الأول يتم بين المدارات من النوع  $e_g$  مع المدارات من النوع  $p_{\parallel}$ . وهذا النوع من التقاطع يسمى بالتقاطع  $\sigma$ . أما النوع الثاني فيسمى النمط  $p_i$  وينتج بين  $t_{2g}$  نمط المدار  $d$  والمدارات  $p_{\perp}$ . التقاطع بين  $t_{2g}$  و  $p_{\parallel}$  أو بين  $e_g$  و  $p_{\perp}$  تصبح معدومة بسبب عملية التناظر. فإذا اعتبرنا المدارات  $d$  و  $p$  فقط فهناك 23 حالة تجمع ذري لأيونات المعدن الانتقالي وثمانية الوجوه المشكل بأيونات الأكسجين. هذه 23 حالة تظهر من مزج 23 حالة أساسية 5d مدار و 18p مدار وثلاثة على كل ستة أيونات أكسجين.

إن مستويات الطاقة ممثلة في الشكل (1-2) والأدلة المكتوبة تحت رموز الطاقة هي من نظرية الزمر للتمثيلات الغير قابلة للاختزال. كما أن الأدلة العددية وضعت لأجل التمييز بين مختلف المستويات التي

تملك نفس خواص التناظر، أما انحلال المستويات فيرمز له بالأعداد بين قوسين. كما أنه من الملاحظ أن المدارات d للمساعد مازالت منطبقة في الزمر  $e_g$  و  $t_{2g}$ . وهي تختلف عن تلك التي تخص النموذج الكهروستاتيكي من ناحيتين، الأولى هي أن دوال الموجة ليست متطاولة إلى غاية المدارات d وهي عبارة عن مزيج بين المدارات p و d. أما الاختلاف الثاني فهو أن الانطباق بين الزمرتين  $e_g$  و  $t_{2g}$  أوسع بكثير من النموذج الكهروستاتيكي.

المساهمة من طرف التقاطع في قيمة  $10D_q$  عادة تكون أكبر من المساهمة الكهروستاتيكية  $\Delta_{es}$ ، و عادة فان قيمة  $10D_q$  تتراوح من 2 إلى 3 إلكترون فولت بالقيمة المطلقة، و تملك دوال موجة حيث تكون المدارات d تختلف في الطور عن المدارات p. والتداخل بين المدارات يقود إلى تبادل في الشحنة بين الأيونات O و الأيونات B.

في هذه الحالة تسمى هذه الوضعية بـضد مترابطة أما الحالات المترابطة فهي تشكل الطور المتوافق للمدارات p و d وهذه الحالات تملك دوال موجة مسؤولة عن تكوم الشحن بين الأيونات O و الأيونات B. والشكل (2-1) يمثل حالات الارتباط بين المسويات  $e_g$  و  $t_{2g}$ . هذه الحالات تملك دوال موجة مهجنة تقريبا وهي 70% من المدارات p و 30% من المدارات d. تملك مستويات التجمع الذري دوال موجة هي تركيبات بين المدارات p المتوضعة على أيونات الأكسجين الستة، وهي غير مهجنة مع المدارات d وبالتالي فهي لا تساهم في عملية الارتباط معدن-أكسجين، وهذه الحالات تسمى بالحالات غير المرتبطة. انه من المهم أن نلاحظ أن الالكترونات التي تشغل المدارات d في المساعد تكون زوجية عندما تكون المستويات  $3e_g$  و  $2t_{2g}$  غير مشغولة. وهذا بسبب التقاطع للمدارات d في الحالات الممتلئة الأسفل من المستوي  $2t_{2g}$ . [10].

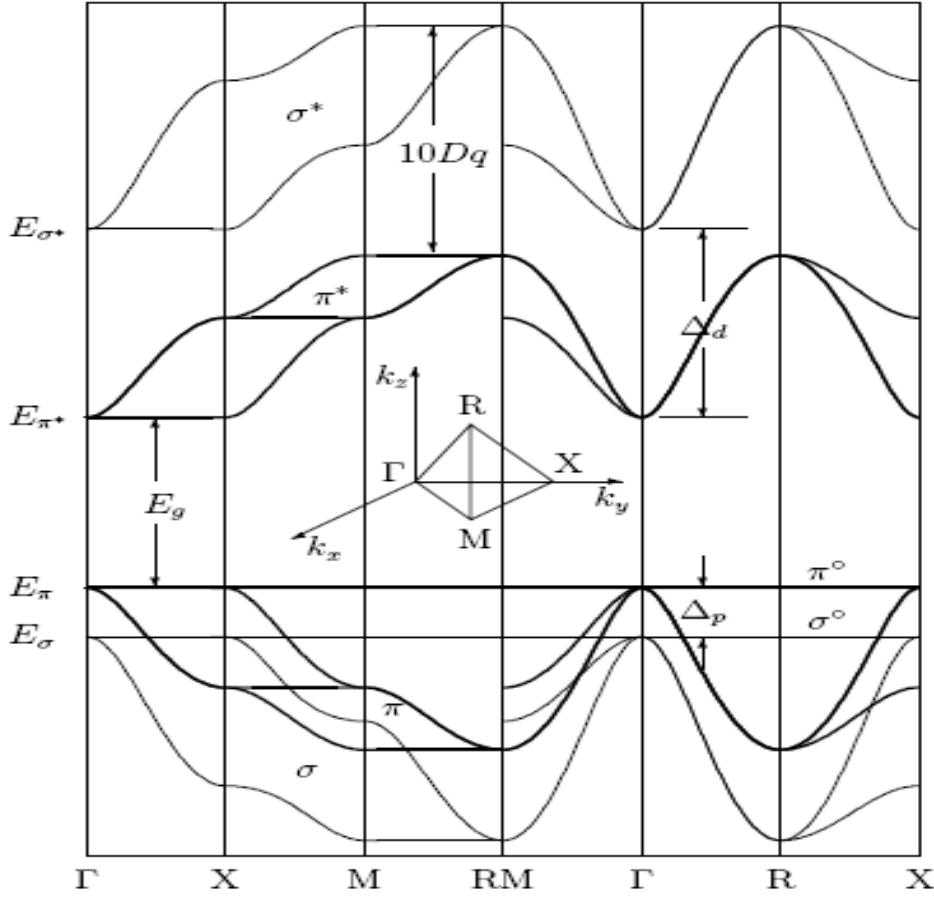
### 1-5 أشرطة الطاقة في الأكاسيد $ABO_3$ :

تتفاعل أيونات المعدن الانتقالي مع الجوار الأقرب لأيونات الأكسجين بين دوال الموجة للمساعد والمهبط يؤدي إلى تعميم جزئي للمدارات d والتي هي فارغة في النموذج الأيوني. إن آلية تمثيل هذا التقاطع بين دوال موجة المساعد والمهبط تضمن تبادل و نقل الالكترونات إلى الأمام والى الخلف بين الأيونات. من الواضح أنه في البنية الأوسع للكريستال سوف يكون نفس الميكانيزم هو الذي يسمح بتشارك أو تقاسم الالكترونات بين المهابط في التجمعات الالكترونية المجاورة. وكل أكسجين في تجمع معطى يتشارك مع المهبط الأقرب، كما أن المهابط يمكن أن تتفاعل فيما بينها من خلال أيون الأكسجين حيث يمكن نقل إلكترون من المهبط إلى أيون الأكسجين ومن أيون الأكسجين إلى المهبط الثاني. عندما تتم هذه الطريقة فان الالكترونات تصبح غير متوضعة و سوف تتشكل أشرطة الطاقة الالكترونية.

من المهم ملاحظة أن تكوين أشرطة الطاقة الالكترونية d يتطلب طريقين مستقلين لتبادل الالكترونات، عدم تموضع الالكترونات d وبالتالي تكون الرتبة الثانية في التقاطع (d - p) (أو احتمال انتقال الإلكترون من d إلى d). وهذا يختلف عن المعدن الأحادي الذرة النموذجي حيث يتعلق التموضع بالرتبة الأولى من التقاطع الذري، في حالة الأكاسيد  $ABO_3$  المكعبة فان الفاصل بين مهبط والمهبط المجاور حوالي  $4A^0$  وهذا كبير جدا لتكوين تقاطع مباشر بين مدارات المهبط وبالتالي تكون أشرطة نقل الكترونات بين المهابط والمساعد والتي تكون المسافة الفاصلة بينها حوالي  $2A^0$ . إن دوال الموجة لحالات العصابة توصف بشعاع موجة  $\vec{k}$  وهي من الشكل :

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}_d} \sum_{\alpha} a_{\alpha}(\vec{k}) \exp i \vec{k} \cdot \vec{R}_d \varphi_{d\alpha}(\vec{r} - \vec{R}_d) + \sum_{\vec{R}_p} \sum_{\beta} b_{\beta}(\vec{k}) \exp i \vec{k} \cdot \vec{R}_d \varphi_{p\beta}(\vec{r} - \vec{R}_p) \quad (5.1)$$

من المعادلة (5-1) فان  $a_{\alpha}(\vec{k})\exp i\vec{k}\vec{R}_d$  و  $b_{\beta}(\vec{k})\exp i\vec{k}\vec{R}_d$  على التوالي هي سعات المدارات d و p ذات التناظرات  $\alpha$  و  $\beta$  المتموضعة في المواقع  $\vec{R}_d$  و  $\vec{R}_p$ . والشكل (3-1) يظهر مخطط أشرطة الطاقة في حالة الأكاسيد  $ABO_3$  النموذجية وهذا عند اعتبار التفاعل بين أيونات الجوار الأقرب فقط. ففي هذا النموذج البسيط عصابات الطاقة تنقسم إلى حالات من العصابات  $\sigma$ . وعصابات  $\pi$ . العصابات  $\sigma$  فقط المدارات ( $e_g d$ ) ومدارات الأكسجين  $p_{||}$  أما العصابات  $\pi$  فقط المدارات ( $t_{2g} d$ ) ومدارات الأكسجين  $p_{\perp}$ . تملك العصابات sigma خمسة فروع، اثنين منفصلين تصنف من النوع عصابة التكافؤ  $\sigma$  وهي مترابطة واثنين منفصلين من نوع عصابة النقل  $\sigma^*$  وهي ضد مترابطة، بالإضافة إلى عصابة واحدة من النوع  $\sigma^0$  وهي غير مترابطة. أما العصابات pi فتملك تسعة فروع هي عبارة عن ثلاثة عصابات تكافؤ مترابطة من النوع  $\pi$  وثلاثة عصابات نقل ضد مترابطة من النوع  $\pi^*$  بالإضافة إلى ثلاثة عصابات تكافؤ غير مترابطة من النوع  $\pi^0$ . كما أن العصابات المترابطة وضد المترابطة ( $\pi, \pi^*, \sigma, \sigma^*$ ) تملك دوال موجة مشكلة من مزيج ( $p - d$ ) يتغير كدالة في شعاع الموجة  $\vec{k}$ . عند النقطة  $\Gamma$  في منطقة بريلمان الأولى كما في الشكل (3-1) فان دالة الموجة تكون إما p صرفة أو d صرفة في تركيبة المدارات. عند  $\Gamma$  وبالتالي نعتمد على المستويات المستخرجة من النموذج الأيوني، والفصل بين العصابات  $\sigma^*$ ،  $\Delta_{es}(d)$  يعود إلى المساهمة الكهروستاتيكية في عملية الانحلال بواسطة الحقل، والفصل عند R يساوي حوالي  $10D_q$ . كما أن العصابات الغير مرتبطة  $\sigma^0$  و  $\pi^0$  تشمل فقط المدارات 2p للأكسجين وبالتالي لا تشمل إلا الامتزاج التكافئي. الفاصل الطاقى بين العصابات  $\pi^*$  و  $\pi^0$  عند  $\Gamma$  هي العرض الأساسي للعصابة  $E_g$  وهو يتغير من واحد إلى أربعة إلكترون فولط، ويأخذ قيمة أكبر في عوازل الأكاسيد  $ABO_3$ . فمثلا عرض العصابة بالنسبة ل  $SrTiO_3$  هو حوالي 3.25eV أما في  $ReO_3$  فيساوي حوالي 1eV وهذا يعني أن  $SrTiO_3$  يملك درجة تأين أكبر من  $ReO_3$ .



الشكل (3-1): يمثل أسطرة الطاقة لأكسيد  $ABO_3$  نموذجي بالاعتماد على التفاعل بين الجوار الأقرب [14]

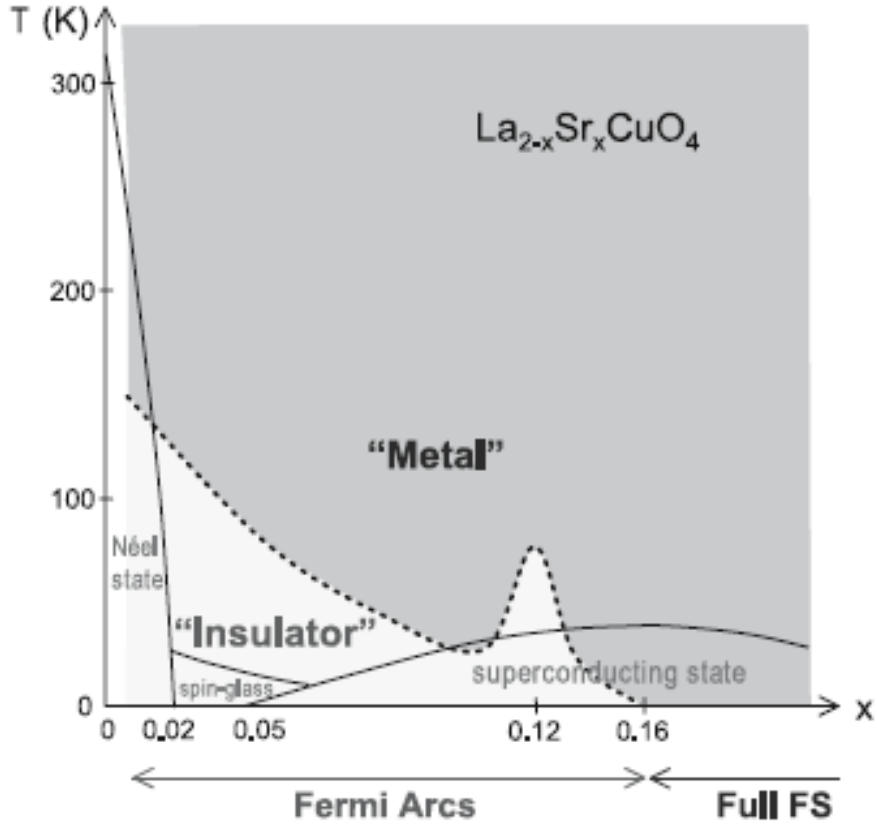
تملك عوازل الأكاسيد  $ABO_3$  عصابات تكافؤ ممتلئة كلياً بالالكترونات وهي العصابات  $(\pi, \pi^0, \sigma, \sigma^0)$ . أما عصابات النقل  $(\pi^*, \sigma^*)$  فهي فارغة. كما تملك معادن الأكاسيد  $ABO_3$  مثل  $NaWO_3$  و  $ReO_3$  إلكترون وحيد لكل وحدة الخلايا في عصابة النقل  $\pi^*$ ، كما أن هناك الكثير من المركبات المعدنية التي تملك الكترونين في العصابة  $\pi^*$  مثل  $BaMoO_3$ ،  $SrMO_3$  و  $CaMO_3$  [44]. عندما يكون تركيز الالكترونات يتراوح بين  $(10^{15} - 10^{20})$  الكترون في كل  $cm^3$  فمن الممكن تكون نصف ناقل من النمط  $n$  وهو مع مستوى فرمي قريب جداً من أسفل العصابة  $\pi^*$  كما يمكن حدوث تحولات أخرى حسب قيمة درجة الحرارة وكمثال على ذلك فالنمط  $n$  من  $SrTiO_3$  يمكن أن يصبح فوق ناقل في درجات حرارة أقل من  $0.3k^0$  [46]. كما أن عوازل الأكاسيد  $ABO_3$  يمكن أن تطعم بحقن أيونات خاصة في المواضع  $A$  أو  $B$ ، فمركبات التنغستين برونز هي حالات خاصة حيث يمكن وضع أيونات مانحة في المكان الفارغ  $A$  للعازل  $WO_3$  فنحصل على المجموعة:  $K_xWO_3$ ،  $Na_xWO_3$ ،  $Li_xWO_3$  و  $H_xWO_3$ . وعندما يصبح تركيز البرونز من رتبة  $10^{22}$  ففي هذه الحالة تصبح العديد من مركبات البرونز مواد فائقة الناقلية [15-38].

### 6-1 تأثير التطعيم على الخواص الفيزيائية للأكاسيد :

تتأثر الخواص الفيزيائية للأكاسيد بشكل جذري، عند القيام بعملية تطعيم doping، حيث يمكنها التحول من عازل شديد المقاومة إلى مادة فوق ناقلة ممتازة. وتعتبر مركبات cuprates نموذج ممتاز عند التكلم عن كيفية تأثر الخواص الفيزيائية للأكاسيد بسبب عملية التطعيم. ويطلق اسم مركبات الكبريتات-

cuprate عادة على أي عدد من عائلة المواد التي تكون فيها المستويات  $\text{CuO}_2$  هي أساس بناء الطبقات المكونة لهذه المواد. ومعظم المواد فائقة الناقلية ذات درجات الحرارة المرتفعة هي عبارة عن كبريات .  
1-6-1 البنية الشبكية :

إن البنية الشبكية للكبريات تتكون من وحدة خلايا هي عبارة عن مستوي  $\text{CuO}_2$  واحد أو عدد قليل من هذه المستويات فوق بعضها متبوعة بطبقة مكونة من ذرات أخرى (Ba, La, O ... ) ، وتكرر هذه البنية على طول المحور z . والاعتقاد الحالي هو أن الناقلية الفائقة تتم فقط في المستويات  $\text{CuO}_2$  بينما يقتصر دور بقية الطبقات المحيطة المكونة من ذرات أخرى على توفير ناقلات الشحنة سواء كانت الكثرونات أو ثقب - holes والتي تنتج ظاهرة فوق الناقلية ولهذا السبب تتم تسمية الطبقات المجاورة للمستويات  $\text{CuO}_2$  بخزانات الشحنة . كما أن اعتبار ظاهرة فوق الناقلية ذات درجات الحرارة المرتفعة ثنائية البعد - 2D يعود إلى كون المسافات التي تفصل المستويات  $\text{CuO}_2$  عن بعضها البعض هي أكبر من المسافة التي تفصل الأكسجين عن النحاس، ولذلك تفضل ناقلات الشحنة التي تشاركها هذه الذرات القفز في نفس المستوي  $\text{CuO}_2$  بدل القفز بين مستويين من هذا النوع أي أنها تفضل عدم الخروج من هذا المستوي . إن الآلية أو الميكانيزم الذي يتم من خلالها نقل الشحنة من خزانات الشحنة إلى المستويات  $\text{CuO}_2$  تسمى **التطعيم** . وهي تتوقف على عملية استبدال ذرات من خزان الشحنة بذرات أخرى تكون في حالة تأين مختلفة مما يؤدي إلى إخراج الالكترونات من المستوي  $\text{CuO}_2$  ، أو إدخال الكثرونات إليه. ففي الحالة الأولى يكون تيار النقل عبارة عن ثقب، بينما في الحالة الثانية عبارة عن الكثرونات. ويتم الكشف عن طبيعة تيار النقل، سواء كان ثقب أو الكثرونات بواسطة إشارة معامل مفعول هول -Hall. و يرمز عادة بالرمز x لمقدار التطعيم وهو يمثل نسبة الذرات المستبدلة إلى العدد الأصلي للذرات الموجودة أصلا في خزانات الشحنة. ويؤدي تغيير التركيبة الكيميائية لخزانات الشحنة بواسطة تغيير x إلى تغيير كثافة ناقلات الشحنة الموجودة في المستويات  $\text{CuO}_2$  وهذا في درجات حرارة معينة ، إلى تحديد طبيعة المادة أي إن كانت عازلة أو ناقلة . الخ . ويتغير درجة الحرارة يمكننا الحصول على بيان الطور الممثل في الشكل (1-4). وبيان الطور هذا هو شئ مميّز جدا للناقلية الفائقة ذات درجات الحرارة المرتفعة. و حتى تكون أي نظرية تفسر هذه الظاهرة مقبولة، ينبغي لها أن تكون قادرة على تفسير بيان الطور أولا. حيث يزودنا بيان الطور بمعلومات مهمة حول طبيعة الميكانيزم الذي يتسبب في ظهور فوق الناقلية ذات درجات الحرارة المرتفعة.

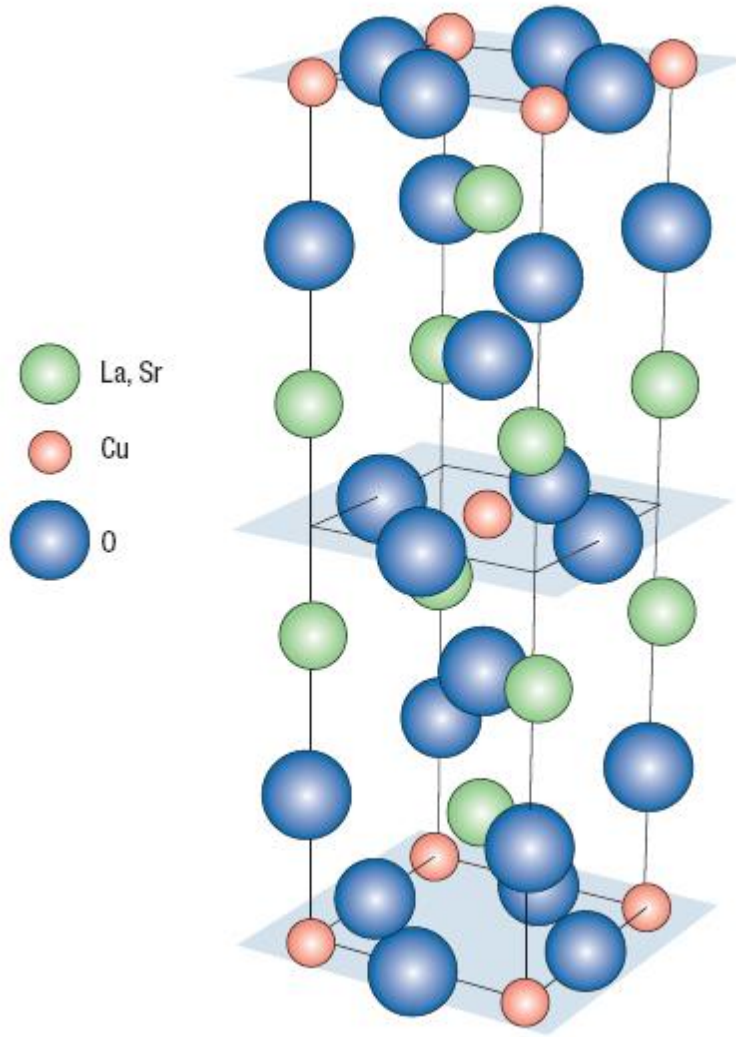


الشكل (4-1): بيان الطور للأكسيد  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  بدلالة درجة الحرارة [39]

#### 2-6-1 المميزات الأساسية لبيان الطور:

عند مستويات التطعيم المنخفضة جدا  $x \sim 0$  تكون المادة عبارة عن مادة ذات مغناطيسية حديدية مضادة (AFM) مع تقلبات كمية صغيرة. وفي هذه الحالة تكون المادة عازلة، وعندما تكون درجة الحرارة مرتفعة بقدر كافي، فالتقلبات الحرارية سوف تدمر الانتظام المغناطيسي وتحول الكبريات إلى ناقل. و عند بلوغ مستوى التطعيم الأمثل  $x \sim 0.16$  تكون الكبريات مادة فوق ناقلة وفي أعلى درجة حرارة حرجة ممكنة، وهي منخفضة عندما ننظر إليها بمقياس درجة حرارة الغرفة ولكنها مرتفعة جدا بالمقارنة مع درجات الحرارة الحرجة الخاصة بالمواد فوق الناقلة الاعتيادية والتي تخضع لنظرية (BCS). وبما أننا نتكلم عن عموميات حول هذا النوع من الأكاسيد، فسوف لن نتعمق كثيرا في الكلام عن النظريات الخاصة ببيان الطور ونترك ذلك إلى الفصل الثالث. وسوف نتكلم فقط على نماذج معروفة لهذا النوع من الأكاسيد.

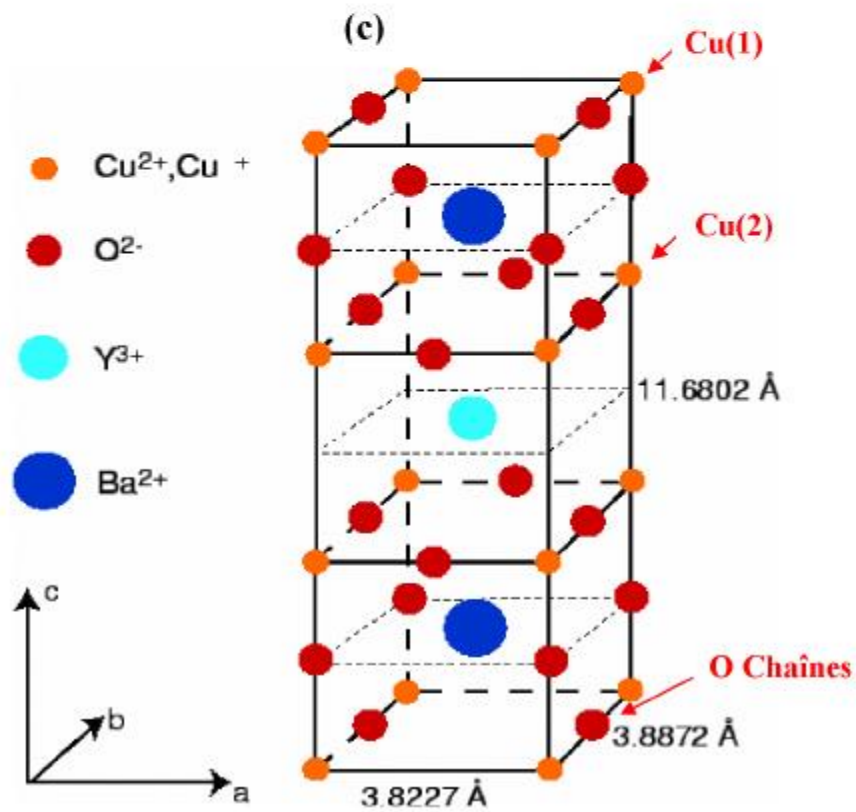
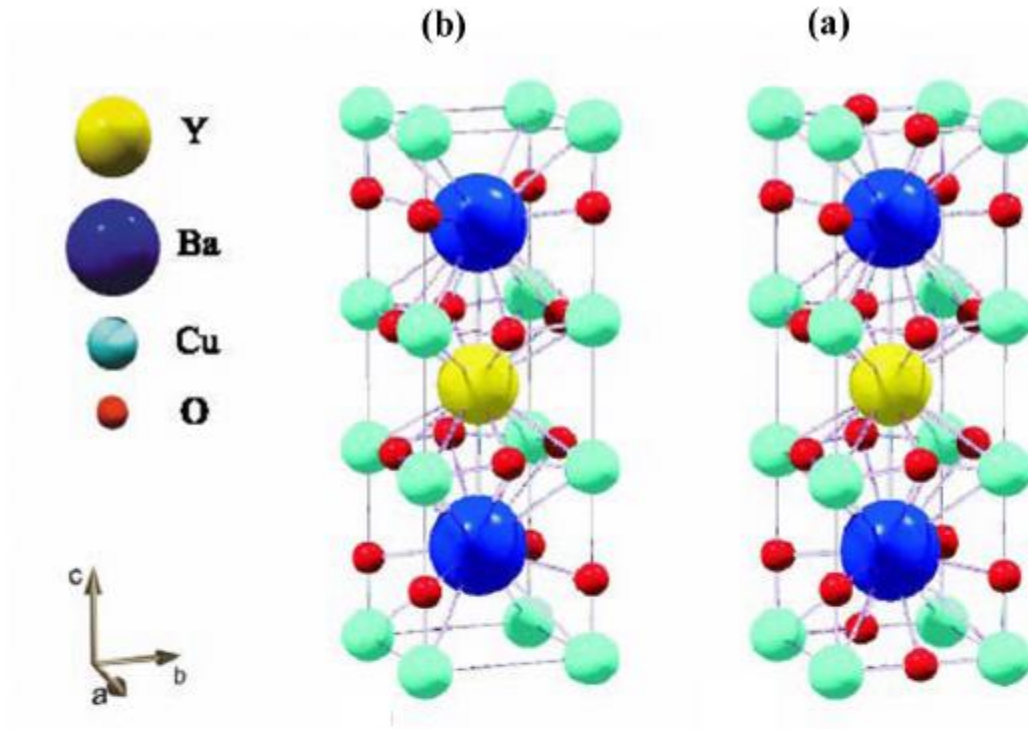




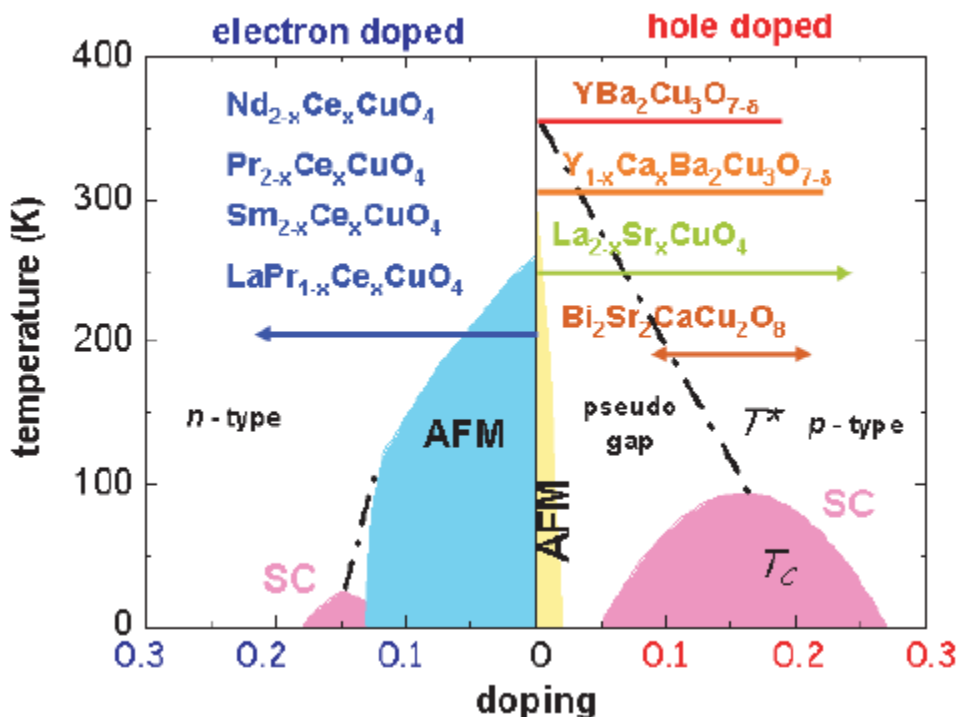
الشكل (5-1): مواقع الذرات في البنية البلورية للأكسيد  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  [40]

### 3-6-1 الأكسيد $La_{2-x}Sr_xCuO_2$ :

تملك هذه المادة بنية نموذجية للكبريت وهي تصبح مادة فائقة الناقلية عند القيام بعملية التطعيم بواسطة الثقوب - holes . وهي أحد أول المركبات التي تم اكتشافها كمادة فائقة الناقلية ذات درجة حرارة مرتفعة . و بنيتها البلورية تحوي مركز عبارة عن رباعي الزوايا كما يظهر في الشكل (5-1) حيث تكون كل ذرة نحاس محاطة بستة ذرات أكسجين. وتتم عملية التطعيم عن طريق استبدال ذرات La بواسطة Sr . حيث يكون عند  $x \sim 0$  عبارة عن عازل بينما عند  $x \sim 0.15$  يصبح مادة فائقة الناقلية ذات درجة حرارة حرجة  $T_c \sim 39k$ . عند  $x \sim 0$  في البلورة  $La_2CuO_2$  تكون ذرات الأكسجين في الحالة الأيونية  $O^{2-}$  وبالتالي سوف تملك طبقة p ممتلئة ، وبنفس المعنى سوف تفقد ذرة La ثلاثة إلكترونات وتصبح  $La^{+3}$  وهي في هذه الحالة أكثر استقراراً، وهذا مفضل من أجل التكلفة المنخفضة للطاقة، كما أن النحاس يصبح  $Cu^{+2}$  .



الشكل (6-1): مواقع الذرات في البنية البلورية للأكسيد  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  حيث نلاحظ الحالة  $\delta = 0$  والحالة  $\delta = 1$  الشكلين (b-a) على الترتيب بينما نلاحظ مواقع ذرات النحاس في الحالة (c) [41]

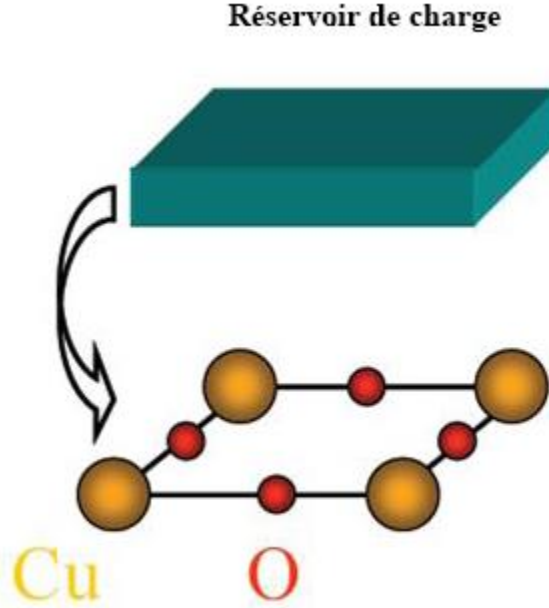


الشكل (7-1): مقارنة بين بياني الطور الناتجين عن التطعيم الالكتروني والتطعيم بواسطة الثقوب [42]

فعندما يفقد النحاس إلكترون واحد يجعله يمتلك طبقات ممتلئة بينما عندما يفقد إلكترون آخر يتكون ثقب في الطبقة-d ولهذا السبب نجد أن  $\text{Cu}^{2+}$  تمتلك سبين يساوي النصف  $1/2$  في البلورة. بينما نجد من أجل  $x \neq 0$  يصبح المركب السابق بالشكل  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_2$  ، ويتوقف التطعيم على عملية الاستبدال العشوائي للأيونات  $\text{La}^{3+}$  بواسطة الأيونات  $\text{Sr}^{2+}$  في خزانات الشحنة. و النتيجة سوف يكون هنالك عدد أقل من الالكترونات المتاحة في المستويات الناقلة  $\text{CuO}_2$  وهكذا نكون قد قمنا بعملية تطعيم بواسطة الثقوب. يوجد هنالك فقط عمليتين ممكنتين من حيث المبدأ، و لكن واحدة منهما مفضلة من ناحية الطاقة الأولى هي  $(\text{Cu}^{2+} \rightarrow \text{Cu}^{3+})$  وهذا يؤدي إلى تكون الطبقة  $3d^8$  ، وهي تعني وجود ثقبين في نفس الطبقة d وهذا يؤدي إلى قوة تنافر كهربائية كبيرة أي يؤدي إلى ارتفاع الطاقة مما يجعل هذه العملية غير مفضلة. أما العملية الممكنة الثانية  $(\text{O}^{-2} \rightarrow \text{O}^{-1})$  وهذا يعطي التشكيلة  $2p^5$  وهي تعني تكون ثقب وحيد في الطبقة-p ، والنتيجة تكون ثقبين في طبقتين منفصلتين وهي حالة أفضل من الحالة السابقة من ناحية انخفاض الطاقة .

#### 4-6-1 الأكسيد $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ :

وهو مركب نموذجي للكبريتات ، تكون فيه ناقلات الشحنة في طور فوق الناقلية عبارة عن الكترونات وليست ثقوب كما هو الحال في المركب السابق  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_2$  ، وتكون بنيته البلورية ممركرة بواسطة رباعي الزوايا. وتحدث عملية التطعيم عن طريق استبدال الذرات Nd بذرات السيزيوم Ce .

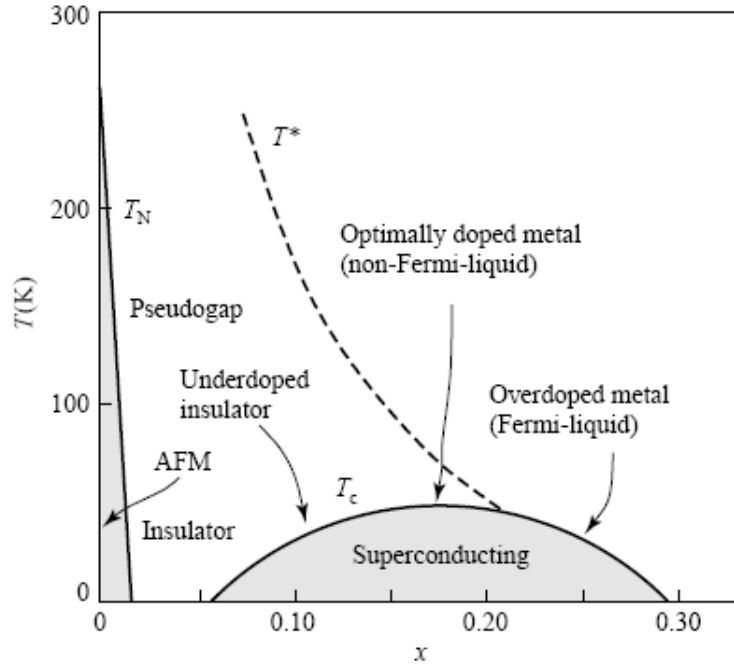


الشكل (8-1) : مخطط يظهر البنية الطبقيّة في الأكاسيد فائقة الناقلية من النوع YBCO [43]

فعند  $x \sim 0$  في البلورة  $Nd_2CuO_4$  نجد أن ذرات الأكسجين تكون في الحالة  $O^{-2}$  وبالتالي فهي تحقق طبقة  $p$  - ممتلئة ، وبنفس الشكل تفقد ذرة  $Nd$  ثلاثة إلكترونات وتصبح  $Nd^{+3}$  والتي تكون تشكيلة مستقرة ، وهي تكلف طاقة أقل. ومبدأ انحفاظ الشحنة يفرض على النحاس بأن يكون في التشكيلة  $Cu^{+2}$  ، عندما يفقد النحاس إلكترون واحد يحقق طبقة مغلقة، ولكنه عندما يفقد إلكترون ثاني يتكون ثقب في الطبقة  $d$  . بينما نجد أنه من أجل  $x \neq 0$  ينتج المركب  $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$  من خلال عملية التبديل العشوائي للأيونات  $Nd^{+3}$  بواسطة  $Ce^{+4}$  في خزانات الشحنة ، وبالتالي سوف يكون هنالك وفرة في الإلكترونات المتاحة في المستويات  $CuO_2$  وهذا ما يسمى التطعيم بواسطة الإلكترونات . و الشكل (7-1) يعطي مقارنة بين التطعيم بواسطة الإلكترونات والتطعيم بواسطة الثقوب، ويظهر كأن هنالك تناظر مرآتي في بيان الطور لكلا النمطين، ولكن مع اختلاف وهو وجود منطقة  $spin - glass$  في بيان الطور الخاص بالتطعيم بواسطة الثقوب. كما نجد أن القيمة العظمى لدرجة الحرارة الحرجة في عملية التطعيم بواسطة الإلكترونات أصغر من تلك المطعمة بواسطة الثقوب.

#### 5-6-1 الأكسيد $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ :

يرمز لهذا المركب عادة بالرمز YBCO والبنية البلورية لهذا المركب هي أكثر تعقيدا من المركبات السابقة كما يظهر في الشكل (6-1)، حيث نجد اثنين من المستويات  $CuO_2$  لكل وحدة خلايا بدلا من مستوي واحد. وهي مفصولة بمستوى إضافي من الذرات  $Y$  من خزانات الشحنة. حيث يتكون خزان الشحنة من ذرات الباريوم  $Ba$  ومن سلاسل أكسجين- نحاس  $CuO_x$  في الاتجاه-  $y$  . ان وجود أكثر من مستوى  $CuO_2$  أدى إلى درجات حرارة مرتفعة تساوي تقريبا  $T_c \sim 92k$ .

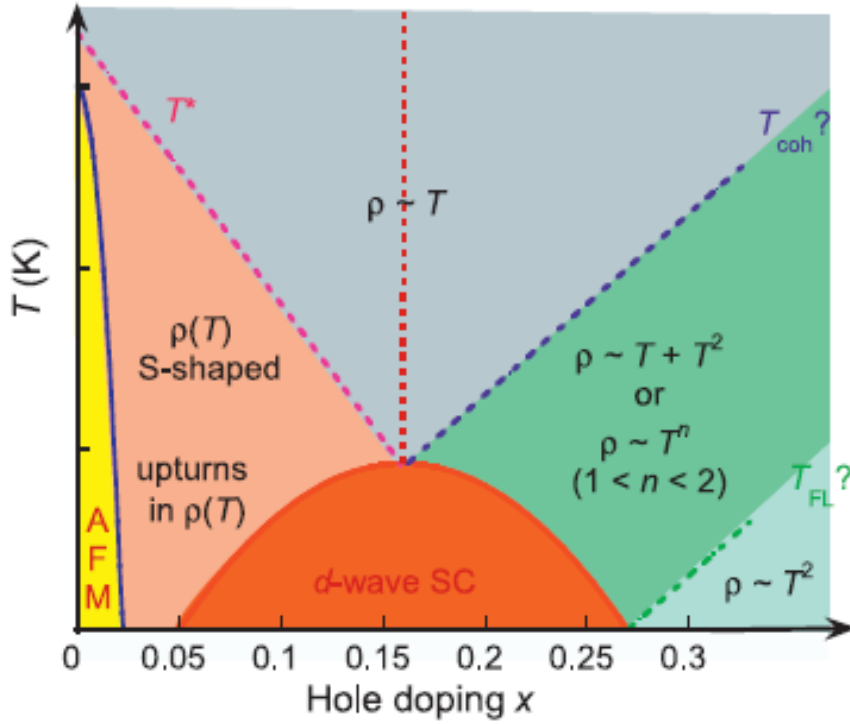


الشكل (9-1) : بيان الطور للأكاسيد YBCO في حالة التطعيم بواسطة الثقوب [44]

عند مستوى التطعيم  $x \sim 0$  في البلورة  $YBa_2Cu_3O_6$  تكون ذرات الأكسجين في الحالة  $O^{-2}$  وبالتالي فهي تحقق طبقة  $p$  - ممتلئة . وبنفس الطريقة تفقد ذرة  $Y$  ثلاثة إلكترونات لتصبح  $Y^{+3}$  والتي هي تشكيلة مستقرة ، ولنفس السبب تصبح ذرة الباريوم بالشكل  $Ba^{+2}$  ، وبسبب التعادل الكهربائي وتفضيل الطاقة المنخفضة تتحول ذرة النحاس إلى التشكيلة  $Cu^{+2}$  في المستوي ، وإلى  $Cu^{+1}$  في السلسلة . أما عند مستويات التطعيم  $x \neq 0$  ، فيتحقق التطعيم في المركب  $YBa_2Cu_3O_{6+x}$  عن طريق تغيير محتويات الأكسجين في خزان الشحنة، وهذا ما يؤدي إلى تكون ثقوب في المستويات  $CuO_2$  ، لأن الأكسجين الجديد المضاف  $O^{-2}$  يؤدي إلى امتصاص الإلكترونات من المستوي  $CuO_2$  .

### 7-1 خواص الحالة الطبيعية للأكاسيد فائقة الناقلية:

تتميز الأكاسيد فوق الناقلية بخواص تختلف عن تلك الخواص الاعتيادية المعروفة للمواد فائقة الناقلية ، حيث نجد مثلا أن الحساسية المغناطيسية و معامل هول تتعلق بدرجة الحرارة، بشكل مختلف عن ذلك المتوقع من سوائل لاندو-فرمي القانونية . كما أن استرخاء التجاوب النووي لمغناطيسي (RMN) يتناسب مع درجة الحرارة  $1/T_1 \sim T$  وهذا يناقض الحالة الاعتيادية لسائل فرمي . بالإضافة إلى عدم التجانس الملاحظ في المقاومة الكهربائية حيث تكون في الاتجاه العمودي على المستوي  $CuO_2$  أكبر بكثير من تلك الموجودة في نفس المستوي . وهذا يشير إلى الطبيعة ثنائية البعد التي تحدث فيها ظاهرة فوق الناقلية. فالمقاومة تتعلق بشكل خطي بدرجة الحرارة  $\rho_{xy} \sim aT + b$  في المستوي وهذا يختلف عن الشكل القانوني لسائل فرمي حيث  $\rho_{xy} \sim aT^5 + b$  . حيث نتج الأس 5 من عملية التشتت للإلكترونات مع الفونونات. والشكل يبين التصرف الخطي لبعض المواد في مجال محدد من درجة الحرارة. وبالنظر للخواص الغير اعتيادية للمقاومية في الحالة الطبيعية ، هنالك ملاحظتين ينبغي ذكرهما - الأولى هو أن



الشكل (10-1) : مخطط بيان الطور لدرجة الحرارة بدلالة مستوى التطعيم للأكسيد  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  ، ويحتوي على الدالة التي تتغير بها المقاومة بدلالة الحرارة من أجل مستويات تطعيم مختلفة [45]

التصرف الخطي أي  $\rho_{xy} \sim T$  موجود فقط عند نقطة التطعيم المثالي، وعند الابتعاد عن هذه النقطة يتحول البيان عن الشكل الخطي إلى شكل مختلف. أما الملاحظة الثانية فهي عدم وجود تناظر بين التطعيم الإلكتروني والتطعيم بواسطة الثقوب، ففي حين يعطي الأخير التعلق الخطي للمقاومة بدرجة الحرارة ، نجد أن التطعيم بواسطة الإلكترونات يعطي  $\rho_{xy} \sim T^2$ . والشكل (10-1) يبين بشكل واضح الكيفية التي تتغير بها المقاومة في المستوي  $\rho_{xy}$  بدلالة درجة الحرارة في مناطق مختلفة من بيان الطور، حيث يمثل الخط المستمر الحدود بين الحالة الطبيعية وحالة فوق الناقلية ، أما الخطوط المتقطعة فتمثل الحدود بين التصرفات الغير اعتيادية للمقاومة بدلالة درجة الحرارة في مستوى التطعيم xy. هذه الخواص الشاذة للحالة الطبيعية للمواد فائقة الناقلية دفعت Anderson إلى القول بأن كل عمل يريد تفسير هذه الظاهرة في إطار نظرية سوانل لاندو سوف يصل إلى نتائج خاطئة. كما نبه إلى أن هذه عبارة عن حالة كوانتية جديدة. إلا أن صلاحية هذا النموذج لازالت محل جدل كبير بين الباحثين في هذا الميدان .

