البــاب الخامس عشر

ديناميكية الشبيكه Lattice Dynamics

عند درجة الصفر المطلق تستقر الذرات فى اية شبيكه فى مواضع الاتزان فى حالة سكون ولكن رفع درجة الحرارة يسبب تذبذب هذه الذرات حول مواضع الاتزان بسعه حركة تتوقف على درجة الحرارة وقد تصل مقدار هذه السعه الى ١٠٪ من المسافة بين الذرات المتجاورة عندما تصبح درجة الحرارة مرتفعة .

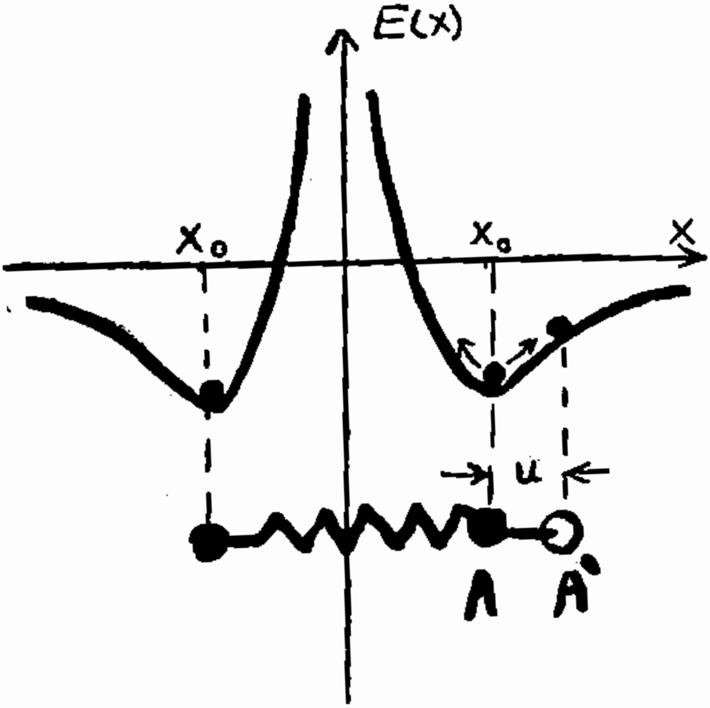
التردد الذرى Atomic frequency of vibration

اعتبر شبيكه بلورية يكون لكل ذرة فيها عدد z جار قريب
coordination number or nearest neighbours.

نفرض أن $E(x_0)$ تمثل طاقة الموضع للذرة عند وضع الاتزان X_0
نفرض أن التغير فى طاقة الذرة A عند ازاحتها الى الوضع A' هو E
وان الازاحة بين الوضعين هى u

$$\therefore \quad \Delta E = \frac{2}{z} \Big[\big\{ E(x_0+u) - E(x_0) \big\} - E(x_0) - E(x_0-u) \Big]$$

$$= \frac{2}{z} \Big[E(x_0+u) + E(x_0-u) - 2\,E(x_0) \Big]$$



شكل ١٥ — ١

يلاحظ أننا قسمنا المعادلة على Z عدد الجيران وذلك للحصول على التغير في الطاقة لكل ذرة كما أننا ضربنا المقدار في ٢ وذلك لأن حركة أية ذرة بالنسبة لأخرى تجاورها يسبب زيادة في طاقة الموضع بنفس المقدار لكل من الذرتين .

نفك المقدارين $E(x+u)$ & $E(x-u)$ بمفكوك تيلور

$$\therefore\quad E(x_0+u) = E(x_0) + \frac{\delta E}{\delta X}\cdot u + \frac{1}{2}\,\frac{\delta^2 E}{\delta X^2}\cdot u^2 + \ldots$$

$$E(X_0-u) = E(X_0) - \frac{\delta E}{\delta X}\cdot u + \frac{1}{2}\,\frac{\delta^2 E}{\delta X^2}\cdot u^2 - \ldots$$

