

Ibach Harald • Lüth Hans

Φυσική Στερεάς Κατάστασης

Εισαγωγή στις Αρχές
της Επιστήμης των Υλικών

Επιμέλεια

Σωτήριος Βεσ

Μετάφραση

Σωτήριος Βεσ

Εθλένη Παλιούρα

Αντώνης Αναγνωστόπουλος

Χαρίτων Ποθιάτογλου

Μετάφραση από την αγγλική έκδοση

Translation from the English language edition:

Solid-State Physics by Harald Ibach and Hans Luth

Copyright © Springer-Verlag Heidelberg Berlin 1993, 1995, 2003, 2009

Springer-Verlag GmbH is a part of Springer Science+Business Media

All Rights Reserved

Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος

Επιμέλεια:

Σωτήριος Βες, Καθηγητής Τμήματος Φυσικής Α.Π.Θ.

Μετάφραση:

Σωτήριος Βες, Καθηγητής Τμήματος Φυσικής Α.Π.Θ.

Ελένη Παλούρα, Καθηγήτρια Τμήματος Φυσικής Α.Π.Θ.

Αντώνης Αναγνωστόπουλος, Καθηγητής Τμήματος Φυσικής Α.Π.Θ.

Χαρίτων Πολάτογλου, Αν. Καθηγητής Τμήματος Φυσικής Α.Π.Θ.

ISBN 978-960-456-313-5

© Copyright 2012 για την ελληνική γλώσσα Εκδόσεις ΖΗΤΗ

Το παρόν έργο πνευματικής ιδιοκτησίας προστατεύεται κατά τις διατάξεις του ελληνικού νόμου (Ν.2121/1993 όπως έχει τροποποιηθεί και ισχύει σήμερα) και τις διεθνείς συμβάσεις περί πνευματικής ιδιοκτησίας. Απαγορεύεται απολύτως η άνευ γραπτής άδειας του εκδότη κατά οποιοδήποτε τρόπο ή μέσο αντιγραφή, φωτοανατύπωση και εν γένει αναπαραγωγή, εκμίσθωση ή δανεισμός, μετάφραση, διασκευή, αναμετάδοση στο κοινό σε οποιαδήποτε μορφή (ηλεκτρονική, μηχανική ή άλλη) και η εν γένει εκμετάλλευση του συνόλου ή μέρους του έργου.

All rights reserved. According to the Greek (Act 2121/1993) and National Copyright Law no part of this book may be reproduced by any mechanical, photographic, or electronic process, or in the form of a system, transmitted, nor may it be stored in a retrieval private use, without the written permission of the publisher.

Φωτοστοιχειοθεσία

Εκτύπωση

Βιβλιοδεσία

Π. ΖΗΤΗ & Σια ΟΕ

18ο χλμ Θεσ/νίκης-Περαίας

Τ.Θ. 4171 • Περαία Θεσσαλονίκης • Τ.Κ. 570 19

Τηλ.: 2392.072.222 - Fax: 2392.072.229 • e-mail: info@ziti.gr



www.ziti.gr

ΒΙΒΛΙΟΠΩΛΕΙΟ ΘΕΣΣΑΛΟΝΙΚΗΣ - ΚΕΝΤΡΙΚΗ ΔΙΑΘΕΣΗ:

Αρμενοπούλου 27, 546 35 Θεσσαλονίκη

Τηλ.: 2310.203.720, Fax: 2310.211.305 • e-mail: sales@ziti.gr

ΒΙΒΛΙΟΠΩΛΕΙΟ ΑΘΗΝΩΝ - ΕΝΩΣΗ ΕΚΔΟΤΩΝ ΒΙΒΛΙΟΥ ΘΕΣΣΑΛΟΝΙΚΗΣ:

Στοά του Βιβλίου (Πεσμαζόγλου 5), 105 64 Αθήνα • Τηλ.-Fax: 210.3211.097

ΑΠΟΘΗΚΗ ΑΘΗΝΩΝ - ΠΩΛΗΣΗ ΧΟΝΔΡΙΚΗ:

Ασκληπιού 60, 114 71 Αθήνα

Τηλ.-Fax: 210.3816.650 • e-mail: athina@ziti.gr

ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΟ ΒΙΒΛΙΟΠΩΛΕΙΟ: www.ziti.gr

Πρόλογοι των συγγραφέων

Πρόλογος τέταρτης έκδοσης

Το βραβείο Nobel που απονεμήθηκε στον Albert Fert και τον συνάδελφό μας Peter Grünberg προσήλκυσε το ενδιαφέρον στην αξιοσημείωτη πρόοδο που έχει επιτευχθεί στο πεδίο του μαγνητισμού σε ό,τι αφορά τόσο την κατανόηση του φαινομένου όσο και τις εφαρμογές του. Επομένως ήταν απαραίτητη η προσθήκη στο βιβλίο ενός κεφαλαίου για το φαινόμενο της γιγαντιαίας μαγνητοαντίστασης (GMR). Δεδομένου ότι το φαινόμενο GMR παρατηρείται σε συστήματα λεπτών μαγνητικών υμενίων, ήταν φυσικό να συνδυάσουμε τη θεώρηση του φαινομένου GMR με μία σύντομη παρουσίαση, υπό μορφή παραρτήματος, των ιδιαζόντων μαγνητικών ιδιοτήτων των λεπτών υμενίων. Ο μεγάλος πλούτος των φαινομένων που απαντάται σε λεπτά μαγνητικά υμένια συνδέεται στενά με διάφορες πηγές μαγνητικής ανισοτροπίας. Επομένως έπρεπε να είμαστε προσεκτικοί με τη συνηθέστερη αιτία της μαγνητικής ανισοτροπίας, που είναι η κρυσταλλική ανισοτροπία και τα φαινόμενα που συνδέονται με αυτήν όπως η μαγνητική υστέρηση και τα τοιχώματα μαγνητικών περιοχών.

Το φαινόμενο GMR είναι μόνο ένα από τα πολλά καινούρια φαινόμενα που παρατηρούνται, όταν οι διαστάσεις των στερεών μειώνονται στη νανοκλίμακα. Παράδειγμα, η ημικλασική προσέγγιση φαινομένων ηλεκτρονικής μεταφοράς αποτυγχάνει στις μικρές διαστάσεις και η κανονική ροή ηλεκτρικού ρεύματος αντικαθίσταται από βαλλιστική μεταφορά ή μεταφορά λόγω φαινομένων διάχυσης, προκαλώντας κβαντικά φαινόμενα όπως οι ταλαντώσεις Aharonov-Bohm, οι ταλαντώσεις Alsthuler-Aronov-Spivak, ο ασθενής εντοπισμός και οι διακυμάνσεις της αγωγιμότητας. Τα φαινόμενα των κβαντικών φαινομένων μεταφοράς περιγράφονται σε μία νέα υποπαράγραφο που εντάχθηκε στο βιβλίο.

Ένα από τα πιο ενδιαφέροντα πεδία στον χώρο των διηλεκτρικών ιδιοτήτων των υλικών αφορά τα υλικά με αρνητικό δείκτη διάθλασης. Ενώ στη φύση δεν υπάρχουν υλικά με αυτή την ιδιότητα, έχουν κατασκευαστεί σύνθετα υλικά που περιλαμβάνουν πλέγματα κυκλωμάτων ηλεκτρικού και μαγνητικού συντονισμού, που αποκαλούνται μετα-υλικά και τα οποία έχουν εξαιρετικά ασυνήθιστες οπτικές ιδιότητες. Με περαιτέρω εξέλιξη στην κατασκευή τεχνητών δομών με διαστάσεις τη νανοκλίμακα είναι εφικτή η εφαρμογή των μετα-υλικών για οπτικές εφαρμογές στο ορατό. Σε αυτό το συναρπαστικό πεδίο αφιερώσαμε ένα καινούριο παράρτημα.

Η εξέλιξη στην κατασκευή νανοδομών είναι καθοριστική τόσο σε αυτό το πεδίο, όπως και σε σχεδόν όλα τα άλλα πεδία τρέχοντος ενδιαφέροντος. Γι' αυτό έχουμε εισαγάγει ένα καινούριο παράρτημα που αφορά μεθόδους ανάπτυξης υλικών. Επίσης έχουμε εκσυγχρονίσει τα παραρτήματα που αφορούν τη φασματοσκοπία φωτοεκπομπής και την περίθλαση νετρονίων.

Είμαστε ευγνώμονες για τα σχόλια και τις υποδείξεις συναδέλφων και φοιτητών που βοήθησαν στη βελτίωση αυτού του τόμου.

H. Ibach - H. Lüth

Jülich Aachen, Φεβρουάριος 2009

Πρόλογος τρίτης έκδοσης

Η γερμανική έκδοση του διδακτικού βιβλίου μας «Festkörperphysik» έχει ήδη φτάσει την 6η έκδοση και σε σύγκριση με την 2η έκδοση στα αγγλικά είναι εκτενέστερη και σημαντικά αναθεωρημένη. Προς το παρόν το βιβλίο έχει μεταφραστεί στα ιαπωνικά, κορεατικά και πολωνικά και χρησιμοποιείται σαν καθιερωμένο διδακτικό βιβλίο σε όλο τον κόσμο. Επομένως, η προσεκτική αναθεώρηση του αγγλικού κειμένου και η εναρμόνιση του με την πλέον πρόσφατη 6η γερμανική έκδοση είναι επίκαιρη. Οι υποπαράγραφοι «Υπεραγωγοί υψηλής θερμοκρασίας» και το Παράρτημα XVI με τίτλο «Ταλαντώσεις Shubnikov-de Haas και κβαντικό φαινόμενο Hall» έχουν αναθεωρηθεί πλήρως, σύμφωνα με την τρέχουσα και καλύτερη κατανόηση των φαινομένων. Η 3η έκδοση του αγγλικού κειμένου περιέχει αρκετά περισσότερα κεφάλαια, έτσι ώστε να ανταποκρίνεται στις απαιτήσεις της διδασκαλίας σύγχρονων πεδίων έρευνας. Πιστεύουμε ότι η σύγχρονη διδασκαλία της φυσικής στερεάς κατάστασης θα πρέπει να δίνει έμφαση σε πτυχές της επιστήμης των υλικών και τις εφαρμογές της, ιδιαίτερα δε στα ηλεκτρονικά στερεάς κατάστασης. Συνεπώς, οι αποκλίσεις από το τέλειο περιοδικό στερεό αποκτούν μεγαλύτερη βαρύτητα. Στο κείμενο μελετούμε: διαγράμματα φάσεων κραμάτων, στοιχεία της φυσικής ατελειών δομής και άμορφα υλικά. Η σημασία των πολυστρωματικών δομών, που βρίσκονται υπό μηχανική τάση, στη φυσική των διατάξεων είναι σημαντική και επομένως στοιχεία θεωρίας ελαστικότητας των κρυστάλλων είναι (και πάλι) απαραίτητα. Επομένως αφιερώσαμε ένα καινούριο κεφάλαιο σε αυτό το θέμα. Το επιπλέον κεφάλαιο για τα φάσματα διέγερσης υπεραγωγών, έχει σαν στόχο να βελτιώσει την κατανόηση της επίκαιρης έρευνας σε διεπιφάνειες υπεραγωγών/αγωγών καθώς και τις εφαρμογές στα ηλεκτρονικά υπεραγωγών. Για τον ίδιο λόγο έχουν συμπεριληφθεί υποκεφάλαια για τις επαφές Schottky μετάλλου/ημιαγωγού και για τις βασικές αρχές λειτουργίας σημαντικών διατάξεων ημιαγωγών. Σε όλες αυτές τις προσθήκες προσπαθήσαμε να διατηρήσουμε το πνεύμα του βιβλίου, δηλαδή να τοποθετήσουμε τα φαινόμενα στο γενικό πλαίσιο της κατανόησης της φυσικής στερεάς κατάστασης σε ατομιστική βάση.

Ευχαριστούμε τους Dr. Klaus Dahmen, Dr. Arno Förster, Dr. Margaret Giesen, Dr. Michel Marso, Prof. Angela Rizzi και τον Dr. Thomas Schäpers για τις χρήσιμες συζητήσεις μας σε ειδικά θέματα και τις πολλαπλές υποδείξεις τους για τη βελτίωση της παρουσίασης.

Επίσης ευχαριστούμε τους Dr. H. J. Koelsch, Dr. T. Schneider και τον Mr. C.-D. Bachem της Springer-Verlag για την ευχάριστη συνεργασία.

H. Ibach H. Lüth

Jülich and Aachen, Ιανουάριος 2003

Πρόλογος δεύτερης έκδοσης

Η γερμανική έκδοση του εγχειριδίου «Festkörperphysik» έχει γίνει εξαιρετικά δημοφιλής μεταξύ των γερμανόφωνων φοιτητών και ήδη διατίθεται η 4η έκδοσή του. Η αγγλική έκδοσή του έχει υιοθετηθεί από πολλά πανεπιστήμια των Ηνωμένων Πολιτειών όπως και πολλών άλλων χωρών. Η παρούσα έκδοση είναι η 2η αγγλόφωνη έκδοση, η οποία αντιστοιχεί στην 4η γερμανόφωνη έκδοση.

Εκτός από τη διόρθωση ορισμένων τυπογραφικών λαθών και τη βελτίωση του γενικού παρουσιαστικού του βιβλίου, στην παρούσα έκδοση ορισμένα κεφάλαια είτε αναθεωρήθηκαν δραστικά είτε επεκτάθηκαν. Για παράδειγμα, το Ένθετο V επεκτάθηκε ώστε να συμπεριλάβει την περιγραφή της γωνιακά αναλυμένης φωτοεκπομπής ως και τη σπουδαιότητά της κατά τη μελέτη των ηλεκτρονικών δομών. Το Υποκεφάλαιο 10.10, περί υπεραγωγών υψηλής θερμοκρασίας, έχει γραφεί εκ νέου, καθώς αυτό το λίκν ενεργό ερευνητικό πεδίο αναπτύσσεται τόσο γοργά, ώστε να προκύψουν πολλά νέα αποτελέσματα από την εμφάνιση της πρώτης έκδοσης. Αυτά τα νέα αποτελέσματα έριξαν νέο φώς σε πολλές θεμελιώδεις απόψεις της φυσικής.

Το νέο Υποκεφάλαιο 10.10 αναπτύχθηκε κατόπιν εκτενών συζητήσεων με συναδέλφους οι οποίοι εργάζονται ερευνητικά στο πεδίο της υπεραγωγιμότητας. Ιδιαίτερα ευχαριστούμε τον καθηγητή C. Calandra από το πανεπιστήμιο της Modena, καθώς και τον Dr. R. Wördenweber του Ινστιτούτου Λεπτών Υμενίων και Τεχνολογίας Ιόντων (Institute of Thin Film and Ion Technology) του ερευνητικού κέντρου του Jülich.

Η αναθεώρηση των προβλημάτων έγινε με τη βοήθεια των Dr. W. Daum, Dr. A. Förster, A. Leuther και Ch. Ohler. Τους ευχαριστούμε για την όλη προσπάθειά τους. Επίσης ευχαριστούμε την Dr. Margret Giessen για τις πολυάριθμες βελτιώσεις της στο χειρόγραφο, καθώς επίσης και την Dr. Angela Lahee για την επιτυχή μετάφραση των αναθεωρημένων ή νέων Υποκεφαλαίων.

H. Ibach-H. Lüth

Jülich και Aachen, Απρίλιος 1995

Πρόλογος πρώτης έκδοσης

Τις πρόσφατες δεκαετίες, η Φυσική Στερεάς Κατάστασης «βίωσε» πολλές και δραματικές εξελίξεις, μέσω των οποίων αναδείχθηκε σε έναν από τους ευρύτερους και ανεξάρτητους κλάδους της Φυσικής. Ταυτόχρονα επεκτάθηκε σε πολλές νέες περιοχές, παίζοντας ζωτικό ρόλο σε πεδία που στο παρελθόν ανήκαν στην κυριότητα της επιστήμης των μηχανικών και των χημικών. Μία άμεση συνέπεια αυτής της εκρηκτικής ανάπτυξης είναι ότι σήμερα κανένας πανεπιστημιακός δάσκαλος δεν διανοείται ότι μπορεί να καλύψει σε επαρκές βάθος όλες τις πλευρές αυτού του αχανούς πεδίου. Παρομοίως, δεν είναι δυνατόν να φανταστούμε ότι στο πλαίσιο ενός μαθήματος μπορεί κάποιος να προσφέρει στους φοιτητές μια εις βάθος κατανόηση όλων αντικειμένων καθώς και των πολλαπλών εφαρμογών του κλάδου.

Ενόψει αυτής της κατάστασης, η ύπαρξη ενός εγχειριδίου που να δίνει μια συνοπτική θεώρηση των βασικών στοιχείων της φυσικής των στερεών είναι ιδιαίτερα χρήσιμη. Στο εν λόγω βιβλίο παρουσιάζονται οι θεμελιώδεις πτυχές της Φυσικής Στερεάς Κατάστασης, ακολουθώντας το σχήμα: Χημικός δεσμός, δομή, δυναμική πλέγματος, και ηλεκτρονικές ιδιότητες. Πιστεύουμε ότι αυτή η ακολουθία αποτελεί τη βέλτιστη επιλογή για τη διδασκαλία του αντικειμένου, καθόσον επιτρέπει τη βαθμιαία εισαγωγή των δυσνόητων εννοιών και μάλιστα αφού ήδη θα έχει επιτευχθεί η κατανόηση των θεμελιωδών ιδεών μέσω της μελέτης απλών προτύπων και παραδειγμάτων. Πέραν της προσεκτικά δομημένης ανάπτυξης της ύλης της κλασικής θεώρησης της Φυσικής Στερεάς Κατάστασης, η οποία εδράζεται τόσο στην παρουσία περιοδικότητας στο στερεό όσο και στην προσέγγιση του ενός ηλεκτρονίου, το βιβλίο περιλαμβάνει επίσης περιεκτικές περιγραφές των πλέον ενεργών περιοχών των σύγχρονων ερευνητικών πεδίων: μαγνητισμός, υπεραγωγιμότητα και φυσική ημιαγωγών.

Στο κεφάλαιο του μαγνητισμού μελετάται η σύζευξη ανταλλαγής μεταξύ εντοπισμένων και μη ηλεκτρονίων και ο αναγνώστης θα οδηγηθεί στο σημείο να είναι σε θέση να κατανοεί τα αποτελέσματα σύγχρονων πειραμάτων σε λεπτά υμένια. Η καθιερωμένο πρότυπο της υπεραγωγιμότητας επεξηγείται μέσω μιας απλοποιημένης παρουσίασης της BCS θεωρίας. Ένα υποκεφάλαιο αφιερώνεται στους καινοφανείς υπεραγωγούς υψηλών θερμοκρασιών. Το πεδίο όμως βρίσκεται σε τέτοια ανάπτυξη, που μας επέβαλλε να περιοριστούμε στη θεώρηση μερικών επιλεγμένων πειραματικών αποτελεσμάτων και μερικών κεντρικών ιδεών αυτού του συναρπαστικού φαινομένου. Το κεφάλαιο των ημιαγωγών, πέραν της γενικής εισαγωγής στα εν λόγω υλικά, περιέχει λεπτομερείς περιγραφές των ημιαγωγικών ετεροδομών, υπερδομές, επιταξία και το κβαντικό φαινόμενο Hall.

Στη Φυσική Στερεάς Κατάστασης η αλληλεπίδραση μεταξύ θεωρίας και πειράματος πάντα έπαιζε και συνεχίζει να παίζει ζωτικό ρόλο. Έτσι, σε όλο το βιβλίο καταβάλλεται προσπάθεια να διατηρήσουμε μια μέση πορεία στην οποία όπου τόσο

η θεωρία όσο και το πείραμα να παρουσιάζονται επαρκώς. Όπου η θεωρητική προσέγγιση είναι εξυπηρετική και όχι εξαιρετικά απαιτητική, δεν διστάζουμε να προκαλέσουμε τον αναγνώστη με τις αναγκαίες αφηρημένες έννοιες. Επιπλέον επιχειρήσαμε να συμπεριλάβουμε θεωρητικές μεθόδους και έννοιες, για παράδειγμα αυτές της θεωρίας ομάδων, οι οποίες είναι απαραίτητες για την κατανόηση σύγχρονων δημοσιεύσεων σχετικές με τη θεωρία της στερεάς κατάστασης.

Η συνοπτική παρουσίαση των θεμελιωδών θεωρητικών απόψεων συμπληρώνεται με τη συμπερίληψη επιλεγμένων πειραματικών μεθόδων και παραδειγμάτων, συνεπτυγμένων υπό τη μορφή αυτοτελών ενθέτων. Αυτά προσφέρουν στον αναγνώστη την ευκαιρία να ελέγξει και συνάμα να εμπεδώσει το υλικό που ήδη έχει μελετήσει και πιθανόν να τον παροτρύνει σε περαιτέρω εμβάθυνση ή διεύρυνση σε περιοχές που τον ενδιαφέρουν.

Οι φοιτητές θα ωφεληθούν επίσης σημαντικά επιλύοντας τις εκτεταμένες σειρές προβλημάτων που παρατίθενται στο τέλος κάθε κεφαλαίου. Αυτά τα προβλήματα δεν περιορίζονται σε υπολογισμούς που βασίζονται στις μεθόδους που περιγράφονται στο κείμενο. Σε πολλές περιπτώσεις αυτά οδηγούν σε περιοχές που κείνται εκτός του βασικού σκοπού του βιβλίου. Όλα τα προβλήματα τέθηκαν σε εξετάσεις των δικών μας κύκλων μαθημάτων. Παρ' όλα αυτά, ο φοιτητής συχνά έχει ανάγκη από κάποιο χέρι βοήθειας ή από κάποια προκαταρκτική βοήθεια εκ μέρους του διδάσκοντος. Τα προβλήματα είναι χρήσιμα τόσο στους φοιτητές όσο και στους διδάσκοντες. Είναι έτσι σχεδιασμένα ώστε να παροτρύνουν την περαιτέρω μελέτη και να αναδεικνύουν τη σύνδεση μεταξύ διάφορων γνωστικών περιοχών.