## مراجع الفصل الأول

- [1] L. F. Mattheiss, Phys. Rev **6**, 4718 (1972).
- [2] E. O. Wollan and W. C. Koehler, Phys. Rev. **100**, 545 (1955).
- [3] F. L. Battye, H. HÄochst, and A. Goldman, Solid State Commun. **19**, 269 (1976).
- [4] M. Cardona, Phys. Rev. **140**, A651 (1965).
- [5] P. A. Lightsey, Phys. Rev. B **8**, 3586 (1973).
- [6] V. E. Henrich, G. Dresselhaus, and H. J. Zeiger, Bull. Am. Phys. Soc. **22**, 364 (1977).
- [7] R. D. Shannon, Acta Cryst. A **32**, 751 (1976).
- [8] E. A. Kraut, T. Wolfram, and W. E. Hall, Phys. Rev. B **6**, 1499 (1972).
- [9] T. Wolfram, R. A. Hurst, and F. J. Morin, Phys. Rev. B **15**, 1151, (1977).
- [10] T. Wolfram, E. A. Kraut, and F. J. Morin, Phys. Rev. B **7**, 1677 (1973).
- [11] W. Zhang, High Photoemission Spectroscopy on High Temperature Superconductor  
,(Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2013). Page05
- [12] J. B. Goodenough and P. M. Roccah, J. Appl. Phys. **36**, 1031 (1965).
- [13] J.R. Schrieffer, Handbook of High -Temperature Superconductivity (Theory and  
Experiment) - (Springer, 2007) page96
- [14] T. Wolfram, S. Ellialtioglu, electronic and optical properties of d-band perovskites, (  
Cambridge University Press , New York,2006) page14
- [15] J. F. Schooley, W. R. Hosler, E. Ambler, J. H. Becker, M. L. Cohen, and O. S. Koonce,  
Phys. Rev. Lett. **14**, 305 (1965).
- [16] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. (London) A **276**, 238 (1963).
- [17] A. D. Wadsley, Non-stoichiometric compounds, ed. L. Mandalcorn (New York,  
Academic Press, 1964).
- [18] Ch. J. Raub, A. R. Sweedler, M. A. Jensen, S. Broadston, and B. T. Matthias,  
Phys. Rev. Lett. **13**, 746 (1964).
- [19] A. R. Sweedler, Ch. J. Raub, and B. T. Matthias, Phys. Lett. **15**, 108 (1965).
- [20] J.P. Remeika, T. H. Geballe, B. T. Matthias, A. B. Copper, G. W. Hull, and E. M. Kelley,  
Phys. Lett. **24A**, 565 (1967).
- [21] H. R. Shanks, Solid State Commun. **15**, 753 (1974).
- [22] J. G. Bednorz and K. A. MÄuller, Z. Phys. B **64**, 189 (1986).
- [23] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [24] P. W. Anderson, The theory of superconductivity in the high-Tc cuprates (Princeton, NJ,  
Princeton University Press, 1997).
- [25] A collection of papers on the applications may be found in the IEEE Trans.



- Sonics Ultrason. **19** (2) (1972).
- [26] L. A. Pedersen and W. E. Libby, *Science* **176**, 1355 (1972).
- [27] D. B. Meadowcraft, *Nature* **226**, 847 (1970).
- [28] T. C. Lim, E. A. Kraut, and R. B. Thompson, *Appl. Phys. Lett.* **20**, 127 (1972).
- [29] Z. J. Kiss, *Photochromics. Phys. Today* **23**, 42 (1970).
- [30] R. J. H. Voorhoeve, D. W. Johnson, Jr., J.P. Remeika, and P. K. Gallagher, *Science* **195**, 827 (1977).
- [31] R. B. Woodward and R. Holman, *The conservation of orbital symmetry* (Weinheim/Bergstrasse, Verlag-Chemic, 1970).
- [32] T. Wolfram and F. J. Morin, *Appl. Phys.* **8**, 125 (1970).
- [33] D. A. Shirley, *J. Vac. Sci. Technol.* **12**, 280 (1975).
- [34] A. C. C. Tseung and H. L. Beven, *J. Electroanal. Chem. Interfacial Electrochem.* **45**, 429 (1973).
- [35] J. G. Mavrodies, D. I. Tchernev, J. A. Kafalas, and D. F. Kolesar, *Mater. Res. Bull.* **10**, 1023 (1975).
- [36] M. S. Wrighton, A. B. Ellis, P. T. Wolczanski, D. L. Morse, H. B. Abrahamson, and D. S. Ginley, *J. Amer. Chem. Soc.* **98**, 2774 (1976).
- [37] R. D. Nasby and R. K. Quinn, *Mater. Res. Bull.* **11**, 985 (1976).
- [38] A. Fujishima and K. Honda, *Nature* **238**, 37 (1972)
- [39] A. Bussmann, H.H Keller, *High Tc Superconductors and Related Transition Metal Oxides*, (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2007). page27.
- [40] Ch. J. Raub, A. R. Sweedler, M. A. Jensen, S. Broadston, and B. T. Matthias, *Phys. Rev. Lett.* **13**, 746 (1964).
- [41] A. Sonia, These présentée pour obtenir le diplome de doctorat en sciences en physique, (universite mentouri-constantine, 2012) page 27
- [42] M. Mouliner, These, présentée pour obtenir le grade de doctorat en sciences, (universite de Strasbourg, 2009) page 24
- [43] N Boussouf, These, présentée pour obtenir le diplome de doctorat en sciences en physique, (universite mentouri-constantine, 2011) page 34
- [44] K. Fossheim and A. Sudbø, *Superconductivity Physics and Applications*, (John Wiley, England, 2004) page44

[45] N. E Hussey, *J. Phys: Condens. Matter* **20**, 123201 (2008) (pp17)

## الفصل الثاني

خواص مميزة في الأكاسيد فوق الناقلة  
YBCO

## 1- التطعيم وتوزع الشحنة:

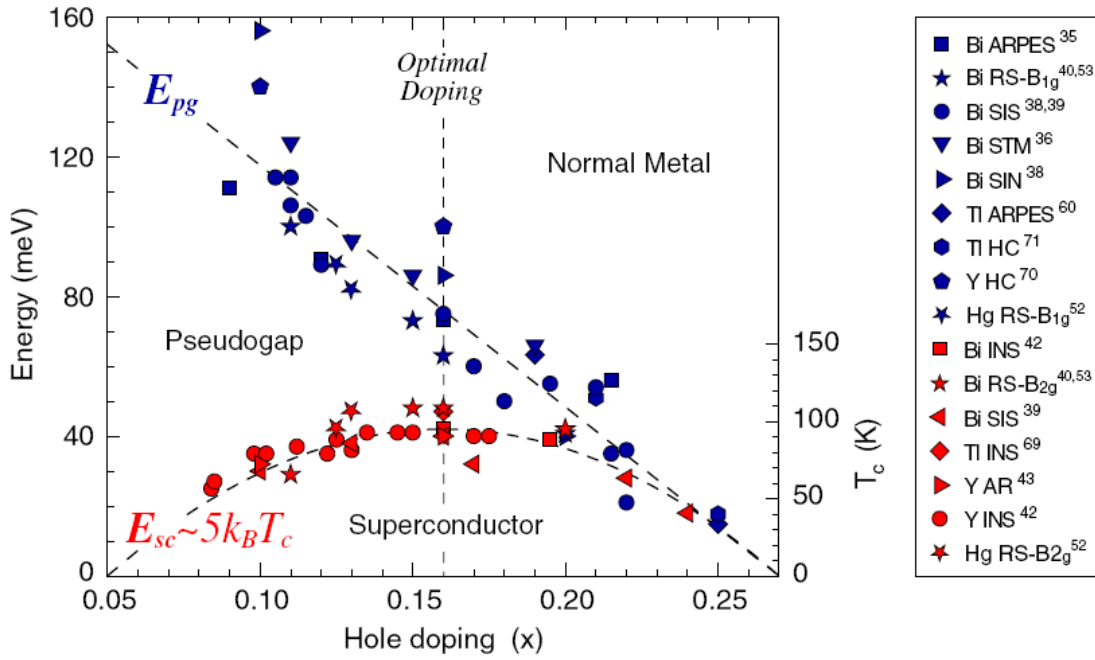
إن أبسط مركبات النحاس التي تملك بنية بيروفسكيت هي عبارة عن عوازل ، ولكي تكون فوق ناقلية ينبغي أن يتم تطعيمها بواسطة ناقلات الشحنة الكهربائية والتي يمكن أن تكون الكترولونات أو ثقوب- holes . ومن المتفق عليه بشكل عام، أن عملية التطعيم تملك التأثير الأكبر على الخواص فوق الناقلية في مركبات الكبريتات. من الناحية المبدئية ، هناك طريقتين من أجل زيادة عدد ناقلات الشحنة بطريقة كيميائية في الكبريتات (i) عن طريق استبدال الذرات المعدنية الموجودة في خزانات الشحنة بواسطة ذرات تمتلك تكافؤ الكترولوني أكبر ، أو/و (ii) تغيير عدد ذرات الأكسجين . والتطعيم سوف يزيد عدد الالكترولونات أو الثقوب الموجودة عند مستوى فرمي ، حيث أن تركيز ناقلات الشحنة في الكبريتات هو مقدار صغير  $5 \times 10^{21}$  ~ بالمقارنة مع تلك الموجودة في المواد فائقة الناقلية الاعتيادية ، والتي تقدر بين  $10^{23} - 5 \times 10^{22}$  . وهذا يعود إلى كبر مسافة الترابط في المواد فائقة الناقلية الاعتيادية ، حيث أن نسبة  $10^{-4}$  أي  $(\Delta_0/E_F)$  من الالكترولونات الموجودة بجوار سطح فرمي هي التي تساهم في تكوين الثنائيات الالكترونية . أما في الكبريتات ، فنسبة 10% من كل الالكترولونات أو الثقوب هي التي تساهم في تكون ثنائيات كوبر-Cooper.

### 1-1-2- العلاقة بين عملية التطعيم ودرجة الحرارة - $T_c$ :

في المواد فائقة الناقلية الاعتيادية، تتزايد درجة الحرارة الحرجة  $T_c$  مع تزايد تركيز ناقلات الشحنة الكهربائية أي  $T_c \propto p$  ، بينما في الكبريتات لا تتغير  $T_c(p)$  كما في الحالة الاعتيادية ، وهذا ما يظهر في الأشكال رقم (1-2) و (2-2)، حيث تكون في معظم الكبريتات المطعمة بواسطة الثقوب عبارة عن شكل يشبه شكل الناقوس، ويمكن تقريبه [1] بواسطة العلاقة التالية:

$$T_c(p) \approx T_{c,max}[1 - 82.6(p - 0.16)^2] \quad (1.2)$$

حيث ترمز  $T_{c,max}$  إلى درجة الحرارة الحرجة العظمى لمركب معين ، مع العلم أن الناقلية الفائقة تظهر في مجال تطعيم محدد بدقة  $0.05 \leq p \leq 0.27$  والتي تختلف بشكل صغير جدا بين مركبات الكبريتات المختلفة، ويتم تقسيم مجال التطعيم إلى ثلاثة مناطق رئيسية هي منطقة تحت التطعيم، منطقة التطعيم الأمثل، منطقة ما بعد التطعيم. ويطلق على طور العازل الموجود في المنطقة  $p < 0.05$  بالمنطقة غير المطعمة ، كما تسمى أيضا بمنطقة السبين المجمدة spin - glass . أما في المنطقة  $p > 0.27$  فتصبح الكبريتات معدنية. من الناحية النظرية تقوم ذرة الأكسجين باكتساب اثنين من الالكترولونات من ذرات أخرى، إلا أنه من الناحية التطبيقية، فالعملية أكثر تعقيدا من هذا. فإذا تم تحقيق تغيير تركيز الثقوب عن طريق تغيير محتوى الأكسجين، فعدد الثقوب المطعمة عن طريق إضافة ذرة أكسجين في مناطق التطعيم المختلفة لن يساوي بالضبط اثنين [2] في منطقة تحت التطعيم ، تساهم كل ذرة أكسجين بشكل جزئي بأكثر من تقبين في الكثافة الكلية لناقلات الشحنة ، أما في منطقة التطعيم المثالي ، فعدد الثقوب الناتجة عن إضافة ذرة الأكسجين تساوي بالضبط اثنين. بينما ينتج عن كل ذرة أكسجين مضافة في منطقة ما بعد التطعيم مساهمة بثقب واحد في الكثافة الكلية لناقلات الشحنة الكهربائية.



الشكل (1-2) : مخطط يظهر كيفية توزع النتائج التجريبية لقياسات شبه المنطقة الممنوعة  $E_{pg}$  وكذلك  $E_{sc}$  مأخوذة بطرق مختلفة ، على عدد كبير من الأكاسيد فوق الناقلة التي تملك  $T_c^{max} \sim 95K$  [3].

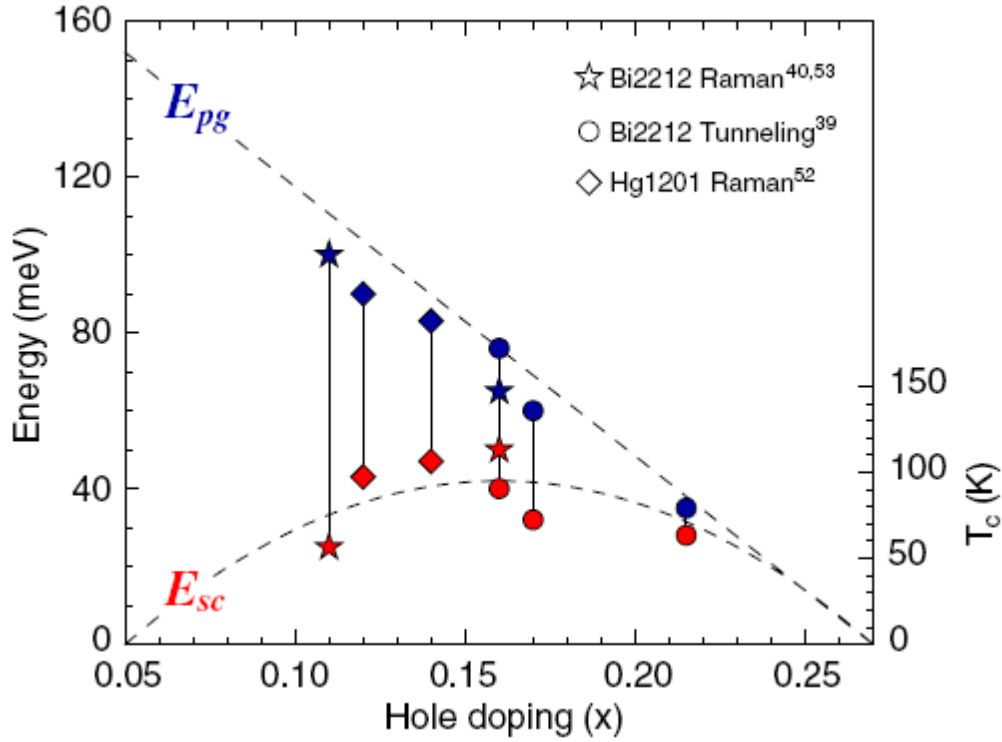
والشكل (1-2) يبين بدقة الكيفية التي تتوزع بها النتائج التجريبية للقياسات التي تمت بتقنيات مختلفة ، مثل تقنية الزاوية (ARPES) ، أو مفعول النفق (STM, SIN, SIS) ، انعكاس أندريف (AR) ، تشتت رامون (RS) ، الناقلية الحرارية (HC) بالإضافة الى تقنية التشتت غير المرن للنيوترونات (INS) . هذه القياسات تمت على عدد كبير من الأكاسيد فوق الناقلة مثل (Bi2212, Y123, Ti2201, Hg1201) وكذلك (Hg1201) والتي تمتلك  $T_c^{max} \sim 95K$  من أجل الحصول على الكيفية التي تتغير بها منطقة الطاقة شبه الممنوعة ( $E_{pg} = 2\Delta_{pg}$ ) وكذلك منطقة الطاقة الممنوعة الخاصة بفوق الناقلة ( $E_{sc} \sim 5k_B T_c$ ) بدلالة التطعيم بواسطة الثقوب  $x$  ، حيث من السهل أن نلاحظ بأن المعلومات التجريبية قد توزعت على بيانين ، أحدهما على شكل قطع مكافئ ، ويمكن تقريبه إلى الصيغة التالية:

$$E_{sc} = E_{sc}^{max} [1 - 82.6(x - 0.16)^2] \quad (2.2)$$

أما البيان الثاني فهو عبارة عن تقريب خطي لمنطقة الطاقة شبه الممنوعة، ويكتب بالشكل :

$$E_{pg} = E_{pg}^{max} (0.27 - x)/0.22 \quad (3.2)$$

حيث  $E_{pg}^{max} = E_{pg}(x = 0.05) = 152 \pm 8meV$  وكذلك نجد أكبر قيمة تجريبية لمنطقة الطاقة الممنوعة لهذه الأكاسيد تساوي:  $E_{sc}^{max} = 42 \pm 2meV$  .



الشكل (2-2) : مخطط يظهر تغير شبه المنطقة الممنوعة  $E_{pg}$  وكذلك  $E_{sc}$  لعدد من الأكاسيد مأخوذة بنفس التجربة ، باستخدام نماذج متشابهة . وهي تظهر بشكل واضح وجود نمطين مختلفين للمناطق الممنوعة.[3]

في الكبريات ذات ثلاثة و أربعة طبقات ، نجد أن هنالك نوعين من المستويات  $\text{CuO}_2$  ، داخلية وخارجية. حيث في كل مجموعة ثلاثية أو رباعية الطبقات، نجد أن مستويات  $\text{CuO}_2$  الخارجية متصلة مباشرة بخزانات الشحنة. وفي نفس الوقت نجد أن المستويات  $\text{CuO}_2$  الداخلية في التجمعات الثلاثية والرباعية الطبقات معزولة عن خزانات الشحنة، ونتيجة لذلك نجد أن المستويات  $\text{CuO}_2$  الداخلية والخارجية لا تمتلك تطعيم متكافئ [4]. في منطقة ما بعد التطعيم، تكون مواقع تطعيم ناقلات الشحنة موجودة في المستويات الخارجية في الغالب بينما تحافظ المستويات الداخلية على الوضعية التي وصلتها عند نقطة التطعيم المثالي. ويحتمل أن يكون هذا هو السبب الذي يجعل درجة الحرارة الحرجة في المركبات رباعية الطبقات أقل من درجة الحرارة الحرجة في المركبات ثلاثية الطبقات وهذا في نفس العائلة، ففي المركبات رباعية الطبقات، من المستحيل أن يتحقق التطعيم المثالي في كل الطبقات الأربعة في نفس الوقت. أغلب مركبات الكبريات فوق الناقله هي مطعمة بواسطة الثقوب، بينما توجد القليل من المركبات المطعمة بالالكترونات والتي تظهر فوق الناقلية. مع العلم أن النسبة بين درجة الحرارة الحرجة العظمى في الكبريات المطعمة بالثقوب وتلك المطعمة بالالكترونات تساوي بالتقريب 5.6 . كما أن نسبة مقارنة وجدت في المركب  $\text{C}_{60}$  [5] بالإضافة إلى أن  $T_c(p)$  على شكل شبه ناقوسي كما في الكبريات. ويبدو أن عملية التطعيم بواسطة الثقوب غير متناظرة مع عملية التطعيم بواسطة الالكترونات، لأننا نجد دائما بأن هنالك فرق كبير في درجة الحرارة العظمى، كما أن مجال التطعيم الالكتروني أضيق بالنسبة لمجال التطعيم بواسطة الثقوب.

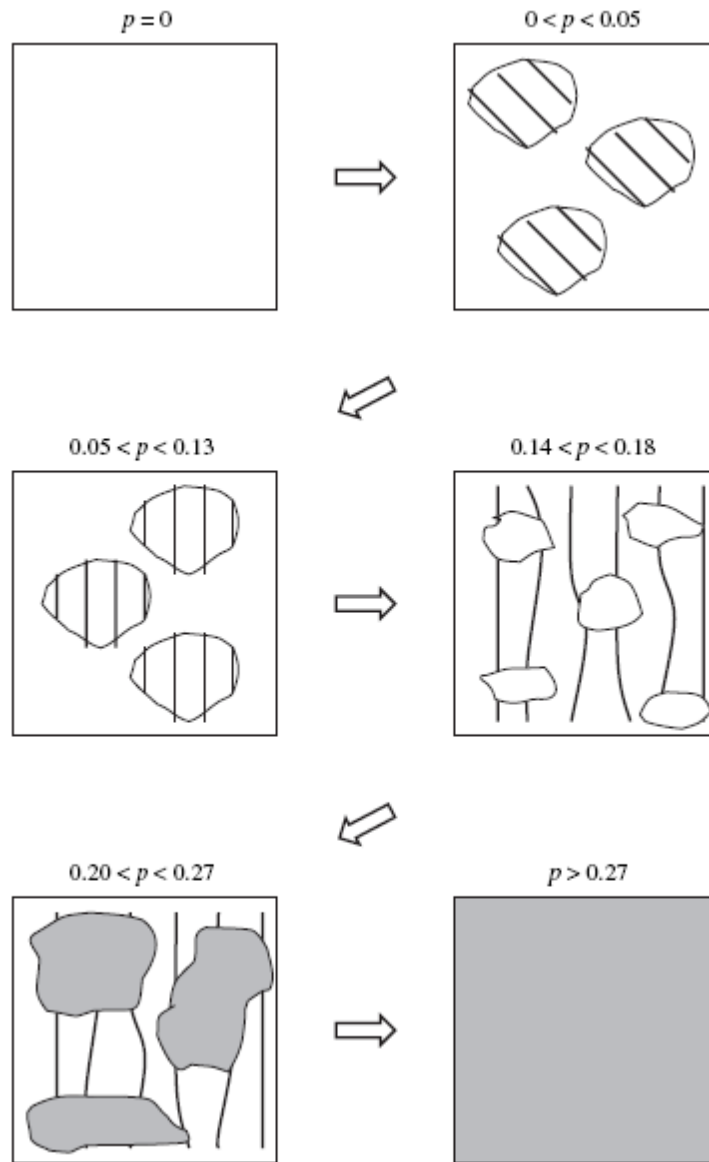
### 2-1-2 ظاهرة عدم تجانس توزيع الشحنة الكهربائية :

في النموذج البسيط للمعدن، تشكل الالكترونات "بحر" من الجسيمات سالبة الشحنة ضعيفة التفاعل فيما بينها، والتي تكون موزعة بشكل متجانس داخل المعدن، ولذلك فسوف تكون الالكترونات حرة التنقل في الأبعاد الثلاثة. بينما نجد في مركبات الكبريات أن الناقلية الفائقة

تحدث في بعدين أي داخل المستويات  $\text{CuO}_2$ ، فتعميم نموذج المعدن البسيط في هذه الحالة يبدو ممكن إذا كان توزيع الشحن الكهربائية متجانس داخل هذه المستويات، والحالة ليست كذلك هنا. ففي الكبريت والعديد من المركبات الأخرى نجد أن توزيع الشحنة غير متجانس، بل أكثر من هذا حيث نجد في الكبريت أن توزيع الشحنة غير متجانس سواء في المقياس الميكروسكوبي أو الماكروسكوبي، وهذا ما يظهره الشكل رقم (2-3).

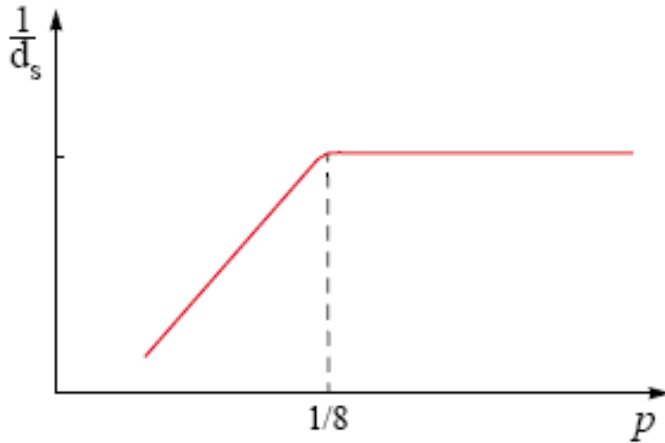
عند درجات التطعيم  $p < 0.05$  في الكبريت، تفضل الثقوب عدم التوزيع بشكل منتظم أو متجانس في المستوى  $\text{CuO}_2$ ، ولكن تفضل تكوين شكل ديناميكي أحادي البعد تسمى خطوط الشحنة - charge stripes. حيث تكون خطوط الشحنة قطرية في المنطقة غير المطعمة، وبالتالي فهي لا تنتقل عبر الروابط  $\text{Cu} - \text{O} - \text{Cu} - \text{O}$  كما في الشكل (2-3) ولكن على الاتجاه القطري  $\text{Cu} - \text{Cu} - \text{Cu}$ . وبما أنه في منطقة الكبريت غير المطعمة يكون تركيز الثقوب صغير، فسوف نجد المناطق ضد فيرومغناطيسية التي تفصل الخطوط المشحونة بعضها عن بعض تمثل مسافات كبيرة. كما أن طور الخط المشحون غير موزع بشكل متجانس، حيث نجد أن هنالك نوعين من الجزر الصغيرة إما تحتوي على طور ضد المغناطيسية الحديدية الأصلي أو السليم، أو تحتوي على طور خطوط الشحن القطرية. بينما نجد أنه في منطقة تحت التطعيم ( $0.05 \leq p \leq 0.13$ ) تصبح خطوط الشحن عمودية أو أفقية وتتنظم بشكل متقارب كما يظهر في الشكل (2-3)، وفي هذه المنطقة من التطعيم يكون البعد المتوسط بين خطوط الشحن متناسب تقريبا مع  $1/p$ ، وتحدث له ظاهرة التشعب بجوار  $p = 1/8$  كما في الشكل (2-4). ويبقى متوسط البعد بين خطوط الشحنة ثابت عمليا بعد درجة التطعيم  $p = 1/8$ .

كما نجد أن الخطوط المشحونة الديناميكية تصبح مفصولة فيما بينها بخطوط مغناطيسية ثنائية البعد، والتي يمكن اعتبارها كتأثير للذاكرة المحلية الخاصة بطور عازل المغناطيسية الحديدية المضادة. فعندما تتزايد  $p$  تتناقص نسبة مناطق المغناطيسية الحديدية المضادة السليمة، كما يظهر في الشكل (2-5)، ولكن يبقى كلا النوعين من الجزر السليمة والجزر التي تحوي خطوط شحن عمودية متواجدين في نفس الوقت. إن طول الخطوط المشحونة المنفصلة عن بعضها هو حوالي  $100\text{\AA}$  وهي ديناميكية بمعنى أنها تستطيع التخرج كما تستطيع الحركة بشكل مستعرض، ونتيجة لذلك فهي ليست وحيدة البعد بالضبط ولكنها شبه أحادية البعد. تكون خطوط الشحن نصف ممثلة بمعنى وجود شحنة كهربائية موجبة وحيدة لكل اثنين من مواقع النحاس على طول الخط المشحون. كما أنه بجوار منقطة التطعيم المثالي أي  $p \sim 0.16$  وفي منطقة ما بعد التطعيم ( $0.2 \leq p \leq 0.27$ )، يبقى متوسط البعد بين الخطوط المشحونة ثابت تقريبا



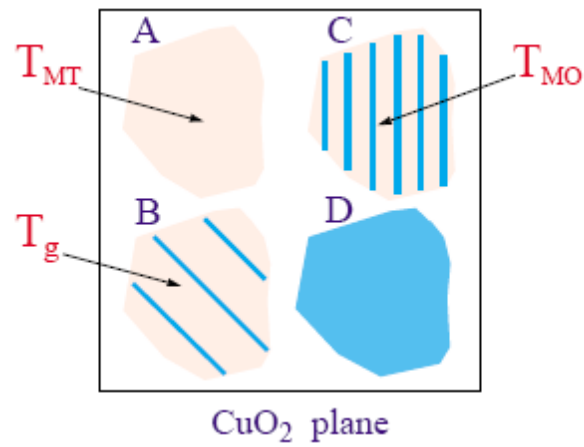
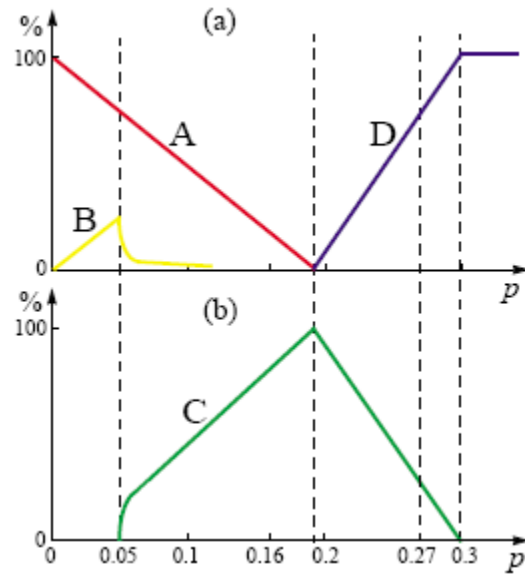
الشكل (3-2): كيفية توزع الشحنة في المستويات  $\text{CuO}_2$  بدلالة التطعيم ، حيث تمثل الخطوط المسارات المشحونة، المناطق البيضاء والرمادية طور المغناطيسية الحديدية المضادة والطور المعدني على الترتيب.[6]





الشكل (4-2): كيفية تغير كثافة المسارات المشحونة  $1/d_s$  في المستويات  $\text{CuO}_2$  بدلالة التطعيم، حيث تمثل المسافة بين خطوط المسارات المشحونة، حيث نلاحظ بوضوح وجود عملية تشبع بعد النقطة  $1/8$ . [7]

كما يظهر في الأشكال (4-2) و (5-2). و لهذا السبب، فعندما يزداد مستوى التطعيم، تقوم الثقوب المطعمة حديثاً بالاستيلاء على جزر المغناطيسية الحديدية المضادة السليمة، والتي تتلاشى كلياً عند النقطة  $p \sim 0.19$  كما يظهر في الشكل (3-2). و تبدأ جزر معدنية صغيرة بالتشكل من أجل مستوى تطعيم أعلى من  $p \sim 0.19$  كما يظهر في الشكل (5-2). وتصبح ناقلات الشحنة موزعة بشكل متجانس في المستويات ثنائية البعد  $\text{CuO}_2$ ، وتصبح الكبريات معادن ولكن ليست فوق ناقلة، والمعلومات الملخصة في الشكل (5-2). لا تعني بأن الترابط المغناطيسي يتلاشى من أجل  $p > 0.19$ ، ولكن في الحقيقة لا يزال الاسترخاء المغناطيسي هو المسيطر في الدرجات العليا من مناطق ما بعد التطعيم [8]، والشكل (5-2) يبين الأنواع الأربعة للمناطق المتكونة في المستوي  $\text{CuO}_2$  عند مستويات تطعيم  $p$  مختلفة، حيث تحتوي المنطقة A على انتظام مغناطيسية حديدية مضادة، بينما تحتوي المنطقة B على طور مسارات الشحن القطرية التي تفصل بينها مناطق مغناطيسية، حيث قمنا بتمثيل المسارات المشحونة بواسطة خطوط. كما تحتوي المنطقة C على المسارات المشحونة العمودية و طور مغناطيسية حديدية مضادة يفصل هذه المسارات عن بعضها البعض. بينما تتوزع الثقوب بشكل متجانس في المنطقة D. حيث ترمز  $T_{MT}$  إلى درجة حرارة التحول المغناطيسي،  $T_{sg}$  درجة حرارة انتظام الشحن الكهربائي. أما  $T_{MO}$  فهي درجة حرارة الانتظام المغناطيسي، المسؤول عن استقرار



الشكل (5-2): المناطق المختلفة المتشكلة أثناء التطعيم في المستويات  $\text{CuO}_2$  بدلالة التطعيم [9]

## 2-2 تأثير النظائر على درجات الحرارة المميزة :

من الناحية التاريخية يعتبر تأثير النظائر، أحد الظواهر التي ساهمت في فهم الآلية المسؤولة عن تشكل ثنائيات-Cooper في الناقلية الفائقة العادية التي تخضع الى نظرية BCS ، حيث أن الملاحظة التجريبية للطريقة التي تتغير بها درجة الحرارة الحرجة  $T_c$  بدلالة كتلة النظائر  $M$  التي تدخل في تكوين بنية المادة فوق الناقلية ، أدت إلى استنتاج للقانون التالي :

$$T_c \propto M^{-\beta} \quad (4.2)$$

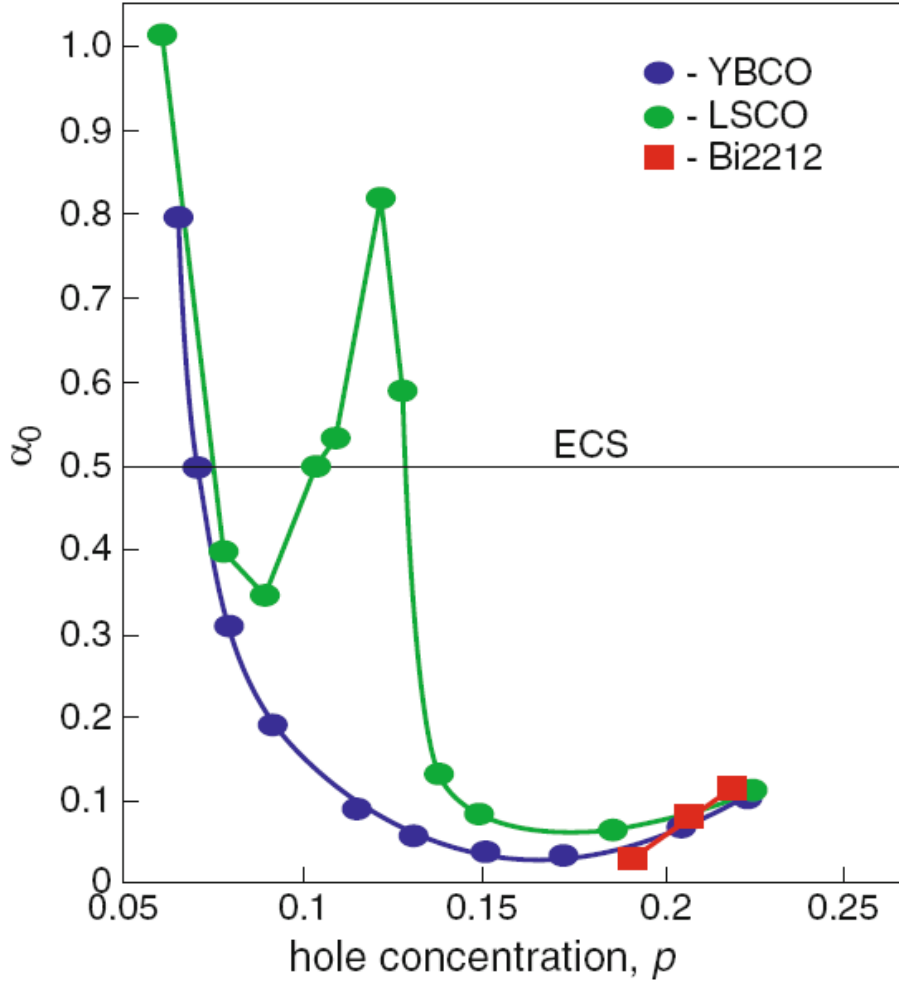
حيث يسمى  $\beta$  معامل تأثير النظائر ، ويعطى حسب نظرية BCS بالعلاقة التي تربطه مع كثافة الحالة لجسيم وحيد  $N(0)$  عند سطح فرمي، و الكمون بين الالكترونات  $V$  كمايلي :

$$\beta = 0.5[1 - 0.01\{N(0)V\}^{-2}] \quad (5.2)$$

حيث تأخذ  $\beta$  قيم تتراوح بين 0.4 و 0.5 في العديد من المواد فائقة الناقلية ، مع وجود بعض الاستثناءات. وبما أن درجة حرارة Debye تتناسب مع سرعة الصوت التي تتغير وفق القانون  $M^{-1/2}$  ، فيمكن أن نجد التناسب  $T_c \propto \theta_D$  ، وحيث أن درجة حرارة دباي تتعلق مباشرة باهتزازات الشبكة، فالتناسب السابق يشير إلى الدور المهم الذي تلعبه اهتزازات الشبكة في آلية حدوث الناقلية الفائقة. ولكن في الأكاسيد YBCO تكون قيمة  $\beta$  قريبة من الصفر وهذا يدل على أن الميكانيزم أو الآلية الأساسية لحدوث الناقلية الفائقة في هذه الأكاسيد لن تكون كما في المواد فائقة الناقلية العادية أي التفاعل الكترون-فونون.

لقد لوحظ تجريبيا أن مفعول النظائر في الكبريات يكون صغير جدا بشكل ملفت عند نقطة التطعيم المثالي  $p_{opt} \sim 0.16$  ، وهذه النتيجة تم أخذها كحجة ضد الميكانيزم الذي تعتمد عليه نظرية BCS أي ضد فكرة أن يكون التفاعل الكترون-فونون هو السبب في تكون الثنائيات فوق الناقلية في درجات الحرارة المرتفعة . وهذا لايعني بأن الفونونات غير ذات صلة بالميكانيزم. في الحقيقة هنالك تأثير كبير للنظائر في الكبريات و الشكل (2-6) يبين كيفية تغير معامل مفعول النظائر  $\alpha_0 \equiv d \ln(T_c) / d \ln(M)$  بدلالة مستوى التطعيم  $p$  للنظيرين ( $O^{16}$  ,  $O^{18}$ ) في المركبات LSCO ، YBCO و Bi2212 . و أول ما نلاحظه من خلال الشكل (2-6) أن مفعول نظائر الأكسجين في الكبريات غير مستقل عن الجملة المدروسة وعن التطعيم كذلك ، أما الأمر الثاني فهو أنه في منطقة ما قبل التطعيم يمكن للمعامل  $\alpha_0$  أن يأخذ قيم أكبر بكثير من تلك التي تتوقعها نظرية BCS والتي تساوي حوالي 0.5 كما أنه لا يمكن تجاوز هذه القيمة حسب هذه النظرية . أما الأمر الثالث فهو أنه عند نقطة التطعيم المثالي و بجوار هذا قليلا في منطقة ما بعد التطعيم يكون تأثير النظائر صغير جدا .

في المركبات YBCO تكون الدالة  $\alpha_0(p)$  عبارة عن شبه ناقوس مقلوب ، بينما في حالة LSCO يكون التأثير الأعظم عند مستوى التطعيم  $p = 1/8$  . كما أنه قد تمت دراسة تأثير النظائر ( $Cu^{63}$  ,  $Cu^{65}$ ) في المركبين LSCO ، YBCO . ففي حالة LSCO نجد أن تأثير نظائر النحاس مشابه لتأثير نظائر الأكسجين كما في الشكل (2-6) أما تأثير نظائر النحاس في YBCO فهو صغير جدا حتى عند التطعيمات الصغيرة،



الشكل (2-6): كيفية تأثير نظائر الأكسجين في الأكاسيد Bi2212 ، YBCO ، وكذلك LSCO [10]

إلى درجة أنه يمكن أن يكون سالب. وبالتالي فكل المعلومات الناتجة عن مفعول نظائر النحاس و الأكسجين تشير إلى أن ميكانيزم فوق الناقلية ذات  $T_c$  المرتفعة يختلف عن ذلك الذي تفسره نظرية BCS.

### 2-3 غياب الترابط بين $\Delta_0$ ودرجة الحرارة $T_c$ :

بناء على نظرية BCS ، نجد أن منطقة الطاقة الممنوعة عند  $T = 0$  ، ودرجة الحرارة الحرجة مترابطين مع بعضهما وفق العلاقة ( $2\Delta_0 = 3.52k_B T_c$ ) ، ولهذا نجد  $\Delta = 2k_B T_c$  ، أما في المواد فائقة الناقلية ذات درجات الحرارة المرتفعة، نجد أن منطقة الطاقة الممنوعة التي تم قياسها تجريبيا باستخدام طريقة (ARPES) هي في الغالب أكبر من  $2k_B T_c$  ، وعلى سبيل المثال في المركب Bi2212 نجد أن درجة الحرارة الحرجة عند نقطة التطعيم المثالي هي بالتقريب 95K ، كما أن قيمة منطقة الطاقة الممنوعة التي تم الحصول عليها باستخدام طريقة (ARPES) هي حوالي 35 – 40meV وهذا يعطينا النسبة من 4.2 إلى 4.8 ، بينما في مركبات أخرى تتغير النسبة لتصل إلى 30 في منطقة ما قبل التطعيم . وبالتالي نجد أنه في الكبريات تكون درجة الحرارة الحرجة ومنطقة الطاقة الممنوعة غير مترابطين معا. كما يعني هذا في الكبريات وجود ميكانيزمين مختلفين واحد لتكون الثنائيات الناقلة للشحنة ، والآخر لبداية تكون طور ترابط بعيد المدى .

## 4-2 ظاهرة عدم تجانس الكتلة الفعالة :

بسبب بنية الطبقات التي تميز المواد فائقة الناقلية ذات درجات الحرارة المرتفعة ، تتحرك الإلكترونات بطريقة سهلة في المستويات  $\text{CuO}_2$  بينما تجد صعوبة في التنقل بين هذه المستويات، ولهذا فعدم تجانس البنية البلورية للكبريتات سوف يؤثر في خواص النقل الكهربائي ، كما أنه من المتوقع عليه بأن الكتلة الفعالة تتغير مع تغيير الاتجاهات البلورية. وبدلاً من أن تكون مقدار سلمي تصبح الكتلة الفعالة للإلكترون عبارة عن موتر - tensor . ففي حالة الكبريتات تكون الكتلة الفعالة عبارة عن تنسور قطري كتقريب جيد، بينما تأخذ قيمة متماثلة داخل المستوي الإلكتروني  $m_a \approx m_b$  كما أن الكتلة الفعالة للإلكترون في داخل المستوي بالنسبة للكبريتات أكبر من كتلة الإلكترون بأربع إلى خمسة مرات  $m_{ab} \approx (4 - 5)m_e$  .

يعرف عدم التجانس بالنسبة بين الكتلة الفعالة في مختلف الاتجاهات  $\gamma^2 = m_c/m_a$  . ففي المركب YBCO تكون نسبة الكتلة الفعالة تساوي تقريباً 30 ، بينما تكون في LSCO تساوي تقريباً 200 . إن عدم التجانس الكبير هذا غريب عن المواد فائقة الناقلية العادية ، ويعني أن الإلكترونات بالكاد تتحرك في اتجاه المحور - c وبالتالي يمكن اعتبار الكبريتات ببعدين فعالين فقط .

## 5-2 تأثير الشوائب على درجات الحرارة المميزة :

يعتبر تأثير الشوائب المغناطيسية وغير المغناطيسية أحد الاختبارات الحاسمة ، لحالة فوق الناقلية . فبينما نجد أن تأثير هذه الشوائب الغير مغناطيسية ضعيف في المواد الناقلة الاعتيادية . نجد أن الشوائب المغناطيسية تؤثر بشكل كبير جداً . ولقد أصبح التأثير المتعاكس لهذين النوعين من الشوائب على خواص فوق الناقلية المعتمدة على المغناطيسية من الحقائق التجريبية المسلم بها في هذه الأيام [11, 12].

إن مدى الترابط في الناقلية الاعتيادية كبير جداً ، لذلك نجد أن تأثير الشوائب على فوق الناقلية نفسه عملياً ، سواء على المقياس الميكروسكوبي أو الماكروسكوبي أيضاً . وهذه الحال ليست كما في الكبريتات فوق الناقلية ، حيث يكون مدى الترابط صغير جداً ، ولذلك سوف نعتبر كيفية التأثير على الناقلية الفائقة في كلتا الحالتين بشكل منفصل .