$$-\ 2E(x_0) = -\ 2E(x_0)$$

بالجمع نحصـــــل على : ـــ

$$E\,(Ex_0 + u) + E\,(x_0 - u) - 2\,E\,(x_0) = \frac{\delta^2 E}{\delta X^2} \cdot u^2$$

$$\therefore \quad \Delta E = \frac{2}{z}\,\frac{\delta^2 E}{\delta x^2}\,u^2 = \tfrac{1}{2}\,\alpha\,u^2$$

$$\alpha = \frac{4}{z}\,\frac{\delta^2 E}{\delta x^2}$$

اى ان التغير فى الطاقة يتناسب طرديا مع مربع الازاحه u وتكون القوة المؤثرة على كل ذرة بدلالة الازاحة هى

$$F = -\frac{d}{du}\,(\Delta E) = -\alpha\,u$$

وتكون بذلك المعادلة التفاضلية للحركة هى

$$m\,\frac{d^2u}{d\,t^2} = -\alpha \cdot u$$

حيث m هى الكتلة الذرية

حل المعادلة السابقة ، وهى على شكل حركة توافقيه بسيطه ، هو

$$u = A \cos \omega t$$

حيث

$$\omega = 2\pi f = \sqrt{\frac{\alpha}{m}}$$

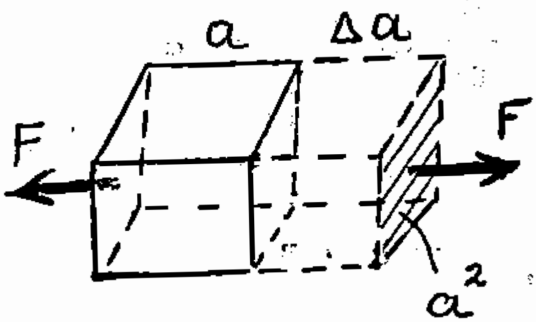
وبذلك يكون التردد الذرى هو

$$f = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{\alpha}{m}}$$

حيث α هو ثابت القوة اى القوة التى تحدث وحدة الازاحه ويمكن تقديره عمليا بالاستعانة بنظرية المرونة .

فاذا اثرنا بقوة F على مكعب من المادة طول ضلعه الوحده تكون α هى القوة اللازمة لكى تحدث استطاله فى المكعب مقدارها الوحده وذلك بافتراض صحة قانون هوك .

$$\therefore \; Y \frac{\Delta a}{a} = F/a^2$$



شكل (١٥ ــ ٢)

حيث Y هو معامل يونج للمرونة .

وباعتبار أن كلا من a , Δa يساويان الوحدة تكون

$$Y = F = \alpha$$

اى أن ثابت القوة α يكون فى حدود القيمة ٢٥ نيوتن/متر واذا

اعتبرنا مادة مثل النحاس تكون كتله الذرة الواحده فيه هى حوالى 10^{-25} كيلو جرام وبالتعويض فى معادلة التردد نحصل على

$$f = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{25}{10^{-25}}} = 10^{13} \ c/s \quad \text{تقريبا}$$

ومن الواضح اننا اذا اعتبرنا جميع الحركات المكنه للذرات المختلفة فاننا نجد ضرورة وجود ترددات أخرى كثيرة .

النظرية الكلاسيكية للحرارة الذرية
Classical theory of specific heats of solids

وجد ديولنج وبتى قديما بالتجربة أن حاصل ضرب الوزن الذرى مضروبا فى الحرارة النوعية يكون مقدارا ثابتا لمواد كثيرة ويساوى تقريبا العدد ٦ . وقد أوحت تلك المشاهدة أن ذرات المواد المختلفة لها نفس السعه الحرارية وان الحرارة تختزن داخل المادة على شكل طاقة حركة داخلية .