Αυτό το βιβλίο είναι η μετάφραση της τρίτης έκδοσης του γερμανικού πρωτότυπου. Οι συγγραφείς θεωρούν πολύ καλή τους τύχη που είχαν την υποστήριξη της Dr. Angela Lahee κατά τη μετάφραση και δακτυλογράφηση αυτού του βιβλίου. Είμαστε ευγνώμονες σε ένα αριθμό συναδέλφων, οι οποίοι όλα αυτά τα χρόνια παρείχαν ανεκτίμητες υποδείξεις σχετικά με την παρουσίαση του βιβλίου ή με την παροχή του πειραματικού υλικού που περιγράφεται στο βιβλίο. Για την κριτική ανάγνωση των χειρογράφων και των πρώτων δοκιμών ευχαριστούμε ιδιαίτερα τους Dr. W. Daum, Mr. Ch. Stuhlman, Dr. M. Wuttig and Mr. G. Bogdanyi. Τα σχήματα προετοιμάστηκαν με μεγάλη φροντίδα και υπομονή από τους Mrs. U. Marx Birmansand Mr. H. Mattke. Το γερμανικό χειρόγραφο δακτυλογραφήθηκε από τους Mrs. D. Krüger, Mrs. Jürss-Nystenand Mrs. G. Offermann. Εκφράζουμε τις ευχαριστίες μας στους Dr. H. Lotsch και Mr. C.-D. Bachem του Springer-Verlag για την ευχάριστη συνεργασία μας.

H. Ibach, H. Lüth
Jülich, Ιανουάριος 1991

Πρόλογος ελληνικής έκδοσης

Το βιβλίο «Φυσική Στερεάς Κατάστασης – Εισαγωγή στις Αρχές της Επιστήμης των Υλικών» αποτελεί την ελληνική έκδοση του βιβλίου «Festkörperphysik» των καθηγητών H. Lüth και H. Ibach του Πανεπιστημίου του Aachen της Γερμανίας και καλύπτει τόσο τις βασικές αρχές της Φυσικής Στερεάς Κατάστασης όσο και μια πλειάδα εννοιών των ιδιοτήτων της Φυσικής των Υλικών.

Το βιβλίο είναι το κατάλληλο διδακτικό εγχειρίδιο για τη μελέτη της Φυσικής Στερεάς Κατάστασης και των αρχών της Επιστήμης Υλικών και απευθύνεται τόσο σε φοιτητές Τμημάτων Φυσικής ή Επιστήμης των Υλικών των Πανεπιστημίων, όσο και των αντίστοιχων Τμημάτων των Πολυτεχνικών Σχολών με προσανατολισμό την Τεχνολογία και την Μελέτη των Υλικών.

Η ενθουσιώδης υποδοχή και η ευρύτατη χρήση του από πάρα πολλά πανεπιστήμια σε όλο τον κόσμο ως διδακτικό εγχειρίδιο, είτε στη μητρική γερμανική του έκδοση ως «Festkörperphysik» είτε στην αγγλική του έκδοση ως «Solid-State Physics, An Introduction to Principles of Materials Science», παράλληλα με την απουσία αντίστοιχου ελληνόγλωσσου εγχειριδίου, ώθησε την ελληνική ομάδα να προχωρήσει στην απόδοσή του και στα ελληνικά.

Το βιβλίο χαρακτηρίζεται από την πετυχημένη προσπάθεια των συγγραφέων να κάνουν έναν άριστο συνδυασμό ενός επαρκούς και κατανοητού θεωρητικού υποβάθρου, το οποίο και συγκρίνουν με αντίστοιχα επίκαιρα πειραματικά αποτελέσματα. Η παρουσία επιλεγμένων ένθετων ενισχύει σημαντικά την πληρότητα του κειμένου και συνάμα εξοικειώνει τον φοιτητή με τις αντίστοιχες πειραματικές διατάξεις, παρέχοντάς του εναύσματα για περαιτέρω μελέτη. Τέλος παρουσιάζονται επίκαιρες τάσεις και εφαρμογές, όπως οι νανοδομές και τα μεταϋλικά.

Η παράθεση σημαντικού αριθμού επιλεγμένων προβλημάτων στο τέλος κάθε κεφαλαίου θα βοηθήσει τους φοιτητές να εμβαθύνουν και να κατανοήσουν τις επιμέρους έννοιες. Τα προβλήματα είναι έτσι επιλεγμένα, ώστε να ωθούν τους φοιτητές σε περαιτέρω μελέτη και αναζήτηση στη βιβλιογραφία και να καταδεικνύουν τη διασύνδεση μεταξύ των διάφορων πεδίων της Φυσικής Στερεάς Κατάστασης και Τεχνολογίας.

Η πρώτη ελληνική απόδοση πραγματοποιήθηκε με τη συνεχή υποστήριξη και ενθάρρυνση των εκδόσεων ΖΗΤΗ. Τους ευχαριστούμε από τη θέση αυτή.

*Η ομάδα για την ελληνική απόδοση
Θεσσαλονίκη, Δεκέμβριος 2011*

Περιεχόμενα

Κεφάλαιο 1	Οι χημικοί δεσμοί στα στερεά	1
1.1.	Ο περιοδικός πίνακας των στοιχείων	2
1.2.	Ομοιοπολικός δεσμός	5
1.3.	Ιοντικός δεσμός	11
1.4.	Ο μεταλλικός δεσμός	16
1.5.	Ο δεσμός του υδρογόνου	17
1.6.	Ο Δεσμός van der Waals	19
1.7.	Προβλήματα	19
Κεφάλαιο 2	Δομή της στερεάς ύλης	25
2.1.	Το κρυσταλλικό πλέγμα	26
2.2.	Συμμετρία χώρου ή σημείου	29
	Ανάκλαση σε επίπεδο	30
	Αναστροφή	30
	Άξονες περιστροφής	30
	Άξονες περιστροφής - αναστροφής	31
2.3.	Οι 32 κρυσταλλικές τάξεις (ομάδες σημείου)	31
2.4.	Η σπουδαιότητα της συμμετρίας	34
2.5.	Απλές κρυσταλλικές δομές	37
	Η ολοεδρικά κεντρωμένη κυβική δομή	37
	Η εξαγωνική πυκνή επιστοιβάση	39
	Η ενδοκεντρωμένη κυβική δομή	39
	Η δομή του διαμαντιού	40
	Η δομή Zinc Blende	41
	Ιονικές δομές	41
2.6.	Φασικά διαγράμματα κραμάτων	42
2.7.	Ατέλειες στα στερεά	53
2.8.	Προβλήματα	56

Κεφάλαιο 3	Περίθλαση από περιοδικές δομές	59
3.1.	Γενική θεωρία σκέδασης	60
3.2.	Περιοδικές δομές και το αντίστροφο πλέγμα	66
3.3.	Οι συνθήκες σκέδασης για περιοδικές δομές	68
3.4.	Η ερμηνεία Bragg της συνθήκης Laue	70
3.5.	Οι ζώνες του Brillouin	74
3.6.	Ο παράγοντας δομής	75
3.7.	Μέθοδοι της δομικής ανάλυσης	78
	Τύποι ανιχνευτικών δεσμών	78
	Διεργασίες για τον προσδιορισμό της δομής	80
3.8.	Προβλήματα	82
	Ένθετο Ι. Πειράματα περίθλασης με διάφορα σωμάτια	85
I.1.	Ηλεκτρόνια	85
I.2.	Ατομικές δέσμες	87
I.3.	Νετρόνια	89
	Ένθετο ΙΙ. Συμβολομετρία και τοπογραφία ακτίνων X	92
Κεφάλαιο 4	Δυναμική των ατόμων εντός των κρυστάλλων	97
4.1.	Το δυναμικό	98
4.2.	Η εξίσωση κίνησης	100
4.3.	Γραμμική διατομική αλυσίδα	102
4.4.	Σκέδαση από χρονικά μεταβαλλόμενες δομές – Φασματοσκοπία φωτονίων	107
4.5.	Ελαστικές ιδιότητες των κρυστάλλων	111
4.6.	Προβλήματα	122
	Ένθετο ΙΙΙ. Φασματοσκοπία Raman	127
Κεφάλαιο 5	Θερμικές ιδιότητες	135
5.1.	Η πυκνότητα καταστάσεων	136
5.2.	Θερμική ενέργεια αρμονικού ταλαντωτή	139
5.3.	Ειδική Θερμότητα	141
5.4.	Φαινόμενα λόγω αναρμονικότητας	144
5.5.	Θερμική διαστολή	145

5.6. Θερμική αγωγιμότητα φωνονίων	149
5.7. Προβλήματα	154
Ένθετο IV. Πειράματα σε χαμηλές θερμοκρασίες	156

Κεφάλαιο 6 «Ελεύθερα» ηλεκτρόνια στα στερεά 161

6.1. Το αέριο των ελεύθερων ηλεκτρονίων σε ένα απείρου βάθους τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού	163
6.2. Το αέριο Fermi σε θερμοκρασία $T=0$ K	167
6.3. Η στατιστική Fermi	170
6.4. Η ειδική θερμοχωρητικότητα των ηλεκτρονίων στα μέταλλα	174
6.5. Ηλεκτρονική θωράκιση σε ένα αέριο Fermi – Η μετάβαση Mott	179
6.6. Η θερμοϊονική εκπομπή ηλεκτρονίων από μέταλλα	182
6.7. Προβλήματα	186

Κεφάλαιο 7 Η ηλεκτρονική δομή των στερεών 191

7.1. Γενικές ιδιότητες της συμμετρίας	192
7.2. Η προσέγγιση του σχεδόν ελεύθερου ηλεκτρονίου	196
7.3. Η προσέγγιση της ισχυρής σύζευξης	201
7.4. Παραδείγματα ηλεκτρονικών δομών	208
7.5. Η πυκνότητα καταστάσεων	213
7.6. Πυκνότητα καταστάσεων σε μη κρυσταλλικά στερεά	216
7.7. Προβλήματα	219

Ένθετο V. Φασματοσκοπία φωτοεκπομπής	222
Πείραμα	222
Φωτεινές πηγές	223
Μηχανισμός φωτοεκπομπής	225
Κανόνες επιλογής στην φασματοσκοπία φωτοηλεκτρονίων υπεριώδους (UPS)	228

Κεφάλαιο 8 Μαγνητισμός 231

8.1. Διαμαγνητισμός και παραμαγνητισμός	232
8.2. Η αλληλεπίδραση ανταλλαγής	238
8.3. Αλληλεπίδραση ανταλλαγής μεταξύ ελεύθερων ηλεκτρονίων	241
8.4. Το μοντέλο των ταινιών για τον σιδηρομαγνητισμό	244

8.5.	Η θερμοκρασιακή συμπεριφορά ενός σιδηρομαγνήτη στο μοντέλο των ταινιών	248
8.6.	Σιδηρομαγνητική σύζευξη για εντοπισμένα ηλεκτρόνια	253
8.7.	Αντισιδηρομαγνητισμός	256
8.8.	Κύματα spin	260
8.9.	Κρυσταλλική ανισοτροπία	265
	Μαγνήτιση ενός δείγματος	265
	Ανισοτροπία κυβικών και εξαγωνικών κρυστάλλων	267
	Ανισοτροπία κυβικών και εξαγωνικών κρυστάλλων	267
	Τοιχώματα περιοχών	269
8.10.	Προβλήματα	273
Ένθετο VI. Μαγνητοστατικά κύματα spin		274
Ένθετο VII. Μαγνητισμός σε συστήματα λεπτών υμενίων και το φαινόμενο της γιγαντιαίας μαγνητοαντίστασης (GMR - Effect		280
	Μαγνητική ανισοτροπία σε συστήματα λεπτών υμενίων	280
	Πόλωση ανταλλαγής	282
	Γιγαντιαία μαγνητοαντίσταση (GMR)	284
Κεφάλαιο 9 Κίνηση των ηλεκτρονίων και φαινόμενα μεταφοράς		289
9.1.	Κίνηση των ηλεκτρονίων στις ταινίες και η ενεργή μάζα	289
9.2.	Ρεύματα σε ταινίες και οπές	294
9.3.	Σκέδαση των ηλεκτρονίων στις ταινίες	296
9.4.	Η Εξίσωση Boltzmann και ο χρόνος αφηρέμησης	301
9.5.	Η ηλεκτρική αγωγιμότητα των μετάλλων	306
9.6.	Θερμοηλεκτρικά φαινόμενα	313
9.7.	Ο νόμος των Wiedemann-Franz	317
9.8.	Ηλεκτρική αγωγιμότητα εντοπισμένων ηλεκτρονίων	318
9.9.	Κβαντική μεταφορά σε νανοδομές	322
	Χαρακτηριστικά μήκη	322
	Μονοδιάστατη μεταφορά	323
	Ταλαντώσεις Aharonov-Bohm και Altshuler-Aronov-Spivak	327
	Ασθενής εντοπισμός	333
	Παγκόσμιες διακυμάνσεις της αγωγιμότητας	334
9.10	Προβλήματα	338
Ένθετο VIII. Κβαντικές ταλαντώσεις και η τοπολογία των επιφανειών Fermi		341

Κεφάλαιο 10	Υπεραγωγιμότητα	349
10.1.	Ορισμένα βασικά φαινόμενα που σχετίζονται με την υπεραγωγιμότητα	350
10.2.	Φαινομενολογική περιγραφή μέσω των εξισώσεων London	356
10.3.	Αστάθεια της «θάλασσας Fermi» και τα ζεύγη Cooper	358
10.4.	Η θεμελιώδης κατάσταση BCS	365
10.5.	Το φάσμα διέγερσης ενός υπεραγωγού	376
10.6.	Συνέπειες της θεωρίας BCS και σύγκριση με πειραματικά αποτελέσματα	383
10.7.	Υπερρεύματα και κρίσιμα ρεύματα	388
10.8.	Συνοχή της θεμελιώδους κατάστασης και το φαινόμενο Meissner-Ochsenfeld	392
10.9.	Κβάντωση της μαγνητικής ροής	398
10.10.	Υπεραγωγοί τύπου II	402
10.11.	Υπεραγωγοί «υψηλών θερμοκρασιών»	411
10.12.	Προβλήματα	422
Ένθετο IX. Το φαινόμενο σήραγγας για ένα ηλεκτρόνιο στις επαφές υπεραγωγού		426
Ένθετο X. Φαινόμενο σήραγγας για ζεύγη Cooper – Το φαινόμενο Josephson		438
Κεφάλαιο 11	Διηλεκτρικές ιδιότητες των υλικών	447
11.1.	Η διηλεκτρική συνάρτηση	447
11.2.	Η απορρόφηση της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας	451
11.3.	Η διηλεκτρική συνάρτηση ενός αρμονικού ταλαντωτή	454
11.4.	Διαμήκεις και εγκάρσιοι κανονικοί τρόποι	457
11.5.	Επιφανειακά κύματα σε ένα διηλεκτρικό	460
11.6.	Ανακλαστικότητα ενός διηλεκτρικού ημι-επιπέδου	463
11.7.	Τοπικό πεδίο	464
11.8.	Καταστροφή λόγω πόλωσης και διηλεκτρικά	467
11.9.	Το αέριο ελευθέρων ηλεκτρονίων	468
11.10.	Διατανιακές μεταπτώσεις	471
11.11.	Εξιτόνια	481
11.12.	Διηλεκτρικές απώλειες ηλεκτρονίων	483
11.13.	Προβλήματα	486

Ένθετο XI. Καινοφανή οπτικά υλικά	491
Αρνητικός δείκτης διάθλασης	491
Μεταϋλικά	494
Ένθετο XII. Φασματοσκοπία υπέρυθρου	499
Ένθετο XIII. Μέθοδος εξασθενημένης ολικής ανάκλασης	502
Κεφάλαιο 12 Ημιαγωγοί	505
12.1. Δεδομένα για ορισμένους σημαντικούς ημιαγωγούς	506
12.2. Πυκνότητα φορέων φορτίου σε ενδογενείς ημιαγωγούς	512
12.3. Ημιαγωγοί με προσμείξεις	516
12.4. Πυκνότητες φορέων σε ημιαγωγούς με προσμείξεις	521
12.5. Η αγωγιμότητα των ημιαγωγών	528
12.6. Η επαφή p - n και η επαφή Schottky μετάλλου-ημιαγωγού	534
Η Επαφή p - n σε Θερμική Ισορροπία	535
Η πολωμένη επαφή p - n ανόρθωση	542
Η επαφή Schottky μετάλλου / ημιαγωγού	549
12.7. Ετεροεπαφές και υπερδομές ημιαγωγών	552
12.8. Σημαντικές διατάξεις ημιαγωγών	569
Το διπολικό τρανζίστορ	570
Τρανζίστορ επίδρασης πεδίου (FET)	574
Laser ημιαγωγών	580
12.9. Προβλήματα	586
Ένθετο XIV. Το φαινόμενο Hall	590
Ένθετο XV. Συντονισμός κύκλοτρον στους ημιαγωγούς	593
Ένθετο XVI. Ταλαντώσεις Shubnikov-de Haas και κβαντικό φαινόμενο Hall	597
Ένθετο XVII. Επιταξία ημιαγωγών	607
Ένθετο XVIII. Προετοιμασία νανοδομών	615
Βιβλιογραφία	623
Ευρετήριο όρων	635
Πίνακας σταθερών	646
Ισοδύναμες τιμές	647
Περιοδικός πίνακας	648

Οι χημικοί δεσμοί στα στερεά

Η φυσική στερεάς κατάστασης μελετά την κατάσταση της ύλης στην οποία ένας μεγάλος αριθμός ατόμων, που συνδέονται μεταξύ τους με χημικούς δεσμούς, δημιουργούν ένα πυκνό στερεό συσσωμάτωμα. Η έμφαση στον ορισμό της στερεάς κατάστασης βρίσκεται στον μεγάλο αριθμό των ατόμων, που είναι της τάξης των 20^{23} άτομα/cm⁻³. Εκ πρώτης όψεως η προσπάθεια εφαρμογής συμβατικών επιστημονικών μεθόδων για την περιγραφή ενός τόσο μεγάλου αριθμού ατόμων θα φαινόταν ανέφικτη. Όμως είναι ακριβώς αυτός ο μεγάλος αριθμός των ατόμων που επιτρέπει την ποσοτική περιγραφή του συστήματος με τη βοήθεια νέων μοντέλων που εφαρμόζονται ειδικά στα στερεά. Προϋπόθεση για την επιτυχία αυτών των μοντέλων είναι ότι τα άτομα δεν έχουν επιλεγεί με τυχαίο τρόπο από τον περιοδικό πίνακα. Αντίθετα το στερεό πρέπει να απαρτίζεται από περιορισμένο αριθμό διαφορετικών ατόμων, τα οποία είναι κατανεμημένα στον τρισδιάστατο χώρο με συγκεκριμένο τρόπο. Επομένως, για τον φυσικό που μελετά την στερεά κατάσταση, χαρακτηριστικά παραδείγματα είναι οι «στοιχειώδεις» κρύσταλλοι, δηλαδή τρισδιάστατες περιοδικές δομές που περιέχουν άτομα ενός τύπου ή χημικές ενώσεις που αποτελούνται από δύο διαφορετικά άτομα. Συνεπώς η κατανόηση των στερεών και των χαρακτηριστικών τους ιδιοτήτων προϋποθέτει ότι κατ' αρχάς επιτυγχάνουμε να καταλάβουμε δύο θεμελιώδη φαινόμενα: Το πρώτο αφορά τις δυνάμεις που συγκρατούν ενωμένα μεταξύ τους τα άτομα του στερεού, δηλαδή τους χημικούς δεσμούς μεταξύ των ατόμων. Η δεύτερη σημαντική ιδιότητα αφορά την τακτοποιημένη διάταξη των ατόμων στο στερεό. Η συνοπτική μελέτη αυτών των δύο βασικών φαινομένων γίνεται στα δύο πρώτα κεφάλαια. Για εκτενέστερη συζήτηση επί των φαινο-

μένων ο αναγνώστης παραπέμπεται σε συγγράμματα κβαντικής χημείας και κρυσταλλογραφίας.

1.1 Ο περιοδικός πίνακας των στοιχείων

Εν είδει εισαγωγής στους χημικούς δεσμούς θα μελετήσουμε σύντομα τον τρόπο με τον οποίο δομείται ο περιοδικός πίνακας των στοιχείων.

Οι ηλεκτρονικές καταστάσεις ενός ατόμου ταξινομούνται σύμφωνα με τις καταστάσεις ενός ηλεκτρονίου σε ακτινικώς συμμετρικό δυναμικό. Επομένως έχουμε τις καταστάσεις $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f...$ όπου οι αριθμοί παριστούν τον κύριο κβαντικό αριθμό n και τα γράμματα s, p, d, f αντιστοιχούν στις τιμές του αζιμουθιακού κβαντικού αριθμού (ή κβαντικός αριθμός της τροχιακής στροφορμής) του ηλεκτρονίου ($l=0,1,2,3...$). Η ταξινόμηση γίνεται με αυτόν τον τρόπο, επειδή το δυναμικό κάθε ηλεκτρονίου περιλαμβάνει την επίδραση όλων των άλλων ηλεκτρονίων τα οποία περιγράφονται σαν μια συνεχής κατανομή σταθερού φορτίου, το οποίο, σε μεγαλύτερη ή μικρότερη έκταση, θωρακίζει το δυναμικό του πυρήνα.