فعلى المستوى الماكروسكوبي نتفاجئ حين نعلم أن تأثير الشوائب المغناطيسية وغير المغناطيسية هو نفسه في الكبريتات فوق الناقلية . حيث أن التبديل الجزئي لذرات النحاس بالذرات Fe, Ni و كذلك Zn تؤثر بطريقة متماثلة على درجة الحرارة الحرجة  $T_c$  حيث أن النسبة المئوية  $dT_c/dx$  هي بالتقريب من 4 إلى 5 كلفن لكل ذرة ، وهذه النتيجة مستقلة عن العنصر المستبدل [13] مع استثناء لهذه النتيجة وهي حالة YBCO المطعم بواسطة Zn ، حيث تقوم ذرات Zn بكبح  $T_c$  بثلاث مرات أسرع ، أي بنسبة مئوية تقدر بحوالي 12 كلفن لكل ذرة . ومن الناحية التجريبية ، لا تقوم ذرات Zn بشغل مواقع ذرات النحاس في المستويات  $\text{CuO}_2$  ، ولكن تقوم بشغل مواقع النحاس في السلاسل - Cu أيضاً ، وهذا التموضع في السلسلة يؤدي إلى قطع الترابط بين المستويات  $\text{CuO}_2$  المتجاورة جواراً أقرباً .

أما في المستوى الميكروسكوبي فعلى الرغم من التأثير المتماثل للشوائب المغناطيسية وغير المغناطيسية على درجة الحرارة الحرجة -  $T_c$  ، فقد وجد أن لهما تأثيرين متغايرين تماماً على المستوى الميكروسكوبي أو على المحيط المجاور لها . فقياسات مفعول النفق التي تمت فوق الشوائب Zn و Ni المتواجدة في المستويات  $\text{CuO}_2$  بينت بوضوح بأن شوائب Zn قد شكلت فراغات حولها تشبه تلك الموجودة في الجبنة السويسرية ، تقوم بكبح فوق الناقلية موضعياً [12]. وعلى النقيض من ذلك فتأثير شوائب Ni على الوسط المحيط بها في المستويات  $\text{CuO}_2$  يكون ضعيف و الناقلية الفائقة لا تحدث لها عملية كبح بجوار مواقع الشوائب Ni [11]. وهذا يقودنا إلى نتيجة مهمة وهو الأصل المغناطيسي لعملية تكون الثنائيات فوق الناقلية في المستويات  $\text{CuO}_2$  . و الشيء المفاجئ الآخر الذي تحدثه الشوائب غير المغناطيسية Zn على المحيط المجاور المحلي، هو تحريضها على نشوء عزم مغناطيسي

محلي يساوي حوالي  $0.8\mu_B$  سواء في الكبريات المطعمة بالثقوب أو المطعمة بالالكترونات أي NCCO ، حيث يرمز  $\mu_B$  هنا الى مغنيطون-بور. تكون العزوم المغناطيسية الموجودة في كل مواقع ذرات Cu المحيطة بذرة Zn ذات انتظام مترنج . ولهذا السبب لا تقوم الشائبة الغير مغناطيسية Zn بتدمير الترابط المحلي للمغناطيسية الحديدية المضادة ، ولكنها تقوم بتقويتها . و **منطقيا** فالناقلية الفائقة التي تعتمد على المغناطيسية من أجل تكون الثنائيات، ينبغي أن تقوى أيضا حول هذه الشوائب ، ولكن الأمر عكس هذا التخمين المنطقي تماما في هذه الحالة. تقوم الشوائب المغناطيسية Fe, Ni بتحريض عزم مغناطيسي فعال محلي من رتبة  $4.9\mu_B$  أو  $0.6\mu_B$  في الكبريات المطعمة بالثقوب و من رتبة  $2.2\mu_B$  و  $2\mu_B$  في حالة الكبريات المطعمة بالالكترونات NCCO على الترتيب. ولهذا السبب تقوم Ni الموجودة في المستويات  $CuO_2$  بالنسبة للكبريات المطعمة بالثقوب باختزال العزوم المغناطيسية الفعالة في ذرات النحاس المجاورة لها جوارا أقرب .

## 2-6 علاقة تماسك الطور بدرجات الحرارة المميزة :

في ميكانيكا الكم ، كلما تفاعل إلكترونين فهذا يعني تداخل بين موجتي هذين الإلكترونين ، فبالرمز لدالتي الموجة بالرمزين  $\Psi_1$  و  $\Psi_2$  و الى كمون التفاعل بالرمز H ، فالتفاعل الناتج يعتمد على تكامل التداخل التالي

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1 H \Psi_2 dV \quad (6.2)$$

حيث  $dV$  عبارة عن حجم عنصرى، والتكامل يتم على جميع الفضاء. مع العلم بأن حدوث الناقلية الفائقة يتطلب تكون الثنائيات الناقلة للكهرباء- pairing ، وبداية طور مترابط بعيد المدى . ففي الناقلية الفائقة الاعتيادية التي يمكن شرحها باستخدام نظرية BCS ، تتشكل الثنائيات من الكترولين عند درجة حرارة  $T_c$  من خلال التفاعل الكترون فونون ، و طور الترابط في هذه الحالة يستقر أيضا عند درجة الحرارة  $T_c$  نفسها من خلال تداخل أمواج الثنائيات المشكلة . ويحدث التداخل بين هذه الأمواج في نفس الوقت عند  $T_c$  لأن الكثافة مرتفعة نسبيا ونتيجة لذلك تكون المسافة المتوسطة بين الثنائيات أصغر بكثير من مدى الترابط أو حجم الثنائية . وبعبارة أخرى نقول أن تماسك الطور في المعادن فوق الناقلية مرتفع جدا. في الكبريات ، نجد أن الأمر مختلف في هذه الحالة حيث وبالاعتماد على مستوى التطعيم ، نجد أن حجم ثنائيات Cooper – هي أصغر من أو تساوي المسافات الموجودة بين هذه الثنائيات ، وعلى هذا الأساس يمكن للثنائيات أن تتشكل في درجات حرارة أعلى من  $T_c$  ، وهذا يحدث بشكل بارز في منطقة ما قبل التطعيم .

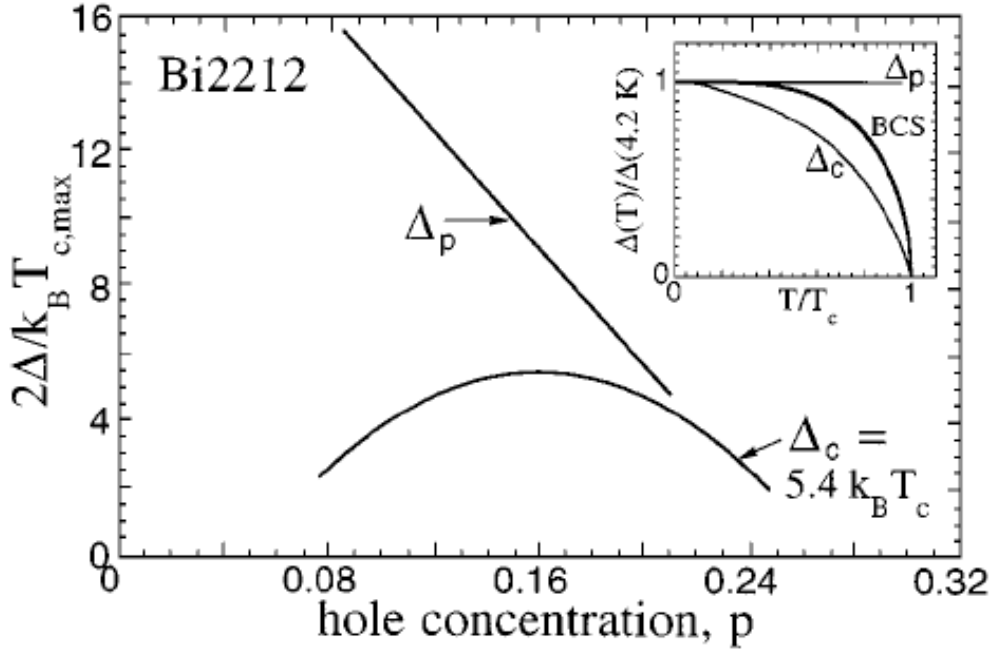
تصف النسبة  $T_{p0}/T_c$  بين درجتي الحرارة  $T_c$  و  $T_{p0}$  مدى تماسك الطور ، حيث تعبر  $T_{p0}$  عن درجة الحرارة التي يتلاشى فيها انتظام الطور عندما نقوم باهمال جميع العوامل المؤثرة في عدم الانتظام ومن جميع درجات الحرية . ففي حالة الناقلية الفائقة الاعتيادية نجد أن النسبة  $T_{p0}/T_c$  مرتفعة جدا وهي تتراوح بين  $2 \times 10^2$  و  $2 \times 10^5$  ، بينما نجدها في الكبريات صغيرة جدا  $16 - 0.7$  وهذا يشير بشكل واضح بأن تكون الثنائيات يمكن أن يحدث في درجات حرارة أعلى بكثير  $T_c$  [14]. ومن الضروري أن نتذكر دائما بأن آلية تكون الثنائيات وآلية استقرار الطور المترابط بعيد المدى هما آليتين مختلفتين سواء في الناقلية الفائقة الاعتيادية أو غير الاعتيادية .

تعتبر الناقلية الفائقة في الكبريات والمركبات الطبقيّة ثنائية البعد ، ودرجة الحرارة  $T_c$  هي الدرجة التي تقوم فيها المستويات فوق الناقلية  $CuO_2$  بجعل طور الترابط مستقر على طول المحور - c ، ومن الخطئ الاعتقاد بأن تداخلات Josepson التي تحدث بين المستويات هي المسؤولة ترابط الطور على المحور - c . فالقياسات التجريبية للمقاومية الكهربائية في المستوى

$\rho_{ab}$  وخارج هذا المستوي  $\rho_c$  كدالة في تغيرات الضغط والتي تمت على المركب T12212 ، أظهرت أن  $\rho_c(T)$  تتناقص بسلاسة مع زيادة الضغط ، بينما تتزايد  $T_c$  أولاً ثم تتناقص [15] . وهذه النتيجة لا يمكن تفسيرها بميكانيزم جوزفسون للترابط بين الطبقات. ولهذا فكل نموذج للناقلية الفائقة في درجات الحرارة المرتفعة يعتمد على وصلة جوزفسون ينبغي مراجعته .

## 2-7 عدد موازين الطاقة يساوي اثنين :

إن منطقة الطاقة الممنوعة ، هي أحد أهم الخواص المميزة لحالة فوق الناقلية ، وقد تمت دراستها بشكل مفصل منذ اكتشاف ظاهرة فوق الناقلية وذلك باستخدام تقنيات مختلفة. ولكن الشيء المفاجئ والمميز في الكبريات هو أن تقنيات قياس مختلفة أعطت نتائج مختلفة لقياس منطقة الطاقة الممنوعة. ولقد ظل هذا التناقض لغزاً إلى غاية التحقق من أن الطرق المختلفة

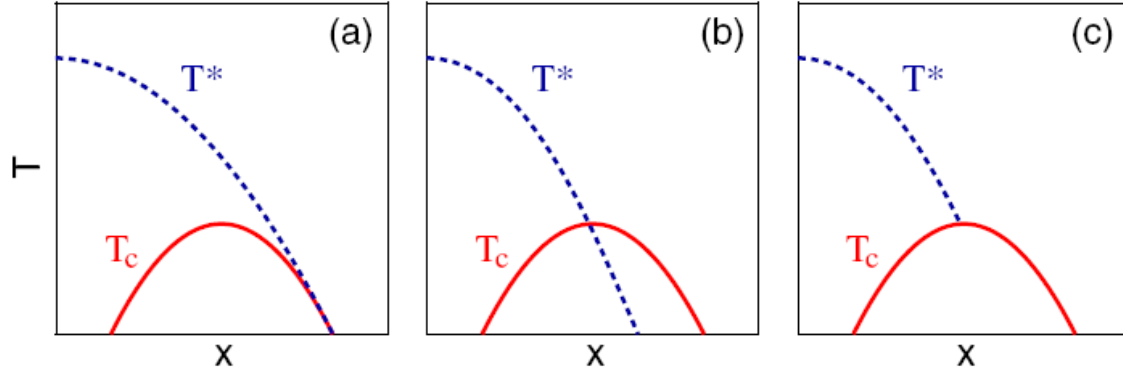


الشكل (7-2): مخطط يظهر بوضوح وجود طاقتين مختلفتين  $\Delta_p$  تمثل طاقة تكون الثنائيات أو ما يسمى بالأزواج تم الحصول عليها باستخدام تقنية (ARPES)، بينما تمثل  $\Delta_c$  طاقة ترابط الطور تم الحصول عليها باستخدام تقنية (Andreev). حيث تمثل  $p_m \equiv p^{opt}$  نقطة التطعيم الأمثل [16]

للقياس أعطت فعلا نمطين مختلفين من مناطق الطاقة الممنوعة، والتي تتعلق قيمتها بشدة بمستوى التطعيم. والشكل (7-2) يوضح هذين الميزانين للطاقة في الكبريات بدلالة تركيز الثقب [18,17]. حيث تعطي قياسات مفعول النفق وكذلك طريقة (ARPES) استطلاعاً لمنطقة الطاقة الممنوعة الخاصة بتكون الثنائيات  $\Delta_p$ . حيث تتزايد قيمتها خطياً تقريباً مع تناقص قيمة مستوى التطعيم  $p$ ، بينما تتبع  $\Delta_c$  شكل القطع المكافئ تقريباً بدلالة مستوى التطعيم  $p$  كما أنها تحقق العلاقة  $2\Delta_c \sim 5.4k_B T_c$ . كما أن خاصية وجود اثنين من موازين الطاقة لا تقتصر على الكبريات المطعمة بواسطة الثقب، بل نجدها في حالة التطعيم بواسطة الإلكترونات أيضاً [19].

في نظرية BCS نجد أن  $\Delta_c$  و  $\Delta_p$  متطابقين بسبب القوة الكبيرة لتماسك الطور. بينما في الكبريات، نجد أن شبه الجسيمات المكونة من إلكترونين أو من ثقبين يتربط أحدها مع الآخر في درجات حرارة أعلى من  $T_c$ ، ولكن استقرار طور الترابط بين الثنائيات المتكونة يتم عند  $T_c$ . حيث نجد تقلبات في طور الترابط بمجرد تجاوزنا درجة الحرارة الحرجة  $T_c$ . ونلاحظ من خلال الشكل (7-2) بأن  $\Delta_c(p)$  و  $\Delta_p(p)$  يملكان شكلين مختلفين للتغير مع تغير مستوى التطعيم  $p$  وهما غير مترابطين مع بعضهما البعض. وهذا يوحي بأن عملية تكون الثنائيات و ترابط الطور يتم التحكم فيهما بواسطة آليتين أو ميكانيزمين مختلفين. ومع ذلك لا يزال هنالك نقاش حاد في الوسط العلمي حول السيناريو الصحيح للطريقة التي يتقاطع بها البيانيين الخاصين بمنطقتي الطاقة الممنوعتين.



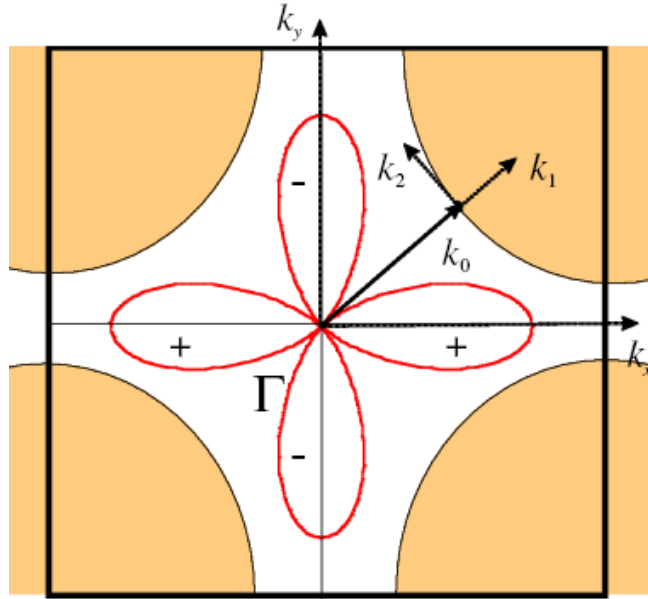


الشكل (8-2): مخطط يظهر ثلاثة سيناريوهات محتملة للكيفية التي تلتقي فيها شبه المنطقة الممنوعة (المرسومة بالخط المنقطع) ، مع منطقة فوق الناقلية في بيان الطور  $(T_c, x)$  [20]

ويمكننا أن نذكر هنا نماذج عن هذه الآراء المختلفة من خلال أحدث الأوراق العلمية الموجودة ، وهو ما يمثله الشكل (7-2). حيث تتناسب  $\Delta_p(p)$  مع  $T_c^*$  وتسمى أيضا شبه المنطقة الممنوعة ، كما تتناسب  $\Delta_c(p)$  مع درجة الحرارة الحرجة  $T_c$  . فبينما يعتبر [21] Millis . بأن الشكل (a) هو السيناريو الصحيح . يفضل [22] Cho . الحالة التي يلتقي فيها البيانيين عند نقطة التطعيم الأمثل  $p \sim 0.16$  كما يظهر في الشكلين (b,c) . أما Norman فقد قدم مناقشة شاملة للسيناريوهات الثلاثة . ويوجد هناك العديد من الأسئلة المفتاحية حول طبيعة وأصل شبه المنطقة الممنوعة ، وهل يتواجد البيانيين معا تحت درجة الحرارة  $T_c$  وهل المنطقة شبه الممنوعة ضرورية من أجل نشوء ظاهرة فوق الناقلية . [22,21] لقد تم التحقق تجريبيا من وجود ثنائيات - Cooper في درجات حرارة أعلى من  $T_c$  ، حيث لوحظت على سبيل المثال في Bi2212 بواسطة قياسات مفعول النفق ، وذلك بجوار منطقة ما بعد التطعيم ، وتم التقاط إشارة وجود الثنائيات في درجات حرارة أعلى بقرابة 20K من  $T_c$  . [14] . وفي الحقيقة فيمكن لثنائيات - Cooper الغير مترابطة أن تتواجد في درجات حرارة الغرفة في منطقة ما قبل التطعيم وكذلك في المنطقة غير المطعمة.

## 8-2 طبيعة التناظر في وسيط الانتظام :

في المواد فائقة الناقلية الاعتيادية ، نجد أن كل إلكترون من ثنائية - Cooper يملك سبين معاكس لسبين الإلكترون الآخر ، كما أن وسيط الانتظام  $\Psi$  الذي يخص الحالة الأرضية لهذا النوع من فوق الناقلية يمتلك دالة موجة ذات تناظر من النمط - s ، بمعنى أنها تمتلك عزم حركي مداري  $l = 0$  كما يظهر في الشكل (9-2). حيث لا تمتلك منطقة الطاقة الممنوعة في هذا النوع من التناظر أي عقدة. كما أنه من الناحية النظرية يمكن لإلكترونين أن يترابطا في حالة منفردة مع عزم حركي مداري  $l = 2$  أي دالة



الشكل (9-2): مخطط يظهر النمطين الممكنين للتناظر (s, d) الموجود في وسيط الانتظام [23]

موجة من النمط-d كما في الشكل (9-2) حيث نرى التناظر الخاص بوسيط الانتظام من النمط  $(d_{x^2-y^2})$  ، والميزة الرئيسية لهذا النمط من التناظر هو امتلاكها لاثنتين من الفصوص الموجبة واثنين من الفصوص السالبة. كما أنه في حالة الفوق ناقلية غير المتجانسة نجد أربعة عقد كما في الشكل (9-2). الوضع في الكبريات غريب ومميز جدا ، حيث بينت معظم الطرق التقنية شديدة الحساسية بأن كل من الكبريات المطعمة بالالكترونات والمطعمة بالثقوب تمتلكان وسيط تناظر من النمط  $(d_{x^2-y^2})$  في الحالة الأرضية لفوق الناقلية . كما أن القياس بواسطة ARPES بين وجود التناظر الرباعي الخاص بمنطقة الطاقة الممنوعة. ومن جهة أخرى فجميع قياسات tunneling التي تمت في الكبريات المطعمة بواسطة الثقوب على طول المحور-c ، تدل على أن التناظر الخاص بتكاثف فوق الناقلية هو من النمط-s ، [24]. ومن الناحية النظرية فإن مفعول النفق بين حالتي فوق الناقلية من النمط-s ومن النمط-d في الاتجاه العمودي على المستوي الذي تتواجد فيه فصوص دالة الموجة - d غير ممكن ، لأن ترابط الفصوص الموجبة سوف يلغي السالبة. ان معرفة طبيعة التناظر الخاصة بالحالة الأرضية في الكبريات يضع قيود على النظرية الخاصة بفوق الناقلية في درجات الحرارة المرتفعة. فعلى سبيل المثال نجد أن حقل تكون الثنائيات مع التناظر من النمط-d غير مفضل بالنسبة للفونونات. بينما نجد العكس تماما في الناقلية الفائقة التي تعتمد على تقلبات السبين.

## 9-2 الخواص المغناطيسية :

في السابق كان ينظر إلى الناقلية الفائقة و المغناطيسية على أنهما ظاهرتان متنافيتان ولا يمكن أن تجتمعا معا ، ولكن هذه النظرة تغيرت جذريا بعد اكتشاف الدور الذي تلعبه التقلبات المغناطيسية في عملية تكون الثنائيات الالكترونية في المواد فوق الناقلة من نوع الفرميونات الثقيلة . بالإضافة إلى الدور المهم لتقلبات السبين في تكون الثنائيات في هذا النوع من المواد فوق لناقلة. هذه العلاقة الودية بين الناقلية الفائقة والمغناطيسية تلعب أيضا دورا حاسما في مركبات الكبريات، والتي ورثت خواصها المغناطيسية من خواص المركب الأب الذي تولدت عنه بطريقة التطعيم، والذي هو في هذه الحالة عبارة عن عازل - Mott الذي يمتلك في الأصل مغناطيسية حديدية مضادة. لقد بينت قياسات التشتتات النثرونية غير المرنة

(INS) بأن مركبات الكبريتات تحوي طيفا واسعا من الخواص المغناطيسية. وقد تمت هذه الدراسة على عدد قليل من مركبات الكبريتات مثل YBCO, LSCO, Bi2212 و T12201 ، لأن القياسات التي تتم بواسطة طريقة INS تحتاج بلورات أحادية متجانسة كبيرة الحجم نسبيا. وعلى العموم تظهر أغلب مركبات الكبريتات خواص متشابهة للتفاعلات المغناطيسية، ومن ناحية أخرى هنالك بعض الفوارق الخاصة بالترابطات المغناطيسية لكل واحدة من مركبات الكبريتات .  
 بما أن YBCO عبارة عن طبقات مضاعفة ، فيمكننا وكتقريب أولي النظر إليها على أنها ترابط ضعيف لثنائيات الطبقات  $\text{CuO}_2$  ، وهذا عن طريق إهمال عدم التجانس المحلي والحدود الصغيرة للتفاعل ، ويمكننا أن نصف التواتر العالي لديناميكا السبين بواسطة هاملتوني هايزنبرغ لثنائية طبقات منفردة :

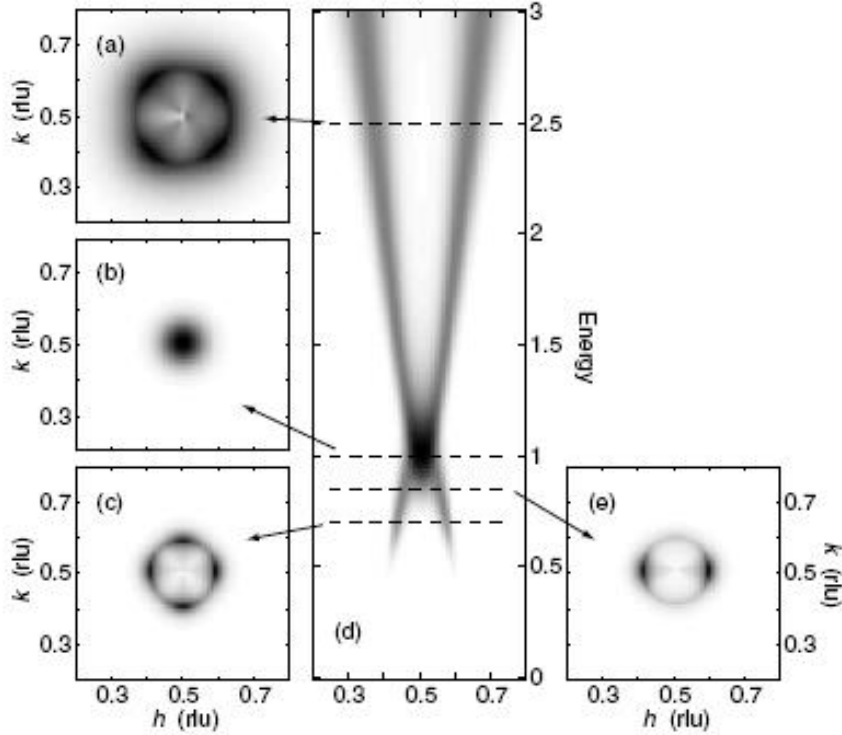
$$H = \sum_{ij} J_{\parallel} S_i S_j + \sum_{ij'} J_{\perp} S_i S_{j'} \quad (7.2)$$

حيث  $J_{\parallel}$  خاص بالتفاعل داخل الطبقات ، بينما يخص  $J_{\perp}$  التفاعل ما بين الطبقات ، حيث يمثل الحد الأول في الهاملتوني الترابطات بين الجوار الأقرب للسبينات  $S_i$  الخاصة بالنحاس Cu في نفس المستوي ، بينما يمثل الحد الثاني الترابطات بين السبينات الخاصة بذرات النحاس Cu الموجودة في مستويات مختلفة. وتلعب تقنية تشتت النيوترونات دورا مهما في دراسة طبيعة التفاعلات المغناطيسية والترابطات الموجودة في الكبريتات. وخاصة في فهم النتائج الحديثة التي تم التوصل إليها في طيف إثارة كل من المركبين YBCO و LSCO. وكذلك محاولة فهم طبيعة منطقة السبين الممنوعة التي تظهر أسفل درجة الحرارة الحرجة  $T_c$  . وتكتب دالة التشتت المغناطيسي التي يتم قياسها باستخدام النيوترونات كما يلي:

$$S(Q, \omega) = \sum_{\alpha, \beta} (\delta_{\alpha, \beta} - Q_{\alpha} Q_{\beta} / Q^2) S^{\alpha\beta}(Q, \omega) \quad (8.2)$$

$$S^{\alpha\beta}(Q, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \sum_r e^{iQ \cdot r} \langle S_0^{\alpha}(0) S_r^{\beta}(t) \rangle \quad (9.2)$$

حيث  $Q$  عبارة عن شعاع مكتوب في وحدات الشبكة المعكوسة،  $S_r^{\beta}(t)$  هي المركبة  $\beta (= x, y, z)$  لسبين خاص بذرة موجودة في الموقع  $r$  من البلورة عند اللحظة الزمنية  $t$  ، بينما يمثل الرمز  $\langle \dots \rangle$



الشكل (10-2): مخطط يظهر نتائج قياسات  $\chi''(Q, \omega)$  بواسطة تشتت النيوترونات في العائلة YBCO عند  $T \ll T_c$ . حيث تمثل الأشكال (a – d) توزع التشتت في فضاء الشبكة المعكوسة حول  $Q_{AF}$  عند طاقات مختلفة، أما الشكل (d) فهو يمثل  $\chi''$  على طول الاتجاه  $Q = (h, \frac{1}{2}, L)$  بدلالة الطاقة المكتوبة في وحدات طاقة التجاوب  $E_r$ ، حيث تتعلق الطاقة بمستوى التطعيم p [25-27].

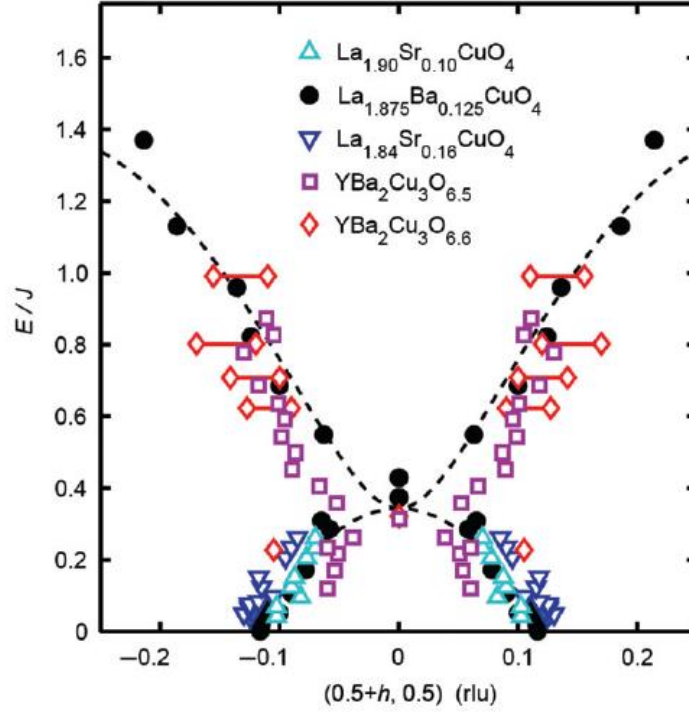
القيمة المتوسطة لكامل التشكيلة. وفي حالة التشتت الغير مرن، من الممكن ربط  $S(Q, \omega)$  مع الجزئ التخيلي للحساسية الديناميكية  $\chi''(Q, \omega)$  الخاصة بالسبين كما يلي:

$$S(Q, \omega) = \frac{\chi''(Q, \omega)}{1 - e^{-\hbar\omega/k_B T}} \quad (10.2)$$

كما أن هنالك عبارة أخرى مفيدة جدا، وهي الحساسية الموضعية (local) المعرفة بالشكل التالي:

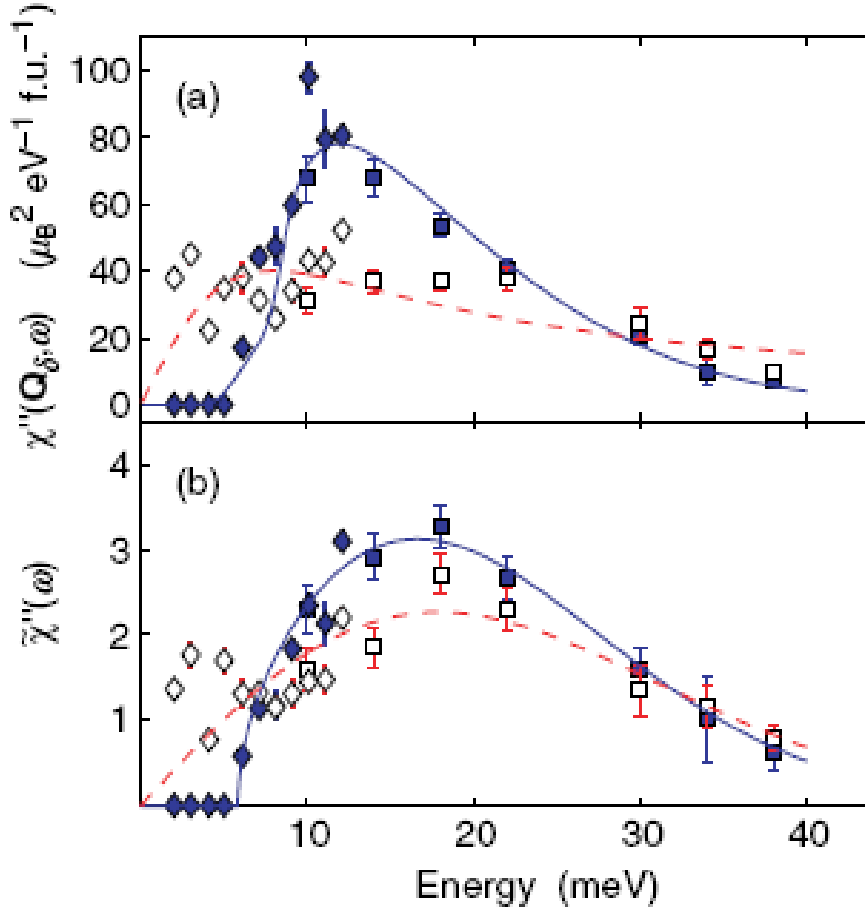
$$\tilde{\chi}''(\omega) = \int dQ_{2D} \chi''(Q, \omega) \quad (11.2)$$

حيث  $Q_{2D}$  يعبر على قيامنا بالتكامل في المستوي ثنائي البعد  $CuO_2$  للشبكة. معظم الدراسات التي تتم بواسطة تشتت النيوترونات، تركز على العائلتين YBCO و LSCO لسبب بسيط جدا، وهو أنهما البلوريتين الوحيدتين التي يمكن إنتاجهما بحجم كبير. وقد كان يعتقد لبعض الوقت بأن الطيف المغناطيسي لهاتين العائلتين مختلف عن بعضه البعض، حيث تتم دراسة تشتت النيوترونات بطاقات منخفضة، أصغر من 20meV [28-30]. بالنسبة للعائلة LSCO، بينما يتركز الاهتمام بالنسبة للعائلة YBCO على عملية التشتت بواسطة النيوترونات عند طاقة 41meV وهو ما يسمى بقمة التجاوب المغناطيسي MRP،



الشكل (11-2): (a) القيم التجريبية للتشتت النيوتروني في الأكسيد (LSCO) ممثلة في الشبكة المعكوسة (b) مخطط يظهر كيفية تغير طاقة التجاوب بدلالة موقع قمة التجاوب في الأكسيد (YBCO) [31]

(magnetic resonance peak) ، والتي تظهر على شكل زيادة في كثافة الطاقة [32-37]. عندما تقترب درجة الحرارة من أسفل  $T_c$  . وقد تم اكتشاف MRP في العديد من العائلات الأخرى [38-41]. ولقد جلب هذا الاكتشاف اهتمامات نظرية معتبرة من أجل فهم السبب الفيزيائي لظاهرة MRP [42-44]. ، كما أن ظاهرة عدم تعلق الإثارة المغناطيسية بدرجة الحرارة عند  $Q_{AF}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$  والتي تم ملاحظتها مرارا وتكراراً في LSCO ، أدت إلى طرح سؤال آخر مهم حول الدور الذي تلعبه الإثارة المغناطيسية في مركبات الكبريت فائقة الناقلية . ولقد تم الحصول على إشارات واضحة تدل على أن التجاوب هو ظاهرة مشتركة بين هاتين العائلتين [45-57]. والشكل (2-10) يظهر نتائج قياس التشتت النيوتروني مع طاقات منظمة أي مكتوبة في وحدة الطاقة التي تحدث عندها عملية التجاوب  $E_p$  ، كما يظهر الشكل كيفية تعلق التشتت المغناطيسي بالوسيط  $Q$  عندما تكون طاقة الإثارة ثابتة . كما يظهر في الشكل (2-11) مقارنة مباشرة لمجموعة من القياسات التي تمت على العائلتين LSCO و YBCO [31,46,45]. ، بدلالة طاقة مكتوبة في وحدة الثابت  $J$  . كما يحتوي الشكل على نتائج تخص المركب LBCO عند مستوى التطعيم  $p = 1/8$  [58,59]. إن درجة التشابه الكبير الذي نجده في الشكل (2-11) يبرر الاقتراح السائد بأن طيف الإثارة المغناطيسية يمكن أن يملك شكل عام بالنسبة للكبريت [31,60].



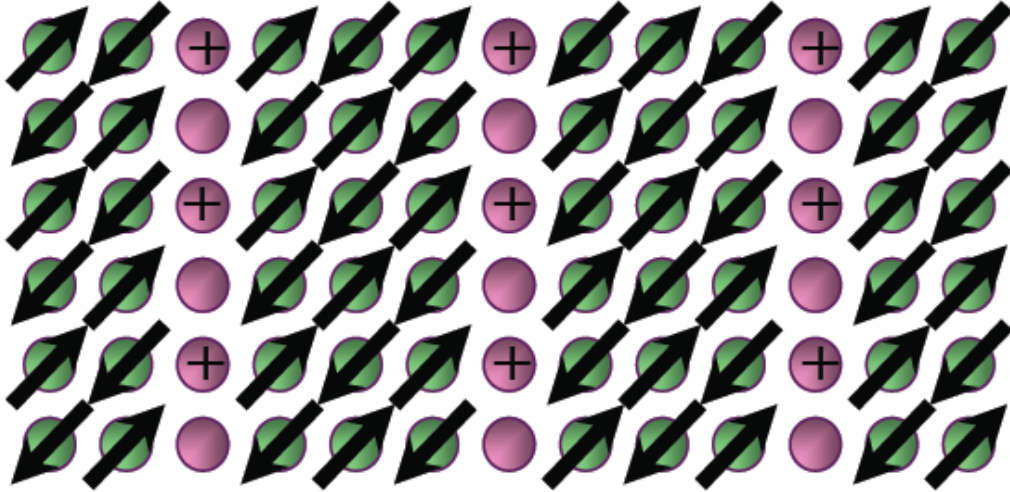
الشكل (12-2): (a) مخطط يظهر النتيجة التجريبية  $\chi''(Q_\delta, \omega)$  ، من أجل  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  عند نقطة التطعيم الأمثل ، حيث  $Q_\delta$  هو موضع قمة التجاوب ، (b) يمثل الحساسية الموضعية  $\tilde{\chi}''(\omega)$  ، حيث تمثل الرموز الملونة الحالة  $T < T_c$  ، بينما الغير ملونة تمثل الحالة  $T > T_c$  [31]

تعتبر عملية فتح المنطقة الممنوعة الخاصة بالسبين ، من أكبر التغيرات التي تحصل للكبريات في منطقة التطعيم المثالي ، وتعتبر النتائج التجريبية الخاصة بالمركب  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  عند مستوى التطعيم  $p = 0.16$  والممثلة في الشكل (12-2) مثال واضح لهذا التغير الحاصل. حيث نجد أنه في الحالة الطبيعية لا تنعدم السعة  $\chi''(Q, \omega)$  إلا عند النقطة  $\omega = 0$  ، ويصبح الأمر مختلف تماما في حالة فوق الناقلية ، حيث ينقص وزن من أسفل المنطقة الممنوعة الخاصة بالسبين  $\Delta_S \sim 8\text{meV}$  ، ويزاح الى الطاقة بجوار  $\Delta_S$  من الأعلى . وهذا يظهر سواء في بيان  $\chi''(Q, \omega)$  في الشكل (a12-2) أو عند التكامل على  $Q$  في الشكل (b12-2) ، والشئ المهم الآخر الذي نجده في المنطقة الممنوعة الخاصة بالسبين ، هو أن قيمتها مستقلة عن  $Q$  [61]. ومن خلال النتائج الممثلة في الأعلى يمكن أن نستنتج وجود طيف إثارة مغناطيسية موحد بالنسبة لجميع الكبريات ، تكون فيه قيمة منطقة السبين الممنوعة مترابطة مع  $T_c$  .

## 10-2 طور تشكل مسارات الشحن :

لقد تكلمنا سابقا عن كيفية التوزيع الغير متجانس لناقلات الشحنة الكهربائية في المستويات العازلة  $\text{CuO}_2$  ، وعدم التجانس هذا واضح سواء على المستوى الماكروسكوبي أو الميكروسكوبي . كما يظهر في الشكل (12-2) ويطلق اسم طور مسارات الشحن على توزيع الشحنة والانتظام المغناطيسي في المستوي  $\text{CuO}_2$  على المقياس الميكروسكوبي أو النانومتري .

لقد ناقشنا في الشكل (2-11) فقط اختفاء قمم التجارب المتوافقة أثناء التطعيم ، واستبدالها بأربعة قمم ديناميكية غير متوافقة ومتواجدة على الحدود. إن قيمة الانزياح في قمم كل من الشحنة والسبين تبين بأن تعديل الشحنة هو أكبر بمرتين من تعديل السبين، والشكل المناسب لهذا النمط من توزيع الشحنة وانتظام السبين، ممثل في الشكل (2-12) حيث مثلت المواقع الفارغة بتطعيم ساكن في الحدود التي ينعكس فيها الطور، والسبين الموجود في الخلفية الخاصة بالمغناطيسية الحديدية المضادة يدور بزواوية 180 درجة عند عبور الجدار المحدد للمنطقة. تكون مسارات الشحن في الكبريات نصف ممتلئة، بمعنى وجود شحنة موجبة واحدة لكل ذرتي نحاس على طول مسار الشحن، بينما نجد في النيكلات - Nickelates بأن كثافة الشحنة هي بمعدل واحدة لكل موقع ذرة نيكل Ni. إن طور مسارات الشحن في الشكل (2-12) والذي هو بالتقريب أحادي البعد ليس السبب في تكون القمم الأربعة الغير متوافقة ، ومن المرجح بأن يكون سبب ظهور القمم الأربعة هو تعامد اتجاهات المسارات المشحونة في المستويات CuO<sub>2</sub> المتجاورة، حيث يدور اتجاهه بزواوية 90 درجة عند الانتقال من مستوي إلى آخر بالتناوب. تتناقص المسافة المتوسطة بين مسارات الشحن من أجل مستويات تطعيم  $p < 0.13$  ، و يحدث التشعب عند  $p = 1/8$  حيث تبقى المسافة بين المسارات ثابتة عمليا. ويبلغ طول المسارات المشحونة المنفصلة حوالي  $100A^0$ . كما أن مسارات الشحن تكون ديناميكية، بمعنى أنها تتعرج وتتلوى ويمكنها الحركة في الاتجاه المستعرض. حيث تكون مسارات الشحن موجودة على كامل مجال التطعيم في YBCO ، وتصبح مرئية في درجة حرارة أعلى من درجة الحرارة الخاصة بشبه المنطقة الممنوعة [64]. تكون مسارات الشحن المتقلبة عبارة عن عوازل على المستوى الميكروسكوبي [7]. وهذا يعني تواجد انتظام للشحن موجود على هذه المسارات وهي تشبه، ولكن ليست كثافة موجة الشحنة الاعتيادية والمعروفة (CDW). وهذا يشير إلى وجود منطقة شحنة ممنوعة في هذه المسارات ، بالإضافة إلى تواجد منطقة سبين ممنوعة في المناطق المغناطيسية المتواجدة بين مسارات الشحنة ، كما يظهر في الشكل (2-12). كما أن انتظام لمسارات مشابهة قد تم ملاحظتها في النيكلات ، ولكنها قطرية كتلك التي تظهر في منطقة ما قبل التطعيم في الكبريات، بالإضافة إلى هذا فالتقوب المطعمة في النيكلات هي أقل تدمير للخلفية المغناطيسية الحديدية المضادة من تلك المطعمة في الكبريات ، والتي تملك بنية مشابهة لها. تكون المسارات المشحونة في النيكلات أيضا عازلة ، ومنطقة الشحنة الممنوعة أسهل في الملاحظة، لأن المسارات المشحونة في النيكلات أقل ديناميكية من تلك التي في الكبريات. كما تم ملاحظة انتظام مسارات الشحنة في المنغنايت أيضا.



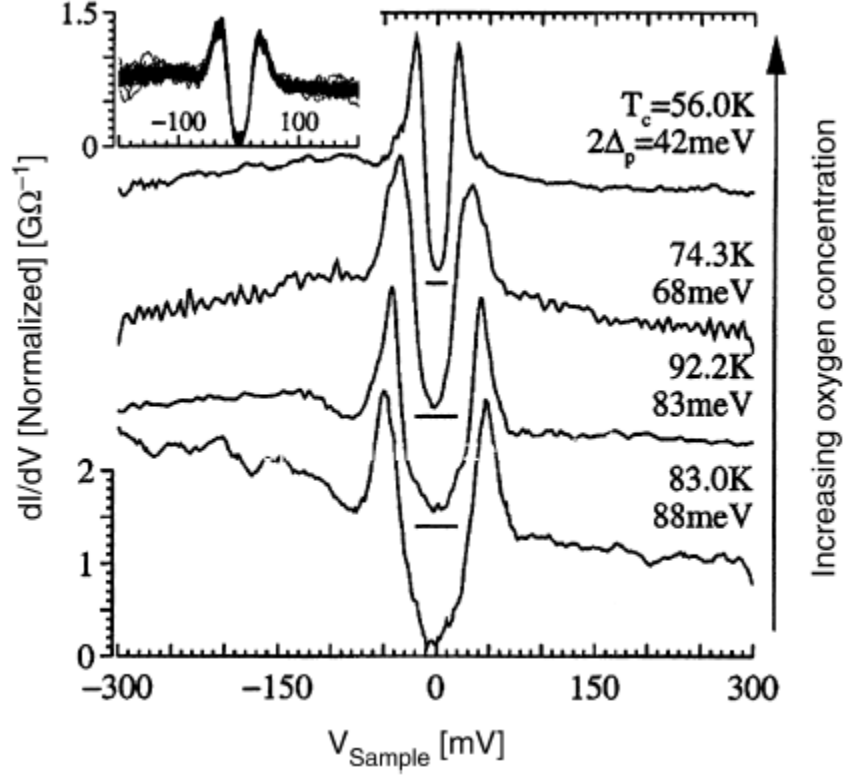
الشكل (2-13): مخطط نموذجي لمسارات الشحن في المستويات ( $\text{CuO}_2$ ) من أجل كثافة ثقب تساوي  $1/8$  حيث تمثل الدوائر ذرات النحاس، بينما تدل الإشارة الموجبة على وجود ثقب [66]

إن انتظام مسار الشحن في الكبريتات ، النيكلات و المنغنات هو برهان على الارتباط الشديد بين الإلكترون والشبكة. مثل هذه الحالات الالكترونية الغير متجانسة مرتبطة بقوة بالخلفية الغير مستقرة للشبكة ، ويمكن تمييز عدد من درجات الحرارة في هذه الحالة ، حيث أنه أثناء القيام بعملية التبريد يبدئ ظهور مسارات الشحنة في درجة حرارة أقل من درجة حرارة تحول البنية  $T_{co} < T_d$  ، حيث  $T_d$  و  $T_{co}$  هما على الترتيب ، درجة حرارة بداية تكون انتظام الشحنة و درجة حرارة انتقال البنية.