استندت النظرية الكلاسيكية على قانون تساوى توزيع الطـاقة Law of equipartition of energy لتفسير ثبوت الحرارة الذرية للمواد ينص هذا القانون على أن طاقة المتذبذب لكل درجة من درجات الحريه هى $\frac{1}{2}$ kT

فى حالة المواد الصلبة يكون لكل ذرة طاقة حركه وطاقة موضع ولذلك فالطاقة المتوسطة للمتذبذب تكون kT

يمكن الوصول لهذه النتيجة رياضيا باعتبار طاقة المهتز التوافقى

$$E = p^2/2m + \frac{1}{2} m\omega^2 u^2$$

حيث ω هى السرعة الزاوية ، p هى كمية الحركة ، u هى

الازاحه من وضع الاتزان . الحد الأول فى المعادلة يمثل طاقة الحركة والحد الثانى يمثل طاقة الموضع .

بتطبيق الميكانيكا الاحصائية الكلاسيكية تكون الطاقة المتوسطة للمهتزهى

$$\overline{E} = \int_0^\infty E\, e^{-E/kT}\, dE \Big/ \int_0^\infty e^{-E/kT}\, dE$$

$$= kT$$

حيث k هو ثابت بولتزمان

T درجة الحرارة المطلقة .

اعتبر اجم ذرى من المادة يحتوى على عدد افوجادروا N ذرات الطاقة الداخلية للمجموعة هى :

$$U = N \times 3kT$$

الحرارة الذرية هى

$$C_v = \frac{\partial U}{\partial T} = 3\, Nk = 3\, R = 6$$

حيث R هو ثابت الغاز ويساوى $N\,k$
يكون هذا القانون صحيحا فى درجات الحرارة المرتفعة فقط وقد وجد أن الحرارة الذرية للمواد تنقص تدريجيا وتؤول الى الصفر عند الصفر المطلق . هذه الحقيقة العملية تجعل النظرية الكلاسيكية غير قادرة على تفسير نقص Cv مع T

ولايمكن أن يفسر هذا النقص باختفاء درجات من الحرية للمهتز التوافقى الذرى اذ ان ذلك يستلزم ان يكون النقص فى Cv نقصا سلميا وليس متصلا كما اننا لايمكننا افتراض وجود كسور من درجات الحرية
fractional degrees of freedom.

نظرية اينشتين للحرارة الذرية Einstein's theory

فسر اينشتين فشل النظرية الكلاسيكية للحرارة الذرية بسبب اعتبار أن الطاقة المتوسطة للمهتز هى kT لكل درجة من درجات الحريه . ادخل بدلا من ذلك نظرية بلانك الكمية التى تنص على أن اى مهتز يبعث او يمتص الطاقة على شكل كمى hf حيث h هو ثابت بلانك و f هو تردد المهتز .

الطاقة المتوسطة الكمية للمهتز التوافقى

اعتبر مجموعة من المتذبذبات التوافقية تكون مجموعة ما عددها N نفرض أن N_0 هو عدد المتذبذبات ذات الطاقة صفر بتطبيق احصاء بولتزمان يكون عدد المتذبذبات ذات الطاقة ε هو

$$N_0 \, e^{-\varepsilon/kT}$$

ويكون العدد الكلى للمتذبذبات ذات الطاقة hf ، $2hf$ ، $3hf$ . . . هو : —

$$N = N_0 + N_0 \, e^{-hf/kT} + N_0 \, e^{-2hf/kT} + \cdots$$

$$= N_0 \left(1 + e^{-x} + e^{-2x} + \cdots\right)$$

حيث $x = h\varepsilon / kT$

مجموع هذه المتسلسلة هو

$$(1 - e^{-x})^{-1}$$

$$N = \frac{N_0}{(1 - e^{-x})}$$

ولايجاد الطاقة نضرب عدد المهتزات فى طاقة كل منها ثم نجمع

$$\therefore\ E = 0.\ N_0 + hf N_0 e^{-x} + 2\ hf\ N_0\ e^{-2x} + \dots$$

$$= f h N_0\ e^{-x}\ (1 + 2 e^{-x} + 3 e^{-2x} + \dots)$$

$$= h f N_0\ e^{-x}\ (1 - e^{-x})^{-2}$$

وبالتعويض بدلا من N_0 نحصل على

$$E = N f h \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} = \frac{N h f}{(e^{x} - 1)}$$