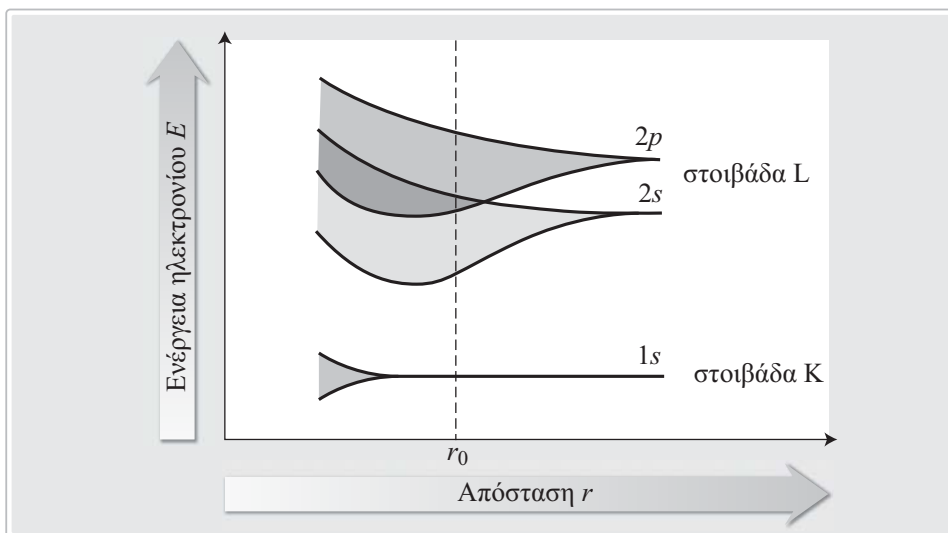
Πίνακας 1.1. Η κατασκευή του περιοδικού πίνακα γίνεται με τη διαδοχική προσθήκη των ηλεκτρονικών στοιβάδων (φλοιών). Στα αριστερά κάθε στήλης δίνεται το εξωτερικό τροχιακό που γεμίζει σταδιακά και σε παρένθεση φαίνεται ο μέγιστος επιτρεπτός αριθμός κατάληψης. Δείτε επίσης το εξώφυλλο.

$1s$ (2) H, He	$4s$ (2) K, Ca	$5p$ (6) In → Xe
$2s$ (2) Li, Be	$3d$ (10) μεταβατικά μέταλλα Sc → Zn	$6s$ (2) Cs, Ba
$2p$ (6) B → Ne	$4p$ (6) Ga → Kr	$4f$ (14) σπάνιες γαίες Ce → Lu
$3s$ (2) Na, Mg	$5s$ (2) Rb, Sr	$5d$ (10) μεταβατικά μέταλλα La → Hg
$3p$ (6) Al → Ar	$4d$ (10) μεταβατικά μέταλλα Y → Cd	$6p$ (6) Tl → Rn

Επιπλέον του κύριου κβαντικού αριθμού n και του αζιμουθιακού κβαντικού αριθμού l , υπάρχει και ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός m που μπορεί να πάρει $(2l+1)$ το πλήθος διαφορετικές τιμές (που κυμαίνονται από $-l$ έως $+l$). Σύμφωνα με την απαγορευτική αρχή του Pauli, κάθε κατάσταση μπορεί να καταληφθεί από δύο το πολύ ηλεκτρόνια αντιθέτου spin. Επομένως, συναρτήσει του αυξανόμενου πυρή-

νικού φορτίου, οδηγούμεθα στην κατασκευή του περιοδικού πίνακα, η δομή του οποίου περιγράφεται στον Πίνακα 1.1. Από τη διαδοχή των ενεργειακών σταθμών του ατόμου του υδρογόνου, θα αναμέναμε ότι, αφού γεμίσουν οι στάθμες $3p$, οι επόμενες που θα πληρωθούν θα είναι οι $3d$. Όμως στην πράξη, όπως φαίνεται και από τον Πίνακα 1.1, αυτό δεν συμβαίνει και μετά από τις στάθμες $3p$ οι επόμενες που γεμίζουν είναι οι $4s$. Η επακόλουθη συμπλήρωση των σταθμών $3d$ οδηγεί στην πρώτη σειρά των μεταβατικών μετάλλων (τα μέταλλα $3d$). Με ανάλογο τρόπο οδηγούμεθα και στα μέταλλα $4d$ και $5d$. Το ίδιο φαινόμενο για τις στάθμες f οδηγεί στις σπάνιες γαίες. Αυτή η ανωμαλία οφείλεται στο γεγονός ότι τα s ηλεκτρόνια έχουν μία μη μηδενική πιθανότητα να βρίσκονται κοντά στον πυρήνα και ως εκ τούτου υφίστανται σε μικρότερο βαθμό τη θωράκιση των άλλων ηλεκτρονίων. Γι' αυτόν τον λόγο τα s ηλεκτρόνια έχουν χαμηλότερη ενέργεια.

Ας σκεφτούμε ένα θεωρητικό πείραμα, στο οποίο σταδιακά πλησιάζουν μεταξύ τους αρκετά άτομα που αρχικώς είναι απομονωμένα. Η αλληλεπίδραση μεταξύ τους θα προκαλέσει διαχωρισμό εκάστης των ενεργειακών τους σταθμών. Αν ο αριθμός των ατόμων είναι πολύ μεγάλος, όπως συμβαίνει στα πραγματικά στερεά, τότε οι ενεργειακές στάθμες θα βρίσκονται σε μία ημισυνεχή κλίμακα και επομένως μπορούμε πλέον να συζητούμε για ενεργειακές ταινίες. (Σχ. 1.1). Το εύρος της



Σχ. 1.1. Σχηματικό διάγραμμα που δείχνει τη διεύρυνση των ενεργειακών σταθμών που συμβαίνει όταν ένας μεγάλος αριθμός ατόμων από την πρώτη γραμμή του περιοδικού πίνακα πλησιάζουν μεταξύ τους. Η απόσταση r_0 αντιστοιχεί κατά προσέγγιση στην απόσταση χημικώς δεσμευμένων ατόμων. Λόγω της επικάλυψης των ταινιών $2s$ και $2p$, στοιχεία όπως το Be που έχει δύο ηλεκτρόνια στην εξωτερική στοιβάδα γίνονται μεταλλικά. Οι βαθιές ατομικές στάθμες διευρύνονται ελάχιστα και επομένως διατηρούν σε μεγάλο βαθμό τον ατομικό τους χαρακτήρα.

ταινίας (δηλαδή η διεύρυνση των σταθμών) εξαρτάται από την επικάλυψη των εμπλεκομένων κυματοσυναρτήσεων. Συνεπώς οι βαθιές στάθμες, για τις οποίες η διεύρυνση είναι μικρή, διατηρούν τον ατομικό τους χαρακτήρα ακόμη και στα στερεά. Αντίθετα οι υψηλότερες κατειλημμένες στάθμες εμφανίζουν τόσο μεγάλη διεύρυνση που οι στάθμες $s-$, $p-$ και $d-$ ενώνονται σε μία ταινία. Τα ηλεκτρόνια αυτής της υψηλότερης ενεργειακά ταινίας είναι υπεύθυνα για τον σχηματισμό των χημικών δεσμών μεταξύ των ατόμων και επομένως η ταινία αυτή ονομάζεται ταινία σθένους. Η θεμελιώδης αρχή που διέπει τον σχηματισμό των χημικών δεσμών είναι η ελάττωση της ηλεκτρονικής ενέργειας που οφείλεται στη διεύρυνση των ενεργειακών επιπέδων. Αυτή η διεύρυνση, παρά την αύξηση της άπωσης ανάμεσα στους πυρήνες, προκαλεί μείωση της συνολικής ενέργειας συναρτήσει της απόστασης μεταξύ των ατόμων μέχρι του σημείου της απόστασης ισορροπίας στο οποίο η συνολική ενέργεια είναι ελάχιστη.

Ο τύπος των δεσμών σε ένα στερεό καθορίζεται ουσιαστικά από τον βαθμό της επικάλυψης των ηλεκτρονικών κυματοσυναρτήσεων των ατόμων που συμμετέχουν στον δεσμό. Στην μία ακραία περίπτωση η επικάλυψη μπορεί να περιορίζεται μεταξύ των γειτονικών ατόμων, ενώ σε άλλες περιπτώσεις οι κυματοσυναρτήσεις μπορούν να εκτείνονται σε αρκετές ατομικές αποστάσεις. Στην πρώτη περίπτωση ο βαθμός επικάλυψης και επομένως και η ισχύς του δεσμού εξαρτώνται όχι μόνο από την απόσταση των γειτονικών ατόμων αλλά και από τις γωνίες των δεσμών. Αυτός ο δεσμός ονομάζεται κατευθυντικός ή *ομοιοπολικός*.

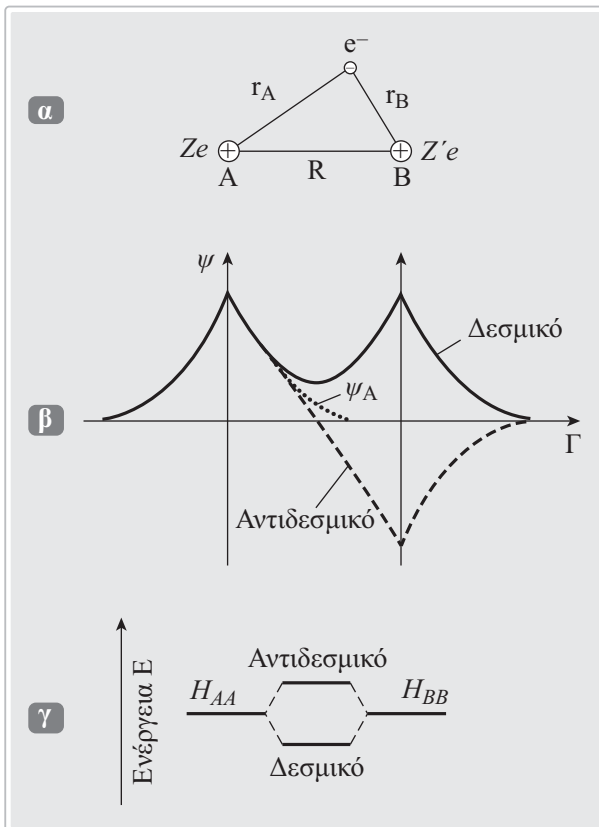
Στην πιο καθαρή του μορφή, ο ομοιοπολικός δεσμός σχηματίζεται ανάμεσα στα στοιχεία που έχουν το ίδιο σθένος, δηλαδή τα στοιχεία που έχουν την ίδια ηλεκτρονική δομή στην εξωτερική τους στοιβάδα. Αυτή όμως η συνθήκη δεν είναι ούτε ικανή ούτε αναγκαία για τον σχηματισμό ομοιοπολικών δεσμών. Αυτό που είναι σημαντικό είναι η σχετική έκταση των κυματοσυναρτήσεων σε σύγκριση με την ενδοατομική απόσταση. Αν η έκταση των κυματοσυναρτήσεων είναι μεγάλη συγκρινόμενη με την απόσταση των πλησιεστέρων γειτόνων, τότε η ακριβής θέση των πλησιεστέρων γειτόνων δεν παίζει σημαντικό ρόλο στη δημιουργία της μεγαλύτερης δυνατής επικάλυψης των κυματοσυναρτήσεων πολλών ατόμων. Σε αυτή την περίπτωση η πυκνότητα επιστοίβαξης είναι σημαντικότερη από τη θέση των πλησιεστέρων γειτόνων και ο δεσμός δεν είναι κατευθυντικός. Η κατάσταση στην οποία οι κυματοσυναρτήσεις εκτείνονται σε απόσταση που είναι μεγάλη σε σύγκριση με την απόσταση των ατόμων είναι χαρακτηριστική του *μεταλλικού* δεσμού. Όμως υπάρχει ένα ακόμη είδος μη κατευθυντικού δεσμού, ο *ιοντικός* δεσμός, που χαρακτηρίζεται από πολύ μικρή επικάλυψη των κυματοσυναρτήσεων. Σχηματίζεται όταν η μεταφορά ενός ηλεκτρονίου από ένα άτομο σε ένα άλλο ευνοείται ενεργειακά σε σημαντικό βαθμό. Ο ιοντικός δεσμός μπορεί να σχηματιστεί μόνο μεταξύ διαφορετικών ατόμων.

Στα επόμενα θα μελετήσουμε με περισσότερες λεπτομέρειες τους διαφορετικούς τύπους των δεσμών.

1.2 Ομοιοπολικός δεσμός

Έχουμε ήδη αναφέρει ότι για τον ομοιοπολικό δεσμό στα στερεά η αλληλεπίδραση μεταξύ των πλησιεστέρων γειτόνων είναι πρωταρχικής σημασίας. Επομένως μπορούμε να εξάγουμε πολλές από τις βασικές ιδιότητες των ομοιοπολικών στερεών χρησιμοποιώντας την κβαντική χημεία των μορίων. Παρακάτω θα αναφερθούμε στο απλούστερο δυνατό πρότυπο, δηλαδή ένα διατομικό μόριο που έχει ένα δέσμιο ηλεκτρόνιο.

Η Χαμιλτονιανή αυτού του μορίου περιέχει την κινητική ενέργεια του ηλεκτρονίου και την αλληλεπίδραση Coulomb ανάμεσα σε όλα τα σωματίδια (Σχ. 1.2.α).



Σχ. 1.2 α-γ. Το μόριο H_2^+ είναι το απλούστερο πρότυπο για τον ομοιοπολικό δεσμό. **(α)** Ορισμός των συμβόλων στην (1.1). **(β)** Δεσμικοί και αντιδεσμικοί συνδυασμοί των ατομικών τροχιακών. Ο δεσμικός συνδυασμός οδηγεί σε συσώρευση φορτίου μεταξύ των πυρήνων που με τη σειρά του προκαλεί μείωση της ενέργειας Coulomb. **(γ)** Ο διαχωρισμός των ατομικών ενεργειακών επιπέδων σε δεσμικές και αντιδεσμικές καταστάσεις. Το μέγιστο κέρδος σε ενέργεια επιτυγχάνεται όταν η δεσμική κατάσταση είναι πλήρως κατειλημμένη -δηλ. περιέχει δύο ηλεκτρόνια- και η αντιδεσμική είναι άδεια (ομοιοπολικός δεσμός).

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_A} - \frac{Z'e^2}{4\pi\epsilon_0 r_B} + \frac{ZZ'e^2}{4\pi\epsilon_0 R}. \quad (1.1)$$

Το κατάλληλο μοριακό τροχιακό ψ_{m_0} για το ηλεκτρόνιο θα έπρεπε να είναι η λύση της εξίσωσης Schrödinger

$$\mathcal{H} \psi_{m_0} = E \psi_{m_0}. \quad (1.2)$$

Όμως ακόμη και σε αυτή την απλή περίπτωση είμαστε υποχρεωμένοι να βασιστούμε σε προσεγγιστικές λύσεις. Η αναμενόμενη τιμή της ενέργειας της βασικής κατάστασης μπορεί να υπολογιστεί χρησιμοποιώντας την προσεγγιστική λύση, σύμφωνα με τη σχέση

$$E' = \frac{\int \psi^* \mathcal{H} \psi dr}{\int \psi^* \psi dr}. \quad (1.3)$$

Η προσεγγιστική λύση ψ μπορεί να οριστεί ως γραμμικός συνδυασμός των καταστάσεων των δύο ατόμων:

$$\psi = c_A \psi_A + c_B \psi_B. \quad (1.4)$$

όπου οι κυματοσυναρτήσεις και οι συντελεστές τους είναι πραγματικοί.

Αποδεικνύεται ότι οποιαδήποτε δοκιμαστική συνάρτηση όπως η ψ πάντοτε οδηγεί σε ενέργεια E' που είναι μεγαλύτερη της πραγματικής τιμής E (Πρόβλημα 1.8). Οι καλύτερες τιμές για τους συντελεστές c_A και c_B είναι αυτές που οδηγούν σε ελάχιστη τιμή της E' .

Χρησιμοποιώντας τις συντημήσεις

$$S = \int \psi_A \psi_B dr \quad (\text{ολοκλήρωμα επικάλυψης}) \quad (1.5\alpha)$$

$$H_{AA} = \int \psi_A \mathcal{H} \psi_A dr \quad (1.5\beta)$$

$$H_{AB} = \int \psi_A \mathcal{H} \psi_B dr \quad (1.5\gamma)$$

καταλήγουμε στην παρακάτω έκφραση για την E' , η οποία ακολούθως πρέπει να ελαχιστοποιηθεί

$$E' = \frac{c_A^2 H_{AA} + c_B^2 H_{BB} + 2c_A c_B H_{AB}}{c_A^2 + c_B^2 + 2c_A c_B S}. \quad (1.6)$$

Για το ελάχιστο ως προς τα c_A και c_B πρέπει

$$\frac{\partial E'}{\partial c_A} = \frac{\partial E'}{\partial c_B} = 0, \quad (1.7)$$

που οδηγεί στο παρακάτω ομοιογενές σύστημα

$$c_A(H_{AA} - E') + c_B(H_{AB} - E'S) = 0, \quad (1.8\alpha)$$

$$c_A(H_{AB} - E'S) + c_B(H_{BB} - E') = 0. \quad (1.8\beta)$$

Η λύση τους δίνεται από τη συνθήκη μηδενισμού της ορίζουσας

$$(H_{AA} - E')(H_{BB} - E') - (H_{AB} - E'S)^2 = 0. \quad (1.9)$$

Για την απλοποίηση του προβλήματος θεωρούμε ένα μόριο με δύο ίδιους πυρήνες (για παράδειγμα H_2^+) για το οποίο ισχύει $H_{AA} = H_{BB}$. Αν χρησιμοποιήσουμε την ατομική ιδιοτιμή $H_{AA} = H_{BB}$ των απομονωμένων ελεύθερων ατόμων, καταλήγουμε σε δύο νέα μοριακά τροχιακά με ενέργειες

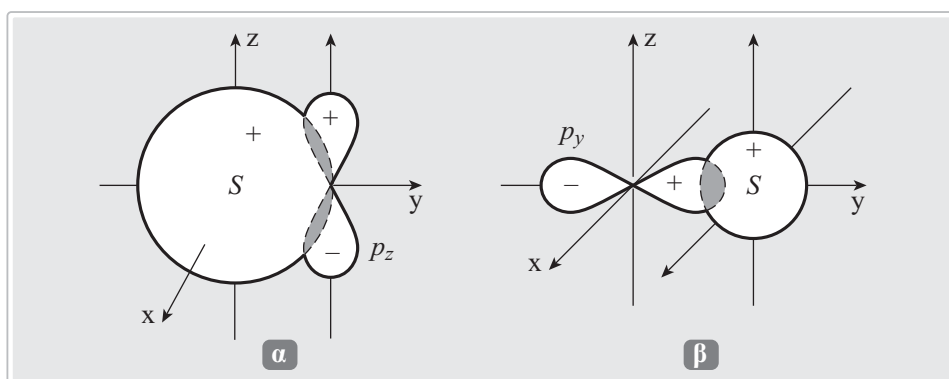
$$E_{\pm} \approx E'_{\pm} = \frac{H_{AA} \pm H_{AB}}{1 \pm S}. \quad (1.10)$$

Όταν οι δύο πυρήνες απέχουν άπειρη απόσταση, λόγω της (1.5α) προκύπτει ότι $S=0$, ενώ όταν οι πυρήνες συμπίπτουν προκύπτει ότι $S=1$. Από την (1.10) απορρέει ότι η χωρική επικάλυψη των κυματοσυναρτήσεων ψ_A και ψ_B οδηγεί σε διαχωρισμό των αρχικών ενεργειακών σταθμών $H_{AA} = H_{BB}$ σε μία υψηλότερη και μία χαμηλότερη μοριακή ενεργειακή στάθμη (Σχ. 1.2γ). Το μοριακό τροχιακό που αντιστοιχεί στην υψηλότερη ενεργειακή στάθμη είναι γνωστό με το όνομα *αντιδεσμικό* και το άλλο ως *δεσμικό*. Το ηλεκτρόνιο στο μόριο καταλαμβάνει το χαμηλότερο δεσμικό τροχιακό προκαλώντας έτσι μείωση της συνολικής ενέργειας. Αυτή η μείωση αντιστοιχεί στην ενέργεια σύνδεσης του ομοιοπολικού δεσμού.

Από τη συζήτηση προκύπτει ότι μόνον τα μερικώς κατειλημμένα ατομικά τροχιακά, δηλαδή αυτά που περιέχουν λιγότερα από δύο ηλεκτρόνια, μπορούν να συμμετέχουν σε ομοιοπολικούς δεσμούς: δεδομένου ότι τα δεσμικά μοριακά τροχιακά μπορούν να έχουν δύο ηλεκτρόνια (η απαγορευτική αρχή του Pauli επιτρέπει δύο καταστάσεις με αντίθετο spin), τα επιπλέον ηλεκτρόνια θα έπρεπε να καταλαμβάνουν το υψηλότερο ενεργειακά αντιδεσμικό τροχιακό, γεγονός που θα εξισορροπούσε την αρχική μείωση της ενέργειας (Πρόβλημα 1.7).