## 11-2 المنطقة الممنوعة الزائفة:

المنطقة الممنوعة الزائفة (PG) أو شبه المنطقة الممنوعة - pseudogap ، هي عبارة عن استنزاف لكثافة الحالات فوق درجة الحرارة الحرجة، وفي جميع مستويات التطعيم ، تكون المنطقة الممنوعة الزائفة متعلقة بمستوى فرمي، ولهذا السبب تهيمن الحالات الطبيعية منخفضة الاستثارة. ولقد تم مشاهدة PG لأول مرة باستخدام قياسات التجاوب المغناطيسي النووي - (NMR) و لذلك وقع خطئ في اعتبارها منطقة ممنوعة للسبين . ولكن القياسات باستخدام العديد من التقنيات الأخرى بينت وجود ما يشبه المنطقة الممنوعة في طيف إثارة الشحنة . وقد أصبح واضحا بأن PG لا تخص السبين فقط ولكنها تخص طيف إثارة السبين والشحنة ، وبكلام آخر يمكننا القول، بأن هنالك اثنين من PG منفصلين فضائيا : واحدة تخص السبين SPG والأخرى تخص الشحنة CPG . وتتعلق قيمة PG بمستوى التطعيم  $p$  ، وتكون كبيرة عند منطقة ما قبل التطعيم وتتناقص مع تزايد التطعيم. إن PG هي منطقة ممنوعة لحالات طبيعية ، ومع ذلك فتقلبات ترابط الطور فوق درجة الحرارة الحرجة  $T_c$  تساهم في PG في درجات حرارة أقل من  $T_{pair}$  أي أقل من درجة الحرارة التي تبدئ عندها ثنائيات-Cooper بالتشكل. ويرمز عادة لدرجة الحرارة التي تبدأ عندها PG بالتلاشي بالرمز  $T^*$  . وقيمة المنطقة الممنوعة للحالات الطبيعية لا تتأثر كثيرا بعملية التبريد خلال  $T_c$  . ولكن هنالك إعادة انتظام للاستثارة داخل PG ، وهذا يحدث في قطاعي الشحنة و السبين .





الشكل (12-2): نتائج القياس بواسطة تقنية STM في سلسلة من البلورات الأحادية النموذجية (Bi2212) مع تغيير مستوى التطعيم، حيث يمثل البيانيين العلويين منطقة ما بعد التطعيم ، بينما يمثل البيان الثالث من الأعلى منطقة التطعيم الأمثل ، أما البيان السفلي فيمثل منطقة ما قبل التطعيم [67]

## 12-2 مستويات التطعيم الخاصة:

يتميز كل بيان طور لأوكسيد النحاس فوق الناقلة بوجود نقطتي تطعيم مميزتين هما  $p = 0.16$  و  $0.19$ . أما بيان الطور في LSCO فهو يحتوي على نقطة مميزة إضافية عند  $p = 1/8$ . النقطة  $p = 0.16$  هي النقطة التي تكون عندها درجة الحرارة الحرجة عظمى. أما النقطة  $p = 0.19$  فهي النقطة التي تكون عندها التقلبات المغناطيسية عظمى، وبما أن التقلبات المغناطيسية هي التي تلعب دور الوسيط في تكون طور الترابط في الكبريت، فالناقلية الفائقة عند درجات الحرارة المنخفضة تكون شديدة عند هذه النقطة وليست عند النقطة  $p = 0.16$ ، حيث أنه عند النقطة  $p = 0.19$  تكون كثافة طاقة فوق الناقلة أكبر ما يمكن. أما النقطة  $p = 1/8$  فهي تميز LSCO حصرياً، حيث في بيان الطور الذي هو عادة على شكل قطع مكافئ، ينحدر البيان فجأة عند هذه النقطة. ولا توجد هذه النقطة في بيان الطور  $T_c(p)$  في بقية المواد فائقة الناقلة ذات درجات الحرارة المرتفعة.

## مراجع الفصل الثاني

- [1] M. R. Presland et al., *Physica C* **176**, 95 (1991).
- [2] P. Ghigna, G. Spinolo, G. Flor, and N. Morgante, *Phys. Rev. B* **57**, 13426 (1998).
- [3] S Hüfner, M A Hossain, A Damascelli and G A Sawatzky, *Rep. Prog. Phys.* **71**, 062501 (2008)
- [4] T. Fujii, T. Watanabe, and A. Matsuda, *Physica C* **357-360**, 173 (2001).
- [5] J. H. Schon, Ch. Kloc, and B. Batlogg, *Nature* **408**, 549 (2000).
- [6] I. A. Parinov, *Microstructure and Properties of High-Temperature Superconductors*, (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg 2007).page 38
- [7] K. Yamada, *Phys. Rev. B* **57**, 6165 (1998)
- [8] G. V. M. Williams, S. Kramer, and M. Mehring, *Phys. Rev. B* **63**, 104514 (2001).
- [9] A Mourachkine, *Journal of Superconductivity*, **17**, 269-274 (2004)
- [10] A. Marouchkine, *Supercond, Sci. Technol.* **17**, 721 (2004)
- [11] E. W. Hudson, K. M. Lang, V. Madhavan, S. H. Pan, H. Eisaki, S. Uchida, and J. C. Davis, *Nature* **411**, 920 (2001).
- [12] S. H. Pan, E. W. Hudson, K. M. Lang, H. Eisaki, S. Uchida, and J. C. Davis, *Nature* **403**, 746 (2000).
- [13] B. von Hedt, W. Lisseck. K. Westerholt, and H. Bach, *Phys. Rev. B* **49**, 9898 (1994).
- [14] J. Corson, R. Mallozzi, J. Orenstein, J. N. Eckstein, and I. Bozovic, *Nature* **398**, 221 (1999).
- [15] J.-P. Salvetat, H. Berger, A. Halbritter, G. Mihaly, D. Pavuna, and L. Forro, *Europhys. Lett.*, **52**, 584 (2000).
- [16] T. Noda, H. Eisaki, and S. Uchida, *Science* **286**, 265 (1999).
- [17] A. Mourachkine, preprint cond-mat/9812245 (1998).
- [18] G. Deutscher, *Nature* **397**, 410 (1999).
- [19] A. Mourachkine, *Europhys. Lett.* **50**, 663 (2000).
- [20] M .R Norman, D. Pines and C. Kallin , The pseudogap: friend or foe of high Tc? *Adv. Phys.***33**, 54 715 (2005)
- [21] A.J. Millis, Gaps and our understanding *Science* **9**, 314 1888 (2006)
- [22] A. Cho, High Tc: the mystery that defies solution, *Science*, **5**, 314 1072 (2006)
- [23] N. E. Hussey, *Advances in Physics*, **51**, 8, 1685-1771(2002)
- [24] Q. Li, Y. N. Tsay, M. Suenaga, R. A. Klemm G. D. Gu, and N. Koshizuka, *Phys. Rev.*

Lett. **83**, 4160 (1999).

[25] S. M. Hayden, H. A. Mook, P. Dai, T. G. Perring, and F. Doğan, *Nature* **429**, 531 (2004).

[26] C. Stock, W. J. L. Buyers, R. A. Cowley, P. S. Clegg, R. Coldea, C. D. Frost, R. Liang, D. Peets, D. Bonn, W. N. Hardy, et al., *Phys. Rev. B* **71**, 024522 (2005).

[27] V. Hinkov, S. Pailhès, P. Bourges, Y. Sidis, A. Ivanov, A. Kulakov, C. T. Lin, D. P. Chen, C. Bernhard, and B. Keimer, *Nature* **430**, 650 (2004).

[28] S.-W. Cheong, G. Aeppli, T. E. Mason, H. Mook, S. M. Hayden, P. C. Canfield, Z. Fisk, K. N. Clausen, and J. L. Martinez, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1791 (1991).

[29] G. Aeppli, T. E. Mason, S. M. Hayden, H. A. Mook, and J. Kulda, *Science* **278**, 1432 (1997).

[30] K. Yamada, C. H. Lee, K. Kurahashi, J. Wada, S. Wakimoto, S. Ueki, Y. Kimura, Y. Endoh, S. Hosoya, G. Shirane, et al., *Phys. Rev. B* **57**, 6165 (1998).

[31] N. B. Christensen, D. F. McMorrow, H. M. Rønnow, B. Lake, S. M. Hayden, G. Aeppli, T. G. Perring, M. Mangkorntong, M. Nohara, and H. Tagaki, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 147002 (2004).

[32] J. Rossat-Mignod, L. P. Regnault, C. Vettier, P. Bourges, P. Burllet, J. Bossy, J. Y. Henry, and G. Lapertot, *Physica B* **180**, 383 (1992).

[33] H. A. Mook, M. Yethiraj, G. Aeppli, T. E. Mason, and T. Armstrong, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3490 (1993).

[34] H. F. Fong, B. Keimer, D. Reznik, D. L. Milius, and I. A. Aksay, *Phys. Rev. B* **54**, 6708 (1996).

[35] P. Dai, H. A. Mook, R. D. Hunt, and F. Doğan, *Phys. Rev. B* **63**, 054525 (2001).

[36] Y. Sidis, S. Pailhès, B. Keimer, C. Ulrich, and L. P. Regnault, *Phys. Status Solidi (b)* **241**, 1204 (2004).

[37] P. Bourges, Y. Sidis, H. F. Fong, B. Keimer, L. P. Regnault, J. Bossy, A. S. Ivanov, D. L. Milius, and I. A. Aksay, in *High Temperature Superconductivity*, S. E. Barnes, J. Ashkenazi, J. L. Cohn, and F. Zuo (eds.) (American Institute of Physics, Woodbury, NY, 1999), pp. 207

[38] H. F. Fong, P. Bourges, Y. Sidis, L. P. Regnault, A. Ivanov, G. D. Gu, N. Koshizuka, and B. Keimer, *Nature* **398**, 588 (1999).

[39] J. Mesot, N. Metoki, M. Bohm, A. Hiess, and K. Kadowaki, *Physica C* **341**, 2105 (2000).

[40] H. He, Y. Sidis, P. Bourges, G. D. Gu, A. Ivanov, N. Koshizuka, B. Liang, C. T. Lin, L. P. Regnault, E. Schoenher, et al., *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1610 (2001).

- [41] H. He, P. Bourges, Y. Sidis, C. Ulrich, L. P. Regnault, S. Pailhès, N. S. Berzigiariova, N. N. Kolesnikov, and B. Keimer, *Science* **295**, 1045 (2002).
- [42] M. Eschrig and M. R. Norman, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3261 (2000).
- [43] A. Abanov, A. V. Chubukov, and J. Schmalian, *J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom.* **117**, 129 (2001).
- [44] H.-Y. Kee, S. A. Kivelson, and G. Aeppli, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 257002 (2002).
- [45] S. M. Hayden, H. A. Mook, P. Dai, T. G. Perring, and F. Doğan, *Nature* **429**, 531 (2004).
- [46] C. Stock, W. J. L. Buyers, R. A. Cowley, P. S. Clegg, R. Coldea, C. D. Frost, R. Liang, D. Peets, D. Bonn, W. N. Hardy, et al., *Phys. Rev. B* **71**, 024522 (2005).
- [47] V. Hinkov, S. Pailhès, P. Bourges, Y. Sidis, A. Ivanov, A. Kulakov, C. T. Lin, D. P. Chen, C. Bernhard, and B. Keimer, *Nature* **430**, 650 (2004).
- [48] P. Bourges, H. F. Fong, L. P. Regnault, J. Bossy, C. Vettier, D. L. Milius, I. A. Aksay, and B. Keimer, *Phys. Rev. B* **56**, 11 439 (1997).
- [49] P. Dai, H. A. Mook, S. M. Hayden, G. Aeppli, T. G. Perring, R. D. Hunt, and F. Doğan, *Science* **284**, 1344 (1999).
- [50] S. M. Hayden, G. Aeppli, T. G. Perring, H. A. Mook, and F. Doğan, *Phys. Rev. B* **54**, 6905 (1996).
- [51] D. Reznik, P. Bourges, H. F. Fong, L. P. Regnault, J. Bossy, C. Vettier, D. L. Milius, I. A. Aksay, and B. Keimer, *Phys. Rev. B* **53**, 14741 (1996).
- [52] H. A. Mook, P. Dai, S. M. Hayden, G. Aeppli, T. G. Perring, and F. Doğan, *Nature* **395**, 580 (1998).
- [53] M. Arai, T. Nishijima, Y. Endoh, T. Egami, S. Tajima, K. Tomimoto, Y. Shiohara, M. Takahashi, A. Garrett, and S. M. Bennington, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 608 (1999).
- [54] P. Bourges, Y. Sidis, H. F. Fong, L. P. Regnault, J. Bossy, A. Ivanov, and B. Keimer, *Science* **288**, 1234 (2000).
- [55] S. Pailhès, Y. Sidis, P. Bourges, V. Hinkov, A. Ivanov, C. Ulrich, L. P. Regnault, and B. Keimer, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 167001 (2004).
- [56] D. Reznik, P. Bourges, L. Pintschovius, Y. Endoh, Y. Sidis, T. Matsui, and S. Tajima, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 207003 (2004).
- [57] M. Ito, H. Harashina, Y. Yasui, M. Kanada, S. Iikubo, M. Sato, A. Kobayashi, and K. Kakurai, *J. Phys. Soc. Jpn* **71**, 265 (2002).
- [58] M. Fujita, H. Goka, K. Yamada, J. M. Tranquada, and L. P. Regnault, *Phys. Rev. B* **70**, 104517 (2004).

- [59] J. M. Tranquada, H. Woo, T. G. Perring, H. Goka, G. D. Gu, G. Xu, M. Fujita, and K. Yamada, *Nature* **429**, 534 (2004).
- [60] J. M. Tranquada, H. Woo, T. G. Perring, H. Goka, G. D. Gu, G. Xu, M. Fujita, and K. Yamada, *J. Phys. Chem. Solids* **67**, 511 (2006).
- [61] B. Lake, G. Aeppli, T. E. Mason, A. Schröder, D. F. McMorrow, K. Lefmann, M. Isshiki, M. Nohara, H. Takagi, and S. M. Hayden, *Nature* **400**, 43 (1999).
- [62] H. He, Ph. Bourges, Y. Sidis, C. Ulrich, L. P. Regnault, S. Pailhes, N. S. Berzigiarova, N., N. Kolesnikov, and B. Keimer, *Science* **295**, 1045 (2002).
- [63] A. Mourachkine, *Physica C* **341-348**, 917 (2000).
- [64] H. A. Mook and F. Dogan, preprint cond-mat/0103037 (2001).
- [65] T. Noda, H. Eisaki, and S. Uchida, *Science* **286**, 265 (1999).
- [66] X.J. Zhou, et al., One-Dimensional Electronic Structure and Suppression of d-Wave Node State in  $(\text{La}_{1.28}\text{Nd}_{0.6}\text{Sr}_{0.12})\text{CuO}_4$ . *Science* **286**, 268 (1999).
- [67] W. Buckel, R. Kleiner, *Superconductivity Fundamentals and Applications*, (WILEY-VCH Verlag, Weinheim, 2004) pp165

## الفصل الثالث

نظريات فوق الناقلية في الأكاسيد

## مقدمة:

منذ اكتشاف المواد فائقة الناقلية ذات درجات الحرارة المرتفعة ، من طرف بندوزر و مولر ، تم إحصاء عدد كبير من النظريات و النماذج التي تحاول تفسير هذه الظاهرة التي لا تستطيع نظرية BCS تفسيرها . ففي سنة 1990 اقترح Davydov بأن نظام تكون الثنائيات في درجات الحرارة المرتفعة لا يمكن أن يتم بواسطة الفونونات والتي هي تكميم للاهتزازات الشبكية ، بل يتم بين ثنائيات تسمى bisoliton والتي تتربط معا من خلال التشويه الموضعي للسلسلة (O – Cu – O – Cu) في المستويات  $\text{CuO}_2$  . كما أن أندرسون كان قد برهن في بداية التسعينات بأن عملية ترابط الطور في الناقلية الفائقة ذات درجات الحرارة المرتفعة ينبغي أن تتم عن طريق تقلبات السبين طويلة المدى. أما في سنة 1994 فقد برهن Alexandrov على وجود فرق كبير بين الموجة الداخلية لثنائيات النقل الكهربائية المتشكلة ، مع الوسيط الخاص بتكاثف (Bose – Einstein). في سنة 1995 بين Emery بأن عملية تكون الثنائيات يمكن أن تتم في درجات حرارة أعلى من  $T_c$  ، كما تم في نفس السنة إثبات وجود مسارات الشحن شبه أحادية البعد في المستويات  $\text{CuO}_2$  ، و هذا باستخدام تقنية تشتت النيوترونات . في سنة 1997 تم تقديم أول نموذج نظري للناقلية الفائقة يعتمد على وجود مسارات الشحن ويتبنى فكرة الفصل بين الشحنة الكهربائية و السبين . بالإضافة إلى العدد الكبير من النظريات التي يصعب التطرق إليها جميعا. وعلى الرغم من العدد الكبير للنظريات الموجودة والتي تختلف في المبادئ التي تعتمد عليها ، إلا أن الشيء الوحيد المشترك بينها هو عدم تمكنها من الوصول إلى أهم النتائج التجريبية بطريقة نظرية . ولهذا فقد خصصنا الفصل الثالث كله لذكر ثلاثة نظريات مهمة بسبب نتائجها المميزة وقبولها من طرف الوسط العلمي. حيث تكلمنا على نظرية بسيطة و حديثة هي النظرية الكهربائية أو نظرية Harshman والتي تم نشرها سنة 2011 وقد أعطت قيما دقيقة لدرجة الحرارة الحرجة  $T_c$  لأكثر من 31 أكسيد [11-1]. وتسمى بالنظرية الكهربائية بسبب ارتباط  $T_c$  بعلاقة بسيطة جدا مع التفاعل الكهربائي بين المستويات  $\text{CuO}_2$  وخزانات الشحنة الكهربائية المحيطة بها .

كما أننا تطرقنا إلى نظريتين مهمتين هما نظرية مناطق التكافؤ المتجاوبة RVB ونظرية ثنائيات الموجة الوحيدة (bisoliton) ، حيث تمكنت نظرية RVB من توقع منطقة فوق الناقلية في بيان الطور للأكاسيد YBCO قبل أن يتم اثباتها تجريبيا، كما أن نظرية ثنائيات الموجة الوحيدة تتفق بشكل جيد مع تجارب أخرى. في الناقلية الفائقة ذات درجات الحرارة المرتفعة ، ليست المشكلة في وجود نظريات تخص هذه الظاهرة ، ولكن المشكلة هي في العدد الكبير لهذه النظريات ، ومع ذلك فهي لا تستطيع أن تفسر جميع الملاحظات التجريبية المعروفة ، والمميزة لبعض هذه الأكاسيد فوق الناقلية . كما فعلت نظرية (BCS) بالنسبة للمواد فائقة الناقلية الاعتيادية أو المنخفضة الحرارة .



### 1-3 النظرية الكهربائية لفوق الناقلية :

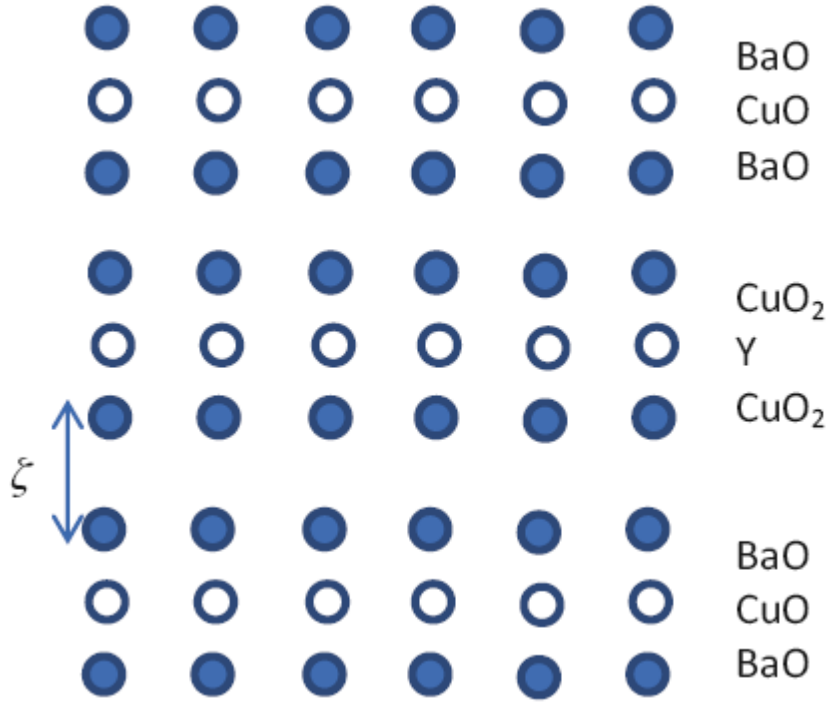
في سنة 2011 قام Harshman بنشر بحث عنوانه نظرية الناقلية الفائقة ذات  $T_c$  المرتفعة ، ولم تعطي هذه النظرية قاعدة من أجل توسيع البحث النظري فقط ، بل أعطت نتائج ممتازة مقارنة بالنتائج التجريبية . لقد أعطت هذه النظرية علاقة بين درجة الحرارة الحرجة عند نقطة التطعيم الأمثل  $T_c^{opt}$  وبنية المستويات البلورية كما يلي :

$$T_{co} = \frac{\beta}{k_B \xi l} \quad (1.3)$$

حيث  $\beta$  عبارة عن ثابت كوني ، أما  $\xi$  فهو المسافة بين المستويات الإلكترونية المتفاعلة ، بينما يمثل  $l$  القيمة المتوسطة للبعد بين الشحن المتفاعلة داخل المستوي وهو يعطى بالعلاقة التالية :

$$l = \sqrt{A} (\eta \sigma)^{-1/2} \quad (2.3)$$

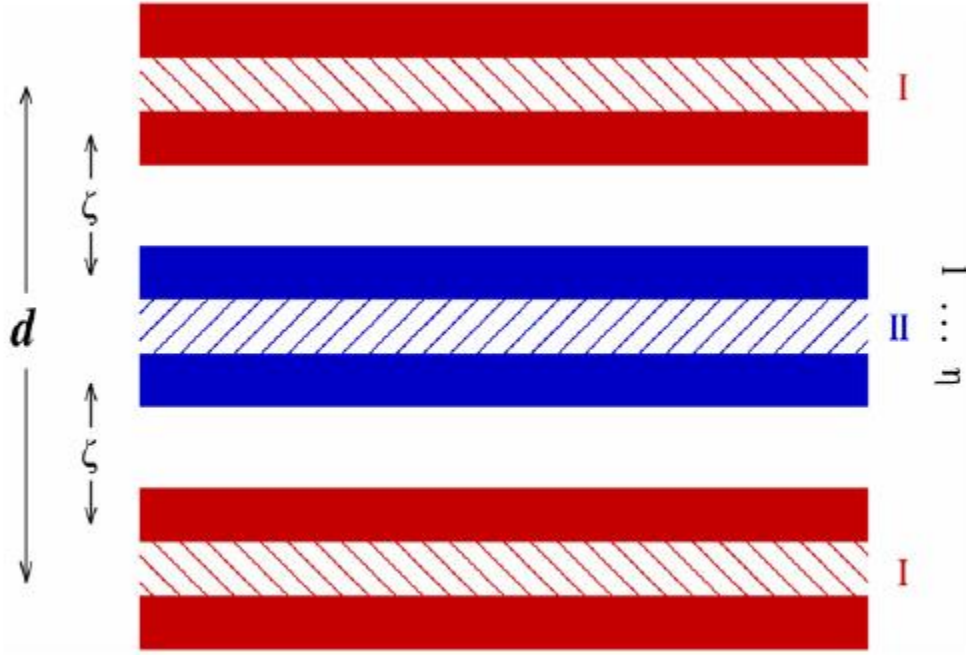
حيث يمثل  $A$  وحدة المساحة في المستوي ، بينما يمثل  $\eta$  عدد مستويات الكبريت ، أما  $\sigma$  فهي نسبة الشحنة لكل مستوي من النمط  $I$  . النظرية مبنية في الأساس على بنية المستويات فوق الناقلة من النمط  $I$  و النمط  $II$  والشكل التالي يبين ذلك بوضوح . وقد أعطت هذه النظرية درجة الحرارة  $T_c^{op}$  بدقة عالية من أجل 31 مركب فوق ناقل بدقة تصل إلى  $\pm 1.4K$  ، وفي سنة 2012 قام Harshman بتوسيع تطبيق النظرية وتعديلها لتصبح صالحة من أجل مركبات فوق ناقلة أخرى مثل  $Fe_{1+x}Se_{1-y}Te_y$  وقد أعطت نتائج دقيقة مرة أخرى. هذه النظرية تعتمد على ميكانيزم تكون أزواج من الثقوب تتبادل الكثرونات مثارة عن طريق فوتونات افتراضية . وكما نلاحظ من العلاقة (1-3) فهذه النظرية بسيطة جدا ، إلا أن التعقيد يكمن في عملية حساب الوسيط  $l$  بسبب البنية المعقدة لمركبات أكاسيد الكبريت ، ووجود عدد كبير من العوامل المتداخلة . إلا أن هارشمان اقترح طريقة فعالة من أجل حساب هذه الوسائط سوف نتطرق إليها باختصار في هذا الفصل ، مع العلم أنه لا يوجد برهان نظري لهذه الطريقة ، ولكن اتفاقها الكبير مع النتائج التجريبية المختلفة أعطاها قبول سريع في الوسط العلمي أكثر من ذلك الذي حصلت عليه بعض النظريات الموضوعية من كبار الفيزيائيين الحاصلين على جوائز نوبل . إلا أن عملية نقد هذه النظرية تدور حول عدم قدرتها على معالجة أهم المسائل التي تدور حولها الأبحاث في وقتنا الحالي ، مثل مسألة طبيعة شبه المنطقة الممنوعة ، وتطور سطح فرمي أثناء عملية التطعيم ، واختفاء مفعول النظائر عند نقطة التطعيم الأمثل ، بالإضافة إلى بيان الطور لدرجة الحرارة بدلالة نسبة التطعيم . كما أن هذه النظرية لم تشر من قريب أو بعيد إلى وجود المسارات المشحونة مع العلم أنها حقيقة تجريبية تم إثباتها بواسطة تشتت النوترونات ، وتقنيات أخرى كثيرة . ولذلك سوف نتطرق في هذا الجزء إلى المبادئ العامة لهذه النظرية ، وإلى أهم النتائج التي توصلت إليها [12-47] .



الشكل (1-3): رسم تخطيطي لبنية أكسيد فوق ناقل متعدد الطبقات ذو درجة حرارة مرتفعة [48]

### 1-1-3 الإثبات التجريبي للنظرية:

من أجل إثبات هذه النظرية في الحالة العامة من خلال النتائج التجريبية، فقد تم تطبيقها على نموذج عام مستقل عن مواضع نوعي ناقلات الشحنة، وكذلك عن الدور الذي تلعبه من أجل تكون الثنائيات وتبادل الطاقة. لقد تم مطابقة النمط الأول من الخزانات التي تحتوي الشحنة  $e_I$  مع المستويات  $\text{BaO}$  -  $\text{CuO}$  أو مع مستويات مكافئة أخرى، وقد تم إعطاء عدد المستويات داخل خزان الشحنة الرمز  $v$  أي أن  $v = 1$  من أجل الخزان الذي يحوي مستوى واحد، و  $v = 2$  في حالة الخزان الذي يحوي مستويين وهكذا. وبالمماثلة الخزان من النمط الثاني الذي يحوي على ناقلات الشحنة من النمط  $e_{II}$  وهو متطابق مع المستويات  $\text{CuO}_2$  أو مستويات مكافئة، حيث يرمز للعدد الكلي للمستويات  $\text{CuO}_2$  بالرمز  $\eta$  والشكل التالي يمثل تخطيط للبنية في الحالة العامة. تتكرر بنية هذه المادة فوق الناقله بدور فضائي  $d$ ، أما المستويات المتفاعلة في خزانات الشحنة من النمط الأول ومن النمط الثاني فهي مفصولة فيما بينها بمسافة  $\xi$ . أما المستويات المطعمة في درجة حرارة معينة  $T_C$  فهي ممثلة في الشكل رقم (2-3) على شكل خطوط مائلة موجودة بين زوج من المستويات من النمط الأول أي  $v = 2$  وكذلك النمط  $II$ ، حيث  $\eta \geq 2$ . وهذا يجعلنا أحرار في تغيير قيم هذه الوسائط حسب نوعية المواد فوق الناقله. وفرضياً فأبسط بنية فوق ناقله ذات درجات حرارة مرتفعة، سوف تكون عبارة عن مستويات الكترونية وحيدة متناوبة مع مستويات ثقوب وحيدة أيضاً، بمعنى  $\eta = v = 1$  [52-49].



الشكل (2-3): رسم تخطيطي لنموذج الطبقات المستخدم في النظرية الكهربائية [53]

في أغلب المواد فوق الناقلة ذات درجات الحرارة المرتفعة تمتلك مستويين خارجيين من النمط I أي  $v = 2$  يحويان بينهما مستويين التطعيم في الغالب. تزود خزانات الشحنة من النمط I بكثافة شحنة ثنائية البعد  $2D$  لكل مستوى خارجي قدرها  $\sigma_I/A$  حيث  $\sigma_I$  هو كسر الشحنة لملي مستوى خارجي من النمط I ، بينما تمثل  $A$  مقدار المساحة التي تحوي هذه الشحنة .

في حالة المركبات التي تملك  $\eta \geq 2$  مثل المركب  $\text{CuO}_2 - (\text{RE}) - \text{CuO}_2$  فالبنية تشكل خزان شحنة ممتد  $e_{II}$  ، مع كثافة شحنة ذات بعدين  $2D$  تساوي  $\sigma_{II}/A$  لكل مستوى خارجي. حيث يمكن للشحنة أن تنتقل إلى نهاية المستوي عند الحاجة. ففي حالة المركب  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-8}$  مثلا نجد أن النمط الأول من الخزانات يتكون من البنية  $\text{BaO} - \text{CuO} - \text{BaO}$  أي اثنين من المستويات  $\text{BaO}$  يفصل بينها مستوى تطعيم  $\text{CuO}$  ، حيث يمكن للسلاسل  $\text{CuO}$  أن تنقل الشحنة إلى المستويين الحديين  $\text{BaO}$  . وبما أنه عند التطعيم العادي للمستويات من النمط I ، يسمح أيضا للشحنة بالانتقال إلى المستويات من النوع الثاني، فسوف نعرف كثافة التفاعل فوق الناقلة بالعلاقة  $\eta\sigma_I/A$  ، ويمكن أن نعبر عن متوسط بعد التفاعل بين حاملات الشحن فوق الناقلة بالمقدار  $\ell = (\eta\sigma_I/A)^{-1/2}$  . وبهذا المعنى فينبغي أخذ  $\ell$  ليكون البعد العمودي بين الجوار الأقرب للمستويات فوق الناقلة والمستويات الوسيطة. ففي الكبريتات مثلا ، يمثل  $\ell$  المسافة على المحور-c بين  $\text{Ba}, \text{Sr}$  أو أي أيونات مكافئة وأقرب أيونات المستويات الأكسجينية . ومن أجل تقليل الارتباط بالمستويات الأيونية ، فيمكن من الناحية الشكلية المطابقة بين الأيونات الموجبة في المستويات من النمط الأول والأيونات السالبة في المستويات من النمط الثاني من أجل تعريف  $\ell$  .

### 2-1-3 كثافة الإلكترونات والثقوب:

لقد تم ملاحظة تنقل الإلكترونات بعيدا عن منطقة السلسلة  $\text{CuO}$  قبل بلوغ النقطة المثالية للتطعيم على شكل تكثف فوق ناقل قبل  $T_c$  وهذا في بلورة أحادية  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-8}$  ، وقد تم تفسير ذلك في هذه النظرية على أنه اقتراب الحالة فوق الناقلة من وضعية التوازن بين الثقوب والإلكترونات ، وهي تعرف درجة الحرارة الخاصة بالتطعيم المثالي  $T_c^0$  على أنها النقطة التي يحصل فيها التوازن وبالتالي فالمبدأ الرئيسي لهذه النظرية هو أنه من أجل مادة فوق ناقلة مطعمة بنوع واحد من الأيونات تملك خزانين

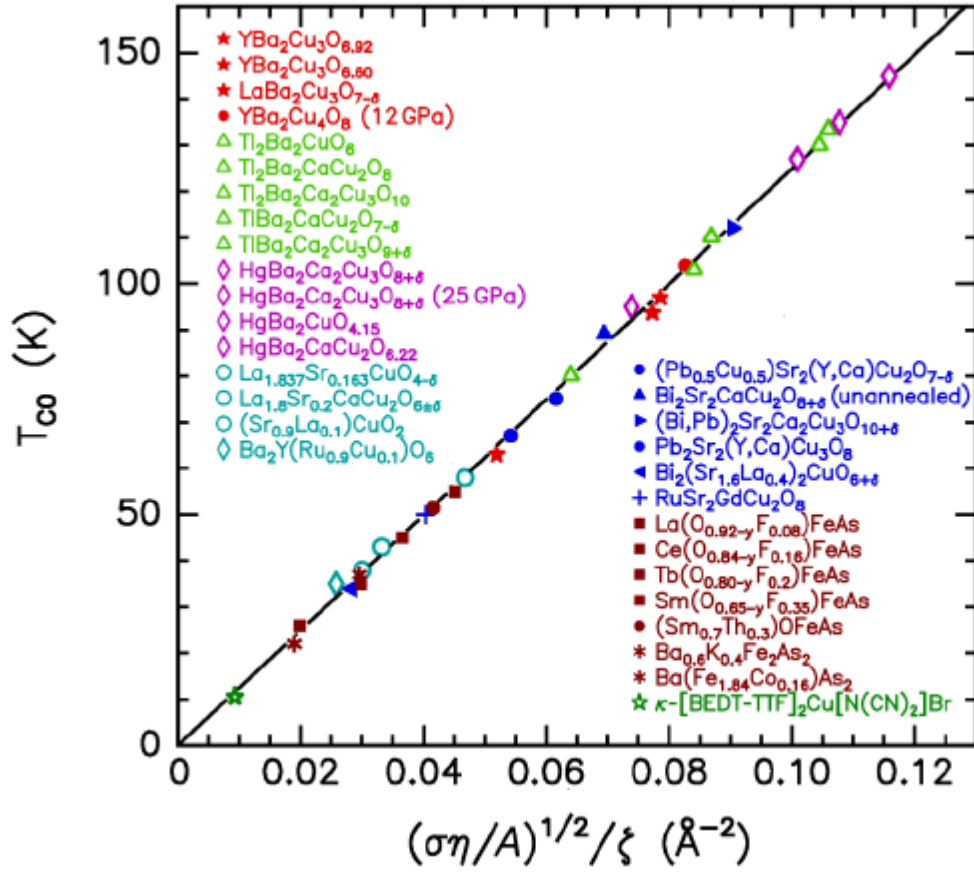
مسكونين بالالكترونات والثقوب فعند  $T_c^0$  يصبح شرط التوازن  $n_{2D}(e_I) = n_{2D}(e_{II})$  . كما أنه في هذا النظام المترابط يكون  $\xi$  أكبر من  $l$  على العموم . وهذا هو الشرط الضروري لفوق ناقلية تعتمد على التفاعل الكهربائي بين مستويات مشحونة مفصولة فضائياً ، حيث يجب أن يكون كمون التجاذب بين المستويات المشحونة أكبر من تفاعل التنافر بين الشحن داخل نفس المستوي وبالتالي  $l \leq \xi$  وهي أيضاً تمثيل لبعض الخواص الموجودة في المرجع [44] من أجل الالكترونات شديدة الإثارة والتي تتفاعل داخل مستويات نظام فوق ناقل . هذه النظرية تقترح أيضاً بأن أكبر قيمة لدرجة الحرارة الحرجة  $T_c^0$  تتحقق عندما يكون  $l = \xi$  . ان المنطق وراء المتراجحة  $l \leq \xi$  هو نفس المنطق الذي نجده في المعادلة رقم 9 في المرجع رقم [2]. مع استثناء هنا وهو أن الحالة المثالية يمكن أن تظهر من أجل  $\xi < l$  . ويعرف  $\xi$  هنا البعد بين المستويات الوسيطة والمستويات فوق الناقلية .

على اعتبار أن ظاهرة فوق الناقلية ذات  $T_c^0$  المرتفعة تظهر بالضرورة نتيجة التفاعل الكهربائي بين الالكترونات والثقوب عبر مسافة  $\xi$  ، فدرجة الحرارة الحرجة سوف تتبع القانون  $T_c^0 \propto l^{-p}\xi^{-q}$  حيث  $p, q$  عبارة عن عددين موجبين . والهدف هنا معرفة مدى صحة هذه المعادلات بالمقارنة مع النتائج التجريبية من خلال تأكيد ضرورة معرفة المقدارين  $l$  و  $\xi$  من أجل اثبات صحة هذا النموذج كميكانيزم لتكون الثنائيات فوق الناقلية .

بعد التفاعل  $\xi$  يعرف عادة ليكون البعد على طول المحور-  $c$  الذي يفصل المستويين المتجاورين جواراً أقرب وهما المستوى الوسيط والمستوى فوق الناقل ، ففي حالة مركبات الكبريتات تكون مستويات التفاعل الخارجية من النمط I تحتوي على مهابط مثل  $Ba^{+2}, Sr^{+2}, La^{+3}$  . أما النمط الثاني II أي مستويات المصاعد فهي تحتوي على المستويات  $CuO_2$  ، ويقاس  $\xi$  نمطياً بالمسافة التي تفصل الأيونات الخارجية في المستويات من النمط I ومستويات الكبريتات الأكسجينية . وقيمة  $\xi$  معروفة بشكل جيد من خلال دراسة أشعة-x أو من خلال قياسات تشتت النيوترونات. أما تحديد  $l$  فيعني تحديد قيمة كل من  $\sigma_I$  و  $A$  ، فمع أنه من الصعب إيجاد قيم تجريبية مضبوطة للمقدار  $\sigma_I$  في معظم المواد فائقة الناقلية ذات  $T_c^0$  المرتفعة ، فهذه النظرية تقترح طرق من أجل إيجادها . فعلى أساس أن العلاقة  $n_{2D}(e_I) = n_{2D}(e_{II})$  محققة عند  $T_c^0$  فيمكن أن نكتب مايلي :

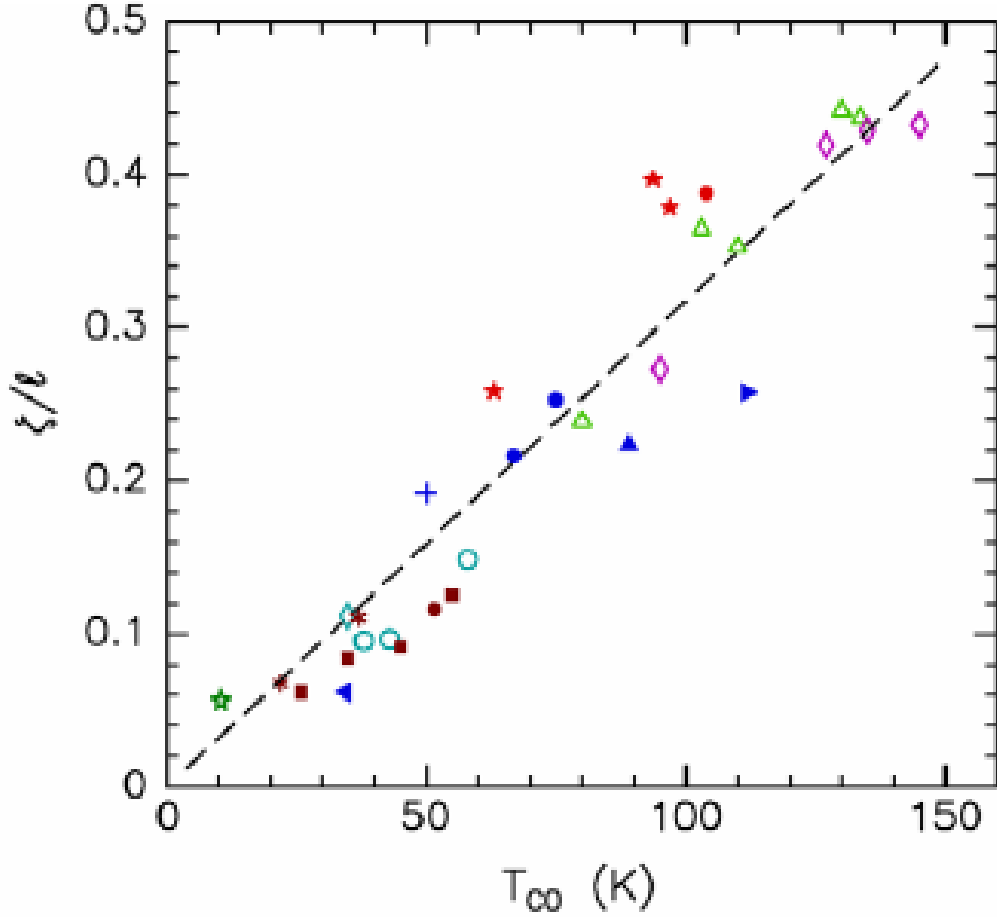
$$n_{2D} = v\sigma_I/A = \eta\sigma_{II}/A \quad (3.3)$$

مع ملاحظة أنه عندما  $v = \eta$  فسوف يكون  $\sigma_{II} = \sigma_I$  ، فمن المناسب التخلي عن الدليل وكتابة  $\sigma$  فقط مكان  $\sigma_I$  في بقية الحسابات. [54-82]



الشكل (3-3): رسم تخطيطي لدرجة الحرارة  $T_c^0$  بدلالة  $(\xi\ell)^{-1}$  من أجل 31 أكسيد [53]

فمن أجل تقدير قيمة  $\sigma$  في الطور 90K للمركب فوق الناقل  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$  والتي هي في المجال  $T_c^0 = 0.21 - 0.25$  كما في المرجع [56]. ففي حالة المركب  $YBa_2Cu_3O_{6.92}$  [55] تكون قيمة  $T_c^0 = 93.7K$  يمكننا تحديد قيمة  $\sigma$  باعتبار مقدار الأكسجين  $x$  الذي يزيد عن القيمة الصغرى  $x_0 = 6.35$  [59] المطلوبة من أجل الناقلية الفائقة. وبالتالي فمحتويات الأكسجين الكلية المرافقة لفوق الناقلية هي  $0.57 = (6.92 - 6.35)$  وبإعطاء التكافؤ  $-2$  لأيونات الأكسجين، فالعدد الكلي للالكترونات المتاحة من أجل تطعيم البنية فوق الناقل هو  $2 \times 0.57 = 1.14$ . مع العلم أنه في المركب  $YBa_2Cu_3O_{6.92}$  توجد خمسة مستويات ناقلة تحتوي على الأكسجين وهي اثنين من الطبقات  $CuO_2$ ، اثنين من الطبقات  $BaO$  وطبقة واحدة  $CuO$ . بمعنى هنالك ثلاثة تخص بنية النمط الأول واثنين يخصان النمط الثاني. وباستخدام مبدأ النظرية وهو أن التطعيم يحدث في كلا النمطين من المستويات، فالشحنة المخصصة لكل مستوي في المركب فوق الناقل  $YBa_2Cu_3O_{6.92}$  تساوي  $1.14/5 = 0.228$  وسوف نرمز لها بالرمز  $\sigma_0$  وسوف نعتبرها مرجع من أجل مقارنة بقية المواد فوق الناقل دات  $T_c^0$  المرتفعة [102-83].