أى أن الطاقة المتوسطة الكمية للمهتز التوافقى الواحد هى

$$\frac{f h}{e^{hf/kT} - 1}$$

اعتبر اينشتين ان ذرات المادة هى متذبذبات توافقية تردد كل منها f وان جميع التذبذبات لها نفس التردد .

$$U = 3N \frac{hf}{e^{hf/kT} - 1} = 3NkT \frac{x}{e^{x} - 1}$$

بمفاضلة U بالنسبة الى T نحصل على الحرارة الذرية

$$Cv = \frac{dU}{dT} \quad 3R \frac{x^{2} e^{x}}{\left(e^{x} - 1\right)^{2}} = 3RE(x)$$

$$= 3RE\left(\frac{\Theta}{T}\right)$$

حيث $E(x)$ هى دالة اينشتين $\Theta = \frac{fh}{k}$ هى درجة الحرارة المميزة للمادة characteristic temperature.

بفحص دالة اينشتين رياضيا عند الدرجات الصغيرة جدا والكبيرة جدا نجـــد الاتى : ـ

$$\lim_{T \to 0} E\left(\frac{\Theta}{T}\right) \to 0$$

$$\lim_{T \to \infty} E\left(\frac{\Theta}{T}\right) \to 1$$

$E(x)$ تؤول إلى الصفر عند درجة الصفر المطلق وتؤول الى الواحد الصحيح عند الدرجات المرتفعة . أى أن الحرارة الذرية Cv عند الدرجات

المرتفعة تساوى 3 R وهذا يتفق مع نتائج النظرية الكلاسيكية بينما عند الدرجات المنخفضة تقل Cv تدريجيا حتى تؤول الى الصفر عند درجة الصفر المطلق ٠

وبالرغم من ان نظرية اينشتين قد فسرت نقص Cv مع درجة الحرارة الا ان قيم Cv التى اعطتها النظرية كانت عادة اقل كثيرا جدا مما اعطته التجربة .

ولذلك لم يكن نجاح النظرية كاملا ٠ وقد ظهر فيما بعد ان سبب هذا الاختلاف هو افتراض ان جميع الذرات تهتز بتردد واحد فقط .

نظرية الفونونات لديباى Debye's phonon theory

افترض ديباى ان الذبذبات الذرية فى المادة تكون طيف ترددات له قيمة معينة لايزيد عنها frequency spectrum وتتوقف على تركيب الشـــبيكه لهذه المادة .

وسمى كل موجه mode of vibration فونون phonon وقد اعتبر ان الحركة الذرية فى داخل المادة تأخذ شكلا موجيا وذلك بالنسبة لوجود قوى بينيه كبيرة بين الذرات ولايعقل أن تتحرك كل ذرة حركة فردية دون ارتباط بالذرات المحيطة بها . ولهذا فقد صور ديباى الحركة الذرية على أنها موجات أو فونونات لها ترددات تتراوح بين الصفر وقيمة عظمى لاتتعداها Cut — off frequency .

طيف الترددات لديباى :

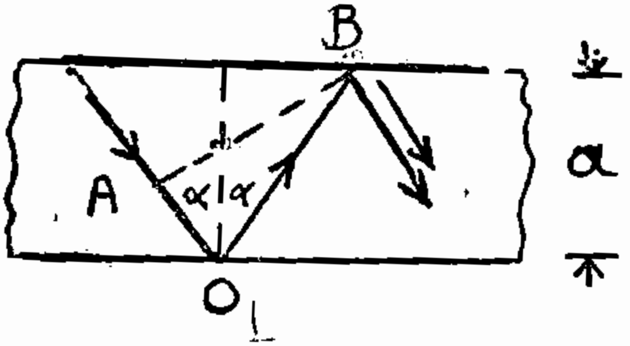
اثبت ديباى ان دالة توزيع الترددات بالنسبة للفونونات N (v) frequency distribution function

تتناسب طرديامع مربع التردد أى مع v^2 وذلك كما يأتى :

اعتبر كتله من المادة على شكل متوازى مستطيلات ابعاده هى
a , b , c

نفرض موجه صوتية (فونون) طول موجتها λ تنتقل فى المادة فى الاتجاه AO كما فى الشكل . تنعكس على السطح الحر عند O ثم مرة اخرى عند B .