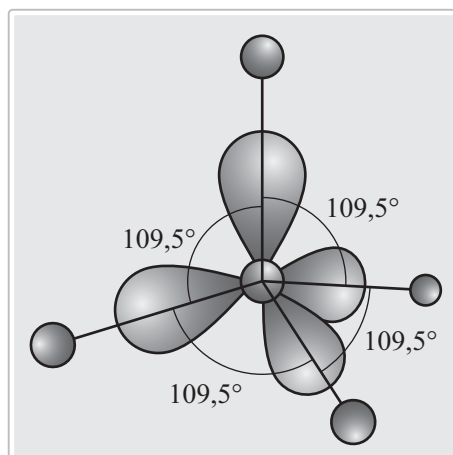
Στα διατομικά μόρια που μελετούμε εδώ το δεσμικό μοριακό τροχιακό αποτελείται από έναν αθροιστικό συνδυασμό των ψ_A και ψ_B , δηλαδή $\psi_{m_0} = \psi_A + \psi_B$ [στην (1.4) έχουμε $c_A = c_B$ για ίδιους πυρήνες]. Όπως φαίνεται στο Σχ. 1.2 αυτός ο συνδυασμός οδηγεί σε αύξηση της πυκνότητας ηλεκτρονικού φορτίου μεταξύ των πυρήνων. Αντίθετα ο αντιδεσμικός συνδυασμός $\psi_{m_0} = \psi_A - \psi_B$ οδηγεί σε μείωση της πυκνότητας φορτίου.

Είναι προφανές ότι ο ομοιοπολικός δεσμός σχετίζεται με συσσώρευση φορτίου μεταξύ των ατόμων που σχηματίζουν το μόριο ή το στερεό. Η χωρική επικάλυψη των κυματοσυναρτήσεων, που είναι υπεύθυνη για τον ομοιοπολικό δεσμό, καθορίζει επίσης το ενεργειακό κέρδος των δεσμικών τροχιακών του μορίου ή του στερεού και την ενέργεια σύνδεσης. Όπως φαίνεται στο Σχ. 1.3, για συγκεκριμένα ατομικά τροχιακά (s , p , d κ.λπ.) υπάρχουν κάποιιο προσανατολισμοί που ευνοούν την υπερέκλυψη ενώ άλλοι έχουν αντίθετη συνέπεια. Αυτός είναι και ο λόγος του ισχυρά κατευθυντικού χαρακτήρα του ομοιοπολικού δεσμού που είναι ιδιαίτερος εμφανής στους ομοιοπολικούς κρυστάλλους του διαμαντιού (C), Si και Ge οι οποίοι έχουν τετραεδρική συναρμογή (Σχ. 1.4).



Σχ. 1.3α,β. Γραφική αναπαράσταση της χωρικής επικάλυψης μεταξύ των s - και p -κυματοσυναρτήσεων του υδρογόνου. Το μέγεθος της κυματοσυναρτήσης απεικονίζεται από μία επιφάνεια σταθερού πλάτους. **(α)** Σε αυτή την κατάσταση η επικάλυψη αναιρείται λόγω της αντιστροφής του προσήμου της κυματοσυναρτήσης p_z . **(β)** Σε αυτή την κατάσταση η επικάλυψη μεταξύ των κυματοσυναρτήσεων s -και p_x δεν μηδενίζεται.

Σχ. 1.4. Η τετραεδρική συναρμογή των πλησιεστέρων γειτόνων στο πλέγμα των C, Si, Ge και α -Sn. Η δομή ευνοείται διότι αφενός μεν η περιοδική της επανάληψη γεμίζει τον τρισδιάστατο χώρο και αφετέρου επιτρέπει τον σχηματισμό υβριδικών τροχιακών sp^3 από τις καταστάσεις s , p_x , p_y και p_z . Στο σχήμα απεικονίζονται τα τροχιακά του διαμαντιού (C). Τα τροχιακά των Si, Ge και α -Sn έχουν επιπλέον κόμβους.



1.2

Να προσδιορίσετε το ισόθερμο μέτρο μεταβολής όγκου (bulk modulus)

$$\kappa = V \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T$$

και την ενέργεια του πλέγματος ανά ζεύγος ιόντων για το NaCl χρησιμοποιώντας την έκφραση για την ενέργεια του πλέγματος που αποτελείται από N το πλήθος ζεύγη ιόντων:

$$U(r) = N \left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} A + \frac{B}{r^n} \sum_{i \neq j} \frac{1}{P_{ij}^n} \right).$$

Χρησιμοποιώντας την τιμή $n=9$ και τη συνθήκη ότι το $U(r)$ είναι ελάχιστο στην απόσταση ισορροπίας να υπολογίσετε το B .

1.3

Είναι ευρέως γνωστό ότι το κοινό αλάτι (NaCl) διαλύεται εύκολα στο νερό. Στο διάλυμα τα άτομα Na και Cl βρίσκονται υπό μορφή θετικών και αρνητικών ιόντων. Να δείξετε ότι, λόγω της μεγάλης διηλεκτρικής σταθεράς του νερού και την επαγόμενη θωράκιση του δυναμικού Coulomb, η ενέργεια σύνδεσης ενός κρυστάλλου NaCl στο νερό είναι μικρότερη από μέση θερμική ενέργεια των ελευθέρων ιόντων. Να υπολογίσετε την απόσταση ισορροπίας των ιόντων σε έναν υποθετικό κρύσταλλο NaCl στο νερό και να δείξετε ότι αυτή η απόσταση είναι μεγαλύτερη από τη van der Waals ακτίνα του μορίου του νερού, δικαιολογώντας με αυτόν τον τρόπο την προσέγγιση που χρησιμοποιήθηκε για τη συζήτηση της διαλυτότητας του NaCl.

1.4

Να συζητήσετε τον ιοντικό χαρακτήρα των αλκαλίων με τη βοήθεια του Πίν. 1.2.

1.5

Να θεωρήσετε τη δομή CsCl και να υποθέσετε ότι η ακτίνα του κατιόντος μειώνεται ενώ η ακτίνα του ανιόντος παραμένει σταθερή. Τι συμβαίνει στην ενέργεια σύνδεσης; Να δείξετε ότι για μικρά κατιόντα η δομή του NaCl είναι η προτιμητέα δομή. Για μία ακόμη μικρότερη ακτίνα κατιόντος η δομή του ZnS έχει τη μεγαλύτερη ενέργεια σύνδεσης (σταθερά Madelung $A=1,638$). Να παραθέσετε παραδείγματα.

Δυναμική των ατόμων εντός των κρυστάλλων

Οι φυσικές ιδιότητες ενός στερεού είναι δυνατόν, χοντρικά, να επιμερισθούν σε αυτές που προσδιορίζονται από τα ηλεκτρόνια και σε αυτές που σχετίζονται με την κίνηση των ατόμων ως προς τη θέση ισορροπίας τους. Στην τελευταία κατηγορία, για παράδειγμα, ανήκουν η ταχύτητα του ήχου και οι επονομαζόμενες θερμικές ιδιότητες: ειδική θερμότητα, θερμική διαστολή, και –για τους ημιαγωγούς και μονωτές– η θερμική αγωγιμότητα. Κατ' αρχάς, επίσης, και η σκληρότητα προσδιορίζεται από την κίνηση των ατόμων περί τη θέση ισορροπίας των. Εδώ βέβαια παίζουν, κατά κανόνα, αποφασιστικό ρόλο και τα σφάλματα της δομής.

Ο επιμερισμός των ιδιοτήτων ενός στερεού σε ιδιότητες των ηλεκτρονίων και σε αυτές της δυναμικής των ατόμων είναι εύκολο, τουλάχιστον ποιοτικά, να κατανοηθεί, καθόσον η κίνηση των ατόμων, λόγω της μεγάλης μάζας τους, είναι πολύ βραδύτερη αυτής των ηλεκτρονίων. Επίσης, αν τα άτομα απομακρυνθούν από τη θέση ισορροπίας τους, τότε τα ηλεκτρόνια υιοθετούν μια νέα κατανομή (με μεγαλύτερη ολική ενέργεια). Όμως, κατά την κίνηση αυτή, το ηλεκτρονικό σύστημα παραμένει στη βασική του κατάσταση. Αν, εν συνεχεία, τα άτομα επανέλθουν στην αρχική τους θέση, η προσφερθείσα ενέργεια ανακτάται πλήρως και στο ηλεκτρονικό σύστημα δεν παραμένει καθόλου ενέργεια. Αυτή διαδικασία ισοδυναμεί με το ότι η συνολική ενέργεια, ως συνάρτηση των συντεταγμένων όλων των πυρήνων των ατόμων, παίζει το ρόλο ενός δυναμικού για την κίνηση των ατόμων. Φυσικά, αυτή η θεώρηση είναι μια απλή προσέγγιση. Υπάρχουν αρκετά φαινόμενα (Φαινόμενα μεταφοράς, Κεφ. 9), όπου η αλληλεπίδραση μεταξύ της δυναμικής των ατόμων και του συστήματος των ηλεκτρονίων καθίσταται σημαντική. Η προσέγγιση που θα

μελετηθεί στα επόμενα ονομάζεται “αδιαβατική προσέγγιση” και εισήχθη αρχικά από τους Born και Oppenheimer [4.1].

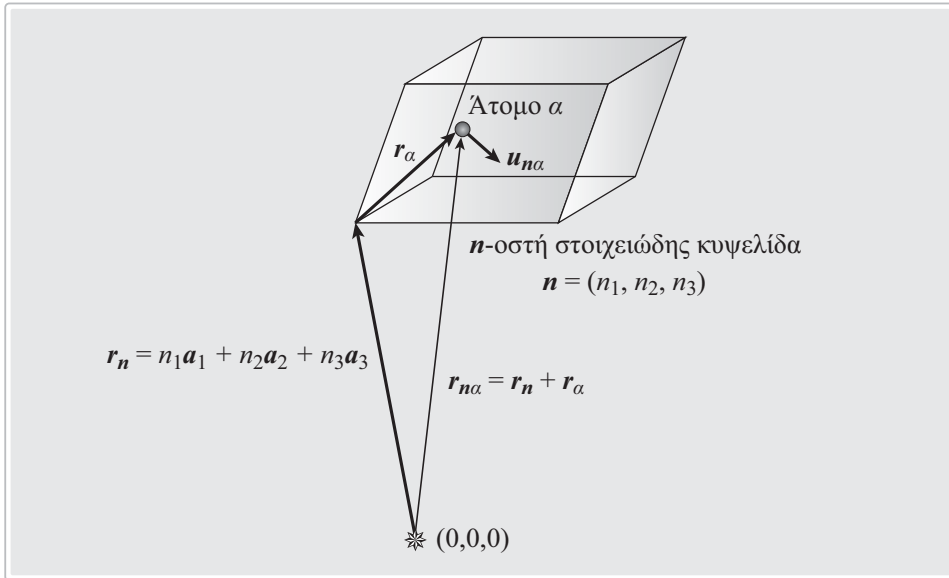
Επειδή το δυναμικό της κίνησης των ατόμων προσδιορίζεται από την ολική ενέργεια και, κατ’ ουσίαν, από τις ιδιότητες του ηλεκτρονικού συστήματος, κανείς θα μπορούσε να επιχειρήσει να περιγράψει αρχικά όλες τις ιδιότητες του συστήματος των ηλεκτρονίων και, εν συνεχεία, να παράγει από αυτές το δυναμικό για την κίνηση των ατόμων. Τέλος, από το δυναμικό μπορεί να αναπαράγει όλες τις ιδιότητες του στερεού που οφείλονται στην κίνηση των ατόμων. Αυτή η διαδικασία είναι όντως δυνατή, όμως εμπεριέχει σημαντικό μαθηματικό φόρτο και δεν ενδείκνυται για ένα διδακτικό βιβλίο. Ευτυχώς, μπορούμε να κάνουμε πολλές και σημαντικές προβλέψεις αναφορικά με τις θερμικές ιδιότητες ενός στερεού και την αλληλεπίδρασή τους με την ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία, χωρίς να είναι απαραίτητη η ακριβής γνώση του δυναμικού της κίνησης των ατόμων. Απλά, κανείς χρειάζεται μια γενική θεώρηση, η οποία να του επιτρέπει την διατύπωση και επίλυση των εξισώσεων κίνησης των ατόμων για οιοδήποτε αυθαίρετο δυναμικό. Με αυτή τη θεώρηση θα ασχοληθούμε στα επόμενα Υποκεφάλαια. Οι γενικές ιδέες που παρουσιάζονται εδώ συνιστούν και τα προαπαιτούμενα για την κατανόηση του Κεφ. 5, στο οποίο θα μελετηθούν οι θερμικές ιδιότητες των στερεών.

4.1 Το δυναμικό

Κατ’ αρχήν, θεωρούμε ένα κατάλληλο σύστημα δεικτοδότησης, ώστε να αναφερόμαστε σε επιμέρους άτομα. Δυστυχώς, αυτό είναι αρκετά περίπλοκο, λόγω των πολλών βαθμών ελευθερίας. Όπως και στα προηγούμενα, αριθμούμε κάθε μοναδιαία κυψελίδα με μια τριάδα αριθμών $\mathbf{n}=(n_1, n_2, n_3)$ ή $\mathbf{m}=(m_1, m_2, m_3)$ και τα άτομα εντός κάθε κυψελίδας με α, β . Η i -οστή συνιστώσα του διανύσματος θέσης στη κατάσταση ισορροπίας ενός ατόμου υποδηλώνεται με τον συμβολισμό r_{nai} και η μετατόπιση από τη θέση ισορροπίας με u_{nai} (Σχ. 4.1). Στη συνέχεια αναπτύσσουμε την ολική ενέργεια του κρυστάλλου Φ , η οποία είναι συνάρτηση όλων ατομικών συντεταγμένων, σε σειρά Taylor περί τη θέση ισορροπίας r_{nai} .

$$\Phi(r_{nai} + u_{nai}) = \Phi(r_{nai}) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{nai \\ m\beta j}} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r_{nai} \partial r_{m\beta j}} u_{nai} u_{m\beta j} \dots \quad (4.1)$$

Οι όροι που είναι γραμμικοί στο u_{nai} εξαφανίζονται, επειδή η ανάπτυξη γίνεται περί τη θέση ισορροπίας (ελάχιστο ενέργειας), και συνεπώς μηδενίζεται η πρώτη παράγωγος. Η άθροιση των δεικτών \mathbf{n}, \mathbf{m} επεκτείνεται σε όλες τις μοναδιαίες κυψε-



Σχ. 4.1. Επεξήγηση της ονοματολογίας των διανυσμάτων που χρησιμοποιούνται για την περιγραφή των ταλαντώσεων του πλέγματος σε ένα τρισδιάστατο περιοδικό κρύσταλλο. Το διάνυσμα πλέγματος \mathbf{r}_n εκτείνεται από ένα αυθαίρετα επιλεγμένο πλεγματικό σημείο $(0,0,0)$ έως την αρχή της n -στής μοναδιαίας κυψελίδας $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$, και από την οποία αρχή η θέση των ατόμων α , περιγράφεται από το διάνυσμα \mathbf{r}_α . Συνεπώς, η μετατόπιση από τη θέση ισορροπίας του ατόμου α στην n -οστή κυψελίδα είναι, $\mathbf{u}_{n\alpha}$. Επομένως, η χρονικά εξαρτώμενη θέση του εν λόγω ατόμου αναφορικά με την αρχή $(0, 0, 0)$ του συστήματος συντεταγμένων είναι $\mathbf{r}_{n\alpha} + \mathbf{u}_{n\alpha}(t)$, όπου $\mathbf{r}_{n\alpha} = \mathbf{r}_n + \mathbf{r}_\alpha$.

λίδες, των δεικτών α, β σε όλα τα είδη ατόμων στην κυψελίδα και των δεικτών i, j σε όλες τις χωρικές συντεταγμένες. Επίσης, στο ανάπτυγμα παραλείπονται, προς το παρόν, όροι ανώτερης τάξης. Συνεπώς, η εξίσωση (4.1) παριστά μια επέκταση του δυναμικού ενός αρμονικού ταλαντωτή στην περίπτωση πολλών σωματιδίων. Γι αυτό και η παράλειψη των όρων ανώτερης τάξης ονομάζεται και “αρμονική” προσέγγιση. Φαινόμενα (π.χ. θερμική διαστολή στερεών) τα οποία απαιτούν την παρουσία και των όρων ανώτερης τάξης ονομάζονται αναρμονικά φαινόμενα.

Οι παράγωγοι του δυναμικού

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial r_{n\alpha i} \partial r_{m\beta j}} = \Phi_{n\alpha j}^{m\beta i} \quad (4.2)$$

ονομάζονται “σταθερές σύζευξης”. Έχουν τις διαστάσεις των σταθερών ελατηρίων [δύναμη/μονάδα μήκους] και βοηθούν στη γενίκευση των σταθερών δυνάμεων του αρμονικού ταλαντωτή για ένα σύστημα με πολλούς βαθμούς ελευθερίας. Συνεπώς,

η ποσότητα $-\Phi_{nai}^{m\beta j} u_{m\beta j}$ παριστά τη δύναμη που ασκείται στο άτομο a της κυψελίδας n κατά την i -στη διεύθυνση, όταν το άτομο β της m κυψελίδας μετατοπίζεται απόσταση $u_{m\beta j}$ στην j -στη διεύθυνση. Για θετικές τιμές της $-\Phi_{nai}^{m\beta j}$ η δύναμη δρα προς την αντίθετη διεύθυνση από τη μετατόπιση $u_{m\beta j}$. Βλέπουμε ότι η παραπάνω περιγραφή επιτρέπει αλληλεπιδράσεις μεταξύ όλων των ατόμων ανεξάρτητα από την απόσταση μεταξύ των. Σε απλά πρότυπα, κανείς λαμβάνει υπόψη του την αλληλεπίδραση μόνο μεταξύ των ατόμων άμεσης γειτονίας.

Οι σταθερές σύζευξης οφείλουν να ικανοποιούν έναν αριθμό συνθηκών, οι οποίες απορρέουν από την ισοτροπία του χώρου, στη συμμετρία μετατόπισης και στη συμμετρία ομάδος σημείου [2.2]. Π.χ. η αμεταβλητότητα κατά τη μετατόπιση του πλέγματος κατά μία αυθαίρετη πλεγματική σταθερά συνεπάγεται ότι η ποσότητα $\Phi_{nai}^{m\beta j}$ μπορεί να εξαρτάται μόνο από τη διαφορά μεταξύ των m και n .

$$\Phi_{nai}^{m\beta i} = \Phi_{0ai}^{(m-n)\beta j} \quad (4.3)$$

4.2 Η εξίσωση κίνησης

Για μια μετατόπιση u του ατόμου a της κυψελίδας n στην διεύθυνση i , το άθροισμα των δυνάμεων σύζευξης και της αδρανειακής δύναμης θα πρέπει να ισούται με μηδέν (Νόμος Νεύτωνα).

$$M_a \ddot{u}_{nai} + \sum_{m\beta j} \Phi_{nai}^{m\beta j} u_{m\beta j} = 0 \quad (4.4)$$

Για N μοναδιαίες κυψελίδες με r άτομα η κάθε μία, θα έχουμε $3rN$ διαφορικές εξισώσεις οι οποίες περιγράφουν την κίνηση αυτών των ατόμων. Ευτυχώς, για περιδικές δομές, είναι δυνατόν να χρησιμοποιήσουμε κατάλληλες, επιθυμητές μορφές λύσεων ώστε να επιτύχουμε σημαντική αποσύζευξη. Αυτές συνίστανται στο να θεωρήσουμε τις απομακρύνσεις u_{nai} υπό τη μορφή επιπέδων κυμάτων σχετικά με τις συντεταγμένες της κυψελίδας.

$$u_{nai} = \frac{1}{\sqrt{M_a}} u_{ai}(\mathbf{q}) e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_n - \omega t)}. \quad (4.5)$$

Σε αντίθεση με τα συνήθη επίπεδα κύματα, αυτά ορίζονται μόνο στα πλεγματικά σημεία \mathbf{r}_n^* . Αντικαθιστώντας την (4.5) στην (4.4) παίρνουμε μια εξίσωση για το

* Σημ. Μετ. Παρατηρείστε ότι οι απομακρύνσεις u_{nai} δεν έχουν διαστάσεις μήκους αλλά είναι [Μήκος] $^{-1}$ [Μάζα] $^{-1/2}$

πλάτος u_{ai} :

$$-\omega^2 u_{ai}(\mathbf{q}) + \sum_{\beta j} \sum_{\mathbf{m}} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{M_\alpha M_\beta}} \Phi_{n\alpha i}^{m\beta j} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_n)}}_{D_{ai}^{\beta j}(\mathbf{q})} u_{\beta j}(\mathbf{q}) = 0. \quad (4.6)$$

Λόγω της συμμετρίας μετατόπισης, οι όροι του αθροίσματος εξαρτώνται, όπως στην (4.3), μόνο από τη διαφορά $\mathbf{m}-\mathbf{n}$. Μετά την εκτέλεση της αθροίσεως ως προς τον δείκτη \mathbf{m} , καταλήγουμε στην ποσότητα $D_{ai}^{\beta j}(\mathbf{q})$, η οποία είναι ανεξάρτητη από τον δείκτη \mathbf{n} . Η ποσότητα $D_{ai}^{\beta j}(\mathbf{q})$ συζευγνύει τα πλάτη μεταξύ τους κατά τρόπο που είναι ανεξάρτητος του \mathbf{n} . Αυτό δικαιολογεί το γεγονός ότι στην έκφραση (4.5) τα πλάτη $u_{ai}(\mathbf{q})$ επελέγησαν ανεξάρτητα του δείκτη \mathbf{n} . Οι ποσότητες $D_{ai}^{\beta j}(\mathbf{q})$ αποτελούν τα στοιχεία του επονομαζόμενου *δυναμικού πίνακα*. Το σύστημα των εξισώσεων

$$-\omega^2 u_{ai}(\mathbf{q}) + \sum_{\beta j} D_{ai}^{\beta j}(\mathbf{q}) u_{\beta j}(\mathbf{q}) = 0 \quad (4.7)$$

είναι ένα γραμμικό ομογενές σύστημα τάξης $3r$. Στην περίπτωση της στοιχειώδους κυψελίδας πλέγματος χωρίς βάση, έχουμε $r=1$ και συνεπώς για κάθε κυματοδιάνυσμα \mathbf{q} , έχουμε να λύσουμε απλά ένα σύστημα τριών εξισώσεων. Αυτό είναι μια πειστική επίδειξη των απλοποιήσεων που απορρέουν από την εφαρμογή των ιδιοτήτων της συμμετρίας μετατόπισης.