الشكل (4-3): رسم تخطيطي لدرجة الحرارة  $T_c^0$  بدلالة  $(\xi/l)$  من أجل 31 أكسيد [53]

عند قيامنا بقسمة الثابت  $\beta$  في القانون على مربع الشحنة الكهربائية  $e^2$  المرافقة لكمون كهربائي يؤثر على بعد  $\xi$  نجد أن القيمة التي نحصل عليها هي  $\Lambda = 0.00747A^0$  وبالتالي فمقياس الطاقة يوضع من طرف طاقة كولون المعدلة بواسطة الثابت  $\Lambda/l$ . ومنه يصبح القانون بالشكل التالي :

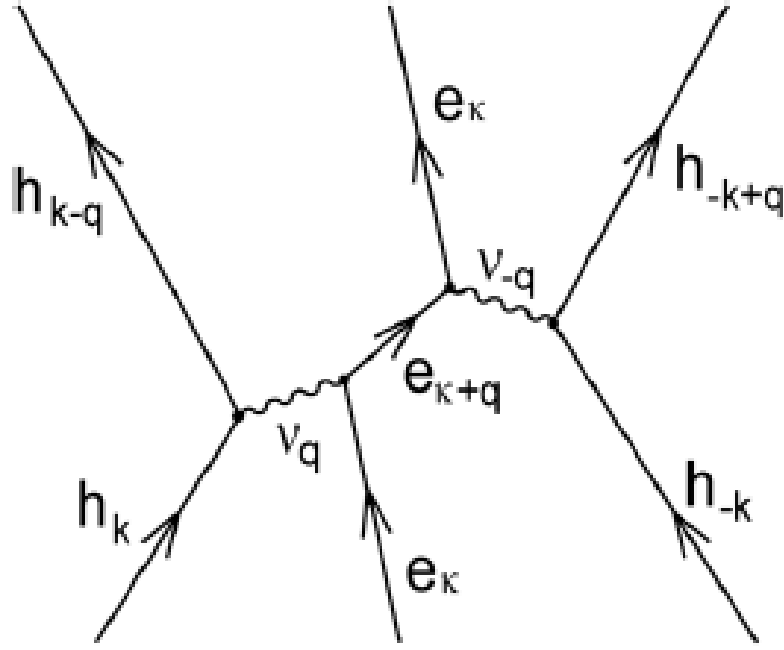
$$K_B T_{c0} = e^2 \Lambda / l \xi \quad (4.3)$$

3-1-3 تكون الثنائيات من خلال تشتت كومبتون:

إن عدم ظهور الكتلة الفعالة في المعادلة رقم (4-3) يمكن فهمه من خلال سلم الطاقة لتكون الثنائيات. فمع ملاحظة أن الثابت  $\Lambda$  في المعادلة رقم (4-3) يساوي بالتقريب ضعف طول موجة كومبتون المختزلة أي :

$$\bar{\lambda}_e l = \hbar / m_0 c \approx 0.00386$$

$$K_B T_{c0} \approx 2 \bar{\lambda}_e e^2 / \xi l \quad (5.3)$$



الشكل (5-3) : رسم تخطيطي لتفسير النظرية الكهربائية لعملية تكون الثنائيات ، حيث ترمز لكميات الحركة  $(h, e, v)$  الى الثقوب ، الالكترونات و الفوتونات بينما  $(k, \kappa, q)$  هي كميات الحركة على الترتيب [53]

هذه المعادلة تحتوي فقط على الكتلة السكونية للإلكترون وبالتالي فهذا يؤكد الاستقلالية عن شريط الطاقة المعتاد أي الكتلة الفعالة ، بالإضافة إلى هذا فعند التأكد من أن التفاعل الكهربائي هو المسؤول عن ظهور فوق الناقلية ذات درجات الحرارة المرتفعة ، فظهور  $\bar{\lambda}_e$  في هذه العبارة النظرية الخاصة بدرجة الحرارة  $T_{c0}$  يؤدي الى اقتراح وجود دور يلعبه فوتون افتراضي في هذا التفاعل ، وهذا ما يظهره الشكل (5-3) والذي يظهر فيه كل من الإثارة الالكترونية الجماعية و الفوتون الافتراضي المتبادل أثناء عملية التفاعل. حيث يتفاعل الجسيمين المكونين للثنائية  $h_k$  عند  $h_{-k}$  بطريقة غير مباشرة عن طريق إنشاء وإخفاء فوتونات افتراضية ذات تواترات وأشعة موجة  $v_q$  و  $v_{-q}$  على الترتيب ، والتي تحول الحالة الالكترونية  $e_k$  الى حالة افتراضية  $e_{k+q}$  قبل أن تعود الى الحالة  $e_k$  . [105-103]

### 2-3 نظرية مناطق التكافؤ المتجاوبة :

إن نظرية مناطق التكافؤ المتجاوبة resonating valence bond والتي يرمز لها اختصاراً بالرمز RVB ويرجع فضل وجودها إلى الروابط من النمط  $p\pi$  الموجودة في مركبات كيميائية مثل البنزن و النفثالين... الخ وهذا من طرف Pauling [106] ، وقد استعملها أيضاً في تفسير خواص بعض أشباه المعادن مثل الغرافيت وبعض المعادن. وفي سنة 1973 اقترح Anderson [107] أن المكان الطبيعي لمناطق التكافؤ المتجاوبة أو RVB هي عوازل - Mott ذات السبين الذي يساوي  $1/2$  وهذا بسبب وجود عدد كبير من التقلبات الكوانتية، حيث أن الأبعاد الأقل و التخامد الهندسي يمكن أن يساعد على وجود هذه التقلبات الكوانتية. من الملفت للانتباه بأن مقالة أندرسون هي كنوع من التأثير بسبب تعدي استعمال Pauling لفكرة RVB في المعادن، على الرغم من تكلفة النتائج التجريبية المبرهنة مثل سطح فرمي . ومع اكتشاف فوق الناقلية في  $La_{2-x}Ba_xCuO_4$  أدرك أندرسون أن نظرية RVB متخصصة جداً، بمعنى إمكانية تحويلها إلى نظرية خاصة بالناقلية الفائقة أثناء عملية التطعيم doping . و أثناء اهتمامه بهذه الفكرة أدرك أيضاً أن طور المعدن الطبيعي الذي تدخل فيه المادة فوق الناقلية بعد بلوغ حد معين من التطعيم، هو أيضاً طور خاص جداً يختلف عن المعادن العادية المعروفة والتي توصف بنظرية سائل-فرمي. ولهذا ينبغي تطوير نظرية RVB إلى مستوى تستطيع فيه وصف حالة جديدة لا يمكن وصفها بسائل-فرمي بالإضافة إلى إمكانية وصف اختلال حالة التناظر في درجات الحرارة المنخفضة . في هذا لجزئ سوف نركز على هذه النظرية من وجهة نظر الناقلية الفائقة فقط ، وبما أن عازل Mott هو الموقع الذي تحدث فيه هذه الظاهرة فمن الأفضل أن نبدأ بالتكلم عنه أولاً.

#### 2-3-1 العوازل ذات الإلكترونات شديدة الارتباط :

إن المركب  $La_2CuO_4$  هو عبارة عن بيروفسكيت طبقي، حيث تشكل الزوايا المشاركة لثمانية الوجوه  $CuO_6$  بنية ثنائية البعد عبارة عن شبكة مربعة [106] . هذه الطبقات مكدسة على طول المحاور -c ، مع تخلل الذرات La . ان البنية المستوية والكيمياء الكوانتية هما السبب الرئيسي للاستطالة الحاصلة في ثمانيات الوجوه، حيث يتشوه شكله ويستطيل على طول المحور -c ، وهذا بدلا من أن يكون مفعول Jahn - Teller كما جرت العادة . إن التكافؤ الشكلي لهذا المركب هو  $La_2^{3+}Cu^{2+}O_4^{-2}$  حيث يمتلك كل من  $La^{+3}$  و  $O^{2-}$  طبقات الكترونية ممتلئة، بينما يمتلك  $Cu^{2+}$  طبقة الكترونية غير ممتلئة  $3d^9$  . كما أنه بفعل الحقل البلوري و التكافؤ التساهمي يتم عزل أحد مدارات Wanier حول ذرة النحاس Cu حيث يمتلك هذا المدار التناظر  $3d_{x^2-y^2}$  ، هذا التناظر يتم تعديله عن طريق عملية التهجين التي تتم بين المدارات  $3d_{x^2-y^2}$  للنحاس والمدارات  $2p$  التي تعود لذرات الأكسجين الأربعة المحيطة والتي تمثل الجوار الأقرب بالنسبة لذرة النحاس .

تتشابك مدارات Wanier مشكلة شريط ضيق لطاقة الارتباط . حيث أن عناصر مصفوفة الانتقال أو القفز بين المواقع  $t_{\perp}$  يكون صغير أي  $(t/t_{\perp} \ll 1)$  على طول المحور -c . مما يسبب الانعزال الإلكتروني للطبقات  $CuO_2$  على طول المحور -c ولذلك فالجزء المتعلق بالطاقة الحركية يكتب بالشكل:

$$H_0 = - \sum_{ij} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + h. c. = \sum_k \epsilon_k c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} \quad (6.3)$$

الأدلة ترمز إلى مدارات وانير ، بينما يرمز  $k$  إلى أشعة الموجة ثنائية البعد المعرفة داخل منطقة بريلوان الأولى . يؤدي نموذج الارتباط الضيق ثنائي البعد إلى شريط ضيق ذو عرض يساوي تقريبا  $3eV$  وهو يستطيع وصف أكاسيد المعادن الانتقالية من النمط  $3d$  . ان شريط الطاقة الناتج نصف ممتلئاً بالالكترونات ، ولذلك كان من المتوقع أن يكون هذا الناقل معدن ، لكن في الحقيقة  $La_2CuO_4$  عبارة عن عازل وقد شكل بذلك تحد لنظرية أسرطة الطاقة البسيطة. إن خاصية العازلية ناتجة من كون عملية تعبئة الالكترونات تناسبية وكمون التناظر  $U$  من أجل موقع واحد هو أكبر من عرض شريط الطاقة وهذا يمنع تكون دوال Bloch وكذلك يمنع تكون سطح فرمي . وبكلام آخر يمكن القول انه من المفضل من ناحية الطاقة أن يمتلك كل موقع إلكترون واحد فقط. وهذا التوضع ينسب إلى Mott حيث يخسر كل إلكترون



طاقة حركية أو طاقة عدم التوضع والتي تساوي بالتقريب عرض شريط الطاقة ، ولكنه في المقابل يربح طاقة تتناقص U لكل موقع ، وهذا يحدث عندما يتفادى اللقاءات القريبة مثل الحالة التي تكون مضاعفة الانشغال singlet . إن فيزياء هذا النمط من العوازل ممثلة بشكل جيد بواسطة نموذج Hubbard حيث تتم كتابة الهاملتوني بالشكل التالي :

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h. c. + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (7.3)$$

يشكل هذا النموذج الذي يبدو بسيط جدا من النظرة الأولى أغنى نموذج من حيث التطبيقات الفيزيائية له. بالإضافة إلى تحد كبير من وجهة نظر عملية تكميم الأجسام المتعددة. لقد تم حل هذه المسألة في حالة البعد الواحد [108] حيث تم إيجاد دوال الموجة الذاتية والقيم الخاصة للطاقة بواسطة طريقة Bethe . مع أنه لا يوجد حل مضبوط في حالة بعدين إلا انه يوجد وصف كفي وفي بعض الأحيان كمي مقبولين بشكل جيد ، يرجع الفضل فيهما إلى نظرية RVB الخاصة بالكبريات:

2-2-3 حالات السبين في العوازل ذات الإلكترونات شديدة الارتباط :  
 إن هذا النمط من العوازل يختلف عن العوازل المعتادة ، حيث تمتلك طاقة منخفضة بالإضافة إلى عدم وجود منطقة ممنوعة لنقل إثارة السبينات ، بينما توجد هناك منطقة ممنوعة محدودة لنقل الشحنة الإلكترونية . وهذه هي الحالة المسماة بعدم الترابط بين السبين والشحنة ، أي أن إثارة السبين سهلة بينما عملية إثارة الشحنة صعبة. وبالتالي سوف يمتلك السبين انتظام بعيد المدى . إن الوضعية التي نهتم بها هنا والتي تخص حالات RVB هو طور السبين السائل والذي يظهر من التقلبات الكمية القوية . من المعتاد أن تكون البداية من أجل القيم الكبيرة  $t \gg U$  ثم اشتقاق لهاملتوني الفعال للسبين كعملية نشر في الوسيط  $t/U$  . عند اقترابنا من الحدود الذرية ، أي لما  $t = 0$  ، سوف يكون هنالك مجموعة كبيرة من الحالات الأساسية المنحلة لنموذج هيوبرارد عند نصف الامتلاء يعطى بالعلاقة التالية :

$$|\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N \rangle \sim \prod_{i=1}^N c_{i\sigma_i}^\dagger |0 \rangle \quad (8.3)$$

في هذه الحالات، يكون كل موقع مشغول بالإلكترون وحيد ويمتلك سبين متعلق به. وبالتالي فالانحلال الكلي للسبين هو  $2^N$  . من خلال نظرية الاضطرابات من الدرجة الثانية يمكن اشتقاق هاملتوني يستطيع الغاء الانحلال  $2^N$  . فمن أجل زوج معطى من المواقع المتجاورة ، توجد أربعة من الدوال الموجية الأساسية ، بحيث عند إدخال  $t$  بطريقة تقريبية سوف يكون هنالك انتقال افتراضي أو عملية مزج للحالات الفردية singlet مع ظهور حالة مثارة انتقالية كما يلي :

$$\frac{|\uparrow, \downarrow \rangle - |\downarrow, \uparrow \rangle}{\sqrt{2}} \rightarrow \frac{|\uparrow\downarrow, 0 \rangle - |0, \downarrow\uparrow \rangle}{\sqrt{2}} \rightarrow \frac{|\uparrow, \downarrow \rangle - |\downarrow, \uparrow \rangle}{\sqrt{2}} \quad (9.3)$$

والنتيجة المهمة هو عملية ربح في الطاقة قدرها  $J = 4t^2/U$  ، من أجل الحالة الأرضية الانفرادية المرتبطة. مع العلم أن الحالات الثلاثية لا يمكنها أن تخضع لعملية انتقالية افتراضية بسبب منع مبدأ الاستبعاد لبأولي لهذه العملية. وبالتالي فالحالات الثلاثية لا يمكنها أن تربح طاقة من خلال الطريقة الحركية. وبالتالي فالطرق المختلفة التي تتفاعل من خلالها الحالات المرتبطة الانفرادية، والحالات المرتبطة الثلاثية تظهر على شكل هاملتوني فعال أو ما يسمى بهاملتوني هايزنبرغ الضد- مغناطيسي ، والذي يكون معرف في فضاء هيلبرت بعده  $2^N$  حيث تملك فيها درجة حرية السبين طاقة أقل في هذا النمط من العوازل .

قبل مجيء نظرية RVB لم تكن هناك طرق كمية خاصة لعملية الترابط بالنسبة للحالات السبينية غير المنتظمة الموجودة في عازل-Mott ، والتي تكون مترافقة عادة مع الأطوار مرتفعة درجة الحرارة ، حيث تقوم التقلبات الترموديناميكية بتدمير الانتظام المغناطيسي بعيد المدى . لقد اقترح أندرسون سنة 1971 إمكانية وجود حقيقي لحالة سبين غير منتظمة و غير منحلة في درجات الحرارة المنخفضة ، حيث يمتلك سائل السبين الكمي هذا خصائص ترابط كمية متميزة. وكبداية فقد اقترح حالة RVB بسيطة

من أجل تمثيل الحالة الكمية لسائل السبين، وقد طبق ذلك من أجل دراسة الحالة الأرضية لشبكة مثلثة ثنائية البعد ذات مغناطيسية حديدية مضادة وسبين- نصف وفق تقاعل هايزنبرغ. وقد كان هذا تعميم صريح لحالة RVB الخاصة بباولينغ، وهذا من أجل الشبكة المثلثية. إن حدس أندرسون قاده إلى اعتبار أن الحالة الأرضية لسائل السبين ينبغي أن تكون في الحالة العامة غير منحلة وهذا سوف يؤدي إلى أعلى طاقة تجاوب. ومن أجل ربط هذا مع الكبريات، فقد اقترح Kivelson [109] نموذج بسيط لشبكة مربعة ذات حالات ارتباط RVB قصيرة المدى، وسرعان ما أتبعه أندرسون باقتراح من أجل الكبريات حيث اعتبر:

$$|RVB\rangle \equiv \sum_C |C\rangle \quad (10.3)$$

حيث أن  $C$  تعني هنا مسح جميع الثنائيات ذات الجوار الأقرب في الشبكة المربعة بحيث يكون كل سبين عبارة عن جزء من ثنائية كما في الشكل (3-6). هنالك عدد آسي كبير من هذه التشكيلات، حيث سوف نعطي وزن متكافئ لهذه التشكيلات ونقوم بالجمع عليهم كلهم مع أطوار متطابقة. عند القيام بتحديد دالة السبين للشبكة المربعة والتي تملك بنية ذات تقسيمات ثنائية سوف نتبع اصطلاح الإشارة الذي يحقق قاعدة Marshall. الرابطة المكونة من الجوار الأقرب  $\langle ij \rangle$  تمتلك دالة موجة  $\frac{1}{2}(\alpha_i \beta_j - \beta_j \alpha_i)$  ويجب أن نضمن بأن  $i$  و  $j$  ينتميان إلى الشبكتين الجزئيتين  $A$  و  $B$  على الترتيب. الحالة المكتوبة في الأعلى ليست جيدة من أجل الشبكة المربعة المكونة من سبين-  $\frac{1}{2}$  خاضع لنموذج هايزنبرغ ذو المغناطيسية الحديدية المضادة، كما أن الحالات RVB تمثل نموذج فريد لدوال الموجة بالنسبة لنظرية الأجسام المتعددة. وهي لا يمكن وصفها بمحدد سلاتر البسيط. وبمعنى تقني نقول بأنها متشابكة أو متداخلة بقوة، وهذا يجعلنا نعتقد بأنها تنتمي إلى نمط من الدوال يدعى دوال Jastrow هذه الحالات تشتمل على ترابطات لأزواج انفرادية من البداية، بدلا من عملية تعبئة حالات الجسيمات المنفردة. لقد تم اكتشاف دالة موجة RVB من طرف Liang [110]. ودالة الموجة تعطى بالعلاقة التالية:

$$|RVB, \alpha\rangle \equiv \sum_C \left[ \prod_{ij(c)} \frac{1}{R_{ij}^\alpha} \right] |C\rangle \quad (11.3)$$

وهذه هي عبارة دالة الموجة RVB بعيدة المدى والتي تحتوي ترابطات انفرادية والتي تصل بين موقعين كفيين، ينتميان إلى شبكتين جزئيتين مختلفتين. إن وزن الروابط الأطول تم اختزاله كدالة في بعده وفق نمط القانون الآسي. ولهذا فالتشكيلة  $C$ ، والتي تحتوي على  $N/2$  تمتلك وزن هو عبارة عن جداء  $1/R_{ij}^\alpha$  مأخوذ على جميع الثنائيات الموجودة في التشكيلة  $C$ . حيث يمثل  $R_{ij}$  البعد بين الموقعين  $i$  و  $j$ . لقد أظهر Liang عن طريق دراسة عددية شاملة كما في الشكل (3-6) بأن دالة الموجة RVB المعطاة في الأعلى، تظهر عملية عشوائية لانكسار التناظر أي وجود شبكتين تحتيتين منتزمتين بشكل المغناطيسية الحديدية المضادة. وهذا عندما يكون  $0 < \alpha < 6$ . يتلاشى وسيط الانتظام عندما تقترب من القيمة الحرجة  $\alpha \approx 6.0$  وعندما تقترب  $\alpha$  من هذه القيمة لا يتبقى هنالك انتظام بعيد المدى وسوف تستطيع أن تصف الانتظام قصير المدى للمغناطيسية الحديدية المضادة. والشيء الملفت للانتباه هو أن طاقة الإثارة لهذه الحالة لشبكة مربعة ثنائية البعد، تمتلك قيمة صغيرة للطاقة عند  $\alpha \approx 4.0$  تساوي تقريبا  $E \approx -0.544$  لكل سبين وهذا في وحدات  $J$ . وعندما تقع  $\alpha$  بشكل جيد في الحالة الغير منتظمة، فالطاقة  $E \approx -0.5437$ ، مع واحد بالمائة من الطاقة المضبوطة للحالة الأرضية. وهذا يظهر أن ترابط الحالات الانفرادية هو الجزء الأصلي من الحالة الأرضية بينما انتظام المغناطيسية الحديدية المضادة هو مجرد تغيير عابر أو دخيل. ولهذا الأسباب فإن حالة انتظام المغناطيسية الحديدية المضادة في 2D هي غير مستقرة وحساسة جدا لعملية التطعيم التي تتم في عوازل- Mott بالإضافة إلى

الاضطرابات الأخرى . وبالتالي فهي ليست حالة مرجعية من أجل دراسة  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  . وهذا الجانب لم يتم ضبطه بشكل جيد في المراجع العلمية .

### 3-2-3 تقريب الحقل المتوسط:

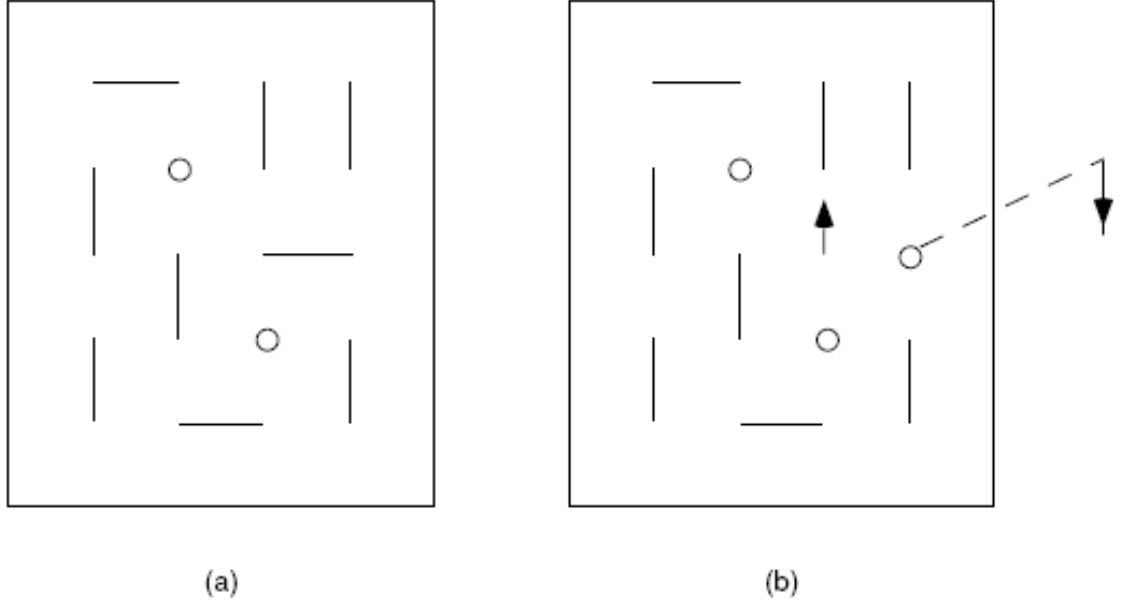
كيف يمكننا أن نجد دوال الحالة الخاصة بمناطق التكافؤ المتجاوبة في إطار نظرية تنظيم متعدد الجسيمات . هنالك نظرية غير اعتيادية للأجسام المتعددة تم صياغتها من طرف Baskaran وآخرين يرمز لها اختصارا بالرمز BZA [111]. هذا التقريب معني بتوسيع فضاء هيلبرت للمسألة . حيث يستعمل من أجل ذلك طرق مثل نظرية موجة السبين الخاصة ب-Holstein ، حيث يتم توسيع فضاء هيلبرت لسبين معطى ، فبدلا من أن يكون البعد يساوي  $2S + 1$  ، سوف يصبح فضاء هيلبرت ذو أبعاد لانهائية مكون من الهزازات التوافقية . إن فضاء هيلبرت الموسع بهذه الطريقة هو نمط طبيعي وهو يمكننا من رؤية حالة السبين السائل ، وهذه الفكرة أصبحت ملائمة من اجل دراسة الحالات الكوانتية العامة لسائل السبين . أحد الأمثلة الرائعة هو الحل الدقيق لنموذج Kitaev [112] حيث تبين أن نظرية الحقل المتوسط ل-RVB تعطي نتائج مضبوطة وهذا من أجل نفس النموذج [113] . يمكن إعادة كتابة نموذج هايزنبرغ على شكل حدود للمؤثرات الالكترونية كما يلي :

$$H_s = J \sum_{\langle ij \rangle} \left( S_i S_j - \frac{1}{4} \right) = -J \sum_{\langle ij \rangle} b_{ij}^+ b_{ij} \quad (12.3)$$

باستخدام العلاقة ،  $S_i = \sum_{\alpha\beta} C_{i\alpha}^+ \vec{\tau}_{\alpha\beta} C_{i\beta}$  ، حيث يمثل  $\vec{\tau}$  مؤثر السبين لباولي أما C فهي المؤثرات الالكترونية والتي تحمل العزم المغناطيسي الفيزيائي . ولذلك فالمقدار  $b_{ij}^+ \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{i\uparrow}^+ c_{j\downarrow}^+ - c_{i\downarrow}^+ c_{j\uparrow}^+)$  يمثل الرابطة المنفردة وفي حالتنا هذه يمثل المؤثر المحايد الخاص بثنائية كوبر - Cooper . يملك هاملتوني هايزنبرغ معنى بسيط جدا ، حيث أن الارتباط سبين-سبين يفضل الروابط المفردة أو ما يسمى singlets . ان الخاصية المهمة لمسألة البلورة تظهر من خلال حقيقة كون مؤثرات العد الخاصة بالروابط المنفردة لا تتبادل إذا كانت تتشارك نفس الموقع . في المرجع [114] نجد علاقة تبادل مفيدة جدا تعطى بالعلاقة التالية :

$$[b_{ij}^+ b_{ij}, b_{jk}^+ b_{jk}] = S_i \cdot (S_j \times S_k) \quad (13.3)$$

هذه العبارة تعرف تيار سبين مرتبط بعدم تموضع الثنائية المنفردة . دعنا ننظر في طبيعة المسألة عند إدخال فضاء هيلبرت الموسع الذي بعده  $4^N$  ، وهذا كبديل لفضاء السبين الذي بعده  $2^N$  . يمتلك الهاملتوني بعض خواص التناظر المحلية في فضاء هيلبرت الموسع . الشيء الملفت للانتباه هو أن بنية الهاملتوني على شكل حدود لمتغير الجسيمات المحجوزة مناسب جدا لوصف الحالة الكمية لسائل السبين . لا يملك مؤثر السبينون تركيبية بسيطة من الحدود المشكلة من متغيرات السبين الأصلية ، بينما تصبح هذه المؤثرات بسيطة جدا عندما تبنى من المؤثرات الالكترونية . بالرغم أن تركيبية الهاملتوني المكتوب في فضاء هيلبرت الموسع مغري بالنسبة لفيزياء RVB ولكنه لا يزال غير قابل للحل في التمثيل الالكتروني . إنها مسألة تفاعل الكتروني مع جذب الجوار الأقرب في قناة السبين المنفردة في شريط طاقة نصف ممثلي ذو عرض يساوي تقريبا الصفر وهذا يعني غياب الطاقة الحركية . [116,115]



الشكل (3-6): مخطط يظهر أحد الأنماط الممكنة لتشكيلات الروابط القصيرة المدى في الحالة RVB [117].

الطريقة العملية من أجل الحصول على دوال ذاتية تقريبية في فضاء هيلبرت الفيزيائي ، هو القيام بعملية إسقاط الحلول التي نجدها بواسطة الحقل المتوسط على فضاء هيلبرت الفيزيائي . والنتيجة هي دوال موجة تقريبية بالنسبة للمسألة الأصلية. سوف نقوم بعملية مشابهة لمسألتنا مع الهاملتوني الخاص بنظرية BCS وسوف نقوم بالحل بشكل تقريبي . في الفضاء  $k$ - يكتب الحد الممثل لتشتت ثنائية كوبر الشكل التالي:

$$H_{\text{pair}} = -J \sum_{k, k'} \gamma(k - k') C_{-k'\downarrow}^+ C_{k'\uparrow}^+ C_{k\uparrow} C_{-k\downarrow} \quad (14.3)$$

حيث يمتلك كمون الثنائية الصيغة  $\gamma(k - k') \sim [\cos(k_x - k'_x) + \cos(k_y - k'_y)]$  . وينبغي الإشارة الى أن كمون الثنائية ، سوف يكون جاذب من أجل الكميات الصغيرة المتبادلة لكمية الحركة أي  $(k - k') \sim 0$  ، ويغير اشارته ليصبح كمون تنافر في حالة القيم الكبيرة لكميات الحركة المتبادلة أي  $(\pi, \pi) \sim$  ، مما يدل بشكل واضح على أن حل الحقل المتوسط في الطاقة المنخفضة عبارة على الموجة  $d_{x^2-y^2}$  بدلا من امتداد الموجة- s كحل منخفض الطاقة بطريقة الحقل المتوسط . [118-120].

الحسابات التي استعملت طريقة التجزئة Bogoliubov – HF تم الحصول على الوسائط المترابطة :

$$\Delta \equiv \sum_k (\cos k_x + \cos k_y) \langle C_{k\uparrow}^+ C_{-k\downarrow}^+ \rangle \quad (15.3)$$

$$p \equiv \sum_{k, \sigma} (\cos k_x + \cos k_y) \langle C_{k\sigma}^+ C_{k\sigma} \rangle \quad (16.3)$$

حيث يمثل الحد  $\Delta$  ما يعرف بالسعة الشاذة لفق الناقلية ، أما الحد  $p$  هو غير اعتيادي نوعا ما ، وهو عبارة عن الطاقة الحركية أو حد القفز ناتج عن عملية التبادل المتعدية superexchange . ان حدود تجزئة هارترى-فوك الغير اعتيادية هذه سوف تلعب دورا حاسما فيما بعد [115, 118]. بعد القيام بتحويل Bogoliubov يمكننا أن نجد هاملتوني اشباه الجسيمات من أجل إثارة السبينون التي لا تحتوي على منطقة ممنوعة كما يلي:

$$H_{mF} \sim J \sum_{k\alpha} |\cos k_x + \cos k_y| \alpha_{k\sigma}^+ \alpha_{k\sigma} \quad (17.3)$$

والشيء الملفت للانتباه هنا هو أن غياب الطاقة الحركية على سطح فرمي من أجل spinons تعطى بالعلاقة التالية  $|\cos k_x + \cos k_y| = 0$ . بالإضافة الى أن ، عملية التضاعف الشاذة تؤدي إلى نتائج ملفتة للانتباه من أجل عملية انشغال الحالة الأرضية:

$$n_{k\sigma} \equiv \langle C_{k\sigma}^+ C_{k\sigma} \rangle = 1 \quad (18.3)$$

فبالرغم امتلاك الاثرات المحايدة للفرميونات لشبه-سطح فرمي ، فلا توجد تقطعات في فضاء كمية الحركة للالكترونات المشكلة له . و بهذا المعنى فالحالة الأرضية لسائل السبين بالنسبة لعازل-Mott هي بعيدة عن أي حالة قياسية لسائل فرمي . الحالة الأرضية المقترحة في هذه النظرية داخل فضاء هيلبرت الموسع هي دالة موجة BCS ، أو مايسمى دالة موجة الحقل المتوسط RVB :

$$|RVBmF\rangle = \prod_k (u_k + v_k C_{k\uparrow}^+ C_{-k\downarrow}^+) |0\rangle \quad (19.3)$$

حيث  $(v_k/u_k) = \pm 1$  في داخل وخارج شبه-سطح فرمي على الترتيب ، إسقاط دالة موجة BCS الخاصة بعدد N من الجسيمات تملك شكل مستوحى من شكل الحالة RVB كمايلي :

$$|RVBmF\rangle = \left( \sum \phi_{ij} b_{ij}^+ \right)^{N/2} |0\rangle \quad (20.3)$$

حيث  $\phi_{ij}$  عبارة عن دالة موجة ثنائية-Cooper وهي تساوي تحويل فورييه للنسبة  $(u_k/v_k)$  . وهي دالة اهتزازية تتلاشى بشكل أسي . ان الشكل المكتوب في الفضاء الحقيقي يخبرنا بأن  $(N/2)$  زوج منفرد هو عبارة عن تكاثف Bose في حالة كمية الحركة المعدومة . ان المنفردات ليست فقط الجوار الأقرب ، بل تملك سعة معطاة ب  $\phi_{ij}$  من أجل فاصل قدره  $ij$  . يمكن لهذه النظرية أن تجد دالة الموجة التقريبية في فضاء هيلبرت الفيزيائي بواسطة مؤثر الإسقاط الذي وضعه Gutzwiller والذي يطبق على الحالة RVB الناتجة من الحقل المتوسط لتتحول الى حالات مشغولة كل على حدى كما يلي :

$$|RVB\rangle = P_G \prod_k (u_k + v_k C_{k\uparrow}^+ C_{-k\downarrow}^+) |0\rangle \quad (21.3)$$

$$= P_G \left( \sum \phi_{ij} b_{ij}^+ \right)^{N/2} |0\rangle \quad (22.3)$$

حيث يقوم  $P_G = \prod_i (1 - n_{i\uparrow} n_{i\downarrow})$  بازالة كل عملية انشغال مضاعفة ويضمن انشغال واحد لكل موقع . وأيضاً حالة عامة لشريط الطاقة التجاوبي من أجل اختيار كفي للدالة  $\phi_{ij}$  ، فعند اختيارنا  $\phi_{ij} = \pm 1$  من أجل الروابط ذات الجوار الأقرب باتجاه كل من المحور x وكذلك y على الترتيب ، وصفر في الحالات المتبقية ، فسوف نقوم بإعادة إنتاج دالة الموجة RVB ذات المدى القصير. الموجودة في المعادلة رقم (10.3) .

### 3-2-4 عوازل-Mott المطعمة :

إن هاملتوني هايزنبرغ يحتفظ بفيزياء الطاقة المنخفضة لدرجات حرية السبين في عوازل-Mott . ما أن ندخل حاملات الشحنة في العازل ، من خلال تطعيم الثقوب في  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  كمثال ، فسوف تصبح لدينا شحن غير متموضعة من خلال ديناميكا الثقوب . وهذا يعني أن خواص العازل قد اختلفت ، وتم إدخال درجات حرية الشحن ذات طاقة منخفضة وهذا بتمديد التطعيم الخارجي . بالإضافة إلى أن التبادل المتعدي يبقى مستمر خلال ترابط الالكترونات في مجال تطعيم محدود . وهذا ملخص في نموذج لهاملتون فعال يسمى النموذج  $t - J$  والذي أصبح شعبياً جدا بعد نظرية RVB الخاصة بفوق الناقلية في الكبريات ، سوف لن نقوم بمناقشة كيفية اشتقاق هذا الهاملتوني في سياق كلامنا عن الكبريات ، حيث أن نموذج شريط الطاقة المنفرد يحتاج إلى أن يدعم بتحليل عملية تكون منفردة Zhang - Rice [121] .

هذا النموذج يحتوي على الطاقة الحركية أو ما يسمى حد القفز أو الانتقال بالنسبة للثقوب بالإضافة إلى ترابط هايزنبرغ الذي يتم من خلال السبين :

$$H_{tj} = H_t + H_s \quad (23.3)$$

$$H_{tj} = - \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} C_{i\sigma}^+ C_{j\sigma} + hc. + J \sum_{\langle ij \rangle} \left( S_i S_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right) \quad (24.3)$$

مع قيد الانشغال المضاعف،  $n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} \neq 2$  عند كل موقع. مع العلم أن الكبريات تمتلك  $J \sim 0.15 \text{ eV}$ . وهو واحد من أعلى القيم بين عوازل - Mott ذات السبين المساوي نصف. إن نظرية BZA ، والتي تقترح نظرية حقل متوسط ل RVB لهذا النمط من العوازل ، قدمت أيضا نظرية الحقل المتوسط لهذه العوازل عندما تكون مطعمة. هذه النظرية أدخلت في حساباتها التحليل التبايري ، وهو مشابه لتحليل BCS - هارترتي فوك ولكن في فضاء هيلبرت مقيد بشرط منع الانشغال المضاعف . وبالتالي فالعملية الأساسية هنا هي البحث عن أصغر قيمة متوسطة للطاقة أو الطاقة الحرة وهذا بالنسبة للدالة  $\phi_{jj}$  :

$$E[\phi] = \langle \text{RVBmF}; \phi | P_G (H_t + H_s) P_G | \text{RVBmF}; \phi \rangle \quad (25.3)$$

إن وجود مؤثر الإسقاط  $P_G$  يجعل الحسابات التحليلية صعبة نوعا ما . وهذه النظرية تقدم تقريبات فيزيائية ممتعة ، حيث تتم معالجة مؤثر الإسقاط  $P_G$  بطريقة الحقل المتوسط وتقریب المعادلة السابقة الى :

$$E[\phi] \approx \langle \text{RVBmF}; \phi | (xH_t + H_s) | \text{RVBmF}; \phi \rangle \quad (26.3)$$

حيث تم تقريب مؤثر الإسقاط المعقد عن طريق استبدال وسيط القفز أو الانتقال  $t$  بوسيط منظم هو عبارة عن  $xt$  ، حيث يعبر  $x$  عن احتمال أن يجد الكترون أحد المواقع الغير مشغولة في جواره الأقرب حيث يمكنه الانتقال أو القفز. وبكلام آخر لقد أعدنا كتابة الهاملتوني بالشكل :

$$\tilde{H}_{tj} = xH_t + H_s \quad (27.3)$$

وهو معرف في فضاء هيلبرت الكلي الذي يحتوي أيضا على انشغال مزدوج . أما البقية فهي مشابهة لنظرية BCS الأصلية . والشئ الممتع في هذه النظرية هو توقعها بأن هذا التقريب يعمل بطريقة جيدة من أجل تطعيم أكبر من 5% . فمن خلال التقريب المذكور في الأعلى تمكنت هذه النظرية من إيجاد (i) الحالة الأرضية لسائل السبين بالإضافة الى إثارة محايدة للفرميونات مع وجود شبه- سطح فرمي من أجل عوازل - Mott (ii) الحالة الأرضية ل فوق الناقلية مع عملية تمديد للتناظر -s من أجل هذا النمط من العوازل المطعمة . إن الدراسة التحليلية للهاملتوني المنظم في المعادلة (27.3) دقيق و هو يعطينا دالة موجة من النمط BCS كمايلي :

$$|\text{RVB}; \phi \rangle = P_G \prod_k (u_k + v_k C_{k\uparrow}^+ C_{-k\downarrow}^+) |0 \rangle \quad (28.3)$$

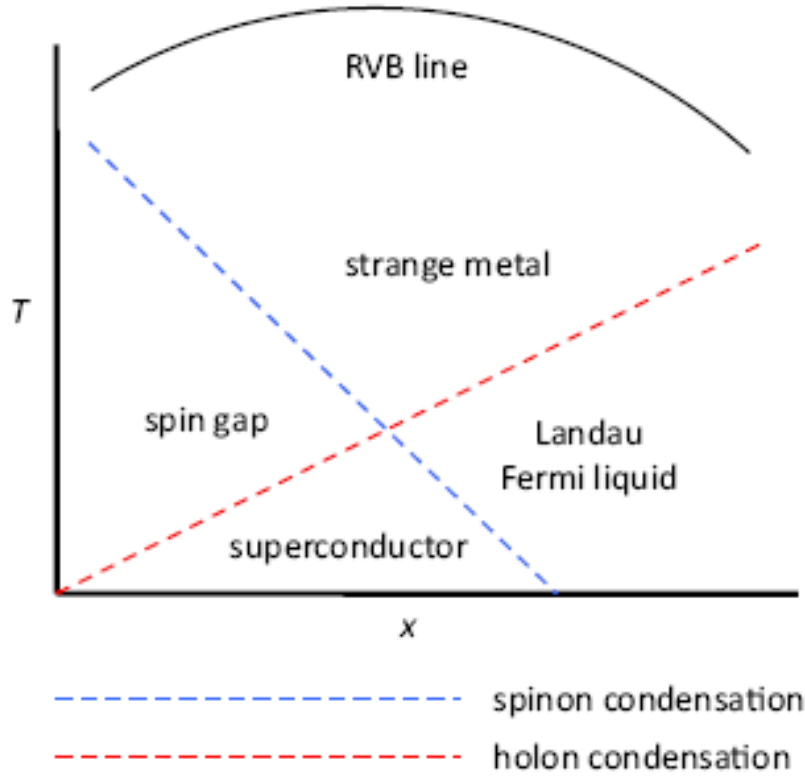
$$\equiv P_G \left( \sum_{ij} \phi_{ij} b_{ij}^+ \right)^{N(1-x)/2} |0 \rangle \quad (29.3)$$

يمكننا أيضا مواصلة العمل على نظرية الحقل المتوسط ل RVB عند درجات الحرارة المحدودة، حيث يمكننا الحصول على درجة حرارة محدودة لطور الانتقال عند  $T^*$  أي درجة حرارة الانتقال حتى من أجل عوازل - Mott. النظرية المبكرة للحقل المتوسط ل RVB ، والتطورات اللاحقة قدمت شكل تقريبي لدرجة حرارة الانتقال  $T^*$  كمايلي :

$$k_B T^* \sim J(1 - \alpha x) \quad (30.3)$$

حيث  $\alpha \approx W/J$  كما أن درجة حرارة انتقال الطور المحدودة هي نتاج حقيقي لنظرية الحقل المتوسط ، وهي تظهر المستوى الذي يبدي منه السبين في تكوين ثنائيات الحالات المنفردة . ودرجة الحرارة هذه تدل على بداية قبل تشكيل الأزواج المنفردة المحايدة. وهذا توقع واضح لنظرية RVB . كما أن الاكتشافات اللاحقة لظاهرة منطقة السبين الممنوعة تجريبيا ، هو نتاج لظاهرة تكون أزواج السبين. علاوة على ذلك ، فعندما نقوم بتطعيم النظام ، يتحول المقدار الفعال  $J$  الى المقدار المنظم  $J(1 - \alpha x)$  وذلك بتخفيف التبادل

المتعدي عن طريق عملية التطعيم بواسطة الثقوب . وهذا يفسر تقريبا التغير الخطي لدرجة الحرارة  $T^*$  الخاصة بمنطقة السبين الممنوعة كدالة في التطعيم  $x$  ، وهذا واضح من خلال تجارب NMR على سبيل المثال . ما هو أفضل ما يمكن فعله من حيث الفهم بالنسبة لتصرف كل من السبين والشحنة في عوازل-Mott المطعمة وكذلك الناقلية الفائقة من خلال نظرية الحقل المتوسط الخاصة ب RVB ؟.



الشكل (7-3) : تمثيل تخطيطي لبيان الطور الخاص بنظرية (RVB) تم أخذه من المرجع [122]

أو بصيغة أخرى يمكننا تعلم الكثير بالإضافة إلى الحصول على الكثير من التوقعات الكوانتية من خلال هذه النظرية البسيطة ، كما يمكننا أن نفسر فيزياء ما يحصل بصورة دقيقة . في عوازل - Mott ، سوف يمتلئ النظام بالأزواج المنفردة والتي لا ينبغي لها أن تتمركز وبالتالي انتاج حالة فوق الناقلية ، لأن النظام كان غير قابل للانضغاط وهذا متعلق بمدى إثارة الشحن الكهربائية . أما عندما يكون لدينا الآن النسبة  $x$  من الثغوب فهذا الامتداد للنظام سوف يكون قابل للانضغاط . أما دالة الترابط أو الأزواج  $\phi_{ij}$  فسوف تقوم بتعديل نفسها بطريقة ذاتية. ولكننا لن نناقش هذه المسألة مطولا هنا ونفضل الانتقال مباشرة إلى الطرق البسيطة التي يمكننا من خلالها استخراج درجة الحرارة الانتقالية  $T_c$  من أجل طور فوق الناقلية . من أجل القيام بتحديد درجة الحرارة الحرجة  $T_c$  ، ينبغي العودة الى دالة الموجة المقترحة سابقا وإيجاد العلاقة التي تربطها بدرجة الحرارة الحرجة هذه . وعن طريق دراسة بنية دالة الموجة التغيرية يمكننا أن نتوقع عبارة  $T_c$  . من خلال هذه الفكرة ، وفي المسألة ذات شبه- بعدين 2D فدرجة حرارة فوق الناقلية  $T_c$  هي درجة الحرارة الانتقالية - Kosterlitz من أجل كثافة  $x$  لأزواج Cooper المشحونة ذات الكتلة الفعالة  $m_c$  .

$$K_B T_c \sim \frac{2\pi\hbar^2}{m_c} (x - x_c) \quad (31.3)$$

حيث تمثل  $x_c$  درجة التطعيم الحرجة التي نحتاجها من أجل التغلب على تأثير الاضطرابات والدخول في طور فوق الناقلية . إن العبارة السابقة أصبحت وصف ممتاز لدرجة حرارة فوق الناقلية  $T_c$  في الكبريت المطعمة وهذا قبل بلوغ نقطة التطعيم الأمثل المسماة  $optimal\ doping$  ، أما بعد نقطة التطعيم فالجزء العلوي من  $T_c$  يتم قطعه بواسطة  $T_c^*$  الخاصة بالمنطقة السبينية الممنوعة . أما أسفل نقطة التطعيم الأمثل



فالموسيط الوحيد للتفاعل هو كتلة الثنائية المشحونة  $m_c$  والذي يميز عرض المنطقة الممنوعة الخاصة بالثقوب الغير متموضعة .  
إن فعالية نظرية RVB تظهر من خلال ايجاد هذه العلاقة الخاصة بدرجة الحرارة الحرجة  $T_c$  ودرجة التطعيم  $x$  وهي تختلف عن النتيجة التي توصلت اليها نظرية BCS بالاضافة الى اتفاقها مع النتائج التجريبية . كما أن التحليل الدقيق لمختلف الأفكار أدى إلى اقتراح شكل مخطط الطور سريعا [123] كما أن النتائج التجريبية التي جاءت لاحقا استقرت على هذا الشكل من بيان الطور الممثل في الشكل (3-7) .  
لقد تعرضت هذه النظرية إلى نقد جاد من طرف Kivelson الذي أعاد صياغة فيزياء عملية تكثف الثنائيات المشحونة لنظرية RVB على شكل تكاثف بوز عند كثافة  $x$  لشبه جسيمات جديدة هي الشحنة + الثقب . [119] إلا أنه تم الرد عليه من طرف واضعي النظرية [123] .

### 3-3 نظرية ثنائية الأمواج الوحيدة:

سوف نناقش هنا نموذج لفرق الناقلية ذات درجات الحرارة المرتفعة ، تم اقتراحه من طرف Davydov ، والذي يعتمد على ما يسمى نموذج ثنائية الموجة المنفردة bisoliton . حيث أنه في البداية لم تكن تربط هذا النموذج أية علاقة مع فرق الناقلية ، وقد تم وضعه من طرف دافيدوف وآخرين من أجل تفسير كيفية انتقال الإلكترونات في الأنسجة الحية. حيث أنه من الناحية الفيزيائية ، فهنا العام للكثير من

الظواهر البيولوجية لا يزال محدود جدا . في الأنسجة الحية تفضل الإلكترونات التنقل على شكل ثنائيات حيث تكون الحالة الإلكترونية منفردة ، ففي المركبات العضوية والتي هي عازلة أصلا، يمكن للوزون أن ينتقل بطريقة أسهل بكثير من تنقل الإلكترون المنفرد. و السبين يلعب دورا مهما في وجود الكائنات الحية، حيث أن إلكترونين يمكن سبينين متعاكسين يترابطان مشكلين بوزون يملك سبين معدوم وشحنة تساوي ضعف شحنة الإلكترون . وهذه الظاهرة التي هي غير مستقرة في الأجسام الصلبة هي ما نسميه حالة فرق الناقلية . ولهذا فهنا لبعض الطرق البيولوجية قد يحسن فهنا لظاهرة فرق الناقلية بصفة عامة . وهذا يعتبر صحيح جزئيا بالنسبة لظاهرة فرق الناقلية ذات درجات الحرارة المرتفعة ، لأن هذه الظاهرة لا يمكن أن تحدث في الأنسجة الحية عن طريق عملية تكون الثنائيات الإلكترونية فقط و إنما تحتاج أيضا إلى وجود طور مترابط أثناء تشكل هذه الثنائيات .