اذا تطابقت موجة ساقطة مع مثيلتها التى انعكست مرتين وكانا فى اتجاه واحد نجد انهما يتحركان فى نفس الطور اذا كان فرق المسار عدد



(شكل ١٥ ــ ٣)

صــحيح من طــول الموجة اى ان $OA + OB = n\lambda$

لكن

$$OB = \frac{a}{\cos\alpha}$$

$$OA = OB \cos 2\alpha$$

$$\therefore OA + OB = a\left(\frac{1 + \cos 2\alpha}{\cos\alpha}\right)$$

$$\therefore n\lambda = 2a\cos\alpha$$

$$\therefore a\cos\alpha = \frac{n\lambda}{2}$$

وبتعميم هذه النتيجة فى اتجاهات الفراغ الثلاثة نحصل على

$$a\cos\alpha_1 = n_1\lambda/2$$

$$b\cos\alpha_2 = n_2\lambda/2$$

$$c\cos\alpha_3 = n_3\lambda/2$$

حيث α_3 ، α_2 ، α_1 هى الزوايا التى تصنعها احرف متوازى المستطيلات c b a مع الاتجاه الموجى .

بالتربيع والجمع نحصل على

$$\frac{1}{\lambda^2} = \frac{n_1^2}{4a^2} + \frac{n_2^2}{4b^2} + \frac{n_3^2}{4c^2}$$

حيث أن مجموع مربعات جيوب تمام الزوايا α_1 α_2 α_3 تساوى واحـــد .

اذا رسمنا فراغ العدد الموجى space — $\frac{1}{\lambda}$ وهو الفراغ

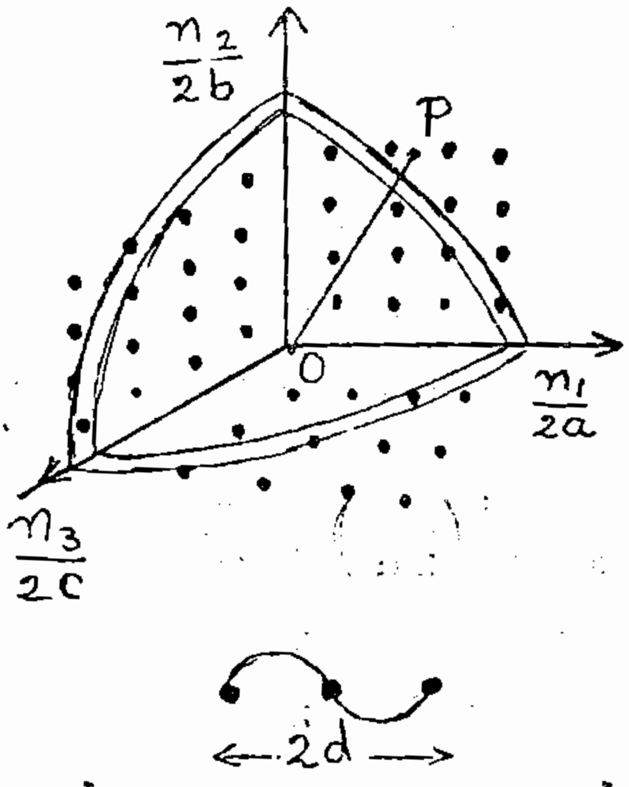
الذى تكون احداثياته المتعامدة هى $\frac{n_1}{2a}$ ، $\frac{n_2}{2b}$ ، $\frac{n_3}{2c}$.