Ένα σύστημα γραμμικών ομογενών εξισώσεων έχει μη τετριμμένες λύσεις μόνο αν η ορίζουσα

$$\text{Det}\{D_{ai}^{\beta j}(\mathbf{q}) - \omega^2 \mathbf{1}\} = 0 \quad (4.8)$$

μηδενίζεται. Αυτή η εξίσωση έχει επακριβώς $3r$ διαφορετικές λύσεις, $\omega(\mathbf{q})$ για κάθε \mathbf{q} . Η εξάρτηση $\omega(\mathbf{q})$ είναι γνωστή ως *σχέση διασποράς*. Οι $3r$ διαφορετικές λύσεις ονομάζονται *κλάδοι* της σχέσης διασποράς. Οι σχέσεις διασποράς ικανοποιούν έναν αριθμό γενικών σχέσεων. Όμως αντί να αποδείξουμε μαθηματικά αυτές τις σχέσεις από την (4.8) για τη γενική περίπτωση, θα συζητήσουμε λεπτομερώς την ειδική περίπτωση της διατομικής γραμμικής αλυσίδας. Και στη συνέχεια θα κάνουμε χρήση των αποτελεσμάτων, ώστε να παρουσιάσουμε μια γενική παρουσίαση των κλάδων διασποράς σε έναν τρισδιάστατο κρύσταλλο.

«Ελεύθερα» ηλεκτρόνια στα στερεά

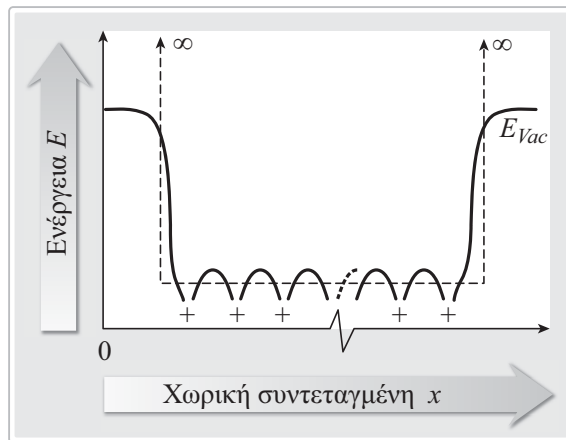
Σε μία ικανοποιητική προσέγγιση οι ιδιότητες των στερεών είναι δυνατόν να διαχωριστούν στη δυναμική των δονήσεων και τις ηλεκτρονικές ιδιότητες. Αυτή η προσέγγιση ονομάζεται αδιαβατική (Κεφ. 4) και βασίζεται στο γεγονός ότι για τη δυναμική των βαρέων πυρήνων ή των πυρήνων μαζί με τα ισχυρώς δεσμευμένα εσωτερικά ηλεκτρόνια (αυτός ο συνδυασμός ονομάζεται «ατομικός πυρήνας»), η ενέργεια μπορεί να εκφραστεί ως συνάρτηση των συντεταγμένων του πυρήνα ή του ατομικού πυρήνα σε σχέση με ένα χρονικώς ανεξάρτητο δυναμικό: το σύστημα των ηλεκτρονίων, λόγω της πολύ μικρότερης του μάζας, ακολουθεί την κίνηση του πυρήνα ή του ατομικού πυρήνα σχεδόν ακαριαία. Από τη σκοπιά του συστήματος των ηλεκτρονίων αυτό σημαίνει ότι για τη δυναμική των ηλεκτρονίων μπορούμε να θεωρήσουμε την κίνηση του πυρήνα ή του ατομικού πυρήνα ως εξαιρετικώς βραδεία και σε ορισμένες περιπτώσεις ως ανύπαρκτη. Στο πλαίσιο της αδιαβατικής προσέγγισης μπορούμε να ορίσουμε τις διεγερμένες καταστάσεις του συστήματος των ηλεκτρονίων στο στατικό δυναμικό των θετικώς φορτισμένων και περιοδικώς τακτοποιημένων πυρήνων ή ατομικών πυρήνων. Με αυτή την προσέγγιση μπορούμε να αγνοήσουμε τυχόν αλληλεπιδράσεις ανάμεσα στους εν κινήσει ατομικούς πυρήνες και τα υπόλοιπα ηλεκτρόνια του κρυστάλλου. Προκειμένου να χειριστούμε φαινόμενα μεταφοράς των ηλεκτρονίων στους κρυστάλλους (Υποκεφ. 9.3-9.5) πρέπει να επανεισάγουμε τις αλληλεπιδράσεις ηλεκτρονίου-πλέγματος με τη μορφή διαταραχών.

Όμως η αδιαβατική προσέγγιση των σταθερών/ακίνητων πυρήνων ή ατομικών πυρήνων δεν επιτρέπει τον ποσοτικό χειρισμό των διεγερμένων καταστάσεων των

ηλεκτρονίων. Επομένως θα πρέπει να επιλύσουμε την εξίσωση Schrödinger για περίπου 10^{23} ηλεκτρόνια (που επίσης αλληλεπιδρούν μεταξύ τους) στο περιοδικό, στατικό δυναμικό των πυρήνων. Συνεπώς είναι απαραίτητη η περαιτέρω απλοποίηση του προβλήματος.

Μπορούμε να θεωρήσουμε ένα μόνο ηλεκτρόνιο σε ένα ενεργό περιοδικό και χρονικά ανεξάρτητο δυναμικό. Αυτό το δυναμικό παράγεται από τους στάσιμους στις θέσεις ισορροπίας, πυρήνες και όλα τα υπόλοιπα ηλεκτρόνια. Αυτά τα ηλεκτρόνια προστατεύουν σε σημαντικό βαθμό το πυρηνικό φορτίο και επομένως καταλήγουμε με ένα δυναμικό, το οποίο έχει ποιοτικά τη μορφή του Σχήματος 6.1. (συνεχής γραμμή). Αυτή η προσέγγιση ονομάζεται *προσέγγιση ενός ηλεκτρονίου*. Στην *προσέγγιση ενός ηλεκτρονίου* αγνοούμε όλες τις αλληλεπιδράσεις ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου που δεν μπορούν να αντιμετωπιστούν σαν ένα τοπικό δυναμικό για το ηλεκτρόνιο που μελετούμε, για παράδειγμα αλληλεπιδράσεις που προκύπτουν από την ανταλλαγή δύο ηλεκτρονίων. Όμως αυτές οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ηλεκτρονίων είναι σημαντικές, για παράδειγμα, για την κατανόηση του μαγνητισμού και της υπεραγωγιμότητας. Επομένως θα επανέλθουμε αργότερα στο θέμα της αλληλεπίδρασης των ηλεκτρονίων. Προς το παρόν θα περιοριστούμε στην υπόθεση του τοπικού περιοδικού δυναμικού και θα επιλύσουμε την εξίσωση του Schrödinger για ένα ηλεκτρόνιο σε αυτό το δυναμικό. Γι' αυτό το ηλεκτρόνιο θα βρούμε μία σειρά από κβαντισμένες ηλεκτρονικές καταστάσεις που θα γαμίζονται διαδοχικά με τα διαθέσιμα ηλεκτρόνια. Σε αυτή τη διαδικασία η αρχή του Pauli επιβάλλει όπως κάθε κατάσταση να περιέχει ένα μόνο ηλεκτρόνιο.

Σχ. 6.1. Η ποιοτική μορφή του δυναμικού για ένα ηλεκτρόνιο στο περιοδικό πλέγμα θετικά φορτισμένων πυρήνων (+). Η στάθμη του κενού E_{vac} είναι η στάθμη στην οποία πρέπει να προαχθεί το ηλεκτρόνιο, έτσι ώστε να μπορεί να βγει από τον κρύσταλλο και να δραπετεύσει στο άπειρο. Η απλούστερη προσέγγιση για την περιγραφή του συστήματος είναι ενός τετραγωνικού πηγαδιού δυναμικού (-) με απείρως υψηλά τοιχώματα στις επιφάνειες του κρυστάλλου.



6.1 Το αέριο των ελεύθερων ηλεκτρονίων σε ένα απείρου βάθους τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού

Ένα ακόμη απλούστερο πρότυπο, που μελετήθηκε πρώτα από τους Sommerfeld και Bethe το 1933, αγνοεί το περιοδικό δυναμικό μέσα στον κρύσταλλο. Παρ' όλη την απλότητά του, αυτό το μοντέλο έδωσε μία κατά πολύ βελτιωμένη κατανόηση πολλών ηλεκτρονικών ιδιοτήτων των στερεών και ειδικότερα αυτές των μετάλλων. Σε αυτό το μοντέλο ένας μεταλλικός κρύσταλλος (έναν κύβος ακμής L) περιγράφεται από ένα τρισδιάστατο δυναμικό με σχήμα κουτιού με άπειρο φράγμα δυναμικού στην επιφάνεια (Σχ. 6.1), με άλλα λόγια, τα ηλεκτρόνια δεν μπορούν να φύγουν από τον κρύσταλλο. Αυτή είναι μία προφανής υπεραπλούστευση, αφού οι τιμές του έργου εξόδου είναι της τάξης των 5 eV (Υποκεφ. 6.6). Η χρονικά ανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger για ηλεκτρόνιο σε ένα άπειρο πηγάδι δυναμικού, στην προσέγγιση του ενός ηλεκτρονίου είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E'\psi(\mathbf{r}), \quad (6.1)$$

όπου το δυναμικό $V(\mathbf{r})$ δίνεται από τη σχέση

$$V(x, y, z) = \begin{cases} V_0 = \text{σταθερό για } 0 \leq x, y, z \leq L \\ \infty & \text{στις υπόλοιπες περιπτώσεις} \end{cases} \quad (6.2)$$

Αν θέσουμε $E = E' - V_0$ προκύπτει

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (6.3)$$

Αφού τα ηλεκτρόνια, λόγω του άπειρου φράγματος δυναμικού στην επιφάνεια ($x, y, z = 0$ και L), δεν μπορούν να φύγουν από τον κρύσταλλο, έχουμε τις ονομαζόμενες *σταθερές οριακές συνθήκες* (μπορείτε να συγκρίνετε με τις περιοδικές οριακές συνθήκες που υιοθετήθηκαν στην Υποκεφ. 5.1). Αυτές έχουν ως εξής

$$\begin{aligned} \psi &= 0 && \text{για } x=0 \text{ και } L; \text{ για } y, z \text{ μεταξύ } 0 \text{ και } L; \\ & && \text{για } y=0 \text{ και } L; \text{ για } x, z \text{ μεταξύ } 0 \text{ και } L; \\ & && \text{για } z=0 \text{ και } L; \text{ για } x, y \text{ μεταξύ } 0 \text{ και } L; \end{aligned} \quad 6.4$$

Το ηλεκτρόνιο πρέπει να βρίσκεται κάπου μέσα στο φράγμα δυναμικού και επομένως η συνθήκη για την κανονικοποίηση της $\psi(\mathbf{r})$ γράφεται ως εξής:

$$\int_{\text{box}} d\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = 1. \quad 6.5$$

Η εξίσωση του Schrödinger (6.3) μαζί με τις οριακές συνθήκες (6.4) δίνουν τη λύση

$$\psi(\mathbf{r}) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2} \sin k_x x \sin k_y y \sin k_z z. \quad (6.6)$$

Οι πιθανές καταστάσεις της ενέργειας υπολογίζονται με αντικατάσταση της (6.6) στην (6.3)

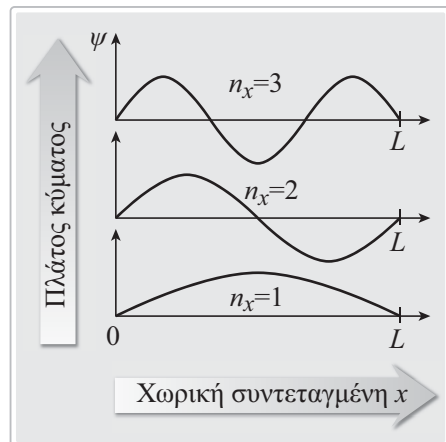
$$E = \frac{\hbar k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2). \quad (6.7)$$

Όπως αναμένεται, οι ενέργειες είναι αυτές ενός ελεύθερου ηλεκτρονίου (σχέση de Broglie) όπου όμως η συνθήκη $\psi = 0$ για $x, y, z = L$ (6.4) οδηγεί στους παρακάτω περιορισμούς για τον κυματάριθμο k_x, k_y, k_z :

$$\begin{aligned} k_x &= \frac{\pi}{L} n_x \\ k_y &= \frac{\pi}{L} n_y \\ k_z &= \frac{\pi}{L} n_z \quad \text{με} \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (6.8)$$

Οι λύσεις για n_x, n_y ή $n_z = 0$ δεν είναι δυνατόν να κανονικοποιηθούν στον όγκο του κουτιού και επομένως εξαιρούνται. Αρνητικά κυματοδιανύσματα δεν δίνουν καινούριες γραμμικώς ανεξάρτητες λύσεις της (6.6). Οι πιθανές καταστάσεις ενός ηλεκτρονίου σε ένα τρισδιάστατο απείρου βάθους τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού (στάσιμα κύματα, Σχ. 6.2) μπορούν να μπουν σε κατηγορίες ανάλογα με τους

Σχ. 6.2. Η μορφή των τριών πρώτων κυματοσυναρτήσεων (παράλληλα με τον άξονα x) του ελεύθερου ηλεκτρονίου, που βρίσκεται σε ένα τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού μήκος L . Τα μήκη κύματος που αντιστοιχούν στους κβαντικούς αριθμούς $n_x = 1, 2, 3, \dots$ είναι $\lambda = 2L, L, 2L/3, \dots$. Οι καταστάσεις με μικρούς κβαντικούς αριθμούς, όπως αυτές που φαίνονται στο σχήμα, δεν είναι σημαντικές για μακροσκοπικά σώματα επειδή είναι θαμμένες στο ημισυνεχές πολλών άλλων καταστάσεων με υψηλότερους κβαντικούς αριθμούς. Αυτό όμως δεν ισχύει σε νανοδομές όπου το L είναι της τάξης των 5-100 nm (12.93, Υποκεφ. 9.9)



κβαντικούς τους αριθμούς (n_x, n_y, n_z) ή (k_x, k_y, k_z). Η αναπαράσταση των επιτρεπτών τιμών στον τρισδιάστατο χώρο των κυματοδιανυσμάτων οδηγεί σε επιφάνειες σταθερής ενέργειας, $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ που είναι σφαιρικές.

Για τις σταθερές οριακές συνθήκες που περιγράφονται εδώ, οι δυνατές τιμές του k περιορίζονται στο θετικό όγδοο του τρισδιάστατου χώρου. Σε σύγκριση όμως με την περίπτωση των περιοδικών οριακών συνθηκών (Υποκεφ. 5.1) η πυκνότητα των καταστάσεων είναι διπλάσια κατά μήκος όλων των αξόνων. Επομένως κάθε κατάσταση αντιστοιχεί σε όγκο $V_k = (\pi/L)^3$. Για μακροσκοπικές διαστάσεις L μπορούμε να θεωρήσουμε τις καταστάσεις ως ημισυνεχείς, έτσι ώστε για πολλές εφαρμογές να είναι δυνατή αντικατάσταση των αθροισμάτων με ολοκληρώματα στον χώρο των k .

Όπως και στην περίπτωση των φωνονίων, μπορούμε να υπολογίσουμε την πυκνότητα καταστάσεων. Απλά παίρνουμε τον όγκο ενός λεπτού κελύφους του ογδοημορίου στον τρισδιάστατο χώρο που ορίζεται από τις επιφάνειες της ενέργειας $E(\mathbf{k})$ και $E(\mathbf{k}) + dE$ και διαιρούμε με τον όγκο V_k που σχετίζεται με ένα σημείο στον χώρο των k :

$$dZ' = \frac{1}{8} 4\pi k^2 dk / (\pi/L)^3. \quad (6.9)$$

Δεδομένου ότι $dE = (\hbar^2 k/m) dk$ ο αριθμός των καταστάσεων ανά μονάδα όγκου του κρυστάλλου είναι:

$$dZ = \frac{(2m)^{3/2}}{4\pi^2 \hbar^3} E^{1/2} dE. \quad (6.10)$$

Στην κβαντομηχανική του Schrödinger που χρησιμοποιήθηκε μέχρι εδώ δεν υπάρχει πρόβλεψη για την ενδογενή γωνιακή ορμή, δηλαδή το spin, του ηλεκτρονίου. Όπως φαίνεται από την κατασκευή του περιοδικού πίνακα (Υποκεφ. 1.1) πρέπει να προσάψουμε στο ηλεκτρόνιο το spin, το οποίο σε εξωτερικό μαγνητικό πεδίο έχει δύο δυνατούς προσανατολισμούς. Όταν δεν υπάρχει εξωτερικό πεδίο, οι ενεργειακές στάθμες των δύο προσανατολισμών είναι εκφυλισμένες. Αυτό σημαίνει ότι κάθε σημείο του χώρου των k στο Σχ. 6.3, όταν λάβουμε υπ' όψιν το spin του ηλεκτρονίου, περιγράφει δύο δυνατές ηλεκτρονικές καταστάσεις. Επομένως για την πυκνότητα καταστάσεων) $D(E) = dZ/dE$ του αερίου των ελευθέρων ηλεκτρονίων σε ένα άπειρο πηγάδι δυναμικού, καταλήγουμε

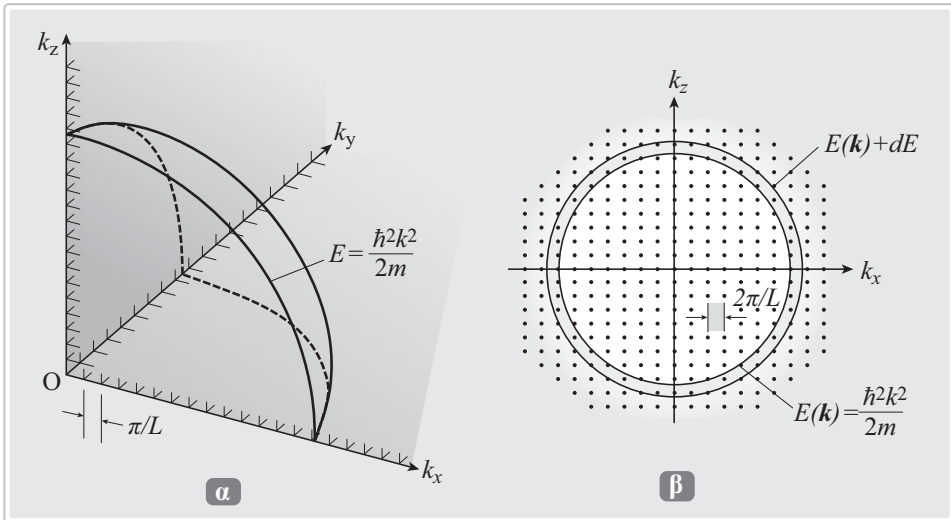
$$D(E) = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} E^{1/2}. \quad (6.11)$$

Η $D(E)$ συνήθως εκφράζεται σε μονάδες $\text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$. Η ίδια πυκνότητα καταστάσεων (Σχ. 6.4), και επομένως οι ίδιες εκφράσεις για τις μακροσκοπικές ιδιότητες του κρυστάλλου, προκύπτουν αν χρησιμοποιήσουμε περιοδικές οριακές συνθήκες:

$$\psi(x + L, y + L, z + L) = \psi(x, y, z). \tag{6.12}$$

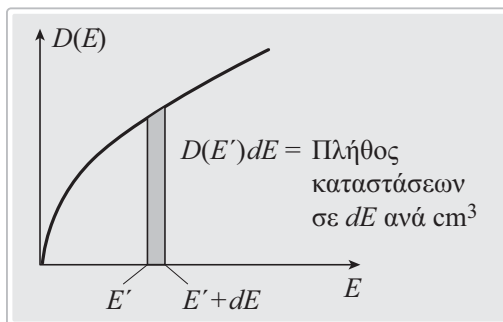
Αυτές οι συνθήκες οδηγούν σε λύσεις της (6.3) που έχουν τη μορφή οδεύοντος κύματος:

$$\psi(\mathbf{r}) = \left(\frac{1}{L}\right)^{3/2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}.$$



Σχ. 6.3 α, β. Αναπαράσταση των καταστάσεων ηλεκτρονίου σε ένα άπειρο τετραγωνικό πηγάδι με τη βοήθεια του πλέγματος των επιτρεπτών τιμών των κυματοδιανυσμάτων στον χώρο των \mathbf{k} . Λόγω των δύο δυνατών προσανατολισμών του spin, κάθε σημείο αντιστοιχεί σε δύο καταστάσεις. **(α)** Για σταθερές οριακές συνθήκες όλες οι καταστάσεις βρίσκονται σε ένα τεταρτημόριο και απέχουν μεταξύ τους γραμμική απόσταση π/L . **(β)** Για περιοδικές οριακές συνθήκες οι επιτρεπτές καταστάσεις εκτείνονται σε ολόκληρο τον χώρο των \mathbf{k} , και η μεταξύ τους γραμμική απόσταση είναι $2\pi/L$. Στο σχήμα φαίνεται μία διατομή κάθετη στον άξονα k_y (συγκρίνετε με το Σχ. 5.1). Σε αμφότερα τα σχήματα **(α)** και **(β)** φαίνονται επίσης οι επιφάνειες σταθερής ενέργειας $E(\mathbf{k})$.