إن هذه النظرية تعتمد على ما يسمى مبدأ التموضع الذاتي في نظام ذو بعد واحد ، حيث تسمى شبه الجسيمات ذاتية التموضع self – trapped بالموجة المتفردة لدافيدوف. سوف نناقش الآن نموذج ثنائية الموجة الوحيدة لنقل الإلكترونات في سلسلة جزيئات ذات بعد واحد ، والتي سوف تستعمل لاحقا من أجل شرح ظاهرة فرق الناقلية في المركبات العضوية التي تملك بعد واحد تقريبا وكذلك في الكبريتات. إن نظرية bisolitons تعتمد على مبدأ ثنائيات الموجة الوحيدة ، أو بمعنى آخر تكون ثنائيات مشحونة من الإلكترونات أو الثقوب في حالات كوانتية منفردة بفضل التشوه الموضعي للبلورة ، لهذا فثنائيات الموجة الوحيدة تتكون من خلال التفاعل إلكترون-فونون والذي يكون قويا بشكل معتدل وغير خطي .

### 3-3-1 نموذج ثنائية الموجة الوحيدة :

إذا كان في إمكان سلسلة مرنة ذات بعد شبه أحادي الاحتفاظ بفائض من الإلكترونات ذات شحنة كهربائية تساوي e وسبين يساوي النصف، والتي يمكنها أن تكون ثنائيات في حالات كمية منفردة من خلال التفاعل مع التشوه الموضعي للشبكة البلورية الذي أنشأته الإلكترونات بنفسها. بئر الكمون المكون من خلال تفاعل التشوه قصير المدى لأحد الإلكترونات يقوم بجذب إلكترون آخر والذي بدوره يقوم بتعميق البئر الكموني.

في هذا النموذج لن نعتبر الحركة النسبية لشبه الجسيمات المتشكلة وهذا للتبسيط . نعتبر الخلايا ذات الكتلة M الموجودة على طول سلسلة الجزيئات، والتي تفصل بينها مسافة a ، في التقريب المستمر سوف نصف موقعها من خلال المتغير  $x = na$  بواسطة معادلة حركة لاثنين من شبه الجسيمات كتلتها الفعالة m في حقل الكمون المعرف بالعلاقة :

$$U(x, t) = -\sigma\rho(x, t) \quad (32.3)$$

والذي يتشكل بواسطة تشوه موضعي  $\rho(x, t)$  للسلسلة الانهائية ، وبالتالي فالمعادلة تأخذ الشكل التالي:

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + U(x_i, t) \right] \psi_j(x_i, t) = 0 \quad (33.3)$$

حيث  $i, j = 1, 2$  أما  $\psi(x_i, t)$  فهي دالة في إحداثية شبه الجسيم رقم i في الحالة السبينية j . أما التشوه الموضعي  $(x, t)$  فهو ناتج عن تفاعل شبه الجسيمين أثناء ترحلتهما عن مواضع توازنهما. الدالة  $\rho(x, t)$  التي تصف هذا التشوه الموضعي في السلسلة تحدد من خلال المعادلة التالية :

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial t^2} - c_0^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \rho(x, t) + \frac{\sigma a^2}{M} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (|\psi_1(x, t)|^2 + |\psi_2(x, t)|^2) = 0 \quad (34.3)$$

حيث  $C_0 = a\sqrt{k/M}$  عبارة عن السرعة الطولية لانتقال الصوت في السلسلة، أما  $\sigma a$  فهو الطاقة الناتجة عن تفاعل التشوه لشبه الجسيمين مع السلسلة، أما  $k$  فهو المعامل الطولي للمرونة. بسبب التناظر الانسحابي لسلسلة لانهاية، من الممكن دراسة انتشار الإثارة على طول السلسلة بسرعة ثابتة  $V < c_0$ ، في هذه الحالة، نجد أن الحل الذي يفرض نفسه للمعادلة رقم (34.3) والذي يحقق الشرط  $\rho(x, t) \neq 0$  عند كل النقاط  $(x, t)$  والتي بموجبها  $|\psi_j(x, t)|^2 \neq 0$  وهذا بالنسبة للإحداثية  $\xi = (x - Vt)/a$  المنسوبة للمعلم الذي يتحرك بسرعة  $V$  يأخذ الشكل التالي:

$$\rho(\xi) = \frac{\sigma}{k(1-s^2)} [|\psi_1(\xi)|^2 + |\psi_2(\xi)|^2] \quad (35.3)$$

حيث  $s^2 \equiv V^2/c_0^2$ ، أما الطاقة الكلية الناتجة عن التشوه الموضعي للسلسلة فهو محدد بالعبارة:

$$W = \frac{1}{2} k(1+s)^2 \int \rho^2(\xi) d\xi \quad (36.3)$$

بتعويض  $\rho(\xi)$  أولاً في المعادلة رقم (32.3) ثم بعد ذلك في المعادلة (33.3)، نحصل على معادلة للدالة  $\psi(x_1, x_2, t)$  والتي تحدد حركة ثنائية شبه الجسيمات التي تخضع للكومون (32.3) وهذا دون اعتبار تناظر كولومب الإلكتروني:

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + J \left( \frac{\partial^2}{\partial \xi_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \xi_2^2} \right) + G \left( \frac{|\psi_1(\xi_1)|^2 + |\psi_1(\xi_2)|^2}{|\psi_2(\xi_1)|^2 + |\psi_2(\xi_2)|^2} \right) \right] \psi(x_1, x_2, t) = 0 \quad (37.3)$$

حيث يمثل  $J \equiv \hbar^2/2ma^2$  أما  $G \equiv \sigma^2/k(1-s^2)$ . فإذا اعتبرنا الحالات التي تكون فيها سرعة الحركة صغيرة أي  $s^2 \ll 1$  في هذه الحالة يمكن استبداله بواسطة الثابت  $G_0 \cong \sigma^2/k$ . أما دالة الاحداثيات لثنائية شبه الجسيمين في الحالة الكوانتية المنفردة للسبين فيمكن كتابتها بالشكل التالي:

$$\psi(x_1, x_2, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\psi_1(\xi_1)|^2 + |\psi_1(\xi_2)|^2 + |\psi_2(\xi_1)|^2 + |\psi_2(\xi_2)|^2] e^{-iE_p t/\hbar}$$

حيث  $E_p$  عبارة عن طاقة ثنائية شبه الجسيمات في الكومون  $U(\xi)$ . في سلسلة تحتوي عدد كبير  $N$  من الخلايا العنصرية وتحتوي على  $N_1$  من ثنائيات شبه الجسيمات، فإن عملية تشكيل الثنائيات تتم فقط من طرف حالات أشباه الجسيمات الحرة التي تمتلك عدد موجي قريب من العدد الموجي لسطح فرمي  $k_F = \pi N_1/2aN$ . وبناءً على قانون انحفاظ شبه كمية الحركة للثنائية التي تتحرك بسرعة  $V = \hbar k/m$  يمكن تكوينها من اثنين من أشباه الجسيمات مع أعداد موجية  $k_1 = 2k - k_F$  و  $k_2 = k_F$ . فإذا كانت دوال الموجة لأشباه الجسيمات في الحالة الثنائية ممثلة بدوال الموجة المستوية:

$$\psi_j(\xi_i) = \Phi(\xi_i) \exp(ik_j \xi_i) \quad (39.3)$$

وبالتالي فدالة الإحداثية لثنائية شبه الجسيمات تتحول إلى الشكل التالي:

$$\psi(x_1, x_2, t) = \sqrt{2} \Phi(\xi_1) \Phi(\xi_2) \cos[(k - k_F)(\xi_1 - \xi_2)] e^{i[k(\xi_1 + \xi_2) - E_p t/\hbar]} \quad (40.3)$$

إن ظهور دالة  $\cos$  في هذه الدالة هو نتاج شروط التناظر الموضوعية سابقاً، بتعويض الدالة

$\psi(x_1, x_2, t)$  في المعادلة رقم (37.3) يمكننا إيجاد المعادلة الخاصة بدوال السعة  $\Phi(\xi_i)$  كما يلي:

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial \xi_i^2} + 4g\Phi^2(\xi_i) + \Lambda \right] \Phi(\xi_i) = 0 \quad (41.3)$$

حيث استخدمنا هنا الرموز عديمة الوحدات من أجل  $s^2 \ll 1$ :

$$g \equiv \frac{G}{2J} = \frac{\sigma^2}{2kJ(1-s^2)} \approx \frac{G_0}{2J} = \frac{\sigma^2}{2k} \quad (42.3)$$

وهو يعبر عن ترابط أشباه الجسيمات مع حقل التشوه. الطاقة  $E(V)$  لثنائية شبه الجسيمات في هذا الحقل يمكن التعبير عنها بدلالة حدود من القيم الذاتية  $\Lambda$  الموجودة في المعادلة رقم (41.3) من خلال العلاقة:

$$E(V) = E_p(0) + 2 \frac{mV^2}{2} - \hbar V k_F \quad (43.3)$$

حيث  $E_p(0) = \Lambda J + E_F$  يصف موقع مستوى طاقة ثنائية شبه الجسيمات الساكنة تحت مستوى فرمي الخاص بها أي بالنسبة ل  $E_F = \hbar^2 k_F^2 / m$ . أما حقل التشوه  $\rho(\xi)$  فيمكن التعبير عنه بدلالة حدود للدالة  $\Phi(\xi)$  كمايلي :

$$\rho(\xi) = -\frac{2\sigma}{k(1-s^2)} \Phi^2(\xi) \quad (44.3)$$

و لذلك، فطاقة التشوه الموضوعي للسلسلة في المعادلة رقم (36.3) معرفة بالعبارة التالية :

$$W = \frac{2G(1+s^2)}{1-s^2} \int \Phi^4(\xi) d\xi \quad (45.3)$$

المعادلة رقم (41.3) تقبل حلول دورية منسجمة مع التوزيع المتجانس لأزواج أشباه الجسيمات على طول السلسلة. الدوال الحقيقية  $\Phi(\xi_i)$  لهذه الحلول ينبغي أن تحقق الشروط الدورية :

$$\Phi(\xi_i) = \Phi(\xi_i + L) \quad (46.3)$$

حيث  $L = N/N_1$  وكذلك شرط التنظيم  $\int_0^L \Phi(\xi_i)^2 d\xi = 1$ ، وهذا الأخير يتطلب أن يكون كل زوج من أشباه الجسيمات في دوره الخاص. الحل الدوري الدقيق للمعادلة رقم (41.3) يمكن التعبير عنه بدلالة حدود مكونة من الدوال الزائدية  $dn(u, q)$  من خلال العلاقة:

$$\Phi_q(\xi_i) = \sqrt{\frac{g}{2}} E^{-1}(q) \times dn(u, q) \quad (47.3)$$

حيث  $u = g\xi/E(q)$ . إن الشكل الواضح للدوال  $dn(u, q)$  يتعلق بقيم خاصة للمتغير  $q$  والذي يأخذ قيم مستمرة في المجال  $[0, 1]$ . كما أن القيم الخاصة  $\Lambda$  في المعادلة رقم (41.3) تعطى أيضا بواسطة حدود متعلقة بالمتغير  $q$  من خلال العلاقة  $\Lambda_q = -g^2 q^2 / E(q)$ . حيث أن الدالة عبارة عن تكامل زائدي مكتمل من النوع الثاني والذي يحقق العبارة :

$$E(q) \equiv \int_0^{\kappa(q)} dn^2(u, q) du \quad (48.3)$$

والمقدار  $\kappa(q)$  هو تكامل زائدي مكتمل من الدرجة الأولى، والذي يكتب بالشكل التالي :

$$\kappa(q) = \int_0^1 [(1-t^2)(1-q^2t^2)]^{-1/2} dt \quad (49.3)$$

التكاملين الزائديين  $E(q)$  و  $\kappa(q)$  من أجل الحالتين  $q \approx 1$  و  $q \ll 1$ . وقيمة المتغير  $q$  تتحدد بواسطة الجداء بين الدور  $L$  ووسيط الارتباط  $g$  الخاص بالتفاعل إلكترون فونون، بالإضافة إلى التكاملين الزائديين كمايلي :

$$gL = 2E(q)\kappa(q) \quad (50.3)$$

التوزيع الفضائي لكل من أشباه الجسيمات داخل ثنائيات الموجة الوحيدة يعبر عنه بواسطة  $|\Phi_q(\xi_i)|^2$  وبناء على المعادلة رقم (44.3) فالحقل الخاص بالتشوه المحلي للسلسلة هو أيضا دالة دورية :

$$\rho_q(\xi) = \frac{\sigma g}{\kappa(1-s^2)E^2(q)} dn^2\left(\frac{g\xi}{E(q)}, q\right) \quad (51.3)$$

بتعويض  $\Phi(\xi)$  في المعادلة رقم (45.3) يمكننا أن نجد الطاقة الخاصة بالتشوه الموضوعي في كل دور :

$$W_q(V) = g^2 J \frac{(1+s^2)D(q)}{2(1-s^2)E(q)} \quad (52.3)$$

حيث  $D(q) = \frac{1}{3}[2(2 - q^2)E(q) - 2(1 - q^2)\kappa(q)]$  عبارة عن التوزيع الفضائي. بناءً على المعادلات رقم (43.3)، الطاقة الكلية  $\epsilon_q(V) = E_p(V) + W_q(V)$ ، كحدود بدلالة طاقة فرمي، وهي تأخذ عند السرعة الصغيرة العبارة التالية:

$$\epsilon_q(V) = -\Pi_0(q) + \frac{1}{2}M_{bs}V^2 - \hbar V k_F \quad (53.3)$$

حيث  $\Pi_0(q) = g^2 q^2 / E(q) - W_q(V) = g^2 J F(q)$  وهي تعبر عن طاقة تكون ثنائيات شبه الجسيمات بما في ذلك طاقة التشوه الموضعي للسلسلة. وتعطى الدالة  $F(q)$  بالعبارة التالية:

$$F(q) \equiv \frac{2}{E^2(q)} [2 - q^2 - D(q)/E(q)] \quad (54.3)$$

الكمية  $\Delta = \Pi_0(q)/2$  تحدد مجال الطاقة الممنوع الناتج عن عملية نشوء الثنائيات في طيف شبه الجسيمات. ولهذا فعرض منطقة نشوء الثنائيات يساوي نصف الطاقة اللازمة من أجل تكون ثنائي موجدة وحيدة في حالته السكونية. وتعطى الكتلة الفعالة لثنائي الموجة الوحيدة داخل كل دور بالعبارة التالية:

$$M_{ab} = 2m + \frac{4g^2 J D(q)}{c_0^2 E^2(q)} \quad (55.3)$$

حيث  $m$  هي الكتلة الفعالة لشبه الجسيمات، مع الإشارة إلى أن منطقة الطاقة الممنوعة  $\Delta$  قد تم الحصول عليها دون أي اعتبار لمفعول الحجب لطاقة التناثر الكهربائي بين أشباه الجسيمات. هذا التقريب مبرر إذا كان الامتداد الفضائي لكل ثنائية موجة وحيدة يساوي بالتقريب  $d \approx 2\pi a/g$  يتعدى ثابت الشبكة  $a$ . نلاحظ هنا أن الطاقة الممنوعة لثنائي الموجة الوحيدة الساكن مستقل عن كتلة الأيونات المكونة للشبكة، وبالتالي فلن يكون هناك مفعول النظائر *isotope - effect* بالرغم من أنه يتركز على التفاعل الكترون- فونون. إن مفعول النظائر يظهر نفسه فقط من خلال الطاقة الحركية لثنائية الموجة الوحيدة، وهذا من أجل سرعة صغيرة  $1 \ll s^2 = V^2/c_0^2$  وحتى في هذه الحالة يكون مفعول النظائر صغير. داخل كل دور  $L$  في السلسلة اللانهائية يوجد هناك توافق بين الطاقة  $\epsilon_q(V)$  ودالة الإحداثيات  $\psi_q(x_1, x_2, t)$ ، هذه الأخيرة تصف كيفية توزع ثنائيات وحيدة الموجة عند قيمة محددة  $k$ :

$$\psi_q(x_1, x_2, t) = \frac{\sqrt{2}}{E^2(q)} \cos[(k - k_f)(\xi_1 - \xi_2)] \quad (56.3)$$

$$\times dn\left(\frac{g\xi_1}{E(q)}, q\right) dn\left(\frac{g\xi_2}{E(q)}, q\right) e^{i\left[\delta(k) + \frac{E_p t}{\hbar}\right]}$$

حيث  $\delta(k)$  هو عبارة عن طور يتغير بسهولة عندما تتغير إحداثية مركز ثقل الثنائية وحيدة الموجة:

$$\delta(k) = 2k[(x_1 + x_2)/2 - Vt] \quad (57.3)$$

### 3-3-2 حالة الكثافة الصغيرة لنقلات الشحنة المطعمة:

من أجل القيم الصغيرة نوعاً ما لكثافة شبه الجسيمات أي عندما  $gL \gg 1$  تأخذ التكاملات الزائدية التقريب التالي:

$$E(q) \approx 1, \quad K(q) \approx \ln\left(4/\sqrt{1 - q^2}\right) \quad (58.3)$$

وفي هذه الحالة تأخذ الدالة  $D(q)$  و الدالة  $F(q)$  من أجل  $q \approx 1$  الشكل التقريبي التالي على الترتيب:

$$\frac{2}{3} [1 \pm 4gL \exp(-gl)] \quad (59.3)$$

وبالتالي فطاقة تكون ثنائيات الموجة الوحيدة سوف تكتب بشكل تقريبي بسيط  $\Pi_0 \approx 2g^2 J/3$  كما أن تحقق الشرط  $gL \gg 1$  يجعلنا نكتب الكتلة الفعالة لثنائية الموجة الوحيدة بالشكل التالي:

$$M_{ab} = 2m + \frac{8g^2 J}{3c_0^2} \quad (60.3)$$

وهذا يتخطى الكتلتين الفعاليتين لشبه الجسيمات التي تشكل ثنائية الموجة الوحيدة ، والكتلة الفعالة للثنائية الساكنة مستقلة عن الكتلة  $F(q)$  الخاصة بالجزئيات الثقيلة ، ومن العلاقات السابقة نجد أنه من أجل السرعة الصغيرة تأخذ منطقة الطاقة الممنوعة القيمة :

$$\Delta = \frac{1}{3} g^2 J \quad (61.3)$$

الدوال المغلفة لشبه الجسيمات  $\Phi(\xi)$  هي دوال بالتقريب قطع زائدة في داخل كل دور وتكتب بالشكل:

$$\Phi(\xi) \approx \sqrt{\frac{g}{2}} \operatorname{sech}(g\xi) \quad (62.3)$$

كما أنه داخل المعلم  $\xi$  تمثل الدالة  $\Phi(\xi)$  ارتفاعات ناقوسية عرضها يساوي بالتقريب  $2\pi/g$   $\Delta\xi$  تفصل في ما بينها مسافات  $L$  ، ومن أجل ثنائية موجة أحادية ساكنة ، أي  $\xi = x$  تتحول (62.3) إلى :

$$\Phi(x) = \sqrt{\frac{g}{2}} \times \operatorname{sech}(gx) \quad (63.3)$$

حيث تمثل القيمة  $\Delta x = 2\pi a/g$  مدى أو مسافة الترابط في ثنائية الموجة الوحيدة ، وعندما تكون هنالك ثنائية وحيدة في السلسلة ، فان اثنين من أشباه الجسيمات المكونين للثنائية يتحركان في جدار كموني فعال مشترك ، يكون نصف قطر هذا الجدار أصغر بمرتين بالنسبة لموجة وحيدة معزولة ، وعمقها أكبر بمرتين من العمق في حالة الموجة الوحيدة المعزولة :

$$U_{\uparrow\downarrow} = -2g^2 J \times \operatorname{sech}^2(g\xi) \quad (64.3)$$

**3-3-3 حالة الكثافة الكبيرة لناقلات الشحنة المطعمة :**

في حالة الكثافات الكبيرة لأشباه الجسيمات الموجودة في السلسلة ، وعندما يكون  $gL < 5$  ، يمكننا تقريب التكاملات الزائدية  $E(q)$  و  $\kappa(q)$  الى الشكلين التاليين من أجل  $q^2 \ll 1$  :

$$E(q) \approx \frac{\pi}{2} \left[ 1 - \frac{1}{4} q^2 - \frac{3}{64} q^4 + \dots \right] \quad (65.3)$$

$$k(q) \approx \frac{\pi}{2} \left[ 1 + \frac{1}{4} q^2 + \frac{9}{64} q^4 + \dots \right] \quad (66.3)$$

في هذه الحالة ، ومن المعادلة (50.3) يمكننا أن نجد :

$$q^2 = 4\sqrt{2} \left[ \frac{2gL}{\pi^2} - 1 \right]^{1/2} \ll 1 \quad (67.3)$$

وهذا يحدد طولية  $q$  للدوال الزائدية . و بفضل المعادلة (67.3) ، نجد أن الحلول الدورية للمعادلة (56.3) موجودة تحت الشرط  $gL < \pi^2/2$  ، ولهذا ، فالكثافة العظمى لأشباه الجسيمات الموجودة على السلسلة على شكل تكاثف للثنائيات ، موجودة في الدور الأصغر  $L_{\min} = \pi^2/2g$  . كما أن الشكل التقريبي للدوال  $\Phi_q(\xi)$  و  $D(q)$  يصبح كمايلي :

$$\Phi_q(\xi) \approx \frac{\sqrt{2g}}{\pi} \left[ 1 - \frac{q^2}{2} \sin^2(2g\xi/\pi) \right] \quad (68.3)$$

$$D(q) \approx \frac{\pi^2}{2} \left[ 1 - \frac{3}{4} q^2 + \frac{9}{64} q^4 \right] \quad (69.3)$$

وبالتالي فمنطقة الطاقة الممنوعة سوف تتناقص مع تزايد كثافة شبه الجسيمات . بل أكثر من هذا ، فعند الكثافات العالية لثنائيات الموجة الوحيدة يقوم التفاعل الكهربائي بتقليص قيمة منطقة الطاقة الممنوعة:

$$\Delta \approx g^2 J \left[ \frac{2}{\pi} \right]^3 \quad (70.3)$$

### 3-3-4 دراسة تأثير التنافر الكهربائي:

كل النتائج السابقة التي تم الحصول عليها لم تأخذ في الحسبان التنافر الكهربائي بين أشباه الجسيمات . فعند أخذنا للتنافر الكهربائي بعين الاعتبار، حيث سوف نعتبره كما اضطراب . فتكون الثنائيات عند السرعة المنخفضة لا يزال هو المفضل من ناحية الطاقة إذا كانت قيمة ثابت الترابط  $g$  أكبر القيمة الحرجة :

$$g_{cr} \approx \left[ \frac{e_{eff}^2}{4\pi\epsilon^2 J} \right] \quad (71.3)$$

حيث  $e_{eff}$  هي الكتلة الفعالة المحجوبة. وقد تم الحصول على الشكل التقريبي لهذه القيمة عن طريق استخدام الشرط على تنقل شبه الجسيمات وهو أن التنقل الناتج عن التنافر الكهربائي أصغر من بعد الثنائية  $2\pi a/g$ .

### 3-3-5 دراسة تأثير استقرار الثنائيات:

لا تتفاعل الثنائيات مع الفونونات ، لأن هذا التفاعل ثم أخذه في الحسبان بالكامل عند ترابط أشباه الجسيمات مع التشوه الموضعي للشبكة ، ولهذا السبب فهو لن يقوم بعملية إشعاع للفونونات . وفي درجات الحرارة المنخفضة تكون الثنائية مستقرة إذا كان الريح في طاقة الترابط الناتج عن عملية تكون الثنائيات يتعدى طاقة التنافر الكهربائي الناتج عن شحنها. كما أن سرعة حركة الثنائية ينبغي أن لا تتجاوز مركبة السرعة الطولية للصوت  $c_0$  مع الإشارة الى أن هذه السرعة تساوي تقريبا  $c_0 \approx 10^5 \text{ cm/c}$  في الكبريت ، كما أن القيمة العظمى لسرعة المجموعة  $V_g$  لشبه الجسيمات الحرة داخل شريط النقل الخاص بها ، والذي يحدد بواسطة تكامل التبادل  $J$  يميز عرض هذا الشريط :

$$V_g = \frac{2aJ}{\hbar} = \frac{\hbar}{am} \quad (72.3)$$

حيث  $m$  عبارة عن الكتلة الفعالة لشبه الجسيم ، والثنائية لن تتلاشى بطريقة ذاتية ما دامت سرعتها أصغر من السرعة الحدية  $V_{cr} = 2\Delta/\hbar k_F$  ، حيث  $k_F$  هي كمية الحركة على سطح فرمي .

### 3-3-6 درجة الحرارة الحرجة في النظرية :

في نظرية ثنائيات الموجة الأحادية الخاصة بفوق الناقلية ، عرف Davydov درجة الحرارة الحرجة  $T_c$  على أنها درجة الحرارة التي تتلاشى فيها منطقة الطاقة الممنوعة ، فإذا كانت كثافة ثنائيات شبه الجسيمات المثارة صغيرة ، وتحقق الشرط  $g < 3$  فسوف تصبح بلورة المادة المدروسة فوق ناقلة عند تخفيض درجات الحرارة . وبالتماثل مع نظرية BCS للناقلية الفائقة الاعتيادية ، فمن الممكن تقدير قيمة درجة الحرارة الحرجة من خلال قيمة طاقة تكون الثنائيات أي  $2\Delta \approx k_B T_c$  حيث  $k_B$  عبارة عن ثابت بولتزمان ، حيث أنه عند درجات حرارة أقل من درجة الحرارة الحرجة ، سوف يكون الطور  $\delta(k)$  الموجود في المعادلة (57.3) متماسك على طول كامل السلسلة.

عندما قدم Davydov هذا النموذج كميكانيزم للناقلية الفائقة ذات درجات الحرارة  $T_c$  المرتفعة في الكبريت ، لم يكن يعلم حينها بوجود المسارات شبه أحادية البعد في المستويات  $\text{CuO}_2$  . ولذلك فقد اعتبر أحادية البعد موجودة في المستويات  $\text{CuO}_2$  . وبما أن المستويات  $\text{CuO}_2$  تتكون من شبه سلاسل لانهائية من أيونات النحاس و الأكسجين المتناوبة، فقد اعتبر Davydov كل سلسلة  $\text{Cu} - \text{O} - \text{Cu} - \text{O} - \text{Cu} - \text{O}$  في المستوي  $\text{CuO}_2$  هي نظام شبه أحادي البعد والتيار يتدفق عبر هذه السلاسل . وبناء على النتائج التي توصل إليها Davydov فإن مستويات التطعيم في الكبريت فوق الناقلية ينبغي أن يكون صغيرا ولهذا فقد وجد أن نتائجه تكون مقبولة عندما  $1 \gg gL$  . كما أصر على أن طاقة تكون الثنائيات  $\Delta$  في المعادلة رقم (60.3) لا تتعلق بكتلة خلية الشبكة، وتظهر هذه الكتلة فقط في الطاقة الحركية لثنائية الموجة الوحيدة. ولهذا يمكن اعتبار نموذج الفكرة الرئيسية لهذه النظرية صحيحة ، وكتقريب أولي يستطيع هذا النموذج

وصف الكبريات المطعمة بالثقوب ، ومع ذلك فنموذج Davydov للناقلية الفائقة غير مكتمل ويحتاج إلى ميكانيزم من أجل استقرار تماسك الطور. [126-124].



## مراجع الفصل الثالث

- [1] J.G. Bednorz and K.A. Müller, Z. Phys. B **64** 189(1986)
- [2] D.R. Harshman and A.P. Mills, Phys. Rev. B **45** 10684(1992)
- [3] J. Bardeen, L.N. Cooper and J.R. Schrieffer, Phys. Rev. **108** 1175(1957)
- [4] H. Su, D.O. Welch and W. Wong-Ng, Phys. Rev. B **70** 054517(2004)
- [5] D.R. Harshman, J.D. Dow and A.T. Fiory, Phys. Rev. B **77** 024523(2008)
- [6] D.R. Harshman, J.D. Dow and A.T. Fiory, Phys. Rev. B **80** 136502(2009)
- [7] L.C. Bourne, A. Zettl, T.W. Barbee and M.L. Cohen, Phys. Rev. B **36** 3990(1987)
- [8] S. Hoen, W.N. Creager, L.C. Bourne, M.F. Crommie, T.W. Barbee, M.L. Cohen, A. Zettl, L. Bernardez and J. Kinney, Phys. Rev. B **39** 2269(1989)
- [9] H.B. Radousky, J. Mater. Res. **7** 1917(1992)
- [10] M. Gurvitch, and A.T. Fiory, Phys. Rev. Lett. **59** 1337(1987)
- [11] M. Gurvitch, A.T. Fiory, L.F. Schneemeyer, R.J. Cava, G.P. Espinosa and J.V. Waszczak, Physica C, **153–155** 1369(1988)
- [12] G. Soerensen and S. Gygax, Phys. Rev. B **51** 11848(1995)
- [13] A.S. Sefat, M.A. McGuire, B.C. Sales, R. Jin, J.Y. Howe and D. Mandrus, Phys. Rev. B **77** 174503(2008)
- [14] G. Wu, R.H. Liu, H. Chen, Y.J. Yan, T. Wu, Y.L. Xie, J.J. Ying, X.F. Wang, D.F. Fang and X.H. Chen, Europhys. Lett. **84** 27010(2008)
- [15] F. Gollnik and M. Naito, Phys. Rev. B **58** 11734(1998)
- [16] J.D. Dow and M. Lehmann, Phil. Mag. **83** 527(2003)
- [17] A. Zimmers et al, Phys. Rev. B **76** 064515(2007)
- [18] P.M.C. Rourke, A.F. Bangura, C. Proust, J. Levallois, N. Doiron-Leyraud, D. LeBoeuf, L. Taillefer, S. Adachi, M.L. Sutherland and N.E. Hussey, Phys. Rev. B **82** 020514(R)(2010)
- [19] D.R. Harshman, J.D. Dow and A.T. Fiory, Phil. Mag. **91** 818(2011)
- [20] K. Ishida, Y. Nakai and H. Hosono, J. Phys. Soc. Japan **78** 062001(2009)
- [21] T. Maehira, T. Hotta, K. Ueda and A. Hasegawa, Phys. Rev. Lett. **90** 207007(2003)
- [22] C. Bernard and J.L. Tallon, Phys. Rev. B **54** 10201(1996)
- [23] J. Fink, N. Nücker, E. Pellegrin, H. Romberg, M. Alexander and M. Knupfer, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **66** 395(1994)
- [24] K. Segawa and Y. Ando, Phys. Rev. B **74** 100508(R)(2006)
- [25] S.E. Sebastian, N. Harrison, P.A. Goddard, M.M. Altarawneh, C.H. Mielke, R. Liang, D.A. Bonn, W.N. Hardy, O.K. Andersen and G.G. Lonzarich, Phys. Rev. B **81** 214524(2010)
- [26] K.A. Moler, D.L. Sisson, J.S. Urbach, M.R. Beasley, A. Kapitulnik, D.J. Baar, R. Liang

- and W.N. Hardy, Phys. Rev. B **55** 3954(1997)
- [27] Z.Y. Liu, H.H. Wen, L. Shan, H.P. Yang, X.F. Lu, H. Gao, M-S. Park, C.U. Jung and S-I. Lee, Europhys. Lett. **69** 263(2005)
- [28] X.F. Sun , S. Ono, Y. Abe , S. Komiya, K. Segawa and Y. Ando, Phys. Rev. Lett. **96** 017008(2006)
- [29] H-H. Wen, Z-Y. Liu, F. Zhou, J. Xiong , W. Ti, T. Xiang ,S. Komiya , X. Sun and Y. Ando, Phys. Rev. B **70** 214505(2004)
- [30] D.E. Farrell, C.M. Williams, S.A. Wolf, N.P. Bansal and V.G. Kogan , Phys. Rev. Lett. **61** 2805(1988)
- [31] G.D. Gu, R. Pusniak, K. Nakao, G.J. Russell and N. Koshizuka , Supercond. Sci. Technol. **11** 1115(1998)
- [32] D.E. Ferrell, S. Bonham, J. Foster, Y.C. Chang, P.Z. Jiang, K.G. Vandervoort, D.J. Lam and V.G. Kogan , Phys. Rev.Lett. **63** 782(1989)
- [33] D.R. Harshman, W.J. Kossler, X. Wan, A.T. Fiory, A.J. Greer, D.R. Noakes, C.E. Stronach, E. Koster and J.D. Dow, Phys. Rev. B **69** 174505(2004)
- [34] J.D. Dow, D.R. Harshman and A.T. Fiory , J. Supercond.Nov. Mag. **23** 641(2010)
- [35] D.R. Harshman and J.D. Dow , Physica C **408–410** 361(2004)
- [36] A.T. Fiory et al , J. Electron. Mater. **34** 474(2005)
- [37] Y.N. Li Q, Tsay, M. Suenaga, R.A. Klemm, G.D. Gu G D and N. Koshizuka , Phys. Rev. Lett. **83** 4160(1999)
- [38] F. Tafuri and J.R. Kirtley , Rep. Prog. Phys. **68** 2573(2005)
- [39] N-C Yeh et al , Physica C 367 174(2002)
- [40] A. Damascelli, Z. Hussain and Z.X. Shen, Rev. Mod. Phys. **75** 473(2003)
- [41] A.V. Balatsky, Y.N. Joglekar and P.B. Littlewood , Phys.Rev. Lett. **93** 266801(2004)
- [42] A.T. Fiory, A.F. Hebard, R.H. Eick, P.M. Mankiewich, R.E. Howard and M.L. O'Malley, Phys. Rev. Lett. **65** 3441(1990)
- [43] H.L. Kao, J. Kwo , H. Takagi and B. Batlogg , Phys. Rev. B **48** 9925(1993)
- [44] W.A. Little, Novel Superconductivity (New York: Plenum, 1988) p 341
- [45] E.A. Pashitski, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **56**, 662(1969)
- [46] S.I. Shevchenko , Fiz. Nizk. Temp. **2**, 505(1976)
- [47] Y.U.E. Losovik and V.I. Yudson, Zh. Eskp. Teor. Fiz. **71** 738(1976)
- [48] G. Ireson, Discovering Superconductivity An Investigative Approach, (John Wiley, United Kingdom, 2012). pp 113

- [49] K.P. Walsh, A.T. Fiory, N.M. Ravindra, D.R. Harshman and J.D. Dow, *Phil. Mag.* **86** 3581(, 2006)
- [50] T. Fujii, T. Watanabe and A. Matsuda , *Physica C* **357**–360 173(2001)
- [51] L.F. Mattheiss, *Phys. Rev. Lett.* **58** 1028(1987)
- [52] D.R. Harshman, L.F. Schneemeyer, J.V. Waszczak, Y.C. Jean, M.J. Fluss, R.H. Howell and A.L. Wachs , *Phys. Rev. B* **38** 848(1988)
- [53] D. R. Harshman, A.T Fiory and J.D. Dow, *J. Phys.: Condens. Matter* **23**, 295701 (2011)
- [54] S. Belin, K. Behnia , M. Ribault, A. Deluzet and P. Batail , *Synth. Met.* **103** 2046(1999)
- [55] Y. Lou Y, H.L. Yen, J.M. Wrobel, H. Zhang, Y.C. Jean, G. Saito, Z.J. Huang and C.W. Chu, *Phys. Rev. B* **49** 122555(1994)
- [56] T. Honma and P.H. Hor, *Phys. Rev. B* **75** 012508(2007)
- [57] J.D. Jorgensen, B.W. Veal, A.P. Paulikas, L.J. Nowicki, G.W. Crabtree, H. Claus and W.K. Kwok , *Phys. Rev. B* **41** 1863(1990)
- [58] S. Kamal, R. Liang, A. Hosseini, D.A. Bonn and W.N. Hardy, *Phys. Rev. B* **58** R8933(1998)
- [59] F. Stercel, T. Egami, H.A. Mook, M. Yethiraj, J-H. Chung, M. Arai, C. Frost and F. Dogan , *Phys. Rev. B* **77** 014502(2008)
- [60] H.A. Mook, Y. Sidis, B. Fauqu´e, V. Bal´edent and P. Bourges, *Phys. Rev. B* **78**, 020506(R)( 2008)
- [61] M. Izumi, T. Yabe, T. Wada, A. Maeda, K. Uchinokura, S. Tanaka and H. Asano , *Phys. Rev. B* **40** 6771(1989)
- [62] F. Tao, G.C. Che, G.D. Liu, Z.X. Zhao, F. Wu, H. Chen, S.L. Jia and C. Dong , *J. Alloys Compounds* **290**, 298(1999)
- [63] E.N. van Eenige, R. Griessen, R.J. Wijngaarden, J. Karpinski, E. Kaldis, S. Rusiecki and E. Jilek , *Physica C* **168** 482(1990)
- [64] X. Zhang, E.W. Yip and C.K. Ong , *J. Phys. Chem. Solids* **56**, 153(1995)
- [65] J.J. Scholtz, E.N. van Eenige, R.J. Wijngaarden and R. Gressen , *Phys. Rev. B* **45**, 3077(1992)
- [66] C.C Torardi, M.A. Subramanian, C.J. Calabrese, J. Gopalakrishnan, E.M. McCarron, K.J. Morrissey, T.R. Askew, R.B. Flippen, U. Chowdhry and A.W. Sleight , *Phys. Rev. B* **38**, 225(1988)
- [67] M.A. Subramanian, J.C. Calabrese, C.C. Torardi, J. Gopalakrishnan, T.R. Askew, R.B. Flippen, K.J. Morrissey, U. Chowdhry and A.W. Sleight, *Nature* **332**, 420(1988)

- [68] C.C. Torardi, M.A. Subramanian, C.J. Calabrese, J. Gopalakrishnan, K.J. Morrissey, T.R. Askew, R.B. Flippen, U. Chowdhry and A.W. Sleight , *Science* **240**, 631(1988)
- [69] G.M. Phatak, R.M. Iyer, K. Gangadharan, R.M. Kadam, P.V.P. Sastry, M.D. Sastry and J.V. Yakhmi, *Bull.Mater. Sci.* **14**, 241(1991)
- [70] B. Morosin, D.S. Ginley, P.F. Hlava, M.J. Carr, R.J. Baughman, J.E. Schirber, E.L. Venturini and J.F. Kwak , *Physica C* **152**, 413(1988)
- [71] S.S.P. Parkin, V.Y. Lee, A.I. Nazzal, R. Savoy, R. Beyers and S.J. La Placa , *Phys. Rev. Lett.* **61**, 750(1988)
- [72] A. Iyo, Y. Tanaka, Y. Ishiura, M. Tokumoto, K. Tokiwa, T. Watanabe and H. Ihara, *Supercond. Sci. Technol.* **14**, 504(2001)
- [73] J.L. Wagner, B.A. Hunter, D.G. Hinks and J.D. Jorgensen, *Phys. Rev. B* **51**, 15407(1995)
- [74] X. Zhang, W.H. Lu and C.K. Ong , *Physica C* **289**, 99(1997)
- [75] D.T. Jover, R.J. Wijngaarden, H. Wilhelm, R. Griessen, S.M. Loureiro, J-J. Capponi, A. Schilling and H.R. Ott, *Phys. Rev. B* **54**, 4265(1996)
- [76] S.N. Putilin, E.V. Antipov, O. Chmaissem and M. Marezio, *Nature* **362**, 226(1993)
- [77] K. Yamawaki, S. Sasaki, M. Kakihana and M. Tanaka, *Physica C* **340**, 133(2000)
- [78] P.G. Radaelli, D.G. Hicks, A.W. Mitchell, B.A. Hunter, J.L. Wagner, B. Dabrowski, K.G. Vandervoort, H.K. Viswanathan and J.D. Jorgensen, *Phys. Rev. B* **49**, 4163(1994)
- [79] B. Lake et al , *Science* **291**, 1759(2001)
- [80] C. Ulrich et al, *Phys. Rev. B* **65**, 220507(R)( 2002)
- [81] H.R. Liu, D.E. Morris, A.P. Sinha and X. Tang , *Physica C* **174**, 28(1991)
- [82] C.U. Jung, J.Y. Kim, M-S. Kim, S.Y. Lee, S-I. Lee and H.D. Ha , *Curr. Appl. Phys.* **1** 157(2001)
- [83] Y. Tanaka, M. Karppinen and H. Yamauchi, *Supercond. Sci. Technol.* **22** 065004(2009)
- [84] N.G. Parkinson, P.D. Hatton, J.A.K. Howard, C. Ritter, F.Z. Chian and M-K. Wu , *J. Mater. Chem.* **13**, 1468(2003)
- [85] X. Tang, D.E. Morris and A. Sinha, *Phys. Rev. B* **43**, 7936(1991)
- [86] M.A. Subramanian, J. Gopalakrishnan, C.C. Torardi, P.L. Gai, E.D. Boyes, T.R. Askew, R.B. Flippen, W.E. Farneth and A.W. Sleight, *Physica C* **157**, 124(1989)
- [87] S.A. Sunshine et al, *Phys. Rev. B* **38**, 893(1988)
- [88] V.F. Shamray, A.B. Mikhailova and A.V. Mitin, *Crystallogr. Rep.* **54**, 584(2009)
- [89] S.K. Bandyopadhyay, P. Barat, P. Sen, U. De, A. De, P.K. Mukhopadhyay, S.K. Kar and

- C.K. Majumdar, *Physica C* **228**, 109(1994)
- [90] R.J. Cava, M. Marezio, J.J. Krajewski, W.F. Peck, A. Santoro and F. Beech, *Physica C* **157**, 272(1989)
- [91] M. Masuzawa, T. Noji, Y. Koike and Y. Saito, *Japan. J. Appl. Phys.* **28**, L1524(1989)
- [92] A.E. Schlögl, J.J. Neumeier, J. Diederichs, C. Allgeier, J.S. Schilling and W. Yelon, *Physica C* **216**, 417(1993)
- [93] T. Machida, Y. Kamijo, K. Harada, T. Noguchi, R. Saito, T. Kato and H. Sakata, *J. Phys. Soc. Japan.* **75**, 083708(2006)
- [94] J. Meng, G. Liu, W. Zhang, L. Zhao, H. Liu, W. Lu, X. Dong and X.J. Zhou, *Supercond. Sci. Technol.* **22**, 045010(2009)
- [95] A.R. Jurelo, S. Andrade, R.F. Jardim, F.C. Fonseca, M.S. Torikachvili, A.H. Lacerda and L. Ben-Dor, *Physica C* **454**, 30(2007)
- [96] I. Matsubara, N. Kida and R. Funahashi, *J. Phys.:Condens. Matter* **13**, 5645(2001)
- [97] C. de la Cruz et al, *Nature* **453**, 899(2008)
- [98] J. Zhao et al, *Nat. Mater.* **7**, 953(2008)
- [99] G. Bos J-W, G.B. Penny, J.A. Rodgers, D.A. Sokolov, A.D. Huxley and J.P. Attfield, *Chem. Commun.* **31** 3634(2008)
- [100] J. Karpinski et al, *Physica C* **469** 370(2009)
- [101] Z-A. Ren et al, *Chin. Phys. Lett.* **25** 2215(2008)
- [102] N.D. Zhigadlo, S. Katrych, S. Weyeneth, R. Puzniak, P.J.W. Moll, Z. Bukowski, J. Karpinski, H. Keller and B. Batlogg, *Phys. Rev. B* **82** 064517(2010)
- [103] V. Aji, A. Shekhter and C.M. Varma, *Phys. Rev. B* **81** 064515(2010)
- [104] Onnes H K 1911 *Commun. Phys. Lab. Univ. Leiden 120b* (Engl. Transl.)
- [105] D. van Delft and P. Kes, *Phys. Today* **63** 38(2010)
- [106] L. Pauling, *Nature of the chemical bond* (New York, Cornell University Press, 1960).
- [107] P. W Anderson, *Mater. Res. Bull.* **30**, 1108 (1971)
- [108] E. H. Lieb and F. Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **20**, 1445 (1968)
- [109] S. A. Kivelson, D. Rokhsar and J. Sethna, *Phys. Rev. B* **38**, 8865 (1987)
- [110] S. Liang, B. Doucot and P. W Anderson, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 365 (1988)
- T Hsu, *Phys. Rev. B* **41**, 11379 (1990)
- [111] G. Baskaran, Z. Zou and P. W. Anderson, *Solid State Commun.* **63**, 973 (1987)
- [112] A. Kitaev, *Ann. Phys.* **303**, 2 (2003)
- [113] G Baskaran and R Shankar (in preparation)
- [114] G. Baskaran, *Phys. Rev. B* **64**, 092508 (2001)

- [115] G. Baskaran and P W Anderson, Phys. Rev. **B37**, 580 (1988)
- [116] I. Affeck et al, Phys. Rev. **B38**, 745 (1988)
- [117] I. Affeck and J B Marston, Phys. Rev. **B37**, 3774 (1988)
- [118] I. Affeck and J B Marston, Phys. Rev. **B37**, 3774 (1988)
- [119] G. Kotliar, Phys. Rev. **B37**, 3664 (1988)
- [120] C. Gros, R. Joynt and T. M. Rice, Z. Phys. **B68**, 425 (1987)
- [121] F. C. Zhang and T. M. Rice, Phys. Rev. **B37**, 3759 (1988)
- [122] Leon N Cooper, Dmitri Feldman, BCS: 50 years,( World Scientific, Singapore, 2011).