تمثل اى نقطة فى هذا الفراغ موجه ذات طول موجى معين λ ويطلق

اسم فونون على مثل هذه الموجة Phonon التى يتحدد طولها بالاعداد n_1 n_2 n_3 وهى التى تحدد بعد النقطة P عن مركز الاحداثيات

$$\left(OP = \frac{1}{\lambda}\right)$$

تكون أبعد نقطة فى هذا الفراغ عن المركز O هي التى لها أصغر طول موجى λmin ويحدد هذا الطول التركيب البلورى وابعاد وحدة الخلية فى المادة .



شكل (١٥ ـــ ٤)

فاذا كان d هو البعد بين ذرتين متجاورتين فى اتجاه معين تكون اقل طول موجة يمكن لها ان تنتشر فى هذا الاتجاه هى

$$\lambda_{min} = 2d$$

ويكون بذلك حدود فراغ العدد الموجى ($\frac{1}{\lambda}$ — space) فى هذا الاتجاه هو: $\frac{1}{\lambda_{min}}$. ويطلق على مثل هذه الحدود فى فراغ العدد الموجى بمناطق بريلوين وتعرف بانها تلك المنطقة Brillouin zone داخل فراغ العدد الموجى التى تحتوى بداخلها على جميع الفونونات الطبيعية بداخل البلورة .

علاقة ماديلنج : Madelung relation

اذا فرضنا ان منطقة بريلوين عبارة عن كره مركزها O ونصف قطرها $\frac{1}{\lambda m}$ يكون العدد الكلى للفونونات داخل البلورة هو

$$\frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi}{3} \left(\frac{1}{\lambda\ m}\right)^3 / \frac{1}{2a} \quad \frac{1}{2b} \quad \frac{1}{2c}$$

حيث حجم الخلية فى فراغ $\frac{1}{\lambda}$ يساوى $\frac{1}{2a} \cdot \frac{1}{2b} \cdot \frac{1}{2c}$

وقد ضربنا فى $\frac{1}{8}$ لاننا نعتبر نقط الثمن الموجب من فراغ $\frac{1}{\lambda}$ وذلك

منعا لتكرار قيم λ حيث ان هناك فى فراغ $\frac{1}{\lambda}$ ثمانية نقط تمثل نفس الفونون . مثلا : $(n_1 \; n_2 \; n_3)$: $(-n_1, n_2, n_3)$ وهكذا .

وبما ان حجم البلورة اصلا هو $a \; b \; c$ فان عدد الفونونات لوحدة الحجوم من البلورة البلورة هو :

$$N = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{1}{\lambda m}\right)^3 \quad / \text{ c.c.}$$

$$\therefore \quad \frac{1}{\lambda\min} = \left(\frac{3N}{4\pi}\right)^{1/3}$$

ولكن سرعة الصـــوت فى المادة

$$C_o = \lambda_{\min} \; \nu_{\max.}$$

$$= \sqrt{G/\rho}$$

حيث G هو معامل الصلابة ، ρ هى كثافة المادة وتساوى $N \, m$ لأن N هو عدد المهتزات لوحدة الحجوم ، m هى الكتلة الذرية

$$\therefore \quad \nu_{\max} = \frac{C_0}{\lambda\min} = C_0 \left(\frac{3N}{4\pi}\right)^{1/3}$$

$$= G^{1/2} \; \rho^{-1/2} \left(\frac{3\rho}{4\pi m}\right)^{1/3}$$

$$\therefore \quad \nu_{\max} = \text{const.} \; G^{1/2} \; \rho^{-1/6} \; m^{-1/3}$$

وتعطى هذه المعادلة قيمة اكبر تردد للفونونات داخل البلورة أو بمعنى آخر حدود طيف الترددات الداخلية .

وقد تمكن ماديلنج من استنتاج هذه العلاقة عمليا قبل ان تتبلور النظرية على الشكل السابق وهذا الاتفاق بين التجربة والنظرية يحقق صحة النظرية .

ويلاحظ ان ماديلنج كان يوجد قيم m ρ G بالطرق المعتادة وكان يحسب ν_{max} عن طريق قياس تغير Cv / T عند درجات الحرارة المنخفضة وكذلك من معاملات المرونة .