Σχ. 6.4. Πυκνότητα καταστάσεων $D(E)$ ενός σωματιδίου για ένα τρισδιάστατο αέριο ελεύθερων ηλεκτρονίων.



Ένθετο XI

Καινοφανή οπτικά υλικά

Αρνητικός δείκτης διάθλασης

Η διηλεκτρική διαπερατότητα σε ένα μέσο προέρχεται από οποιαδήποτε γραμμική απορρόφησης, οποιασδήποτε φύσεως σε μια συχνότητα ω_0 όπως περιγράφεται από τις (11.37, 11.41, 11.94).

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\omega_0^2 (\epsilon_{st} - \epsilon_\infty)}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \tag{XI.1}$$

Για αρκετά ασθενική απόσβεση γ , η διαπερατότητα $\epsilon(\omega)$ είναι αρνητική μεταξύ της συχνότητας ω_0 των εγκάρσιων κυμάτων και αυτής των διαμήκων κυμάτων $\omega_L = \omega_0 \sqrt{\epsilon_{st} / \epsilon_\infty}$ (βλέπε Σχ. 11.4). Για το αέριο των ελευθέρων ηλεκτρονίων, η διαπερατότητα είναι αρνητική για συχνότητες χαμηλότερες της συχνότητας πλάσματος ω_p (11.86). Κατ' αναλογία προς την (XI.1) μπορούμε να γράψουμε για τη διαπερατότητα ενός μαγνητικού συστήματος που εμφανίζει μαγνητικό συντονισμό στη συχνότητα ω_m ,

$$\mu(\omega) = \mu_\infty + \frac{\omega_m^2 (\mu_{st} - \mu_\infty)}{\omega_m^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} \tag{XI.2}$$

Η μαγνητική διαπερατότητα $\mu(\omega)$ είναι αρνητική μεταξύ ω_m και $\omega_{Lm} = \omega_m \sqrt{\mu_{st} / \mu_\infty}$. Το 1964 ο Veselago μελέτησε τις ιδιόμορφες οπτικές ιδιότητες των υλικών, τα οποία έχουν αρνητική διηλεκτρική ϵ και αρνητική μαγνητική διαπερατότητα μ στην ίδια περιοχή συχνοτήτων [XI.1]. Η μελέτη είχε ξεχασθεί για πολλά χρόνια έως ότου το 2000 οι Smith και άλλοι [XI.2] πρότειναν μια δομή υλικού, από περιοδικά διατεταγμένα πλαίσια συρμάτων [XI.3] και διαχωρισμένων δακτυλιοειδών συντονιστών, τα οποία κατείχαν αρνητικά ϵ και μ στην περιοχή των μικροκυμάτων. Ο αριθμός των αναφορών στην αρχική εργασία του Veselago εκτινάχθηκε όπως επίσης και ο αριθμός των δημοσιεύσεων σχετικές με τα συνθετικά υλικά με αρνητικά ϵ και μ .

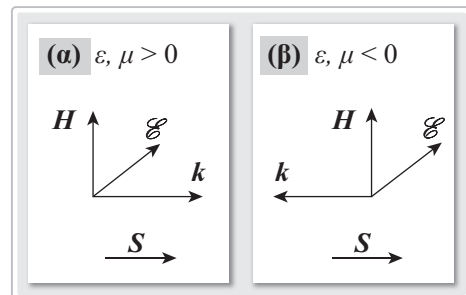
Ακολουθώντας τον Veselago, θα μελετήσουμε τις οπτικές ιδιότητες τέτοιων υλικών. Κατ' αρχάς σημειώνουμε ότι ο δείκτης διάθλασης με ορισμό

$$n = \sqrt{\epsilon\mu} \quad (\text{XI.3})$$

είναι πραγματικός ακόμη και όταν και τα δύο, ϵ και μ , είναι αρνητικά. Αυτό σημαίνει ότι ένα μέσο με αρνητικά ϵ και μ μπορεί να υποστηρίξει ηλεκτρομαγνητικά κύματα. Για κυματικές διεγέρσεις, οι εξισώσεις του Maxwell (συνέκρινε εξισώσεις 11.53, 11.54) παίρνουν τη μορφή

$$\begin{aligned} \mathbf{k} \times \mathcal{E} &= \omega\mu_0\mu\mathbf{H} \\ \mathbf{k} \times \mathbf{H} &= -\omega\epsilon_0\epsilon\mathcal{E} \end{aligned} \quad (\text{XI.4})$$

Σχ. XI.1. (α) Σε ένα κανονικό υλικό με $\epsilon, \mu > 0$, τα \mathcal{E} , \mathbf{H} και \mathbf{k} σχηματίζουν μία δεξιόστροφη τριάδα. **(β)** Σε υλικά με $\epsilon, \mu < 0$ το \mathbf{k} -διάνυσμα έχει αναστραφεί αναφορικά με τη διεύθυνση του διανύσματος Poynting \mathbf{S} . Τα \mathcal{E} , \mathbf{H} και \mathbf{k} σχηματίζουν μία αριστερόστροφη τριάδα. Ένας άλλος τρόπος να εκφράσουμε τα παραπάνω, είναι ότι η ταχύτητα φάσης είναι αρνητική αναφορικά με την ταχύτητα ομάδας ενός κυματοπακέτου.



Από αυτές συνάγεται ότι τα \mathcal{E} , \mathbf{H} και \mathbf{k} σχηματίζουν μία δεξιόστροφη τριάδα για $\epsilon, \mu > 0$. Για υλικά με $\epsilon, \mu < 0$, η τριάδα είναι αριστερόστροφη (XI.1). Γι' αυτό και υλικά με $\epsilon < 0$ και $\mu < 0$ ονομάζονται *Αριστερόστροφα Υλικά (Left-Handed Materials (LHM))*. Στα LHM-υλικά το \mathbf{k} -διάνυσμα και η ροή ενέργειας, η οποία δίνεται από το διάνυσμα Poynting $\mathbf{S} = \mathcal{E} \times \mathbf{H}$ έχουν αντίθετες διευθύνσεις! Ένας άλλος τρόπος να το πούμε είναι ότι στα αριστερόστροφα υλικά η ταχύτητα ομάδας έχει αντίθετο πρόσημο απ' ό,τι η ταχύτητα φάσης. Ο λόγος των φασικών ταχυτήτων του φωτός στο κενό και στο υλικό είναι ο δείκτης διάθλασης στο εν λόγω υλικό. Συνεπώς σε αριστερόστροφα υλικά ο δείκτης διάθλασης είναι αρνητικός! Με άλλα λόγια, στα αριστερόστροφα υλικά ο n είναι η αρνητική τετραγωνική ρίζα του $\epsilon\mu$ (XI.3). Γι' αυτό τα αριστερόστροφα υλικά ορθότερα ονομάζονται και *Υλικά Αρνητικού Δείκτη Διάθλασης (Negative Index Materials (NIM))*.

Τι συμβαίνει λοιπόν αν ένα ηλεκτρομαγνητικό κύμα εντός ενός κανονικού μέσου, π.χ. κενό, διασχίσει τη διεπιφάνεια προς ένα υλικό με αρνητικά δείκτη διάθλασης; Ως συνήθως, ο νόμος του Snell για τη διάθλαση παράγεται από την απαίτηση ότι η παράλληλη συνιστώσα του κυματοδιανύσματος διατηρείται στη διεπιφάνεια μεταξύ κενού και του μέσου με δείκτη διάθλασης n .

$$k_{\parallel}^{(v)} = k_{\parallel}^{(n)}. \tag{XI.5}$$

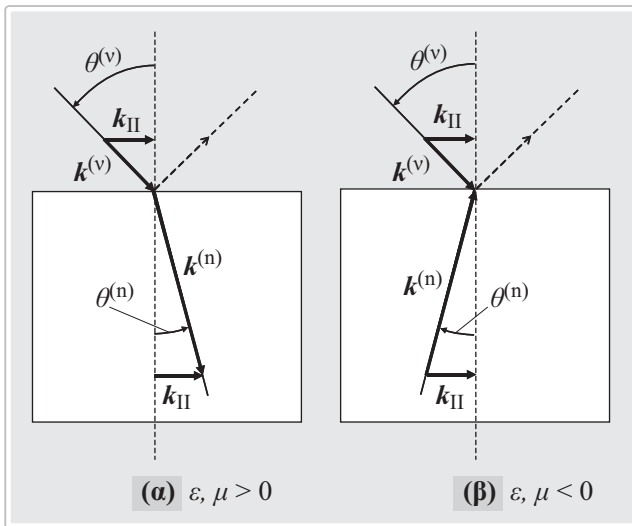
Από τη διατήρηση της συχνότητας του φωτός στη διεπιφάνεια παίρνουμε

$$k^{(n)} = nk^{(v)}. \tag{XI.6}$$

Ο νόμος του Snell προκύπτει από τον συνδυασμό των (XI.5) και (XI.6):

$$n \sin \theta^{(n)} = \sin \theta^{(v)} \tag{XI.7}$$

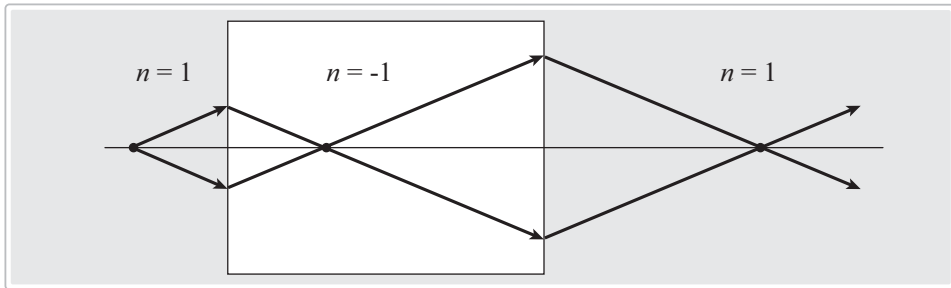
Για κανονικά κύματα με $n > 0$ η δέσμη εντός του υλικού έχει διαθλαστεί προς την πλευρά της καθέτου στην επιφάνεια (Σχ. XI.2β)! Όμως για $n < 0$ το k -διάνυσμα αυτής της δέσμης (ταχύτητα φάσης) δείχνει προς την επιφάνεια, αντίθετα από τη διεύθυνση της ροής ενέργειας (ταχύτητα ομάδος)! Η ανακλώμενη δέσμη κείται στη διεύθυνση της ανάκλασης όπως από ένα κάτοπτρο στην περίπτωση ενός μέσου με $n > 0$. Η ένταση της ανακλώμενης δέσμης μηδενίζεται για $n = -1$!



Σχ. XI.2. Διάθλαση του φωτός στη διεπιφάνεια μεταξύ του κενού και αντίστοιχα ενός μέσου με θετικό και αρνητικό δείκτη διάθλασης n , (α) και (β). Παρατηρήστε ότι στο μέσο με αρνητικό δείκτη διάθλασης (β) η διεύθυνση του k (ταχύτητα φάσης) είναι αντίθετη προς τη διεύθυνση ροής ενέργειας (ταχύτητα ομάδος).

Μια επιπλέον συνέπεια της παράξενης διάθλασης στη διεπιφάνεια μεταξύ ενός υλικού με κανονικό και ενός με αρνητικό δείκτη διάθλασης είναι ότι ένας φακός με κυρτές επιφάνειες (συγκεντρωτικός) δρα ως αποκλίνων, ενώ ένας αποκλίνων ως συγκεντρωτικός. Ακόμη και μια επίπεδη πλάκα από υλικό με αρνητικό δείκτη διάθλασης εμφανίζει τη μη αναμενόμενη ιδιότητα του εστιασμού (Σχ. XI.3). Ακτίνες προερχόμενες από μια σημειακή πηγή εστιάζονται σε ένα σημείο εντός του μέσου και σε ένα σημείο από την έξω πλευρά της πλάκας. Όμως μια παράλληλη πλάκα δεν είναι φακός κατά την κοινή αντίληψη. Η μεγέθυνση είναι πάντα ίση με τη μονάδα και η πλάκα δεν εστιάζει μια παράλληλη δέσμη. Από την άλλη πλευρά, η ποιότητα

του ειδώλου δεν υπόκειται στο σύννηθες όριο περίθλασης, καθόσον η παράλληλη πλάκα-φακός επανακτά και ενισχύει τα εξαφανιζόμενα κύματα του εγγύς πεδίου ενός αντικειμένου [XI.5].

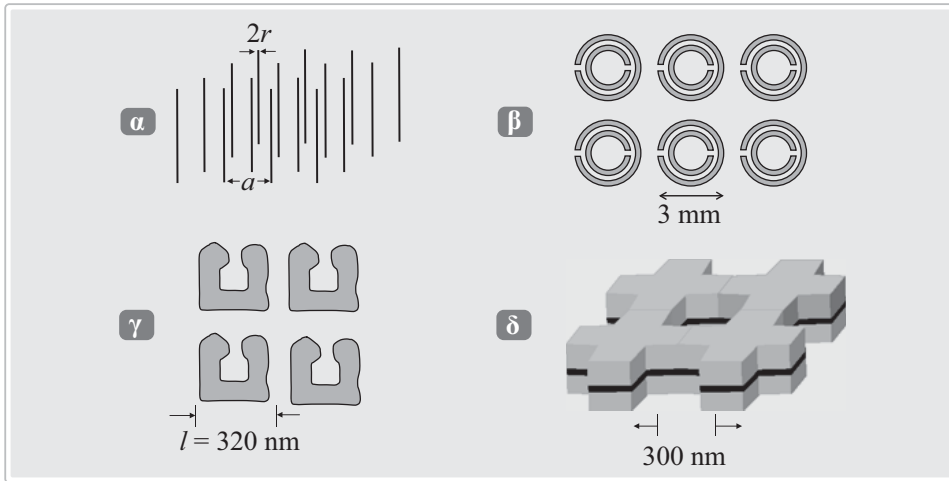


Σχ. XI.3. Μια παράλληλη πλάκα από αρνητικό δείκτη διάθλασης εστιάζει το φως μιας σημειακής πηγής σε ένα σημείο εντός της πλάκας και σε ένα σημείο από την άλλη πλευρά της πλάκας. Η φορά των βελών δείχνουν διεύθυνση ροής της ενέργειας. Η εικόνα παριστά την περίπτωση που ο δείκτης διάθλασης είναι $n = -1$.

Μεταύλικά

Η μελέτη του Veselago αναφορικά με υλικά με αρνητικό δείκτη διάθλασης [XI.1] ήταν πλήρως υποθετική. Ακόμη και σήμερα δεν είναι γνωστό κανένα φυσικό ή συνθετικό υλικό που να παρουσιάζει αρνητικές και τις δύο ποσότητες ϵ και μ στην ίδια περιοχή συχνοτήτων. Όμως, ειδικές περιοδικές μεταλλικές και διηλεκτρικές δομές (μεταύλικά) έχουν σχεδιαστεί και στις οποίες το μέγεθος της δομικής μονάδος είναι μικρό σε σχέση με το μέγεθος του μήκους κύματος που μας ενδιαφέρει και των οποίων δομών η απόκριση στην ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία μπορεί να περιγραφεί, σε μια προσέγγιση ενεργού μέσου, από τις συνεχείς παραμέτρους ϵ και μ (XI.1, XI.2). Το πρώτο επιτυχημένο μεταύλικο στην περιοχή των GHz αποτελείται από έναν συνδυασμό περιοδικών συρμάτινων πλαισίων, για να παρέχουν αρνητικό ϵ , και από διαχωρισμένους δακτυλιοειδείς συντονιστές (*Split Ring Resonators* (SRR) για να παρέχουν αρνητικό μ [XI.3, XI.4]. Στα επόμενα συζητούμε περιληπτικά τις ηλεκτρικές και μαγνητικές ιδιότητες αυτών των στοιχείων, που φαίνονται και στο Σχ. XI.4.

Η αρνητική διαπερατότητα ϵ των πλαισίων προκύπτει από τη συλλογική ταλάντωση πλάσματος ενός τετραγωνικού πλέγματος συρμάτων σταθεράς a , η οποία είναι μικρότερη από το μήκος κύματος λ (Σχ. X.4α). Η συχνότητα πλάσματος του πλέγματος των συρμάτων, όπως και στην περίπτωση ενός αερίου ελευθέρων ηλεκτρονίων, θα ισούται με



Σχ. XI.4. Στοιχεία μεταλλικών: **(α)** Μονοδιάστατα συρμάτινα πλαίσια για την επίτευξη αρνητικής διηλεκτρικής διαπερατότητας ϵ . **(β)** Διαχωρισμένοι δακτυλιοειδείς συντονιστές (*Split Ring Resonators* (SRR) χρησιμοποιούμενοι ως υλικά με αρνητικό δείκτη $\mu(\omega)$ στην περιοχή των GHz. **(γ)** SRR με συχνότητα συντονισμού έως 200 THz. **(δ)** Δικτυωτή δομή αποτελούμενη από ένα σάντουιτς Ag-MgF-Ag, η οποία εμφανίζει αρνητικά ϵ και μ . Τεχνικές κατασκευής νανοδομών όπως αυτή περιγράφονται στο ένθετο XVIII.

$$\omega_p^2 = \frac{n_{\text{eff}} e^2}{\epsilon_0 m_{\text{eff}}}, \tag{XI.8}$$

όπου όμως τώρα η αριθμητική πυκνότητα των ηλεκτρονίων του μετάλλου θα πρέπει να αντικατασταθεί από μια μέση ενεργή πυκνότητα στο μέσο

$$n_{\text{eff}} = n \frac{\pi r^2}{a^2}, \tag{XI.9}$$

όπου r η ακτίνα του σύρματος (Σχ. XI.4α). Η μειωμένη ενεργή πυκνότητα ηλεκτρονίων οδηγεί και σε μείωση της συχνότητας συντονισμού. Η συχνότητα πλάσματος όμως μειώνεται επιπλέον λόγω της παρουσίας της ενεργούς μάζας m_{eff} στον παρονομαστή της (XI.4), καθώς η ενεργός μάζα αυξάνεται εξαιτίας μαγνητικών φαινομένων. Για να το δούμε αυτό, ας θεωρήσουμε ότι το ρεύμα, που διατρέχει κάθε σύρμα, είναι I . Αυτό το ρεύμα δημιουργεί σε μια απόσταση R ένα μαγνητικό πεδίο H ίσο με

$$H(R) = \frac{I}{2\pi R} = \frac{\pi r^2 n v e}{2\pi R} \tag{XI.10}$$

όπου v είναι η μέση ταχύτητα των ηλεκτρονίων. Το διανυσματικό δυναμικό του εν

λόγω πεδίου, ως γνωστόν, ορίζεται μέσω της εξίσωσης

$$\mathbf{H}(R) = \mu_0^{-1} \nabla \times \mathbf{A}, \quad (\text{XI.11})$$

Και επομένως για το $A(R)$ θα έχουμε

$$A(R) = \frac{\mu_0 \pi r^2 n v e}{2\pi} \ln(a/R). \quad (\text{XI.12})$$

Η συνεισφορά των ηλεκτρονίων στην ορμή όταν αυτά βρίσκονται εντός ενός μαγνητικού πεδίου, είναι eA (βλέπε υποκεφ. 9.9, εξ. (9.102)). Έτσι η ορμή ενός ηλεκτρονίου του πλέγματος $m_{\text{eff}}v$ θα πρέπει να αντικατασταθεί από την $eA(R=r)$ (όταν $eA \gg m_{\text{eff}}v$) και επομένως

$$m_{\text{eff}} = \frac{1}{2} \mu_0 e^2 r^2 n \ln(a/r) \quad (\text{XI.13})$$

Η ενεργός μάζα των ηλεκτρονίων για ένα πλέγμα από σύρματα αργιλίου πάχους 2 μm με μια πλεγματική σταθερά $\alpha=5\text{mm}$ ισούται με περίπου 15 φορές τη μάζα ενός πρωτονίου. Το συνδυασμένο αποτέλεσμα της αύξησης της ενεργούς μάζας και της μειωμένης ενεργούς πυκνότητας ηλεκτρονίων οδηγεί σε μια συχνότητα πλάσματος στα 8,2 GHz. Συνεπώς η ε είναι αρνητική για συχνότητες μικρότερες από τα 8,2 GHz.