Page 448

- [123] P. W. Anderson, G. Baskaran, Z. Zou and T. Hsu, Phys. Rev. Lett. **58**, 2790 (1987)
- [124] A. S. Davydov: Bisoliton Mechanism of High-Temperature Superconductivity, phys. stat. sol. (b) **146**, 619 (1988)
- [125] A.S.Davydov: Nonlinear Bisoliton Model of High-Temperature Superconductivity, Chaos. Solitons & Fractals **1**,145-166 (1991)
- [126] A. S. Davydov: physics reports, (Elsevier science publishers, North-Holland, 1990)

## الفصل الرابع

اقتراح نموذج خاص بظاهرة مسارات الشحن في الأكاسيد

**YBCO**



## مقدمة :

في هذا الفصل سوف نقوم باقتراح نموذج لظاهرة تشكل تحديا جديدا عند محاولة فهم الآلية التي تتم وفقها ظاهرة فوق الناقلية في درجات الحرارة المرتفعة. حيث أنه ومنذ اكتشاف ظاهرة فوق الناقلية ذات درجات الحرارة المرتفعة في الأكاسيد YBCO من طرف Muller و Bednorz سنة 1986 [1] ، فإن ميكانيزم الناقلية الفائقة في هذه الأكاسيد غير معروف بشكل جيد إلى غاية يومنا هذا وينظر إليه المجتمع العلمي كأحد أكبر التحديات التي تواجه الفيزياء الحديثة في جزء كبير من القرن الماضي والحالي . والاكتشاف الجديد الذي تم في هذه الأكاسيد وهو ظاهرة المسارات المشحونة أو  $charged - stripes$  هو تحد جديد لأي نموذج نظري يحاول أن يفسر لغز الناقلية الفائقة في هذه الأكاسيد.

يمكن تتبع تاريخ اكتشاف المسارات المشحونة إلى سنة 1990 أو إلى تاريخ أبكر من ذلك [2,3] ، كما تم مشاهدة ظاهرة الشحن المنتظمة في شكل شرائط في هذه السنوات الأخيرة في عدد واسع من أكاسيد المعادن الانتقالية المطعمة بالثقوب كالكبريت، النيكل، المنغنيت، وقد جذبت هذه الظاهرة المميّزة الكثير من الانتباه بسبب ارتباطها بالآلية تكون الأزواج الالكترونية المتسببة في ظاهرة فوق الناقلية [4-5] . وقد نما هذا الفرع من الفيزياء بسرعة، وهو الشيء الذي يظهره الكم الهائل من المقالات العلمية المنشورة في المجالات المتخصصة.

وطور المسارات المشحونة هو الطور الذي تتركز فيه الشحن الكهربائية المطعمة وبشكل تلقائي مشكلة مناطق جدارية تفصلها عن المناطق العازلة كهربائيا ذات المغناطيسية الحديدية المضادة [6]. هذه المناطق يمكن النظر إليها على أنها نهر من الشحن الكهربائي، تتحرك فيه الشحن الكهربائية بحرية ومبدئيا في اتجاه واحد. وهذا يشبه ما يحدث في نهر المياه في الطبيعة.

إن وجود المسارات المشحونة تم إثباته باستخدام العديد من التقنيات [7-10] ، وطريقة انعراج النترونات هي الطريقة الأكثر استعمالا، وهي الطريقة الأنسب من أجل دراسة المسارات المشحونة ودراسة السبين في نفس الوقت. إن طور المسارات المشحونة تم توقعه باستخدام العديد من التقريبات النظرية [11,12] ، والعديد من النظريات قطعت مسافة كبيرة في هذا الميدان معتمدة على الأساس التجريبي لوجود المسارات المشحونة في المستوي  $CuO_2$  [13]. المعطيات الجديدة تقول بأن ظاهرة المسارات المشحونة هي ظاهرة مشتركة بين جميع أكاسيد الكبريتات فوق الناقلية [14]. وفي الوقت الحالي أي نظرية تريد تفسير ظاهرة فوق الناقلية ذات درجات الحرارة المرتفعة ينبغي أن تأخذ في الحسبان اقتراح نموذج خاص بها لظاهرة المسارات المشحونة. في مركبات الأكاسيد  $CuO_2$  فوق الناقلية تتدفق بسرعة كبيرة جدا لا يمكن من دراستها بشكل مفصل ، ومع ذلك فالمعلومة المؤكدة من قبل النتائج التجريبية هو أن المسارات المشحونة تملك أبعاد قريبة من البعد الواحد  $Quasi - 1D$  [15].

في هذه الدراسة ، قمنا باقتراح نموذج للمسارات المشحونة في الأكاسيد YBCO كسلسلة تكاد تكون أحادية البعد متكونة من أزواج أمواج انعكاس السبين الأحادية  $bisoliton - pairs$ . وفي الأساس يعتبر Davydov أول من قام باقتراح نموذج أزواج الأمواج الأحادية كنموذج لآلية عمل فوق الناقلية ذات درجات الحرارة المرتفعة ، ولكن وجود المسارات المشحونة في  $CuO_2$  لم يكن معروفا في ذلك الوقت ، وبالتالي فالعديد من تقريباته لم تعطي نتائج صحيحة [16,17].

إن النموذج الذي اقترحتنا هنا هو نموذج بسيط للمسارات المشحونة في الأكاسيد YBCO ، حيث استعملنا طريقة أخرى من أجل تفادي عملية الإخماد  $frustration$  في حركة اللثقوب المطعمة الناتجة عن خلفية المغناطيسية الحديدية المضادة الموجودة أصلا. هذا السيناريو أدى بنا إلى عملية تركيب مميزة جدا لنمطين من أزواج الموجة الوحيدة، أحد هذين النمطين ذو اتجاه عمودي VBS بينما الآخر فهو ذو اتجاه أفقي HBS. هذين النمطين يشكلان تركيبات مماثلة تماما لعملية تعبئة لوحة شطرنج ذات بعد  $(n \times 2)$  بواسطة أحجار الدومينو ذات الأبعاد  $(1 \times 2)$ . لقد استعملنا الخواص التي تتمتع بها سلسلة أعداد Fibonacci من أجل عملية تقدير الطول المناسب للمسارات المشحونة التي يستعملها هذا النموذج ومن أجل كتابة دالة الطاقة الحرة. عملية البحث عن القيم الصغرى لهذه الدالة عند نقطة التطعيم المميزة في بيان الطور أعطت قيم دقيقة لدرجة الحرارة الحرجة العظمى الممكنة  $T_{c,max}$  في الأكاسيد YBCO.

#### 1-4- النموذج:

إن حركة ثقب وحيد في خلفية مادة ذات مغناطيسية حديدية مضادة هي حركة متخامدة بسبب الروابط الخاطئة الناتجة عن عملية انعكاس السبين التي تتركها كأثر لعملية الحركة [18]. ومع ذلك يمكننا تقادي هذه الروابط الخاطئة عن طريق عملية التعديل المستمر أو التشويه المتواصل لبنية سلسلة السبين. بحيث تصبح حركة الثقب غير متخامدة مطلقاً، ولن تترك أثر للروابط الخاطئة على طول المسار الذي تتحرك فيه. وهذا يحدث فقط إذا كانت هناك عملية إثارة تؤدي إلى انعكاس اتجاه السبين تماماً في كل مرة قبل أن يقفز الثقب إلى هذا الموقع. وهذا ينبغي أن يتكرر بشكل دوري في كل مرة يحاول فيها الثقب القفز من موقع إلى آخر على طول السلسلة. هذه العملية لا يمكن أن تتم إلا إذا كانت هنالك أمواج وحيدة solitons لعملية انعكاس اتجاه السبين مرافقة لعملية وصول الثقب للموقع المجاور للسبين الذي سوف تتم عليه عملية الانعكاس. يمكن التعبير عن هذه العملية بوصف رياضي هو أن الثقب يحرض عملية انعكاس السبين في الموقع المجاور الذي يريد الانتقال إليه. سوف يكون هنالك نوعين من أشباه الجسيمات quasiparticles التي تحتوي سبين منعكس وحيد في سلسلة هايزنبرغ وقد رمزنا للأول بالرمز  $\oplus$  من أجل السبين المنعكس في اتجاه الأعلى كما رمزنا إلى شبه الجسيم في حالة السبين المنعكس إلى أسفل بالرمز  $\ominus$ . وبسبب عملية التبادل المتواصلة التي سوف تتم فحركة الثقب سوف تتم دون أية عوائق. وهذا يعني أن كل شبه جسيم سوف ينقل شحنة كهربائية قدرها  $(+e)$  وهذا ما يوضحه الشكل (1-4) والطريقة التي تتصرف بها أزواج أشباه الجسيمات ممثلة في الشكل (a1-4). وكنتيجة لذلك سوف يتحرك الزوج بطريقة حرة، والتشوه الطولوجي في سلسلة السبين قد يكون المصدر الفيزيائي لعملية تكون الأزواج في الناقلية الفائقة ذات درجات الحرارة المرتفعة HTSC. إن عملية تصرف الموجة الطولوجية الوحيدة في سلسلة سبين أحادية البعد ذات مغناطيسية حديدية مضادة تم دراستها بشكل مفصل في النظريات الخاصة بالموجة الوحيدة وتوصف بمعادلة  $\sin - \text{Gordon}$  [20,19].

عندما تكون هنالك موجتين أحاديتين غير مترابطتين سوف نخسر طاقة قدرها ستة من طاقة الروابط  $6\varepsilon_b$  أي ثلاثة روابط لكل موجة وحيدة ولكن إذا ترابط اثنين من أشباه الجسيمات من النوع  $\oplus\oplus$  مع شبه الجسيم المعاكس له في اتجاه السبين والذي يحمل نفس الشحنة الكهربائية  $\oplus\ominus$  فسوف نخسر عدد أقل من الروابط، حيث سوف تصبح هنا أربعة روابط بدلاً من ستة الشكل (b1-4)، منذ هذه اللحظة ينبغي التفريق بين نوعين الأزواج bisolitons الأول هو العمودي VBS والذي يكلف مقدار من الطاقة قدره  $4\varepsilon_b$ ، أما النوع الثاني فهو الأفقي HBS ولكنه سوف يكلف طاقة قدرها  $6\varepsilon_b$  الشكل (c1-4). ولكننا نلاحظ بسهولة أن جمع اثنين من النمط الأفقي سوف يكون DHBS وهذا يكلف طاقة أقل  $4\varepsilon_b$ ، وبالتالي هذه العملية سوف تكون أفضل من وجهة النظر الطاقوية. ونستنتج أن VBS يمكن أن تكون منفردة أو متعددة بينما HBS ينبغي أن تكون مضاعفة أي DHBS بدلاً من HBS. الطاقة المستفادة من خلال هذه الارتباطات تتحول إلى طاقة  $\varepsilon_f$  حركية للموجة الوحيدة كما يلي: بالنسبة ل VBS الطاقة الحركية لاثنتين من الموجات الوحيدة تساوي  $2\varepsilon_f = 6\varepsilon_b - 4\varepsilon_b$ ، وهذا يعطي  $\varepsilon_f = \varepsilon_b$ . أما في حالة DHBS فمن الواضح أن  $4\varepsilon_f = 12\varepsilon_b - 8\varepsilon_b$  والتي تعطي نفس النتيجة أيضاً أي  $\varepsilon_f = \varepsilon_b$ . مع العلم أننا نحتاج إلى طاقة قدرها  $3\varepsilon_b$  من أجل تحريك ثقب واحد، حيث نقوم بكسر ثلاثة روابط عند تحريك ثقب في كل مرة. ولكننا نعلم أيضاً أن، طاقة الثقب تساوي طاقة فرمي وبالتالي  $E_f = 3\varepsilon_b$ . عند اعتبارنا فقط للتفاعلات الأقل تكلفة من ناحية الطاقة نجد أن توزيع عدد  $n$  من أزواج أحاديات الموجة في مسار أحادي البعد يكافئ بالضبط عملية توزيع  $n$  قطعة دومينو في لوحة شطرنج ذات أبعاد  $(n \times 2)$ . ويمكن لأعداد Fibonacci أن تصف عدد الأنماط الممكنة بشكل دقيق [22,21]. ومنه دالة الطاقة الحرة ل Hemholtz من أجل عملية تعبئة  $n$  من أزواج أحاديات الموجة في لوحة شطرنج  $(n \times 2)$  هي:

$$\mathcal{F} = \sum_n u_n - K_B T_c \sum_n \text{Log}_e \Omega_n \quad (1.4)$$

حيث  $n$  هو عدد أزواج أحاديات الموجة الموجودة في المسارات المشحونة، أما  $u_n = 4n\epsilon_b$  فهي طاقة النمط رقم  $n$ . من أجل  $n$  من الأزواج هنالك عدد قدره  $F_{n+1}$  من الأنماط الممكنة، ومن أجل كل زوج هنالك مكانين محتملين لموجة وحيدة. وبالتالي فعدد التبديلات هي  $\Omega_n = (F_{n+1})^{2n}$ . كما ينبغي أن نأخذ هنا في الحسبان بأن طاقة فرمي  $E_F = 3\epsilon_b$  متناسبة مباشرة مع تركيز الثقوب المطعمة لكل ذرة نحاس لكل مستوي والتي يرمز لها عادة بالرمز  $p$ . مع الأخذ في عين الاعتبار بأن طاقة مستوى فرمي  $E_F \sim 0.3\text{eV}$  في المادة العازلة الأصلية والتي كوننا منها المادة فائقة الناقلية YBCO عن طريق عملية التطعيم بواسطة الثقوب. كما أن كل التجارب تقريبا تتفق على مجال التطعيم  $0.05 < p < 0.3$ ، لهذا السبب سوف نستعمل العبارة البسيطة  $E_F \sim p$  وهذا بوحدة الإلكترون فولت  $\text{eV}$ . بالتعويض في المعادلة (1-4) نجد بأنها تتحول إلى الشكل البسيط التالي :

$$\mathcal{F} \approx \sum_n \frac{4}{3} np - K_B T_c \sum_n 2n \text{Log}_e \frac{\varphi^{n+1}}{\sqrt{5}} \quad (2.4)$$

حيث  $\varphi = (1 + \sqrt{5})/2$  تسمى النسبة الذهبية [23]، كما أن  $\varphi^n/\sqrt{5}$  هي تقريب جيد لأعداد فيبوناكي  $F_n$  من أجل  $n \geq 14$ . النتائج التجريبية تدل على أن المسارات المشحونة تملك أطوال محدودة، ولهذا السبب سوف نعتبر المسارات المشحونة التي تحوي على  $(n-1)$  زوج من أحاديات الموجة، مسارات متوازنة إذا لم تتقبل إضافة زوج آخر إليها. وإذا حدث وأضفنا أحد الأزواج إليه، فسوف يتحول ثانية من النمط  $n$  إلى النمط  $(n-1)$ . ولهذا فاحتمال استقرار المسار المشحون معرف بالنسبة التالية :

$$p_s = F_n/F_{n+1} \quad (3.4)$$

حيث تستطيع  $p_s^{-1}$  أن تتقارب إلى قيمة مستقرة  $\varphi = 1.6180$ ، والتي تسمى بالنسبة الذهبية golden – ratio من أجل  $n \geq 14$ . ومن المفيد أن نذكر بأن أعداد فيبوناكي هي أعداد مميزة جدا، وقد تم اكتشافها في عدد كبير من الظواهر الطبيعية، كما أن العدد الذهبي  $\varphi$  هو النهاية التي تؤول إليها النسبة بين عددين متتاليين من أعداد فيبوناكي. وهو موجود في ظواهر فيزيائية كثيرة ابتداء من الذرة إلى المجرة.

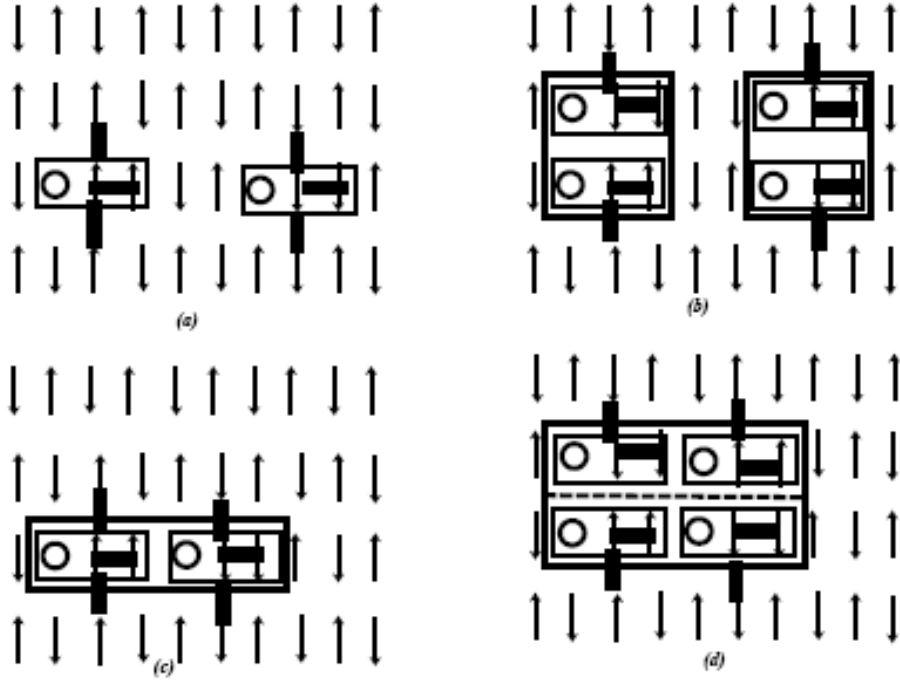
ولهذا سوف نعتبر الشرط  $n \geq 14$  كشرط أساسي من أجل ظهور المسارات المشحونة المستقرة. إن طول HBS يساوي نفس الطول المكون من اثنين VBS المتجاورين وهو يساوي بالتقريب  $2a$  من أجل VBS، باستخدام قيمة ثابت الشبكة للمستويات  $\text{CuO}_2$  حيث  $a \sim 3.85\text{\AA}$ ، نجد أن طول المسار المشحون المتوازن يساوي  $28a$  وبالتعويض نجده يساوي  $107.8\text{\AA}$  من أجل الكبريت. هذه القيمة هي قيمة دقيقة بالمقارنة مع النتائج التجريبية [24]، والتي أعطت طول يقارب  $100\text{\AA}$ . كما أن عملية البحث عن قيمة صغرى للمعادلة (2-4) عند نقطة التطعيم المميزة  $p^{\text{opt}}$  بالنسبة إلى الأعداد  $n$  أدت إلى النتيجة التالية :

$$K_B T_c^{\text{max}} = \frac{2p^{\text{opt}}}{3 \text{Log}_e \frac{\varphi^{2n+1}}{\sqrt{5}}} \quad (4.4)$$

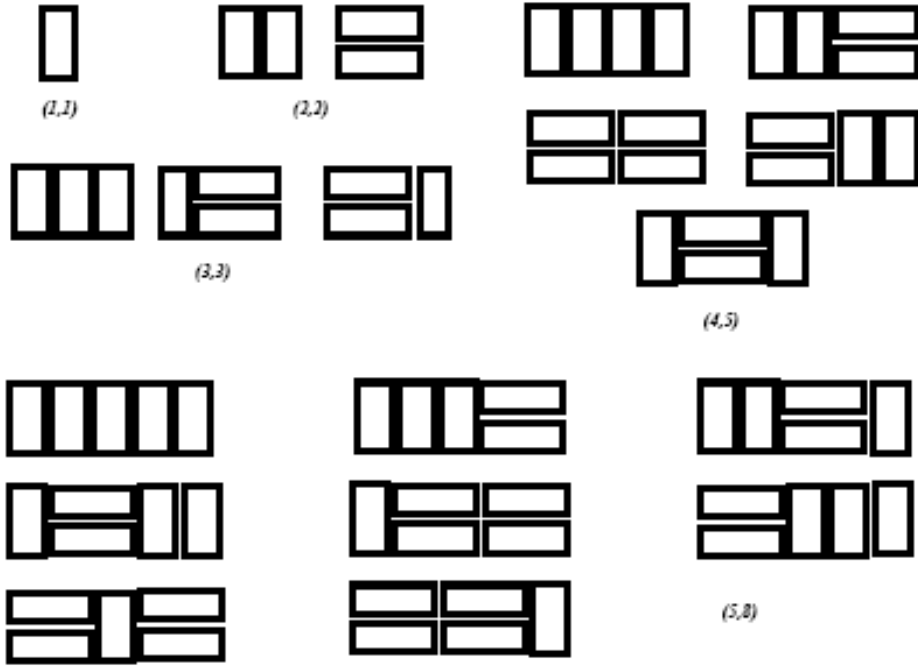
بناء على النتائج التجريبية لبيان الطور  $(T_c, p)$  الخاص بعملية التطعيم باستخدام الثقوب في الكبريت [25-28]، فإن درجة الحرارة الحرجة  $T_c$  تأخذ أكبر قيمة لها عند نقطة التطعيم المميزة  $p^{\text{opt}} = 0.16$ ، وكما رأينا سابقا فإن المسارات المشحونة تصبح شبه مستقرة من أجل  $n \geq 14$ ، وبالتعويض في (4-4) نجد أن  $K_B T_c^{\text{max}} \sim 8.11\text{meV}$ . وبالتالي فإن درجة الحرارة  $T_c^{\text{max}} \sim 94.14\text{K}$ ، هذه القيمة تعتبر قيمة دقيقة بالنسبة للمركب YBCO وهي تتفق بشكل جيد مع التجربة حيث  $T_c^{\text{max}} \sim 93\text{K}$ .

هذا النموذج تم بناؤه على أساس وجود نمطين من الأزواج الخاصة بأحاديات الموجة أي HBS و VBS وهو ما يعطي احتماليين مختلفين، أفقي و عمودي لكييفية اتجاه المسارات المشحونة في المستويات  $\text{CuO}_2$ ، مع العلم أن هذين الاتجاهين موثقين جيدا من خلال النتائج التجريبية. إن النتائج الدقيقة التي تحصلنا

عليها في هذا الجزء من خلال هذا النموذج البسيط لعملية تكون المسارات المشحونة في المركبات YBCO يشجع كثيرا على مواصلة تطوير هذا النموذج من أجل الإجابة على الكثير من الأسئلة المفتوحة ، والتي من أهمها الدور الذي تلعبه المسارات المشحونة في منطقة ما بعد التطعيم.



الشكل رقم (1-4) : رسم تخطيطي يظهر أنماط الارتباطات الممكنة لشبه جسيم ولأزواج أشباه الجسيمات ، حيث مثلنا الثقوب بدوائر فارغة بينما مثلنا الروابط بواسطة خطوط عريضة وقصيرة وهو مقسم إلى أربعة أشكال منفصلة كما يلي : (a) موجتان أحاديتان غير مترابطتان تكلفان  $6\epsilon_b$  من الطاقة، (b) اثنتين من VBS يكلفان  $4\epsilon_b$  لكل منهما (c) شبه جسيم واحد من النمط HBS يكلف طاقة قدرها  $6\epsilon_b$  (d) شبه جسيم من النمط DHBS يكلف طاقة  $4\epsilon_b$  لكل زوج من أحاديات الموجة.



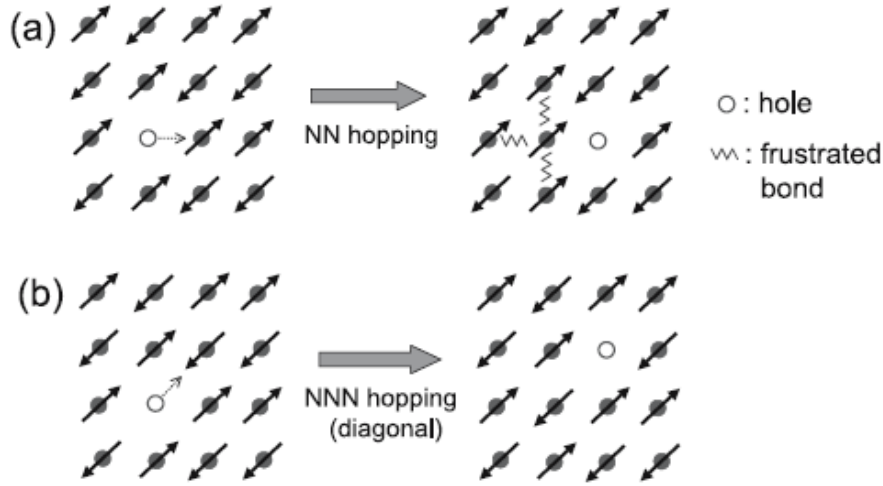
الشكل رقم (2-4) : رسم تخطيطي يظهر الكيفية التي تصف بها أعداد فيبوناكي  $F_{n+1}$  الطرق الممكنة من أجل عملية ملئ لوحة شطرنج ذات بعد  $(n \times 2)$  بواسطة قطع دومينو ذات بعد يساوي  $(2 \times 1)$  ، بحيث يغطي كل دومينو مربعين متجاورين من لوحة الشطرنج . كما أن أعداد فيبوناكي يمكنها أن تصف بالضبط عدد الشبكات المربعة  $(n \times 2)$  التي يمكن تكوينها باستخدام قطع الدومينو  $(2 \times 1)$  ، ويمكننا أن نلاحظ هنا كيفية عمل هذا في الحالات الأولى  $(n, F_{n+1})$  من أجل  $n = 1,2,3,4,5$  ، التفصيل في [22,21] .

#### 4-2- استنتاج بيان الطور ( $T_c, p$ ) من خلال النموذج المقترح :

بالرغم من مرور قرابة الثلاثين سنة منذ اكتشاف الناقلية الفائقة ذات درجات الحرارة المرتفعة HTSC في الكبريت ، إلا أن بيان الأطوار الخاص بها بقي غامضاً، كما أن أصل شبه المنطقة الممنوعة PG لا يزال خاضعاً للمناقشة. هذا الموضوع عبارة عن لغز لم يتم التوصل إلى حل له إلى حد هذه اللحظة [29]. في الوقت الحالي هناك الكثير من النماذج النظرية، ولكن القليل منها فقط يتفق مع بعض النتائج التجريبية والتي تم التوصل إليها باستخدام تقنيات مختلفة مثل ARPES و STM بالإضافة إلى العديد من التقنيات الأخرى. و في الحقيقة هنالك نموذجين مهمين أحدهما تم اقتراحه من طرف Anderson ويسمى RVB أي نظرية روابط التكافؤ المتجاوبة [30-32]. أما الثاني فقد تم اقتراحه من طرف Davydov ويسمى نظرية أزواج أحاديات الموجة bisoliton .

في نظرية RVB الخاصة بالناقلية الفائقة عند درجات الحرارة المرتفعة يمكن التوصل إلى شكل تقريبي لبيان الأطوار عن طريق افتراض وجود سلمين لدرجة الحرارة، ومع ذلك فالكثير من الأسئلة مازالت مفتوحة حول هذه النظرية. أما نموذج Davydov فقد تم اقتراحه في الأساس من أجل تفسير كيفية انتقال الإلكترونات بين الخلايا الحية، وعندما اقترح استعمال هذا النموذج من أجل HTSC لم يكن يعلم حينها بوجود المسارات المشحونة في المستويات  $CuO_2$  ، وكنتيجه لذلك فمعظم حساباته لم تكن قريبة من النتائج التجريبية [33,34] .

النتيجة الأساسية لنموذج دافيدوف هي الكمية  $D = E_s - \hbar\omega$  ، حيث  $D$  هي طاقة الارتباط بين الجسيم وبين تشوه السلسلة الناتج عن الجسيم في حد ذاته.  $E_s$  هي الطاقة الحركية للسوليتون أما  $\hbar\omega$  فهي الطاقة الناتجة عن الاثارة الموضوعية [35]. بعض خواص تكون الأزواج يمكن استنتاجها باستخدام نموذج دافيدوف، ولكن هذا النموذج لم يستطع شرح بيان الطور ( $T_c, p$ ) بالاعتماد فقط على نظرية bisoliton . إن النموذج المستخدم هنا هو بسيط جداً من الناحية النظرية، حيث استعملنا طريقة أخرى من أجل تمديد معادلة دافيدوف. إن الفرضيات الأساسية لنظرية دافيدوف هي على اتفاق تام مع الشكل العام للتقريب الذي قمنا به. حيث و في الأول قمنا بصياغة شكل كفي للموضوع ثم قدمنا طرق مختلفة للتعامل معه، أما الحسابات الكمية فقد كانت الخطوة التالية حيث توصلنا إلى نتائج جديدة قمنا بشرحها. بالإضافة إلى العديد من الاستنتاجات. إن الشيء الملاحظ في هذا النموذج هو الكم الهائل من النتائج التجريبية التي يمكن التوصل إليها باستخدام عدد قليل من الوسائط.



الشكل رقم (3-4) : رسم تخطيطي يظهر (a) عملية تخامد حركة الثقب بسبب الخلفية المغناطيسية التي يتحرك من خلالها (b) يظهر فيه إمكانية تفادي عملية تخامد حركة الثقب ويتم هذا بواسطة الانتقالات القطرية [36]

#### 3-4 الحسابات:

في البداية سوف نقوم بحسابات نصف كلاسيكية ثم نقرب من النهاية الكمية ، لذلك سوف نفترض حركة الموجة الوحيدة المشحونة عبارة عن حركة مستمرة تكافئ حركة جسيم مشحون موجود في حقل مغناطيسي والتي سوف تكون حركة حلزونية منتظمة ذات نصف قطر ثابت حول هذا الحقل ولنفرض أن اتجاه الحقل هو المحور  $x$  ، يمكن تجزئة حركة الجسيم المشحون إلى حركة مستقيمة منتظمة بالاتجاه الحقل المغناطيسي بسرعة  $v_{\parallel}$  وإلى حركة دائرية منتظمة حول هذا الحقل بسرعة  $v_{\perp}$  . هذه الطريقة تسمح لنا بأن نجد جميع الخصائص المذكورة سابقا في عبارة عامة واحدة. المكافئ الكمي لهذه الحركة هي مستويات Landau الطاقوية:

$$\varepsilon_l = \hbar\omega_c \left( n_l + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2}{2m^*} k_z^2 \quad (5.4)$$

حيث  $m^*$  هي الكتلة الفعالة لناقلات الشحنة ، و  $\omega_c$  هو تواتر السيكلوترون. في الاتجاه  $x$  سوف تكون لدينا حركة حلزونية، وبالتالي فمسقط حركة  $n$  موجة وحيدة تظهر على شكل  $n_s$  من النقاط المتكافئة التي تتحرك في دائرة نصف قطرها  $R$  في المستوي  $xy$ . باستخدام مبدء الارتياب لهايزنبرغ  $\delta s \delta p_{\perp} \sim \hbar$  حيث  $p_{\perp}$  هي المركبة العمودية لكمية الحركة  $p$  ، و  $\delta s = 2\pi R/n_s$  هو البعد المتوسط لنقطتين متجاورتين من مجموعة النقاط  $n_s$ . من خلال هذه العلاقات البسيطة سوف يصبح من السهل حساب القيمة المتوسطة للطاقة الحركية العمودية  $\varepsilon_{\perp}$  كالتالي :

$$\langle \varepsilon_{\perp} \rangle = \left( \frac{1}{2} \hbar\omega_c \right)^2 \varepsilon_f^{-1} n_s^2 \quad (6.4)$$

حيث  $\varepsilon_f$  تمثل الطاقة الحركية للسوليتون، وكتقريب أولي سوف نقوم باستبدال  $\varepsilon_{\perp}$  بالقيمة المتوسطة  $\langle \varepsilon_{\perp} \rangle$ . بالتعويض في المعادلة رقم واحد ، نجد المعادلة المختزلة الجديدة كما يلي :

$$\tilde{\varepsilon}_l = \hbar\tilde{\omega}_c \left( n_l + \frac{1}{2} \right) + \left( \frac{1}{2} \gamma \hbar\tilde{\omega}_c \right)^2 n_s^2 \quad (7.4)$$

سوف يكون هنالك صراع بين الطاقة الحركية و  $\tilde{\varepsilon}_x$  التي تعطى بالعبارة التالية :

$$\tilde{\varepsilon}_x = \hbar\tilde{\omega}_x \left( n_x + \frac{1}{2} \right) + \tilde{\varepsilon}_j \quad (8.4)$$



أبسط إثارة سوف تكون عملية انقلاب سبين واحد، حيث رمزنا إلى طاقة الإثارة المختزلة لسلسلة سبين ذات مغناطيسية حديدية مضادة بالرمز  $\tilde{\epsilon}_J$  [42,41]، أما الحد  $\hbar\tilde{\omega}_c \left(n_x + \frac{1}{2}\right)$  فيمثل طاقة الإثارة الخطية. دعنا الآن نقوم بإدخال الفرق بين  $\tilde{\epsilon}_x$  و  $\tilde{\epsilon}_J$  في حساباتنا:

$$\tilde{\epsilon}_n = \tilde{\epsilon}_J - \tilde{\epsilon}_x \quad (9.4)$$

المعادلة (9-4) تعبر عن التوازن بين التشتت والتأثير الغير خطي، باستخدام المعادلات السابقة والرمز للفرق  $\hbar\tilde{\omega}_c - \hbar\tilde{\omega}_x$  بالرمز  $\hbar\tilde{\omega}$  نجد مايلي:

$$\tilde{\epsilon}_n = \hbar\tilde{\omega} \left(n + \frac{1}{2}\right) + \left(\frac{1}{2}\gamma\hbar\tilde{\omega}_c\right)^2 n^2 - \tilde{\epsilon}_J \quad (10.4)$$

وبما أن  $\tilde{\epsilon}_0 = 0$  فالتعويض في المعادلة (10-4) سوف يعطي النتيجة التالية:

$$\tilde{\epsilon}_J = \frac{1}{2}\hbar\tilde{\omega} \quad (11.4)$$

هذه العلاقة تظهر  $\tilde{\epsilon}_J$  كمساهمة تأثير طاقة الفراغ على طاقة السوليتون، كما تسمى هذه النقطة باهتزاز النقطة الصفورية، وهي تصف ظاهرة فيزيائية حقيقية، حيث أن الطاقة الصفورية لسلسلة هايزنبرغ ذات مغناطيسية حديدية مضادة ليست فقط حالة Néel بل تحتوي على مزيج من الحالات ذات أعداد مختلفة من انقلابات السبين [38]. باستخدام المعادلات السابقة يمكننا التعبير عن  $\tilde{\epsilon}_n$  بالشكل البسيط التالي:

$$\tilde{\epsilon}_n = \left(\frac{1}{2}\gamma\hbar\tilde{\omega}_c\right)^2 n^2 + \hbar\tilde{\omega}n \quad (12.4)$$

القيمة الصغرى لهذه الدالة يجب أن تكون مساوية إلى (-1)، لأنها مجرد فرق بين طاقتين مختزلتين  $\tilde{\epsilon}_x$  و  $\tilde{\epsilon}_J$ ، وأصغر قيمة لا يمكن أن تكون أقل من  $\epsilon_f$  بالاعتماد على هذه الطريقة يمكننا الوصول إلى أن:

$$\tilde{\epsilon}_n = x^2n^2 + 2\lambda xn \quad (13.4)$$

حيث  $\hbar\tilde{\omega} = 2x$ ، و الوسيط  $\lambda = \pm 1$ ، وكننتيجة لهذه الحسابات نعتقد أن الحد  $\lambda = -1$  يصف عملية التطعيم بالثقوب بينما الحد  $\lambda = +1$  يعبر عن عملية التطعيم باستخدام الالكترونات، وحسب هذا النموذج فان هذا يعتمد على الاتجاه الذي ينقلب به السبين من وضعية إلى أخرى، إن كانت في اتجاه عقارب الساعة أو عكس عقارب الساعة. ومن خلال ما سبق نجد أن:

$$\gamma = \lambda \left(1 - \frac{\omega_x}{\omega_c}\right) \quad (14.4)$$

وحسب ما هو معروف في ميكانيكا الكم، فكل سبين يستطيع أن يمتلك قيمتين فقط إلى أعلى أو إلى أسفل، وعند هذه النهاية الكمية فهناك نمطين فقط من السوليتون  $\uparrow\uparrow$  و  $\downarrow\downarrow$ . والعلاقة نصف الكلاسيكية (13-4) تصبح شبه كمية عند قيامنا بالتعويض  $n \rightarrow 2$ . دعنا نقوم بتوسيع النتيجة الرئيسية التي توصل إليها دافيدوف والتي كنا قد ذكرناها في المقدمة وهذا من وجهة نظر ظواهرية فنعتبر  $\epsilon_2 = 2\Delta_0$  وهذا عند النهاية الكمية  $n = n_s = 2$ . هذه العبارة التي تبدو شديدة البساطة، تسمح لنا في الواقع بالتعامل مع الكثير من التأثيرات باستعمال خواص عامة ودون التطرق إلى تفاصيل طبيعة التفاعلات. في الحالة  $\lambda = -1$ ، يمكننا إعادة كتابة المعادلة (13-4) كما يلي:

$$2\tilde{\Delta}_0 = 4x(x-1) \quad (15.4)$$

دعنا ندخل الآن في حساباتنا المقدارين الجديدين  $T_c^*$  و  $T_F^*$ ، حيث  $E_g = 2\Delta_0 = 4k_B T_c^*$  وكذلك  $\epsilon_f = E_f^* = k_B T_F^*$ ، التعويض في المعادلة (15-4) يعطي النتيجة المهمة التالية:

$$\frac{T_F^*}{T_c^*} = \frac{1}{x(x-1)} \quad (16.4)$$

وبما أن  $T_F \gg T_c$  فهذا يتحقق فقط إذا كان  $x(x-1) \ll 1$ ، ومن (15-4) نجد أن إشارة الجداء  $x(x-1)$  ينبغي أن تكون موجبة، هذين الشرطين يعطيان  $0 < x < \varphi^{(-)}$  أو  $\varphi^{(+)} < x < 1$ ، حيث  $\varphi^{(\pm)} = (1 \pm \sqrt{5})/2$  هما حلين للمعادلة من الدرجة الثانية  $x^2 - x - 1 = 0$ . الحل

الموجب يرمز له بالرمز  $\varphi$  ويسمى بالنسبة الذهبية [43-45]. دعنا نقوم بتعريف التطعيم الفعال للثقوب  $y = p + \delta$  ، حيث  $p$  هو رمز التطعيم المعتاد ، أما  $\delta$  فهي تمثل مجال السبينات المجمدة - spin glass وهي تساوي 0.05- وموجودة في كل البيانات التجريبية للطور. بناء على هذا النموذج ينبغي أن تكون عملية تكوين ثقب تكون مترافقة بعملية انعكاس للسبين في اقرب موقع مجاور للثقب باتجاه الحركة ، ولهذا فنسبة الثقوب المتبقية  $(1 - y)$  ينبغي أن تكون متناسبة مع  $P_J^{-1}$  حيث  $P_J$  تمثل احتمال حدوث انقلاب للسبين أو احتمال حدوث إثارة موضعية بطاقة إثارة قدرها  $\epsilon_J$ . وأكثر من هذا، هذه الظاهرة تتم داخل المسارات المشحونة التي تكلمنا عنها سابقا ووجدنا بأن لها أطوال محدودة ولهذا يمكن القول بطريقة أخرى أن هذه المسارات تبلغ طاقة استيعابها العظمى وتنتشع بالسوليتون ، ولهذا فينبغي للعدد  $(1 - y)$  أن يتناسب مع  $P_S^{-1}$  ، حيث  $P_S$  تعبر عن احتمال تشبع المسار المشحون أو استقراره كما عبرنا عن ذلك سابقا . و من خلال هذه التعريفات نستطيع أن نكتب:

$$(1 - y) = P_G P_J^{-1} P_S^{-1} \quad (17.4)$$

ويسبب التوزيع العشوائي لأماكن التطعيم ، فعامل التناسب  $P_G$  يمثل الاحتمال الهندسي للتطعيم ، مع العلم أن العدد الكلي للأماكن الممكنة للتطعيم لكل أيون نحاس Cu في عازل Mott الأصلي للكبريتات هو:

$$P_G = \left( \frac{1}{2} + \delta \right) \quad (18.4)$$

ولأن الموجة الوحيدة تتصرف بنفس الطريقة التي يتصرف بها الجسيم الكلاسيكي ، نجد أنه من الأسهل استخدام الصيغة الكلاسيكية للاحتمال الترموديناميكي عند درجة حرارة  $T_c = T_c^*$  كمايلي :

$$P_J(T_c = T_c^*) = C_J \exp(-\beta_c^* \epsilon_J) \quad (19.4)$$

حيث  $C_J$  هو ثابت التنظيم ، بينما  $\beta_c^* = (k_B T_c^*)^{-1}$  و  $\epsilon_J = \epsilon_f x$  . باستخدام (4-16) نجد أن:

$$P_J(T_c = T_c^*) = C_J \exp(1 - x)^{-1} \quad (20.4)$$

بناء على شروط المعادلة (4-16) ،  $x(x - 1) \ll 1$  ، وبالتالي فإن  $x = 1 + \epsilon$  أو  $x = -\epsilon$  ، حيث  $0 < \epsilon \ll 1$  ، وبما أن  $n_0 = -x^{-1}$  هو عدد موجب ، فينبغي أن نأخذ القيم السالبة للمتغير  $x$  . وبالتالي فعبارة الاحتمال يمكن تكتب بالشكل المبسط التالي:

$$P_J(x) \sim C_J \exp(1 + x) \quad (21.4)$$

ومجموع الاحتمالات الكلية ينبغي أن يكون مساو للواحد وهذا الذي نسميه شرط التنظيم:

$$\int_{-\infty}^0 C_J \exp(1 + x) dx = 1 \quad (22.4)$$

وعن طريق حساب بسيط جدا نجد أن  $C_J = e^{-1}$  والاحتمال المنظم يصبح عبارة عن الدالة الأسية :

$$P_J(x) \sim \exp(x) \quad (23.4)$$

باستخدام النتائج السابقة يمكننا أن نجد علاقة مهمة بين  $x$  و  $y$  كمايلي :

$$y = 1 - \varphi \left( \frac{1}{2} + \delta \right) \exp(-x) \quad (24.4)$$

وبما أن  $x$  ينبغي أن يأخذ قيم صغيرة جدا ، فسوف نعتبر  $x \sim 1 - \exp(-x)$  ، والمعادلة رقم (4-24) تصبح عبارة خطية بسيطة جدا كما يلي :

$$y \sim ax + b \quad (25.4)$$

حيث  $a = \varphi \left( \frac{1}{2} + \delta \right)$  و  $(a + b) = 1$  . هذه العلاقة المهمة والتي تربط بين التطعيم الفعال  $y$  مع المتغير عديم الوحدة  $x$  . إن طاقة فرمي  $E_F$  تتناسب مباشرة مع التطعيم لهذا سوف نعتبر  $E_F = \kappa y$  حيث  $\kappa$  عبارة عن ثابت تناسب [46-53] . وبالتالي من المعادلة (4-25) ، يمكننا أن نجد  $y \approx b$  عندما يقترب الوسيط  $x$  من الصفر أي لما  $x \rightarrow 0^-$  ، وهذا يعطي قيمة تقريبية للثابت  $\kappa \approx 0.3b^{-1}$  ، مع العلم أن طاقة فرمي  $E_F$  تساوي بالتقريب 0.3eV في الكبريتات أما  $b \approx 0.272$  و بالتالي  $\kappa \approx 1.1$  .