دالة طيف التردد لديباى

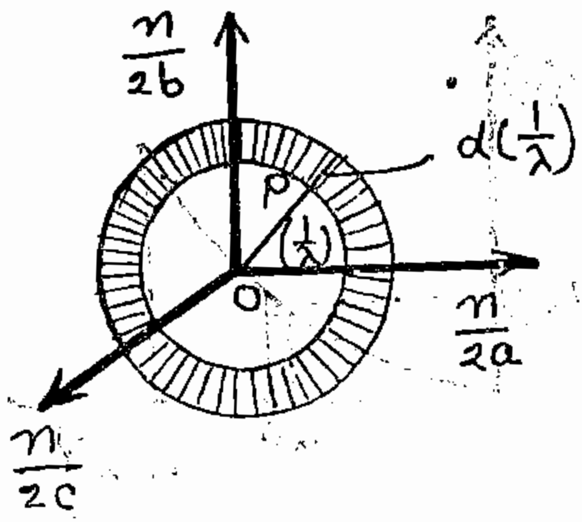
لايجاد دالة توزيع التردد $N(\nu)$ للفونونات بدلالة التردد ν

نعتبر قشرة رقيقة فى فراغ $1/\lambda$ مركزها O نصف قطرها $\frac{1}{\lambda}$ وسمكها $d\left(\frac{1}{\lambda}\right)$

عدد الفونونات داخل القشرة =

$$\frac{1}{8} \cdot 4\pi\left(\frac{1}{\lambda^2}\right) d\left(\frac{1}{\lambda}\right) / \frac{1}{2a} \cdot \frac{1}{2b} \cdot \frac{1}{2c}$$

$$= \frac{4}{\lambda 2} \quad d\left(\frac{1}{\lambda}\right) , \ a\ b\ c$$



(شكل ١٥ — ٦)

وبالقسمة على حجم البلورة abc نحصل على عدد الفونونات من هذه القشرة لكل وحدة حجوم من البلورة وهذا يساوى

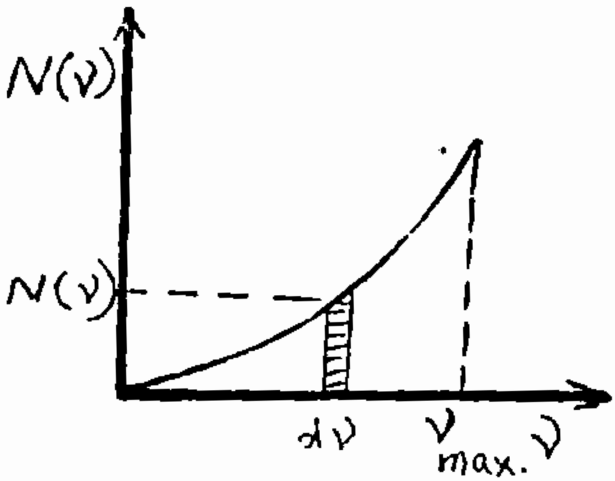
$$\frac{4\pi\nu^2\, d\nu}{C_0^3} = \frac{4\pi}{\lambda^2}\, d\left(\frac{1}{\lambda}\right)$$

$$\therefore \quad N(\nu)\, d\nu = \frac{4\pi\nu^2}{C_0^3}\, d\nu$$

« وقد استعملنا هذا المعادلة $C_0 = \lambda . \nu$ وتفاضلها لايجاد $d\nu , d\lambda$ » المعادلة السابقة تعطى $N(\nu) \propto \nu^2$ اى انها دالة قطع مكافىء يكون لها حدا لاقصى تردد ν_{max} cut. off frequency.

نظرية ديباى لحساب الحرارة الذرية Cv

تنتشر الاهتزازات الميكانيكية داخل اى مادة صلبه على شكل نوعين من الأمواج : —



(شكل ١٥ — ٧)

١ — امواج مستيرضة سرعتها $C_t = \sqrt{\dfrac{G}{\rho}}$ حيث G هى معامل الصلابة ، ρ كثافة المادة ويمكن اعتبار الموجة المستعرضة على انها موجتين مستقطبتين فى اتجاهين متعامدين (مثل الامواج الكهرومغناطيسية) .