Οι διαχωρισμένοι δακτυλιοειδείς συντονιστές (SRR) που απεικονίζονται στο Σχ. XI.4β αποτελούνται από δύο λεπτούς μεταλλικούς ομόκεντρους βρόχους. Οι βρόχοι παρέχουν την επαγωγή L και το χάσμα μεταξύ των δακτυλίων τη χωρητικότητα C . Αυτοί οι συντονιστές, με μια συχνότητα συντονισμού περίπου 5 GHz, εισήχθησαν από τους Smith et al [XI.2] και χρησιμοποιήθηκαν ως υλικά με αρνητική διαπερατότητα $\mu(\omega)$ στην περιοχή των μικροκυμάτων. Για υψηλότερες συχνότητες, χρησιμοποιήθηκε η απλούστερη διάταξη που φαίνεται στο Σχ. XI.4γ. Για ένα πλέγμα όπως αυτό των SRR μπορεί κανείς να παραγάγει εύκολα μια απλή έκφραση για το $\mu(\omega)$, όταν ένα ηλεκτρομαγνητικό κύμα διαδίδεται παράλληλα με το επίπεδο των SRR και το μαγνητικό πεδίο είναι κάθετο στο επίπεδο των SRR, ενώ το ηλεκτρικό πεδίο είναι παράλληλο με την πλευρά των SRR που δεν έχουν τομές. Με τη βοήθεια των κανόνων του Kirchhoff για έναν βρόχο, το δυναμικό αυτεπαγωγής της επαγωγής L , U_L συν την πτώση δυναμικού στα άκρα του πυκνωτού C , U_C ισούται με το δυναμικό που επάγεται από την εξωτερική μαγνητική ροή, U_{ind} , $U_L + U_C = U_{\text{ind}}$ και συνεπώς

$$L\dot{I} + C^{-1} \int I dt = \dot{\phi} \quad (\text{XI.14})$$

στην οποία το ϕ είναι η πυκνότητα ροής και η οποία συνδέεται με το μαγνητικό πεδίο μέσω της

$$\phi = \mu_0 l^2 \mathbf{H} \quad (\text{XI.15})$$

όπου l το μήκος της πλευράς του δακτυλιοειδούς. Στη συνέχεια, παίρνοντας τη χρονική παράγωγο της (XI.14) και μετασχηματίζοντας κατά Fourier το ρεύμα $I(\omega)$ και το πεδίο $H(\omega)$ παίρνουμε

$$I(\omega) = \frac{\omega^2 \mu_0 l^2 / L}{(LC)^{-1} - \omega^2} H(\omega) \quad (\text{XI.16})$$

Το ρεύμα αυτό κυκλοφορεί στον δακτύλιο και συνεπώς δημιουργεί μια μαγνητική ροπή κάθετη στο επίπεδο του δακτυλίου ίση με $m(\omega) = l^2 I(\omega)$ άρα μια μαγνητισση $M(\omega) = (N/V)m(\omega)$, όπου N/V είναι η αριθμητική χωρική πυκνότητα των συντονιστών. Συνεπώς η (XI.16) περιγράφει μια σχέση μεταξύ της μαγνήτισης και του μαγνητικού πεδίου H ,

$$M(\omega) = \frac{\omega^2 N \mu_0 l^4 / LV}{(LC)^{-1} - \omega^2} H(\omega) \equiv (\mu(\omega) - 1)H(\omega) \quad (\text{XI.17})$$

Η μαγνητική διαπερατότητα $\mu(\omega)$ έχει την αναλυτική μορφή της (XI.2) με μια συχνότητα συντονισμού

$$\omega_m^2 = (LC)^{-1} \quad (\text{XI.18})$$

Η χωρητικότητα και η επαγωγή –και συνεπώς και η συχνότητα συντονισμού– εξαρτώνται πρωταρχικά από τις διαστάσεις του συντονιστού. Οι συντονιστές που φαίνονται στο Σχ. XI.4γ εισήχθησαν από τους Linden et al. [XI.6] και οδηγούν σε μια συχνότητα συντονισμού στην περιοχή των THz. Πιο πρόσφατες μελέτες επικαλούνται μεταϋλικά με ειδικές περιοδικές δομές, οι οποίες παρέχουν διηλεκτρικό και μαγνητικό συντονισμό. Ένα τέτοιο παράδειγμα αποτελεί η δικτυωτή δομή (δίκτυ ψαρέματος) που φαίνεται στο Σχ. XI.4δ. Αυτή αποτελείται από ένα σάντουιτς Ag-MgF-Ag με τη μορφή πλέγματος με 300 nm περιοδικότητα. Τα υμένια Ag και Mg έχουν πάχος 40 nm και 17 nm αντίστοιχα. Χρησιμοποιώντας το εν λόγω μεταϋλικό οι Dolling et al. πέτυχαν έναν δείκτη διάθλασης $n = -0,6$ στα 780 nm [XI.7]. Το κυματοδιάνυσμα του φωτός k είναι περίπου της ίδιας τάξης με τις διαστάσεις της ζώνης του Brillouin του περιοδικού πλέγματος. Διηλεκτρικές δομές αυτής της μορφής ονομάζονται *φωτονικοί κρύσταλλοι*.

Αναφορές

- XI.1 Η αγγλική μετάφραση δημοσιεύτηκε ως, V. G. Veselago: Soviet Physics Uspekhi **10**, 50 9(1968)

- XI.2 D.R. Smith, W.J. Padilla, D.C. Vier, S.C. Nemat-Nasser, and S. Schultz: Phys. Rev Lett: 84, 4184 (2000)
- XI.3 J.B. Pendry, A.J. Holden, W.J. Stewart, and I. Youngs: Phys. Rev. Lett **76**, 4773 (1996)
- XI.4 J.B. Pendry, A.J. Holden, D.J. Robbins, and W.J. Stewart: IEEE Trans Microwave Theory Tech. **47**, 2075 (1999)
- XI.5 J.B. Pendry: Phys. Rev. Lett. 85, 3966 (2000)
- XI.6 S. Linden, Ch. Enkrich, M. Wegener, Jiangfeng Zhou, Th. Koschny, C.M. Soukoulis: Science **306**, 1351 (2004)
- XI.7 G. Dolling, M. Wegener, C. M. Soukoulis and S. Linden: Optics Letters **32**, 53 (2007)

Ευρετήριο όρων

- Αγωγιμότητα αλμάτων, 319
αγωγιμότητα, 605
άδειο πλέγμα, 210
αδιαβατική απομαγνήτιση, 156, 273
 » προσέγγιση, 98, 161
αδιαβατικό θερμιδόμετρο, 158
αδρανειακή δύναμη, 100
αέριο “ελεύθερων” ηλεκτρονίων, 132, 163, 468
 » Fermi, 167, 190
αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός, 2
άκαμπτο συμπίκνωμα ζεύγους Cooper, 395
ακινητοποίηση στάθμης Fermi, 550
ακμή ευκινησίας, 319
ακουστικός κλάδος, 104
ακτινοβολία πέδησης, 80
 » σύγχροτρον, 223
αληθινή ορμή, 298
αλλαγή φάσης, 352
αλληλεπίδραση Coulomb, 243
αλληλεπίδραση ανταλλαγής, 238, 241, 281
άμεσες μεταπτώσεις, 475
άμεση εγχάραξη του μετάλλου, 616
άμεσο χάσμα, 511
άμορφη κατάσταση, 25
 » φάση, 216
αναγωγή στην πρώτη ζώνη του Brillouin, 196
ανάκλαση Bragg, 72, 208
 » σε επίπεδο, 30
ανακλαστικότητα διηλεκτρικού ημι-επιπέδου, 463
αναρμονικά φαινόμενα, 99
αναστροφή, 30
ανάστροφη πόλωση, 543
ανασύνδεση, 544
ανελαστική μέση ελεύθερη διαδρομή, 323
 » σκέδαση, 305
ανελαστικό φαινόμενο σήραγγας, 436, 437
ανισοτροπία εξαγωνικών κρυστάλλων, 269
 » επιφάνειας, 281
 » κυβικών κρυστάλλων, 267
ανόρθωση, 542
αντεστραμμένα FET, 578
αντιδεσμικό, 7
 » αντιδεσμικό τροχιακό, 7
αντισηδηρομαγνητικό στρώμα, 287
αντισηδηρομαγνητισμός, 231, 232, 256
αντιστροφή πληθυσμών, 581
 » στον χρόνο, 268
 » της στατιστικής της κατάληξης, 581
αντίστροφο πλέγμα, 66, 274
αντίστροφος ελαστικού τανυστή, 118
άντληση στη διεγερμένη κατάσταση, 581
αντλία προσρόφησης ιόντων, 607
ανωμαλία van Hove, 138, 214, 476
αξίωμα αμοιβαίου αποκλεισμού, 131
άξονας περιστροφής, 30
άξονας περιστροφής - αναστροφής, 31
απαγορευμένη περιοχή, 212
απαγορευτική αρχή Pauli, 2
απειροστό περιοδικό δυναμικό, 196
αποδέκτες, 517, 520
απόδοση εκπομπού, 574
απόλυτη θερμοδύναμη, 315
απόλυτο χάσμα, 212
αποπολωτικό πεδίο, 280
απορρόφηση ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας, 451
απορρόφηση μικροκυμάτων, 276

- απορρόφηση φωτός, 580
 απώλειες λόγω πλασμονίων, 484
 αριθμητική πυκνότητα ταλαντωτών, 454
 αριθμός Lorentz L, 317
 » κυμάτων, 457
 αριστερόστροφα υλικά, 492
 αρμονική προσέγγιση, 99
 αρμονικό στερεό, 144
 αρμονικός ταλαντωτής, 146
 αρνητική διαφορική αγωγιμότητα σ , 533
 αρνητικός δείκτης διάθλασης, 491
 αρχή διατήρησης της ορμής, 298
 » της Αντιστοιχίας, 291
 » του Pauli, 162, 168, 170
 ασθενής εντοπισμός, 333
 ασθενικά προσδεδεμένα εξιτόνια, 482
 ασυνέχεια στην ταινία σθένους, 556
 » στην ταινία αγωγιμότητας, 555
 ατέλειες Frenkel, 53
 ατομικά τροχιακά, 5, 229
 ατομικός παράγοντας σκέδασης, 76
 αυθόρμητη εκπομπή, 580
- Altshuler–Aronov–Spivak, 330
- Β**αθμίδα θερμοκρασίας, 149
 βάθος διείσδυσης London, 358, 391
 βαλβίδα spin, 287
 βαλλιστική μεταφορά, 323, 324
 » μεταφορά ηλεκτρονίων, 604
 βαριά Φερμιονικά υλικά, 376
 βαριές οπές, 509
 βρόχος υστέρησης, 267, 283
- $Ba_{1-x}Y_xCuO_{3-y}$, 413
 Ba-La-Cu-O, 412
 Bardeen, Cooper και Schrieffer, 349
 Ba-Y-Cu-O, 352
 Bednorz και Müller, 412
 Bogoliubov, 382
 Bragg - ανακλωμένο κύμα, 198
- Γ**ενικευμένη αγωγιμότητα, 449
 γενικευμένη διηλεκτρική συνάρτηση, 449
 » εξίσωση κίνησης, 117
- γενική θεωρία σκέδασης, 60
 γερμάνιο, 212
 γιγαντιαία μαγνητοαντίσταση, 284
 γραμμές anti-Stokes, 128
 » Raman, 128
 » Stokes, 128
 γραμμική διατομική αλυσίδα, 102
 γραμμικοποιημένη εξίσωση Boltzmann, 304
 γραμμικός συνδυασμός τροχιακών, 220
- C_{60} , 10
 CBE, 613
 CMOS, 578
 Curie, 250
- Δ**ακτυλιοειδείς συντονιστές, 494
 δείκτες Miller, 70
 δεσμοί από κυματιστές, 223
 δεσμός van der Waals, 19
 » υδρογόνου, 17
 δημιουργός ζευγών Cooper, 368
 διαγωγιμότητα, 573, 574
 διαδικασία Umklapp, 152
 διαδικασίες σκέδασης ηλεκτρονίων, 305
 διακριτική ικανότητα, 501
 διαμαγνητική επιδεκτικότητα, 273
 διαμαγνητική συμπεριφορά, 233
 διαμαγνητισμός, 232
 διαμήκεις και εγκάρσιοι κανονικοί τρόποι, 457
 διάμηκες κύμα, 105, 457
 διάμηκες κύμα πλάσματος, 484
 διαμήκης ενεργός μάζα, 507
 » οπτικός κλάδος, 106
 διαμορφωμένος εμπλουτισμός, 559
 διάνυσμα Burger, 55
 » Poynting, 128
 » αντίστροφου πλέγματος, 192
 διανυσματικό δυναμικό, 328
 διαπερατότητα μαγνητικού συστήματος, 491
 διάσπαση των ταινιών, 199
 » φωνονίου, 144
 διαταινιακές μεταπτώσεις, 471
 διατάξεις ημιαγωγών, 569

- διατάξεις οπτοηλεκτρονικής, 570
 διατήρηση **k**, 299
 - » της ενέργειας, 299
 - » ψευδο-ορμής, 152
 διατμητική παραμορφώση, 114
 διαχυτική μεταφορά, 323, 324
 διαχωρισμένοι δακτυλιοειδείς συντονιστές, 496
 διεγερμένες καταστάσεις, 231
 διεγέρσεις Stoner, 264
 διεπιφανειακές καταστάσεις, 549
 διεργασία περιστρεφόμενου κρυστάλλου, 81
 διηλεκτρικές απώλειες, 483
 διηλεκτρική επιδεκτικότητα, 450
 - » μετατόπιση, 458
 - » σταθερά υψηλών συχνοτήτων, 455
 - » συνάρτησης, 448
 δινορεύματα, 234
 διπλοί μονοχρωμάτορες, 132
 διπλωμένη παράσταση, 210
 διπολική αλληλεπίδραση, 19
 - » ροπή, 105, 454, 473
 διπολικό τρανζίστορ, 570
 δισδιάστατο αέριο ηλεκτρονίων, 560
 δισδιάστατο πλέγμα, 26, 27
 δομές *niri*, 566
 δομή διαμαντιού, 40
 - » ταινιών σε ετεροεπαφή, 557
 - » των ταινιών, 231
 δομική ανάλυση, 78
 δότες, 517
 δύναμη Lorentz, 341, 410, 590
 δυναμικό, 98
 - » Coulomb, 12
 - » Hall, 590
 - » διάχυσης, 538
 - » ενός αρμονικού ταλαντωτή, 99
 δυναμικός πίνακας, 101, 103

 DNA, 18
 Drude, 297

Εγκάρσια διαμήκης ενεργός μάζα, 507
 εγκάρσια οπτικά φωνόνια, 131
 εγκάρσιο κύμα, 457
 εγκάρσιος ακουστικός κλάδος, 106
 - » οπτικός κλάδος, 106
 εγχάραξη με αντιδρώντα ιόντα, 618
 ειδική ηλεκτρική αγωγιμότητα, 307
 - » θερμότητα, 141, 151, 352
 - » θερμοχωρητικότητα ελεύθερων ηλεκτρονίων, 176
 - » θερμοχωρητικότητα ηλεκτρονίων, 174
 εισαγωγή προσμίξεων, 53
 έκταση περιοχής φορτίων χώρου d_n , 547
 εκφυλισμένο αέριο Fermi, 365
 ελαστικά κύματα, 117
 ελαστικές ιδιότητες κρυστάλλων, 111
 - » σταθερές, 121, 144
 ελαστική διαδικασία, 129
 ελαστική μέση ελεύθερη διαδρομή, 322, 333
 ελαστική σκέδαση, 128, 298
 - » σταθερά, 112
 - » τάση, 281
 ελαστικό ισότροπο μέσο, 138
 - » φαινόμενο σήραγγας, 430, 431, 434
 ελαστικός τανυστής τάσεως, 115
 ελαφρές οπές, 509
 ελάχιστα Cooper, 229
 ελάχιστη ελεύθερη ενθαλπία, 217
 ελεύθερα ηλεκτρόνια, 161, 483, 512
 ελεύθερη ενθαλπία, 45
 - » οπή, 521
 έμμεσες μεταπτώσεις, 475
 έμμεσο ενεργειακό χάσμα, 479
 έμμεσοι ημιαγωγοί, 508
 ενδιάμεση φάση, 408
 ενδογενής μαγνητική ροπή, 233
 - » ημιαγωγός, 512, 513
 ενδογενής περιοχή, 525
 ενδόθετη θέση, 53
 ενδοκεντρωμένη κυβική δομή, 39
 ενδοκέντρωση, 28
 ενδοταινιακές μεταπτώσεις, 471
 ενέργεια Fermi EF, 210
 - » Fermi, 169, 175
 - » ανισοτροπίας, 273

- ενέργεια αποπόλωσης, 272
 » ιονισμού, 11
 ενεργειακές επιφάνειες, 195, 213
 » στάθμες, 231
 ενεργειακή ανάλυση, 223
 ενεργειακό χάσμα, 199
 ενεργειακοί σταθμοί, 3
 ενεργή μάζα, 289
 ενεργό δυναμικό, 231
 » ιοντικό φορτίο, 454
 » χάσμα, 568
 ενεργός διατομή σκέδασης Raman, 132
 » διατομή σκέδασης ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου, 300
 » διατομή σκέδασης σημειακής φορτισμένης ατέλειας, 529
 » διατομή σκέδασης, 528
 » μάζα, 511
 » πυκνότητα ηλεκτρονίων, 242
 » πυκνότητα κατάστασης, 514
 εντροπία, 45
 » μηδενικού σημείου, 21
 εξαγωγική πυκνή επιστοίβαση, 39
 εξαγωγικό κοβάλτιο, 266
 εξάρμωση, 54
 εξάρμωση ακμής, 55
 » βίδας, 55
 εξασθενημένη ολική ανάκλαση, 463, 502
 εξισώσεις Bogoliubov, 382
 » London, 356, 399
 » Maxwell, 353, 391
 » Boltzmann, 151, 301, 302, 528
 » Bragg, 72, 110
 » Clausius-Mossotti, 467
 » Laplace, 188, 461
 » Poisson, 180, 535, 557
 » Schrödinger, 6, 192, 234, 472
 » Sine-Gordon, 271
 » κίνησης διαμήκων ηχητικών κυμάτων, 112
 » κίνησης, 100
 » κύματος, 275
 » συνέχειας, 546
 εξιτόνια, 481
 » Frenkel, 482
 » Mott-Wannier, 482
 επαγόμενη εκπομπή, 580
 επαφή p-n σε Θερμική Ισορροπία, 535
 » p-n, 534, 535
 » Schottky, 534
 » Schottky μετάλλου/ημιαγωγού, 549
 » μετάλλου/ημιαγωγού, 535
 επίπεδα κύματα, 100, 192
 » ψευδο-Fermi, 552
 επιταξία, 615
 » ημιαγωγών, 607
 » μοριακής δέσμης, 607
 επιφάνεια Fermi, 210
 επιφανειακά κύματα, 461, 485, 502
 » κύματα σε ένα διηλεκτρικό, 460
 επιφανειακό κύμα spin, 276, 277
 επιφάνειες διασκεδασμού, 195
 εσωτερική ενέργεια, 45, 141, 170
 ετερο-διπολικά τρανζίστορ, 574
 ετεροδομή ημιαγωγών, 554
 ετεροεπαφές και υπερδομές ημιαγωγών, 552
 ετεροεπαφή p-n, 557
 ευκινησία, 306, 512
 ευκινησία ηλεκτρονίου, 306
 εύκολη διεύθυνση, 265
 εύκολος άξονας, 266
 ευρετικό μοντέλο, 376
 ευτηκτικό σημείο, 51

 fcc, 38
 Grüneisen, 310

Ζευγάρια Couper, 358
 ζεύγη Cooper, 330, 358, 359, 362, 365
 ζεύγος Frenkel, 53
 » ηλεκτρονίου-οπής, 447
 ζώνες του Brillouin, 74

Ηλεκτραρνητικότητα, 14
 ηλεκτρονικές ταινίες, 196
 ηλεκτρική αγωγιμότητα εντοπισμένων ηλεκτρονίων, 318
 ηλεκτρική αγωγιμότητα ημιαγωγού, 512
 » αγωγιμότητα μετάλλων, 306
 » πυκνότητα ρεύματος, 294, 307

- ηλεκτρικό ανάλογο των τρόπων των φωνονίων, 125
- ηλεκτρόνια, 289
- ηλεκτρονική θεωρία μαγνητισμού, 232
- ηλεκτρονικές καταστάσεις, 218
- ηλεκτρονική δομή, 195, 212, 231
- » δομή Al, 209
 - » επιδεκτικότητα, 128, 129
 - » πολωσιμότητα, 454, 455
 - » συγγένεια, 555
- ηλεκτροστατική αποπόλωση, 280
- ημιαγωγοί, 505
- » III-V, 510
 - » με προσμειξίσεις, 516
- ημι-αρμονική προσέγγιση, 147
- ημι-ηλεκτρόνια, 379, 382
- ημικλασική θεώρηση, 107
- ημι-οπές, 379, 382
- ημισφαιρικός ηλεκτροστατικός εκτροπέας, 223
- ημι-σωματίδια, 379
- HEMT, 575, 577
- Θ**άλασσα Fermi, 377
- θεμελιώδης κατάσταση BCS, 365
- θερμαποποίηση, 533
- θερμιδόμετρο Gmelin, 158
- » Nernst, 157
- θερμικά νετρόνια, 110
- θερμικές ιδιότητες, 97, 135
- θερμική αγωγιμότητα, 144, 149, 151, 160
- » αγωγιμότητα φωνονίων, 149
 - » αντίσταση, 153
 - » διαστολή, 145
 - » διαστολή στερεών, 99
 - » ενέργεια, 141
 - » καταστατική εξίσωση, 147
- θερμικός διακόπτης, 158
- » συντελεστής διαστολής, 145
- θερμικώς διεγερθέντα ηλεκτρόνια, 505
- θερμιονική εκπομπή, 182
- θερμοηλεκτρικά φαινόμενα, 313
- θερμοκρασία Curie, 216, 246, 250, 468
- » Debye, 142, 386
- θερμοκρασία Fermi, 169
- » Néel, 257, 283
 - » μετάβασης T_c , 386
- θεώρημα Bloch, 194
- θεωρία BCS, 349, 387
- » Ginzburg-Landau, 406
- θωράκιση Thomas-Fermi, 180
- Ι**δανικός διαμαγνητισμός, 355
- ιδιο-λύσεις, 144
- ιδιότητες συμμετρίας, 192
- ιδιοτρόποι, 459
- ιονικές δομές, 41
- ιοντική ακτίνα, 11
- ιοντικός δεσμός, 4, 510
- ισοτοπικό φαινόμενο, 387
- ισοτροπική συνθήκη, 120
- ισχυρά δέσμια ηλεκτρόνια, 448
- Κ**άθετες μεταπτώσεις, 475
- καινοφανή οπτικά υλικά, 491
- κανάλια ακμής, 603
- κανόνας προσηταιριστικότητας, 32
- » του Friedel, 69
 - » του Matthiesen, 311
- κανόνες επιλογής, 224, 228
- κανονικές συντεταγμένες, 23, 135
- κανονική διαδικασία διάσπασης, 152
- κανονικοί διαμήκεις τρόποι, 457
- » τρόποι, 135
 - » τρόποι δόνησης, 35
- κατανομή Boltzmann, 139, 168
- » Fermi, 172
- κατασκευή Ewald, 69
- καταστάσεις Bloch, 194, 218
- καταστροφές ζευγών Cooper, 368
- καταστροφή λόγω πόλωσης και διηλεκτρικά, 467
- κατοπτρική συμμετρία, 30
- κβαντικά πηγάδια, 597
- κβαντικές ταλαντώσεις, 341
- κβαντική ενέργεια, 274
- » μεταφορά σε νανοδομές, 322
- κβαντικό φαινόμενο Hall, 597, 600
- κβαντικός αριθμός, 2