#### 4-4 الخواص الترموديناميكية :

من خلال العلاقة التي توصلنا إليها في هذا النموذج يمكننا أن نجد بعض الخواص الترموديناميكية المهمة ، والتي تدل على مدى صحة هذا النموذج المقترح . ومن بين الخواص الترموديناميكية التي يمكننا احتسابها السعة الحرارية، الأنتروبي وكذلك دالة الطاقة الحرة . بالنظر للعلاقة (4-13) نستنتج مباشرة أن طاقة أحد الثنائيات المنقسمة في المستوي رقم  $n$  بجوار درجة الحرارة الحرجة  $T_c$  هي عبارة عن طاقة المنطقة الممنوعة مضافا إليها طاقة التقلبات الترموديناميكية التي تتم بجوار  $T_c$  ، حيث سنأخذها هنا في أبسط أشكالها وهو الشكل الخطي في درجة الحرارة كما يلي:

$$\varepsilon_n(x, T) = \varepsilon_0 + 2\Delta_n(T = 0) + \theta(\varepsilon_n - \varepsilon_0)\eta(x)k_B T \quad (26.4)$$

حيث  $\varepsilon_f = \varepsilon_0$  و  $\theta(\varepsilon_n - \varepsilon_0)$  هي عبارة عن دالة- Heaviside وهي تعبر عن حصر التقلبات الكوانتية على الطاقات الأعلى من المستوي  $\varepsilon_0$  أما  $\eta(x)$  فهي عبارة عن وسيط يعبر عن قوة تأثير التقلبات الترموديناميكية بجوار درجة الحرارة الحرجة، و يمكننا التعبير عن العلاقة السابقة كما يلي :

$$\varepsilon_n(x, T) = \varepsilon_0(nx + 1)^2 + \theta(\varepsilon_n - \varepsilon_0)\eta(x)k_B T \quad (27.4)$$

ويمكننا أن نكتب العلاقة السابقة كمجموع لأنواع مختلفة من الطاقات والتأثيرات كما يلي:

$$\varepsilon_n(x, T) = x^2\varepsilon_n^f + 2x\varepsilon_n^h + \varepsilon_n^T + \varepsilon_0^0 \quad (28.4)$$

وهي تعبر عن صراع بين ثلاثة أنماط من الطاقة، الحد  $\varepsilon_n^f = \varepsilon_0 n^2$  يعبر عن الطاقة الحركية لجسيم حر، موجود داخل منطقة محددة، وهي في هذه الحالة مجال ترابط الثنائيات ، أما الحد  $\varepsilon_n^h = \varepsilon_0(n + 1/2)$  فهي تمثل طاقة الهزاز التوافقي وهي تعبر عن طاقة التجاذب التي تتسبب في تشكل هذه الثنائيات . الحد  $\varepsilon_n^T$  الذي يحوي درجة الحرارة يعبر عن قوة التقلبات الترموديناميكية كما ذكرنا سابقا . أما  $\varepsilon_0^0$  فيمكن اعتبارها كطاقة الحالة الأرضية. و بالتالي نرى وجود صراع بين مجموعة من الطاقات تحاول تجزئة الثنائيات، وأخرى تحاول أن تجعلها مترابطة. ويلعب  $|x|^{-1}$  في هذه الحالة دور معامل قوة الترابط  $g$  ، ونلاحظ من خلال العلاقة أنه ينبغي أن يكون  $x$  مقدار سالب . كما أن درجة انحلال المستويات الطاقوية هي  $d_n = 2(n - 1)$  بسبب وجود احتمالين لاتجاه السبين في كل وضعية . وبما أننا نتكلم عن ثنائيات فنلاحظ عدم وجود الحالة  $n = 1$  من الناحية الإحصائية لأن  $d_1 = 0$  . من أجل إيجاد الخواص الترموديناميكية ، سوف نعتبر عدد كبير  $N$  من المسارات المشحونة تحتوي على جميع تركيبات الثنائيات الممكنة ، باستخدام المعادلة رقم (4-28) وكذلك تقريبا- Sterling [54] نجد أن دالة القسمة  $Z$  هي عبارة عن :

$$Z \sim \left\{ 2N^{-1} e^{-(\eta-1)} \sum_0^{\infty} j e^{-\frac{1}{\xi\alpha^2}(j+\alpha)^2} \right\}^N \quad (29.4)$$

حيث  $\alpha = (1 - x^{-1})$  كما أن  $T/T_c = \mu\xi$  ،  $T_c$  هي درجة الحرارة الحرجة بينما  $\mu$  عبارة عن وسيط يعطى بالعلاقة التالية :

$$\mu = \frac{\varepsilon_0}{k_B T_c} (1 - x)^2 \quad (30.4)$$

وكتقريب أولي سوف نعتبر  $N \sim \sigma D(E_F)k_B T$  ، حيث  $D(E_F)$  هي كثافة الحالات عند مستوي فرمي ، أما  $\sigma$  فهو ثابت تناسب . باستخدام المعادلة (4-29) وكذلك عبارة الجمع الخاصة أويلر-ماكلوران [55] يمكننا أن نحصل على السعة الحرارية المختزلة بسهولة :

$$\frac{C_v}{C} = 2(1 + \bar{\lambda})\xi + \quad (31.4)$$

$$\xi \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \xi^2 \log_e \left\{ \begin{array}{l} \alpha^2 \left[ 1 - 2 \sum_{p=1}^{\infty} (2p-1) \frac{B_{2p}}{(2p)!} \left( \frac{1}{\alpha^2 \xi} \right)^p H_{2(p-1)} \left( \frac{1}{\sqrt{\xi}} \right) \right] \times \\ \exp \left( \frac{-1}{\xi} \right) + \alpha^2 \sqrt{\pi \xi^{-1}} \left[ -1 + \operatorname{erf} \left( \frac{1}{\sqrt{\xi}} \right) \right] \end{array} \right\}$$

حيث  $H_{2(p-1)}$  هي كثيرات حدود هرمت ،  $B_{2p}$  هي أعداد برنولي ، أما  $C$  و  $\bar{\lambda}$  فهما يعطيان بالعبارة :

$$C = \sigma k_B \varepsilon_0 (1-x)^2 D(E_F) \quad (32.4)$$

$$\bar{\lambda} = -\log_e [\sigma \varepsilon_0 (1-x)^2 D(E_F)] - \eta \quad (33.4)$$

ويمكننا استنتاج معامل سومرفيلد من خلال المعاملات (31-4) كما يلي:

$$\gamma = 2\sigma k_B^2 D(E_F) (1 + \bar{\lambda}) \quad (34.4)$$

## الفصل الخامس

### النتائج والمناقشة

## أولا الخواص الترموديناميكية:

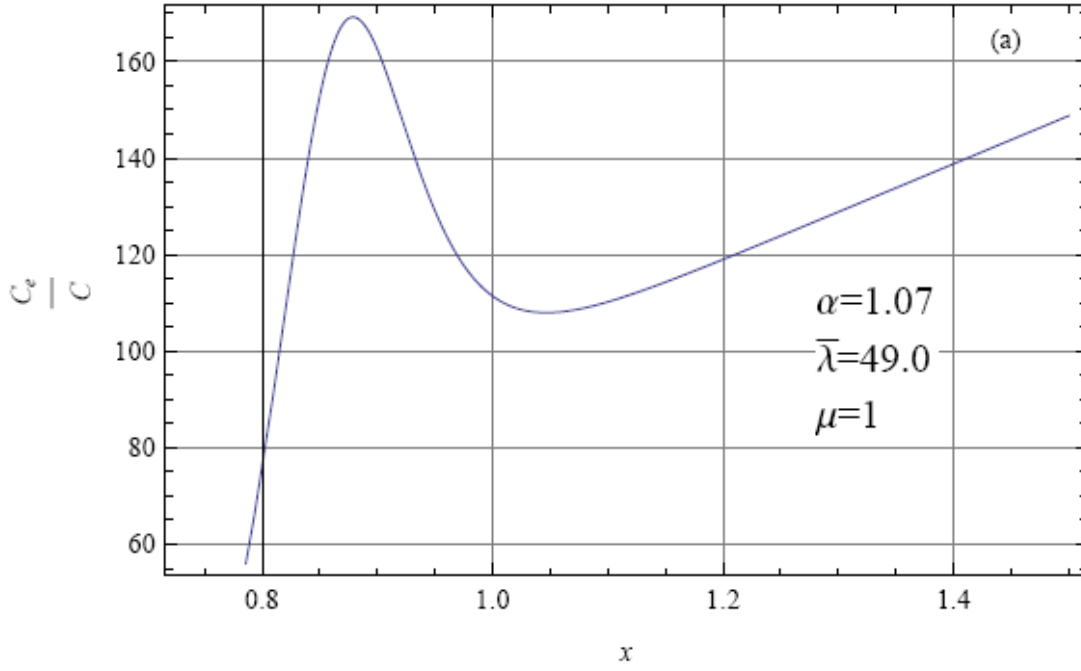
لقد وجدنا في الفصل الرابع ومن خلال النموذج الذي قمنا باقتراحه ، أن هنالك إمكانية الحصول على بعض الخواص الترموديناميكية المهمة مثل السعة الحرارية ، دالة هلموهلتز للطاقة الحرة وكذلك الأنتروبي . وحيث أن هذه الخواص معروفة الشكل بصفة عامة فالنتيجة التي تحصلنا عليها هنا ، تعتبر بشكل أو بآخر أحد المقاييس التي يمكننا من خلاله الحكم على مدى صحة النموذج الذي قمنا باقتراحه . فقد اضطررنا إلى استخدام برنامج محاكاة (math8) من أجل الحصول على البيانات المقبولة الموضحة في الأشكال المقابلة . حيث أن وجود عدة وسائط  $(c, \alpha, \mu, \bar{\lambda})$  جعل عملية الحصول على نتائج جيدة تمر بعدد من المراحل المعقدة . وبما أن الوسيط  $\mu$  مرتبط بدرجة الحرارة من خلال العلاقة  $T/T_c = \mu \xi$  فان اختيارنا للقيمة  $\mu = 1$  جعل من السهل علينا معرفة النقطة التي يتم عندها التحول الحرج من الحالة الطبيعية إلى حالة فوق الناقلية ، وفي هذه الحالة تصبح  $T/T_c = \xi$  وبالتالي عند درجة الحرارة الحرجة تكون قيمة  $\xi$  مساوية للواحد . وهذا بالضبط ما نلاحظه من خلال البيانات الأربعة ، وخاصة من خلال بيان السعة الحرارية والذي يمكننا من حساب النسبة المهمة  $\Delta C/\gamma T_c$  عند حصول التحول الحرج من خلال العلاقة البسيطة التي توصلنا إليها من خلال النموذج المقترح وهي :

$$\frac{\Delta C}{\gamma T_c} = \left\{ \left( \frac{C_v}{C} \right)_{\max} - \left( \frac{C_v}{C} \right)_{\min} \right\} \frac{\mu}{2(1 + \bar{\lambda})} \quad (1.5)$$

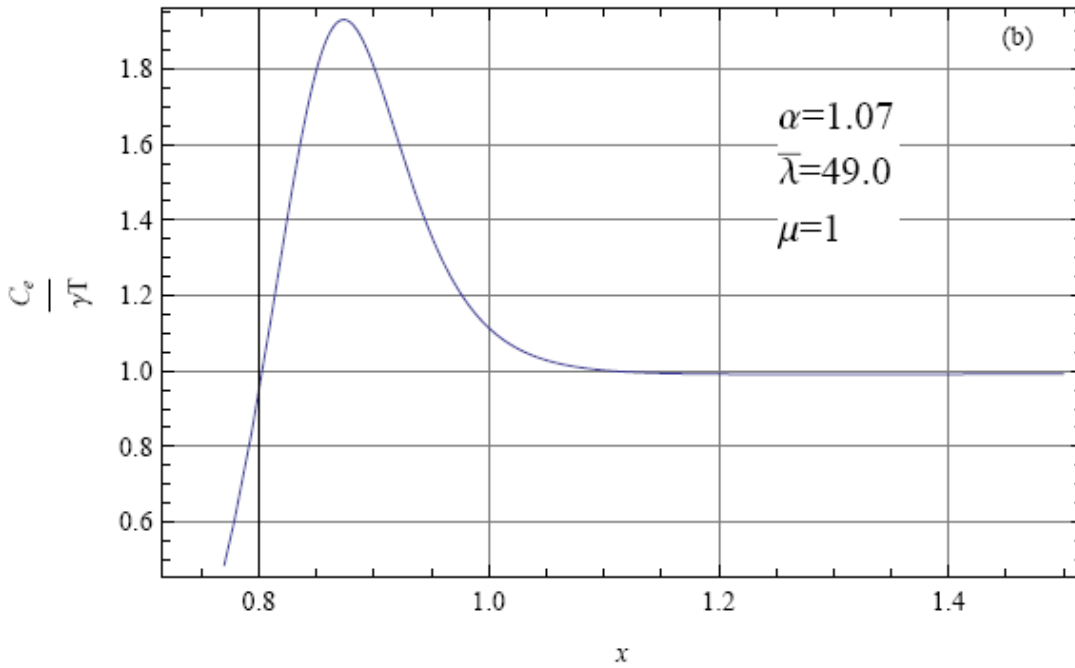
حيث يمكننا الحصول على النسبة  $(C_v/C)_{\max}$  والذي يساوي تقريبا 170 كما أنه عند النقطة  $\xi = 1$  يمكننا أخذ قيمة  $(C_v/C)_{\min}$  وهي مساوية تقريبا 120 وبالتعويض عن قيمة  $\bar{\lambda} = 49$  في العلاقة السابقة نجد النسبة  $\Delta C/\gamma T_c$  تساوي تقريبا 0.5.

ومن خلال عبارة  $\mu$  الموجودة في (4-30) من الفصل الرابع يمكننا تقدير قيمة الطاقة  $\varepsilon_0$  من أجل الكبريات  $T_c \sim 92K$  وبالتالي  $\varepsilon_0 \sim 0.4K$  وهو مقدار صغير جدا، وبما أن الناقلية الفائقة تتم في درجة حرارة مرتفعة ، فهذه النتيجة تدل على استحالة حدوث تكثف بوز-أينشتاين أي بمعنى نزول جميع البوزونات إلى المستوي  $\varepsilon_0$  .

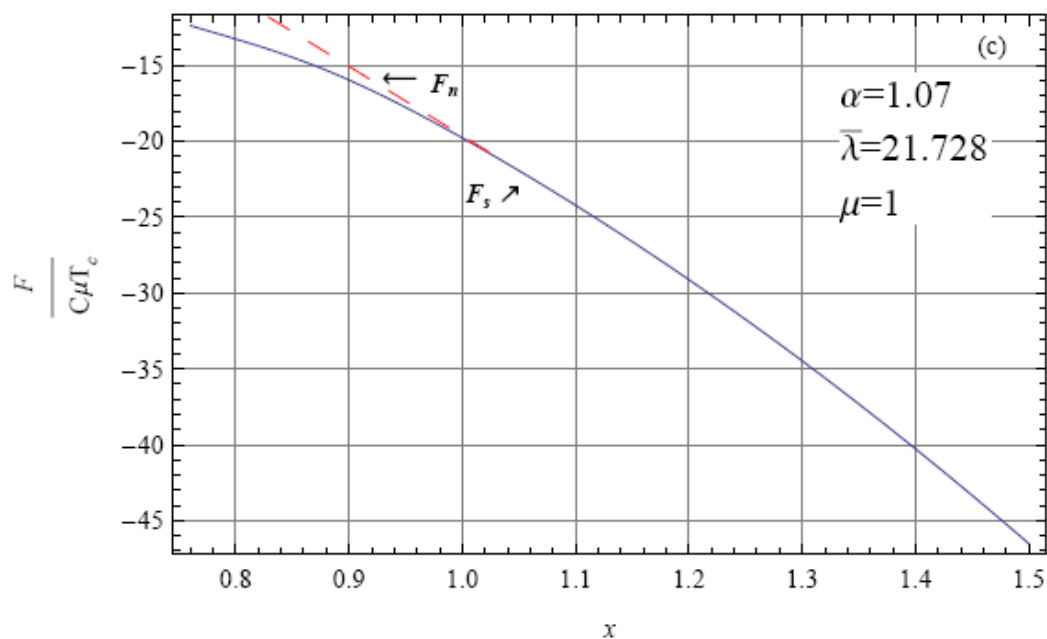
لقد بنينا هذا النموذج على وجود المسارات المشحونة ، وبالتالي سوف تتفاعل ناقلات الشحنة والتي هي في هذه الحالة الثقوب ، مع تموجات مسارات الشحن وهذا يفسر الزيادة في قيمة كثافة الحالات  $D$  التي وجدناها في العلاقة (4-34) من الفصل الرابع لتصبح  $D = D_0(1 + \bar{\lambda})$  . حيث  $D_0$  هي كثافة الحالات الأصلية ، و  $\bar{\lambda}$  يعبر عن قوة التفاعل بين الثقوب و تموجات مسارات الشحنة . إن النتائج السابقة وكذلك تشابه خصائص الأشكال التالية للسعة الحرارية ودالة الطاقة الحرة وكذلك الأنتروبي ، وخاصة عند نقطة التحول الحرج أي  $T_c$  وهي في هذه الحالة النقطة  $\xi = 1$  تعطينا قبول مبدئي للنموذج الذي قمنا بتطبيقه في هذه الحالة . وفي الجزء التالي سوف نرى مدى دقة هذا النموذج من خلال النتائج العددية الدقيقة التي تتعلق بالخواص الالكترونية.



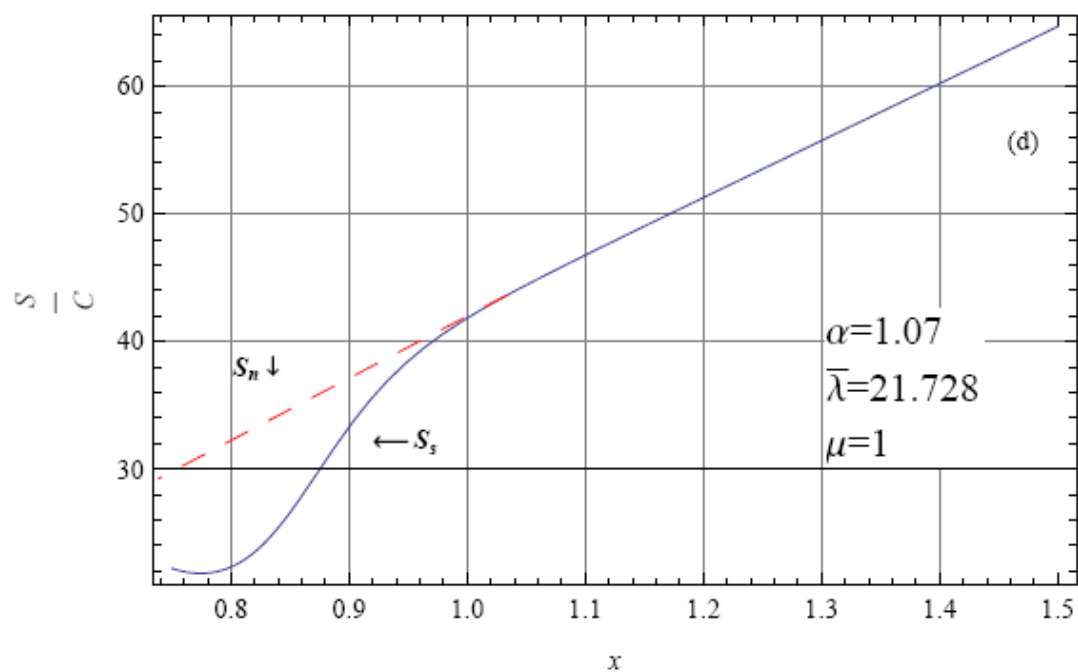
الشكل رقم (1-5) : نتيجة النموذج لبيان السعة الحرارية المختزلة بدلالة  $\xi$  من أجل  $\mu = 1$



الشكل رقم (2-5) : نتيجة النموذج لبيان السعة الحرارية  $C/\gamma T$  بدلالة  $\xi$  من أجل  $\mu = 1$



الشكل رقم (3-5) : نتيجة النموذج لبيان الطاقة الحرة المختزلة بدلالة  $\xi$  من أجل  $\mu = 1$



الشكل رقم (4-5) : نتيجة النموذج لبيان الأنتروبي بدلالة  $\xi$  من أجل  $\mu = 1$



## ثانيا الخواص الالكترونية:

من خلال المعالجة البسيطة التي قمنا بها سابقا ، يمكننا أن نجد بعض النتائج الدقيقة ، كما يمكننا أن نتوصل إلى وجهة نظر جديدة لبيان الطور ( $T_c, p$ ) بالنسبة للتطعيم بواسطة الثقوب في المواد فانقطة الناقلية ذات درجة الحرارة المرتفعة وبالتحديد في *cuprates* . لقد قمنا بمقارنة النتائج التي توصلنا إليها باستخدام هذا النموذج مع أدق النتائج التجريبية في الجدول رقم (5-1)

### حدود المجال الخاص بالتطعيم:

إن المجال الخاص بالتطعيم بواسطة الثقوب معروف بدقة من خلال التجارب المختلفة والقياسات التي تتم بطرق مختلفة وهو يبدئ من التركيز الخاص  $p = 0.05$  عند نهاية منطقة *spin - glass* وينتهي عند التركيز المميز  $p = 0.27$  تقريبا ، وقبل أن نبدئ في اعطاء أي نتيجة لابد أن، نتأكد من أن المجال الخاص بالتطعيم متوافق مع التجربة . لقد أجرينا الحسابات السابقة من أجل  $x < 0$  ، ومن خلال المعادلة رقم (4-25) ، نجد بسهولة أن  $0 < y < b$  وبالتالي سوف نجد  $- \delta < p < b$  وحيث أن  $\delta = -0.05$  تصبح  $0.05 < p < 0.32$  وهو مجال مقبول مقارنة مع التجربة.

### مجال الطاقة الممنوع الخاص بالناقلية الفائقة:

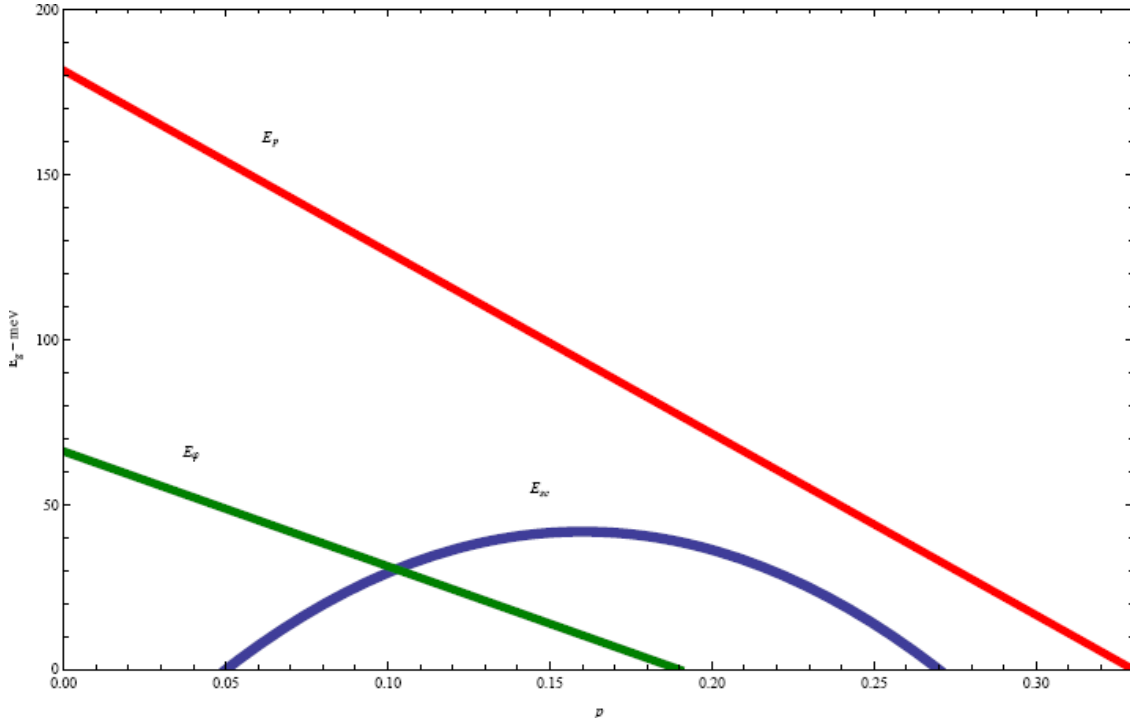
في هذا الجزئ سوف نقوم بتبسيط الحسابات ، وسوف نعتبر أن  $(\delta + 1/2) \sim 1/\sqrt{5}$  وهذا من أجل  $\delta = -0.05$  ، باستخدام الخواص الجبرية البسيطة الخاصة بالنسبة الذهبية *golden - ratio* نستطيع أن نكتب  $a = \varphi/\sqrt{5}$  و  $b = \varphi^{-1}/\sqrt{5}$  . وبما أننا وجدنا سابقا  $E_F = 3\varepsilon_f$  فيمكن أن نعتبر  $\varepsilon_f$  متناسب طردا مع التطعيم الفعال أي  $\varepsilon_f \propto y$  . بتعويض كل من  $\varepsilon_f$  والمعادلة رقم (4-25) في المعادلة رقم (4-16) وبالقيام بعملية إهمال للحدود  $y^3$  نجد هذه المعادلة الجميلة :

$$\frac{T_c}{T_c^{\max}} = 1 - v^{-2}(y - v)^2 \quad (2.5)$$

حيث استعملنا مباشرة علاقة التناسب  $T_c^* \propto T_c$  و الرمز  $v = b/2(b + 1)$  . بالقيام بعملية تعويض بواسطة  $b \sim 0.28$  فسوف نجد  $v \sim 0.11$  وكذلك  $v^{-2} \sim 82.64$  ونلاحظ من الوهلة الأولى أنها تكاد تكون متطابقة مع النتائج التجريبية التي تعطي القيمة 82.6 . أما النقطة المميزة  $p^{\text{opt}}$  فنلاحظ أنها تساوي  $(v + 0.05)$  بالتعويض نجد  $p^{\text{opt}} = 0.16$  وهي مطابقة تماما للنتائج التجريبية. يكفي الآن أن نضع  $(y = p - 0.05)$  في المعادلة رقم (2-5) فتصبح كما يلي :

$$\frac{T_c}{T_c^{\max}} = 1 - 82.64(p - 0.16)^2 \quad (3.5)$$

إن النتيجة رقم (3-5) أعطت نفس النتيجة التجريبية المعروفة والتي تظهر على شكل قطع مكافئ لدرجة الحرارة  $T_c$  بدلالة تركيز الثقوب  $p$  . الشكل رقم (5-5) يظهر هذه العلاقة بشكل واضح جدا.



الشكل رقم (5-5) : نتيجة النموذج المقترح لبيان الطور للطاقة  $E_g$  في الكبريات بدلالة التطعيم  $p$  للثقوب .

. كما أن القيمة العظمى لمجال الطاقة الممنوع  $gap$  هو  $E_{sc}(p = 0.16)$  يعطى بالعلاقة التالية:

$$E_{sc}^{max} \sim \frac{1}{3} \kappa \varphi^{-4} (1 + b)^{-1} \quad (4.5)$$

بالتعويض عن قيم كل من  $(\kappa, \varphi)$  وأخذ  $(b = 0.28)$  في المعادلة رقم (4-5) ، يمكننا أن نجد بسهولة  $E_{sc}^{max} = 41.8 \text{ meV}$  وهي قريبة بشكل ملحوظ من النتائج التجريبية التي أعطت قيمة تساوي  $(42 \pm 2) \text{ meV}$  وهذا إذا أخذنا الأخطاء التجريبية بعين الاعتبار.

**نقطة التركيز الكمية الدرجة :**

في الكبريات ، النقطة الحرجة الكمية ، هي مستوى التطعيم بالثقوب  $p_0$  الذي ينبغي بلوغه حتى يكون التأثير المغناطيسي أقوى ما يمكن ، باستخدام المعادلات رقم (4-11) و (4-25) فسوف نجد أن طاقة الإثارة  $\epsilon_j$  تأخذ الشكل التالي :

$$\epsilon_j = \frac{1}{3} \kappa a^{-1} y(y - b) \quad (5.5)$$

حيث  $3\epsilon_f = \kappa y$  وكذلك  $\hbar\omega = 2x$  . ان طاقة الاثارة  $\epsilon_j$  سوف تأخذ أصغر قيمة لها عند نقطة التطعيم الفعال  $y_0$  التي تحقق الشرط  $(\partial\epsilon_j/\partial y) = 0$  ، وهذا سوف يعطي  $y_0 = 0.5b$  وبالتالي سوف نجد  $p_0 = 0.5b + 0.05$  بالتعويض عن القيمة  $b = 0.28$  سوف نجد قيمة دقيقة للنقطة الكمية الحرجة  $p_0 = 0.19$  ، وهي مطابقة لنتيجة التجربة.

**المناطق شبه الممنوعة :**

إن شبه المنطقة الممنوعة  $pseudo - gap$  هي من أكثر الظواهر الملفتة للانتباه والتي تتم في درجات حرارة أعلى بكثير من درجة الحرارة الحرجة  $T_c$  الخاصة بالناقلية الفائقة ، هذه الظاهرة لم يتم بعد التوصل إلى التفسير الفيزيائي القياسي لها . وسوف نحاول في هذا الجزئ أن نبين إمكانية التوصل إلى نتائج مقبولة مقارنة بالتجربة من خلال هذا النموذج البسيط الذي قمنا باقتراحه. في هذا الجزء يلعب الطور  $\delta$  دورا مهما ، حيث أنه عند الحدود أي عندما  $x \sim 0^-$  ، التطعيم الفعال يصبح  $y \sim b$  ، وهذا يعني أن  $\omega_c \sim \omega_x$  وهذا يظهر النتيجة كما لو كانت عملية رنين أو تجاوب  $resonating$  . و من أجل التبسيط سوف نعتبر طاقة فرمي  $E_F \sim \kappa b$  وبالتعويض في المعادلة رقم (4-25) نجد ما يلي :

$$E_g \sim \frac{4}{3} \kappa b a^{-1} (b - y) \quad (6.5)$$

باستخدام المعادلة رقم (6-5)، يمكننا أن نستنتج التوقعات التالية من أجل  $\delta = -0.05$  وكما رأينا سابقاً حيث وجدنا  $(a, b)$  يساويان على الترتيب  $(\varphi, \varphi^{-1})/\sqrt{5}$ ، وحيث أن  $y = (p - 0.05)$ . باستخدام المعادلة (6-5)، يمكننا أن نجد العبارة المفيدة لمنطقة التزاوج pairing الممنوعة كمايلي:

$$T_p/T_p^{\max} \propto (0.33 - p) \quad (7.5)$$

هذه النتيجة متقاربة بشكل ملحوظ مع الصيغة التجريبية التي تعطي العبارة التالية:

$$T_p/T_p^{\max} \propto (0.27 - p) \quad (8.5)$$

حيث  $E_{pg}$  تتناقص بشكل خطي مع تزايد مستوى التطعيم  $p$ . سوف نستنتج قيمة  $E_{pg}$  عند النقطة المميزة  $p = 0.05$  أو نفس الشيء عند  $y = 0$  عن طريق قيامنا بعملية تمديد للخط المستقيم في المعادلة رقم (7-5) وباستخدامنا للمعادلة (4-5) نجد ما يلي:

$$E_{pg}^{\max} \sim \frac{4}{3} \kappa \varphi^{-4} (1 - b) \quad (9.5)$$

التعويض في المعادلة رقم (9-5) يعطي  $E_{pg} \sim 154 \text{meV}$  عند النقطة المميزة  $P = 0.05$ . هذه النتيجة قريبة جداً من النتائج التجريبية حيث  $E_{pg} \sim (152 \pm 8) \text{meV}$  عند نفس مستوى التطعيم. من أجل  $\delta = 0$  أي اعتبار الظاهرة تبدئ قبل منطقة spin - glass فمن السهل التأكد أن  $(a, b)$  في المعادلة رقم (25-4) يساويان على الترتيب  $(\varphi, \varphi^{-2})/2$ ، حيث استعملنا هنا الخواص الجبرية البسيطة للنسبة الذهبية من أجل كتابة  $b = \varphi^{-2}/2$  والتي تأخذ قيمة عددية  $b = 0.19$  مطابقة لتلك التي وجدناها في حالة النقطة الكمية الحرجة QCP. في هذه الحالة تصبح  $y = p$ ، مما يعني أن المعادلة رقم (6-5) سوف تأخذ الشكل التالي:

$$T_\varphi/T_\varphi^{\max} \propto (0.19 - p) \quad (10.5)$$

هذه النتيجة مطابقة لتلك المعروفة بشكل جيد في التجربة، حيث تتناقص خطياً مع درجة التطعيم  $p$  لتنتهي عند نقطة وحيدة هي  $p = 0.19$ . بعض الباحثين مثل Tallon و Loran يدافعون عن فكرة قطع الخط المستقيم للقطع المكافئ من أجل الوصول إلى النقطة  $p = 0.19$ . بقيامنا بعملية تمديد للخط المستقيم رقم (10-5) وباستخدامنا (9-5) نجد القيمة العظمى للطاقة  $E_\varphi$  عند النقطة  $p = 0$  كمايلي:

$$E_\varphi^{\max} \sim \frac{2}{3} \kappa \varphi^{-5} \quad (11.5)$$

التعويض في هذه المعادلة الأخيرة يعطي  $E_\varphi^{\max} \sim 66.12 \text{meV}$  وهي قريبة بشكل ملحوظ من التجربة حيث  $E_\varphi^{\max} \sim 69.3 \text{meV}$ . والجدول (1-5) يلخص لنا مقارنة بين النتائج التي توصلنا إليها عن طريق هذا النموذج والنتائج التجريبية المأخوذة من المرجع [3] من الفصل الثاني.

الطاقة	النتائج	النظرية	التجربة
$E_{sc} = E_s^{\max}[1 - E^1(p - p^{\text{opt}})^2]$	$E_{sc}^{\max}(\text{meV})$	41.8	<b><math>42 \pm 2</math></b>
	$E^1$	82.64	<b>82.6</b>
	$p^{\text{(opt)}}$	0.16	<b>0.16</b>
$E_{pg} = E_p^0(p^g - p)$	$E_{pg}^{\max}(\text{meV})$	154	<b><math>152 \pm 8</math></b>
	$p^{\text{(g)}}$	0.33	<b>0.27</b>
$E_{\varphi} = E_{\varphi}^0(p^{\varphi} - p)$	$E_{\varphi}^{\max}(\text{meV})$	66.12	<b>69.30</b>
	$p^{\text{(\varphi)}}$	0.19	<b>0.19</b>

الجدول رقم (1-5) : مقارنة وسائط بيان الطور التي توصلنا إليها باستخدام هذا النموذج مع النتائج التجريبية .

إن الناقلية الفائقة في أكاسيد النحاس هي غير اعتيادية ، على الرغم من هذا ، تبدي مركبات الكبريات العديد من الخواص التي تشبه تلك الموجودة في المركبات فوق الناقلية ، الاعتيادية و التي تخضع لنظرية BCS . أولا تحدث ظاهرة الناقلية الفائقة في الكبريات عن طريق تكون الثنائيات الالكترونية أو ثنائيات الثقوب ، وهذا يؤدي ثانيا إلى تكوين منطقة طاقة ممنوعة في طيف الإثارة الالكترونية . أما ثالثا فمفعول النظائر متواجد أيضا في الكبريات ، ومع ذلك فهو متعلق بشدة بتركيز الثقوب ، ولهذا فالمبادئ الأساسية التي تتضمنها ظاهرة فوق الناقلية في المواد المختلفة تكون نفسها .

في الناقلية الفائقة الاعتيادية التي تخضع إلى نظرية BCS ، نجد أن آلية تكون الثنائيات تختلف عن آلية تكون واستقرار طور الترابط بعيد المدى . حيث نجد أن التفاعل بين الالكترونات واهتزازات الشبكة البلورية والمتمثلة في الفونونات هي المسؤولة عن تشكل الثنائيات الكهربائية ، بينما يستقر طور الترابط بين الثنائيات عن طريق عملية تداخل دوال الموجة لهذه الثنائيات . وهذا لأن البعد المتوسط بين الثنائيات أصغر بكثير من حجم الثنائية المتشكلة .

بينما نجد أن مركبات الكبريات تصبح فوق ناقلية عند التطعيم الجزئي بالثقوب أو الالكترونات ، حيث أن الكبريات غير المطعمة عبارة عن عازل - Mott . البنية البلورية للكبريات متباينة الخواص للغاية ، وعلى الرغم من ذلك تحدث الناقلية الفائقة في المستوي  $\text{CuO}_2$  ببعدين فقط ، حيث تكون هذه الطبقات مفصولة عادة بطبقات مكونة من ذرات أخرى والتي تكون عادة عوازل أو أنصاف نواقل . في عملية التطعيم الكيميائي ، تقوم هذه الطبقات بتزويد المستويات  $\text{CuO}_2$  بالشحن الكهربائية ولهذا تسمى عادة بخزانات الشحنة .

كما نجد أن توزع الشحنة الكهربائية في المستويات  $\text{CuO}_2$  يكون غير متجانس في الكبريات المطعمة سواء بالثقوب أو بالالكترونات ، ولكنها مجبرة على تكوين أنماط شبه خطية تسمى المسارات المشحونة أو - stripes . حيث تكون التفاعلات الغير خطية المعتدلة القوة للالكترونات مع اهتزازات الشبكة هي على الأرجح المسؤولة عن تشكل المسارات المشحونة ، والتي هي تعبير عن الحالات المفخخة ذاتيا . تكون المسارات المشحونة في الكبريات نصف ممتلئة وتتبع سلسلة الروابط  $(\text{O} - \text{Cu} - \text{O} - \text{Cu})$  ، وتكون مفصولة بمسارات ثنائية البعد تكون عبارة عن عازل ذو مغناطيسية حديدية مضادة ، كما يمكن للمسارات المشحونة أن تكون ديناميكية حيث تستطيع أن تتلوى والتحرك بطريقة جانبية أيضا ، وفي الأساس تكون هذه المسارات عوازل ، ولهذا نجد منطقة شحنة ممنوعة في المسارات ، ولكن وجود إثارة على شكل سوليتون على هذه المسارات يجعلها ناقلة للكهرباء ، كما يتسبب في نفس الوقت في تشكل الثنائيات المسؤولة عن ظاهرة الناقلية الفائقة من خلال التشويه الموضعي للشبكة المغناطيسية . ولهذا السبب تكون التفاعلات الغير خطية هي المسؤولة عن تكون الثنائيات في الكبريات . حيث تتشكل الثنائية - bisoliton في درجات حرارة أعلى من درجة الحرارة الحرجة  $T_c$  . تتشكل الثنائيات في المسارات المشحونة عند درجة حرارة  $T_{\text{pair}}$  ، ويستقر طور الترابط بعيد المدى عند درجة حرارة  $T_c$  من خلال تقلبات السبين في المسارات العازلة ذات المغناطيسية الحديدية المضادة .

في جميع أنواع الكبريات ، تكون تقلبات السبين هي المسؤولة عن طور الترابط ولكن مع وجود اختلافات طفيفة في الآلية التي تحدث بها هذه التقلبات . حيث يمكن تصنيف مركبات الكبريات إلى صنفين : الصنف الأول يمتلك درجة حرارة حرجة أقل من  $40\text{k}^\circ$  والثاني يمتلك درجة حرارة حرجة أكبر من  $90\text{k}^\circ$  ، وهذه الدرجات عند نقطة التطعيم الأمثل . حيث تمتلك الكبريات من النمط  $40\text{k}^\circ$  مستوى  $\text{CuO}_2$  وحيد في وحدة الخلية ، والفرق بين الصنفين هو في وجود أو عدم وجود قمة الرنين المغناطيسي في الطيف الناتج عن التشتت الغير مرن للنترونات (INS) . فبينما تختفي قمة التجاوب في النمط الأول بسبب الاهتزاز الضعيف لكثافة السبين ، نجد أن طور الترابط في النمط الثاني ناتج عن الاهتزازات السريعة للسبينات المستثارة ، وهذا ما يسبب ظهور قمة التجاوب المغناطيسي في طيف التشتت غير المرن للنترونات (INS) . وبالتالي فمن الناحية المبدئية يمكن وصف الآلية التي تحدث بها ظاهرة فوق الناقلية في الكبريات ، على أنها تركيب بين نموذج ثنائية الموجة الوحيدة bisoliton ، بينما يمكن لنموذج التقلبات السبينية أن يصف خواص طور الترابط .

وبسبب غياب مفعول النظائر على درجة الحرارة الحرجة عند نقطة التطعيم الأمثل ، فقد تم اعتبارها حجة من أجل إخراج الفونونات من لعب دور البوزون المسؤول عن ترابط الشحن الكهربائية داخل الثنائيات . ولكن في الحقيقة يلعب الفونون دورا أساسيا في آلية الناقلية الفائقة عند درجات الحرارة الحرجة  $T_c$  المرتفعة. فببساطة يمكن للتفاعل الكترون-فونون أن يصف آليتين مختلفتين لتكون الثنائيات ، حيث يمكن أن يكون خطي أو غير خطي . فالتفاعل الموجود في الناقلية الفائقة الاعتيادية والتي تخضع لنظرية BCS هو عبارة عن تفاعل ضعيف و خطي . بينما ينبغي لهذا التفاعل في الكبريات أن يكون معتدل القوة وغير خطي .

وقد يبدو هذا تناقضا عند القول بأن مفعول النظائر يظهر تأثيره بشكل واضح على درجة الحرارة ، عندما يكون التفاعل إلكترون- فونون ضعيف بينما يصل إلى حد التلاشي عندما يكون هذا التفاعل قوي وغير خطي . ولكن النتيجة الأساسية لنظرية ثنائية الموجة الوحيدة التي تكلمنا عنها في الفصل الثالث من هذه الأطروحة هي أن الطاقة الكامنة للحالة الإلكترونية ذاتية التفخيخ والتي تنتج عن طريق التشوه الموضعي للشبكة ، لا تتعلق بكتلة خلايا الشبكة ، وتظهر هذه الكتلة فقط في الطاقة الحركية للإلكترون ذاتي التفخيخ . إذا كان التفاعل إلكترون- فونون كبير بما يكفي وغير خطي في الجسم الصلب فيمكن للإلكترون أو ثقب أن يحقق التفخيخ الذاتي ، حيث تتسبب الشحنة المطعمة في إحداث تشوه موضعي في الشبكة ، والذي بدوره يجذب شحنة أخرى في هذا الفخ . وبهذه الطريقة يمكن لشحنتين تكوين ثنائية عن طريق التشوه الموضعي للشبكة الناتج بسببهما .

نجد عدم تجانس توزيع ناقلات الشحنة على المستوى الميكروسكوبي في النيكلات، المنغنات و الكبريات تحدث في المستويات  $NiO_2$  ،  $MnO_2$  و  $CuO_2$  على الترتيب ، وهي تشكل مسارات مشحونة شبه أحادية البعد ، حيث تتدفق هذه المسارات المشحونة في المكان والوقت بطريقة أبطئ من تلك الموجودة في الكبريات ، ولهذا السبب نجد أدلة متوفرة في المراجع العلمية تخص النيكلات والمنغنات . وبسبب التوازن الذي يحصل بين تأثير كل من الشحنة ، السبين و درجات حرية البلورة نجد أن المسافات بين المسارات المشحونة في الكبريات تبقى ثابتة عند بلوغ مستوى التطعيم  $p \sim 0.13$  . إن ظهور أربعة قمم غير متلائمة في طيف التشتت غير المرن للنترونات الذي تكلمنا عنه في الفصل الثاني يدل على التناوب في تغيير اتجاه المسارات المشحونة ، عند الانتقال من مستوى إلى آخر ، حيث يغير المسار اتجاهه بزاوية 90 درجة .

إن دراسة الخواص الفيزيائية للأكاسيد ، هو موضوع معقد جدا ، وذلك بسبب التنوع الكبير في مواد الأكاسيد الموجودة ، والتي تحتوي على عناصر تكاد تشمل أغلب العناصر الموجودة في الجدول الدوري. بالإضافة إلى التنوع الكبير في الخصائص الفيزيائية والكيميائية لهذا النوع من المواد . و تعتبر عائلة الأكاسيد من النمط  $ABO_3$  مثال جيد للعدد الكبير من الخواص الموجودة في هذه المركبات ، حيث تنتوع من العوازل إلى الناقلية الفائقة إلى أنصاف النواقل ... الخ . كما تدخل هذه العائلة من الأكاسيد بشكل أساسي في تكوين المواد فائقة الناقلية ذات درجات الحرارة المرتفعة مثل YBCO . حيث لا يزال تفسير كيفية حدوث الناقلية الفائقة في هذا النوع من الأكاسيد لغزا محيرا إلى درجة أنه لم يتم حله منذ اكتشاف هذه الظاهرة سنة 1986 .

ولقد زادت الاكتشافات الحديثة لبعض الخصائص المميزة في هذه المواد من غموض الآلية التي تتحكم في هذه الظاهرة، مثل خاصية عدم تجانس توزيع الشحنة الكهربائية في المستويات  $CuO_2$  والتي تسمى بالمسارات المشحونة. إن النموذج المقترح في هذه الأطروحة للمسارات المشحونة يعتمد على فكرة بسيطة ، وهي تفادي عملية التخميد التي تحصل لحركة الثقوب في المستويات  $CuO_2$  بسبب الخلفية المغناطيسية التي تتحرك فيها هذه الثقوب. وباستخدامنا لهذا النموذج تمكنا من الحصول على نتائج ممتازة بالمقارنة مع النتائج التجريبية المعروفة بشكل جيد. حيث تمكنا من الحصول على قيم عددية دقيقة لدرجة الحرارة الحرجة  $T_c$  في الأكاسيد YBCO ، طول المسارات المشحونة ، بالإضافة إلى نقاط التطعيم المميزة ، مثل نقطة التطعيم الأمثل ، النقطة الكوانتية الحرجة ، حدود مجال التطعيم الممكن ، بالإضافة إلى القيم العظمى لمناطق الطاقة الممنوعة .

كما تمكنا على الخصوص من الحصول على بيان طور مقبول ، حيث يعطي هذا النموذج سيناريوهين ممكنين للكيفية التي تلتقي فيها شبه المنطقة الممنوعة مع منطقة فوق الناقلية ، حيث يمكن أن تتلاقيا بطريقة سلسلة ، كما يمكن أن يتقاطعا عند نقطة التطعيم الأمثل . يتوقع النموذج وجود اتجاهين ممكنين للمسارات المشحونة الموجودة في المستويات  $CuO_2$  ، وهذا يتفق بشكل واضح مع النتائج التجريبية التي تدل على تغير اتجاه المسارات المشحونة بزواوية 90 درجة عند الانتقال من مستوي إلى أقرب مستوي مجاور له . ولقد قمنا بعملية محاكاة من أجل إيجاد بعض الخواص الترموديناميكية ، مثل السعة الحرارية ، الطاقة الحرة و الأنتروبي .

نحن نعتقد بأن وجود نمطين من المناطق الممنوعة في نفس الوقت هو أمر ضروري من أجل حصول ظاهرة الناقلية الفائقة في درجات الحرارة المرتفعة ، كما أن هذه الظاهرة تحدث بسبب التناغم الموجود بين الخواص الغير خطية للشبكة المغناطيسية، و الخواص الكهربائية لخزانات الشحنة والمستويات  $CuO_2$  أثناء عملية التطعيم بواسطة الثقوب .

ومع ذلك ، هنالك الآن آلاف المقالات العلمية المنشورة في أرقى المجالات العلمية المعروفة ، والتي تحاول إيجاد تفسير لظاهرة فوق الناقلية ذات درجات الحرارة المرتفعة، والتي تكون في الغالب في مركبات الأكاسيد . إلا أن الأمر مازال غامضا لحد الساعة، وتعتبر المسارات المشحونة وأقواس فرمي من بين أبرز المواضيع التي يدور حولها النقاش بين الباحثين .