- κβαντικός αριθμός της τροχιακής στροφορμής, 2
- κβάντο αγωγιμότητας, 606
- » ροής, 399, 409
- κβάντωση z , 561
- » μαγνητικής ροής, 398
- κενό πλέγμα, 197
- κεντρωμένο ορθογώνιο πλέγμα, 27
- κεραμικά υλικά, 352
- κεραμικοί αγωγοί υψηλών θερμοκρασιών, 415
- κεραμικοί υπεραγωγοί, 415, 418
- κινηματική προσέγγιση, 60
- κινητική ενέργεια της Χαμιλτονιανής, 234
- κλάδοι διασποράς, 101
- κόρος, 267
- κράματα Nb-Ti, 411
- κρίσιμα πεδία, B_{c1} και B_{c2} , 407
- » σημεία, 214, 476
- κρίσιμη θερμοκρασία, 349, 383
- κρίσιμο μαγνητικό πεδίο, 391
- κριτήριο Stoner, 246
- κρυσταλλικά συστήματα, 28
- κρυσταλλική ανισοτροπία, 265, 281
- » δομή, 267
- κρυσταλλικό πλέγμα, 26
- κρυσταλλικοί άξονες, 267
- κρύσταλλοι, 267
- κύμα spin Damon-Eshbach, 277
- » spin, 231, 232, 260, 262
- κύματα "Damon - Eshbach", 276
- » Bloch, 194, 290
- κύματα πλάσματος, 484
- κυματαριθμός, 457
- κυματοπακέτο, 290
- κυσελίδα Wigner - Seitz, 75
- Λεπτό υμένιο, 280
- λιθογραφία, 615
- λιθογραφία αποκόλλησης (lift-off), 616, 618
- » ηλεκτρονικής δέσμης, 616
- λιθογραφικές μεθόδους, 322
- λόγος Poison, 122
- laser, 569
- laser διπλής ετεροεπαφής, 586
- » διπλής ετεροδομής, 584
 - » ημιαγωγών, 580
 - » κβαντικού πηγαδιού, 586
- LCAO (γραμμικός συνδυασμός ατομικών τροχιακών), 188, 202
- LEDs, 569
- London και London, 356
- Lyddane-Sachs-Teller, 490
- Μ**αγνητική ανισοτροπία, 265, 280
- » επιδεκτικότητα, 233
 - » πόλωση, 233
 - » πυκνότητα ροής, 233
 - » ροή, 329
 - » συμπεριφορά ιδανικού αγωγού, 354
- μαγνητικό πεδίο, 328
- μαγνητικός κβαντικός αριθμός, 2
- » κυκλικός διχρωσμός, 224
- μαγνήτιση, 232
- μαγνητοαντίσταση, 285, 287
- μαγνητο-ελαστικοί τανυστές, 281
- μαγνητοκρυσταλλική ανισοτροπία, 266
- μαγνητοοπτικό φαινόμενο, 277
- μαγνητοστατικά κύματα spin, 274
- μαγνητοστατική πυκνότητα ενέργειας, 280
- μαγνόνια, 128
- μακρύ υπέρυθρο, 499
- MBE, 609, 615
- μέθοδοι δομικής ανάλυσης, 78
- μέθοδος Laue, 81
- » Weissenberg, 81
 - » εξασθενημένης ολικής ανάκλασης, 502
- μεικτός ιοντικός-ομοιοπολικός χαρακτήρας, 511
- μερική εξάρμωση, 56
- μέση ελεύθερη διαδρομή φωνονίου, 151
- μέσο υπέρυθρο, 499
- μετάβαση Mott, 179, 182
- μεταβατικά μέταλλα, 211, 351
- μεταλλικός δεσμός, 4, 16
- μεταπτώσεις, 475, 476
- » επιτρεπτές, 476
 - » απαγορευμένες, 476, 478

μετασχηματισμός Fourier, 448
 μετατόπιση ζωνών, 554
 μεταυλικά, 494
 μεταφορά θερμότητας, 152
 μέτρο ελαστικότητας, 147, 148

- » ελαστικότητας του Young Y, 122

 μη γραμμική οπτική, 447
 μη εκφυλισμένος ημιαγωγός, 521
 μη ελαστική σκέδαση των ηλεκτρονίων, 483
 μη καθυστερημένη λύση, 459
 μη-αναγώγιμη παράσταση, 34
 μη-ελαστική σκέδαση ακτίνων X, 110
 μη-ελαστική σκέδαση νετρονίων, 111
 μη-κινηματική σκέδαση ακτίνων X, 60
 μήκος διάχυσης οπών, 546

- » κύματος Fermi, 323
- » συμφωνίας φάσης 1_{Φ} , 323, 328
- » κύματος Fermi, 326

 μηχανισμός φωτοεκπομπής, 225
 μιγαδική πυκνότητα σκέδασης, 61
 μικροηλεκτρονική, 446
 μονοδιάστατη μεταφορά, 323
 μονοστρωματικά υμένα σιδήρου, 282
 μονοχρωματικότητα της δέσμης, 110
 μοντέλο Frenkel - Kontorova, 272

- » Schottky, 539
- » ενός ηλεκτρονίου, 231
- » ημιελεύθερου αερίου ηλεκτρονίων, 179
- » ταινιών στον σιδηρομαγνητισμό, 244
- » των δύο ρευστών, 376

 μοριακό τροχιακό, 6
 μοριακοί κρύσταλλοι, 19
 MBE, 577
 Meissner φάση, 408
 MESFET, 575, 576
 MIGS, 550
 MOCVD χαμηλή πίεσης, 611
 MOCVD, 577, 610
 MOMBE, 613
 MOSFET, 575, 576
 MOVPE/MOCVD, 615

Νανοδομές, 322
 νετρόνια, 190
 νιτριδία της ομάδος III, 534
 νόμος δράσης μαζών, 521

- » Curie-Weiss, 252, 255, 258
- » Hook, 115
- » διατήρησης της ορμής, 109
- » δράσης μαζών, 515, 537
- » $T^{3/2}$ του Bloch, 265
- » Mott, 321
- » Wiedemann-Franz, 317

 ηρη διπολικού τρανζίστορ, 571
 Ολική ενέργεια του κρυστάλλου Φ, 98
 ολοεδρικά κεντρωμένη κυβική δομή, 37
 ολοεδρική κέντρωση, 28
 ολοκλήρωμα επικάλυψης, 6
 ομοεπιταξία, 608
 ομοιοπολικός δεσμός, 4, 510
 οπές, 295

- » ταινίας απόσχισης, 509

 οπτική κοιλότητα συντονισμού, 585
 οπτικός κλάδος, 105

- » περιορισμός, 585

 οργανομεταλλική MBE (MOMBE), 613
 ορίζουσα Slater, 395
 όριο Chandrasekhar, 190

- » περίθλασης, 494
- » μακρού μήκους κύματος, 111

 όροι ολίσθησης, 302
 όρος σκέδασης, 302
 Παγκόσμια αγωγιμότητα, 326
 παγκόσμιες διακυμάνσεις της αγωγιμότητας, 334
 παραβολική εξάρτηση, 199
 παράγοντας Boltzmann, 515

- » Debye - Waller, 124
- » δομής, 75

 παραμαγνητική συμπεριφορά, 233
 παραμαγνητικό άλας, 273
 παραμαγνητισμός, 232

- » Pauli, 236

 παραμένουσα μαγνήτιση, 267

- παράμετροι “Grüneisen”, 148
 παράμετρος Stoner, 244
 παραμόρφωση, 112, 113
 πεδίο μαγνητικής αποπόλωσης, 280
 πείραμα, 360
 πειράματα περίθλασης, 85
 - » σε χαμηλές θερμοκρασίες, 156
 περίθλαση, 59
 - » από περιοδικές δομές, 59
 περιοδικές δομές, 66
 - » οριακές συνθήκες, 163, 165
 - » συνθήκες, 193
 περιοδικό δυναμικό, 192
 περιοδικός πίνακας στοιχείων, 2
 περιοδικότητα, 25
 περιοχή κορεσμού, 525
 - » μαγνήτισης, 266
 πηγές σύγχροτρον, 223
 πίεση Fermi, 189
 πιθανότητα αυθόρμητης εκπομπής, 581
 - » επαγόμενης εκπομπής, 581
 πίνακες Pauli, 367
 πινακοστοιχείο, 474-476
 πλασμόνιο, 132, 469, 484
 πλάτη της πιθανότητας, 367
 πολαριτόνια, 458
 πολωμένη επαφή p- n, 542
 πόλωση, 127, 454
 - » ανταλλαγής, 282
 πολωσιμότητα, 473
 προάσπιση Thomas-Fermi, 231
 προσέγγιση, 395
 - » bottom-up, 619
 - » Bragg - Williams, 46
 - » Debye, 139
 - » Hartree-Fock, 243
 - » Heitler - London, 239
 - » Schottky, 547
 - » top-down, 619
 - » ενός ηλεκτρονίου, 162, 231, 297
 - » μέσου πεδίου, 46, 253
 - » μη-εκφυλισμού, 515
 - » ρεύματος διάχυσης, 544
 - » ενεργής μάζας, 292
 - » ισχυρής σύζευξης, 201
 προσέγγιση σχεδόν ελεύθερου ηλεκτρονίου, 196, 201
 προσεγγιστική λύση, 6
 - » μέθοδος Ritz, 203
 προσμείξεις, 505, 530
 πρότυπο Debye, 143
 - » Drude, 306, 309
 - » Penn, 489
 - » γραμμικής διατομικής αλυσίδας, 102
 - » χρόνου αφηρέμησης, 302
 πρώτη ζώνη του Brillouin, 137
 πυκνή επιστοίβαση, 27, 37
 πυκνότητα ενεργειακής ροής, 315
 - » ενέργειας, 115
 πυκνότητα θερμικού ρεύματος, 149, 317
 - » καταστάσεων, 136, 213, 215, 513
 πυκνότητα καταστάσεων για ένα διδιάστατο αέριο ελεύθερων ηλεκτρονίων, 186
 πυκνότητα καταστάσεων σε μη κρυσταλλικά στερεά, 216
 πυκνότητα καταστάσεων του ψευδο-διδιάστατου αερίου ηλεκτρονίων, 563
 πυκνότητα καταστάσεως αερίου ελευθέρων ηλεκτρονίων, 165
 πυκνότητα πιθανότητας, 198
 - » ρεύματος, 294
 - » ρεύματος κατωφλίου, 583
 - » ροής θερμότητας, 315
 - » ροής σωματιών, 315
 - » συνδυασμένης κατάστασης, 477
 - » φορέων, 589
 πυκνότητες φορέων σε ημιαγωγούς με προσμείξεις, 521
- Ρεύμα ανασύνδεσης, 542**
 - » γένεσης, 542
 - » εκπομπού-βάσης, 572
 - » κατωφλίου, 585
 - » συλλέκτη, 570
 ρεύματα σε ταινίες και οπές, 294
 ρευστά Fermi, 376
- RHEED, 609
 Richardson-Dushman, 184
 RIE, 618

- Σημειακά σφάλματα**, 53
 σημειακές ατέλειες, 53
 σιδηροηλεκτρική κατάσταση, 467
 σιδηρομαγνητικά υλικά, 352
 σιδηρομαγνητική σύζευξη, 253, 261
 - » σύζευξη spin, 254
 σιδηρομαγνητικό υμένιο, 283
 σιδηρομαγνητισμός, 231, 232, 260, 352
 σκέδαση Brillouin, 109, 132
 - » Raman, 109, 129
 - » Raman συντονισμού, 132
 - » Rayleigh, 128
 - » ανελαστική, 298
 - » από ακουστικά φωνόνια, 529
 - » από ατέλειες, 310
 - » από ιονισμένες προσμείξεις, 559
 - » από φορτισμένες ατέλειες δομής, 529
 - » από φωνόνια, 310, 559
 - » από χρονικά μεταβαλλόμενες δομές, 107
 - » ζεύγους ηλεκτρονίων, 363
 - » ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου, 299
 - » ηλεκτρονίων στις ταινίες, 296
 - » με αντιστροφή του spin, 323
 - » σε πιεζοηλεκτρικούς ημιαγωγούς, 529
 σολιτόνια, 145
 σολιτονικές λύσεις, 145
 σταθερά Hall, 591
 - » ανισοτροπίας, 270, 273
 - » ανταλλαγής, 241
 - » λεπτής υφής, 605
 - » σύζευξης, 99, 100, 386
 - » Madelung, 13
 σταθερές διάχυσης, 538
 σταθεροποιημένη κατάσταση, 303
 στάθμη Fermi, 479, 522, 535
 - » ουδετερότητας, 550
 στάσιμα θερμικά ρεύματα, 151
 - » κύματα, 164
 στατική διηλεκτρική σταθερά, 455
 στατιστική Bose, 141
 - » Fermi, 170
 στροβιλαντίες, 607
 σύζευξη spin-τροχιάς, 265
 - » ανταλλαγής, 261, 274
 συλλέκτης τρανζίστορ, 571
 συλλογικές διεγέρσεις, 226
 - » ταλαντώσεις, 132
 σύμβολα Schönflies, 33
 συμβολισμός Voigt, 115
 συμβολόμετρο Fabry - Pérot, 132, 277, 585
 - » Michelson, 500
 συμμετρία αναστροφής, 30
 - » μετάθεσης, 31
 - » περιστροφής, 30
 - » σημείου, 29
 συμπύκνωμα ζυγών Cooper, 394
 σύμφωνη σκέδαση, 60
 συναρτήσεις Bloch, 474
 - » Wannier, 290
 συνάρτηση Patterson, 63
 - » Stirling, 172
 - » απωλειών, 483
 - » αυτοσυσχετισμού, 63
 - » επιμερισμού, 146
 - » έργου, 183
 - » κατανομής, 170
 - » των δύο σωματιδίων, 361
 συνδεσμολογία κοινής βάσης, 571, 573
 συνδυασμένη πυκνότητα καταστάσεων, 476
 συνεκτικό πεδίο, 267
 συνθήκη Bragg, 200
 - » Laue, 68, 69
 - » ισοτροπίας, 121
 - » κβάντωσης Bohr-Sommerfeld, 400
 - » ουδετερότητας, 522
 συντελεστές ανάκλασης, 451
 - » διέλευσης, 451
 - » ενδοτικότητας s, 118
 συντελεστής μεταφοράς, 314
 συντονισμός κύκλοτρον, 339, 509, 593
 συντονισμός κυκλότρον, 339
 σύστημα Sommerfeld, 232
 - » ηλεκτρονίου-φωνονίου, 479
 συστήματα διανυσμάτων βάσης, 28
 συχνότητα Debye, 387
 - » αποκοπής Debye, 142
 - » κυκλότρον, 339

- σφαίρα Fermi, 168, 169, 210
 σφάλμα Schottky, 54
 σφάλματα λόγω ακτινοβολήσης, 153
 σχεδόν-ελευθέροι φορείς, 447
 σχέσεις Kramers - Kronig, 451, 474
 » Bohm-Staver, 489
 » Cauchy, 125
 » Lyddane - Sachs - Teller, 460
 » διασποράς spin, 263
 » διασποράς διατομικής αλυσίδας, 104
 » διασποράς, 101
 » του Einstein, 539
 σωλήνες Landau, 344
 » ροής, 410
 σωματίδια Bose, 141
- sp^2 τροχιακά, 10
 spin, 231
 SQUID, 444, 446
 SQUIDS «υψηλών θερμοκρασιών», 420
 Stoner και Wohlfarth, 244
- Ταινία αγωγιμότητας**, 505
 ταινία σθένους, 4, 505
 ταλαντώσεις Aharonov-Bohm, 327, 330
 » Altshuler-Aronov-Spivak, 331, 337
 » Friedel, 219
 » Shubnikov-de Haas, 597
 » ενεργές στο υπέρυθρο, 105
- τανυστής επιδεκτικότητας, 127
 » δεύτερης τάξης, 113
 » ελαστικών σταθερών, 115
 » ενεργής μάζας, 292
 » παραμόρφωσης, 114
 » των ελαστικών σταθερών, 116
- τάξη, 30
 » βραχείας εμβέλειας, 26
- ταχύτητα ολίσθησης, 512, 531
 » ομάδας, 150, 290
- τελεστής ορμής, 474
 τετραγωνικό πηγάδι δυναμικού, 164
 τετριμμένες λύσεις, 101
 τεχνολογία αισθητήρων, 280
 τοίχωμα Bloch, 270
 » Néel, 270
- τοίχωμα περιοχής, 269
 τοπική τάξη (μικρής εμβέλειας), 216
 τοπικό πεδίο, 454, 464
 τοπολογία επιφανειών Fermi, 341
 τρανζίστορ, 569
 » ηρη, 570
 » επίδρασης πεδίου, 570
 » επίδρασης πεδίου, 574
 τριπλοί μονοχρωμάτορες, 132
 τρισδιάστατα πλέγματα Bravais, 29
 τροχιακά sp^3 , 510
 τύπος Gruneisen, 311
 » αερίου - ελεύθερων - ηλεκτρονίων, 215
- T^3 - νόμος, 143
 Thomas - Fermi, 489
- Υβριδικά τροχιακά sp^3** , 9
 υγρό ^3He , 365
 υδρογονικό μοντέλο, 520
 υλικά αρνητικού δείκτη διάθλασης, 492
 » με αρνητικά ϵ και μ , 491
 υπεραγωγιμότητα, 297
 υπεραγωγοί «υψηλών θερμοκρασιών», 411
 » τύπου II, 402, 406
 υπερδομές με διαμορφωμένη χημική σύσταση, 566
 υπερδομή διαμορφωμένης χημικής σύστασης, 608
 υπερδομή με διαμορφωμένη κατανομή προσμείξεων, 566, 567
 υπερδομή με διαμορφωμένη χημική σύσταση, 559, 561
 υπερρεύματα, 355, 388
 υπέρυθρη ανακλαστικότητα, 384
 υπέρψυκτα τήγματα (ύαλοι), 216
 υποταινίες, 325, 563
- Φαινόμενα δεύτερης τάξης**, 269
 φαινόμενα κβαντικής μεταφοράς, 615
 φαινόμενο de Haas-van Alphen, 345, 600
 » Hall, 590
 » Josephson, 438
 » Kondo, 313

- φαινόμενο Meissner-Ochsenfeld, 355, 388, 392
- » Peltier, 316
 - » Raman, 277
 - » Seebeck, 316
 - » Shubnikov-de Haas, 600
 - » σήραγγας, 426
 - » χιονοστιβάδας, 534
 - » Aharonov-Bohm, 328
- φαινομενολογική περιγραφή, 356
- φάση, 42
- » Shubnikov, 408, 409
- φασικά διαγράμματα κραμάτων, 42
- φασική ταχύτητα, 149, 290
- φάσμα διέγερσης, 373
- » διέγερσης ενός υπεραγωγού, 376
- φάσματα Raman Bi_2Se_3 , 130
- φασματομέτρο διπλής δέσμης, 499
- » Fabry - Pérot, 278
 - » φράγματος, 500
- φασματοσκοπία Fourier, 500
- » Raman, 127
 - » ενεργειακής απώλειας, 485
 - » υπερύθρου, 499
 - » φωνονίων, 107
 - » φωτοηλεκτρονίων ακτίνων X, 223
 - » φωτοηλεκτρονίων υπεριώδους, 223
 - » φωτοφωταύγειας, 565
- φορείς μειονότητας, 537
- » παγωμένοι, 524
 - » πλειονότητας, 537
- φουλερίνια, 10
- φωνόνια, 109, 144
- φωνονικό - πολαριτόνιο, 459
- φωτοεκπομπή, 225
- φωτοευπαθής ρητίνη, 616
- φωτοηλεκτρόνια υπεριώδους, 228
- φωτονικοί κρύσταλλοι, 497
- φωτόρευμα, 567
- φωτοφωταύγεια, 565
- Χαμιλτονιανή Heisenberg, 241**
- χαρακτηριστικές εξόδου, 572
- χαρακτηριστική εξίσωση, 200
- » μεταφοράς, 572
- χάσμα, 506
- » Stoner, 260
 - » αναμιξιμότητας, 44, 50
 - » Δ, 375, 430
 - » υπεραγωγού, 373, 375
- χημικά δυναμικά, 48
- χημική εναπόθεση ατμών από οργανομεταλλικές ενώσεις, 610
- χημική συγγένεια A, 11
- χημικό δυναμικό, 171, 173
- χημικοί δεσμοί, 1
- χρόνος αφηρέμησης, 301, 303, 309, 528
- χωρητικότητα φορτίων χώρου, 547
- χωρικός εντοπισμός, 218
- Ψευδο-ορμή των φωνονίων, 109**
- ψευδο-ορμή, 109
- UHV, 607
- Voigt, 115
- Wiedemann-Franz, 317
- YBCO, 413