٢ — امواج طولية سرعتها $C_l = \sqrt{(B + 4/3\ G)/\rho}$ حيث B معامل المرونة الحجمى .

عدد الامواج ، مستعرضة وطولية ، والتى لها ترددات تقع بين ν ، $\nu + d\nu$ هى :

$$N(\nu)\,d\nu = 4\pi\nu^2\left(\frac{2}{C_t^3} + \frac{1}{C_l^3}\right)d\nu$$

وقد ضربنا $\frac{1}{ct^3}$ فى ، حيث أن الموجـــه المســـتعرضة تعتبر اثنتين مســـتقطبتين .

العدد الكلى للامواج او الفونونات فى وحدة الحجوم من المادة هو

$$\int 4 \pi \nu^2 \left(\frac{2}{Ct^3} + \frac{1}{Cl^3} \right)_\nu d\nu$$

ولابد ان يساوى هذا العدد $3N$ اى يساوى العدد الكلاسيكى لدرجات الحرية . ومن الواجب أن يكون حد التكامل الاعلى ν_m محدودا اذ ان عدد درجات الحرية أيضا محدودا .

اذا اعتبرنا اجم جزىء تكون N هى عدد أ فوجادرو وباجـــراء التكامل السابق نحصل على

$$\nu_m^3 = \frac{q N}{4 \pi \left(\frac{2}{ct^3} + \frac{1}{cl^3} \right)}$$

وتعطى هذه المعادلة قيمة اقصى تردد ν_m فى طيف الترددات .

لايجاد الطاقة الداخلية للجرام جزىء من المادة نضرب عدد الفونونات فى الطاقة الكمية quantized energy للمهتز التوافقى

$$\therefore \ U = 4 \pi \left(\frac{2}{ct^3} + \frac{1}{cl^3} \right) \int_0^{\nu_m} \frac{h \nu^3 \, d\nu}{\left(e^{h\nu/kT} - 1 \right)}$$

$$= \frac{9N}{\nu_m^3} \int_0^{\nu m} \frac{h\nu^3 \, d\nu}{\left(e^{h\nu/kT} - 1\right)}$$

وبمفاضلة الطاقة الداخلية U بالنسبة لدرجة الحرارة T نحصل على الحرارة الذرية Cv .

$$Cv = \frac{9N}{\nu^3} \int_0^{\nu_m} \frac{\frac{h^2 \nu^4}{kT^2} \cdot e^{h\nu/kT} \cdot d\nu}{\left(e^{h\nu/kT} - 1\right)^2}$$

وبوضع $\xi = \frac{h\nu}{kT}$ ، $= \frac{h\nu m}{kT}$ × نحصل على $d\zeta = \frac{hd\nu}{kT}$

$$\therefore \; Cv = \frac{9Nk}{X^3} \int_0^{x} \frac{\xi^4 \, e^{\zeta} \, d\zeta}{(e^{\zeta} - 1)^2}$$

وباجراء التكامل بالتجزىء

مع وضع $Nk = R$ حيث R هو ثابت الغاز للجرام الجزيئى

$$\therefore \; Cv = -\frac{9R}{x^3} \int_0^{x} \xi^4 \, d\left(\frac{1}{e^{\xi} - 1}\right)$$

$$= \frac{9R}{x^3}\left(\int \frac{1}{e^{\xi}-1}\, d\xi^{4} - \left| \frac{\xi^{4}}{e^{\xi}-1} \right|_{0}^{x} \right)$$

$$= \frac{9R}{x^3}\left(\int_{0}^{x} \frac{4\,\xi^{3}\, d\xi}{(e^{\xi}-1)} - \frac{x^{4}}{e^{x}-1} \right)$$

$$= 3R\left(\frac{12}{x^3} \int \frac{\xi^{3}\, d\xi}{e^{\xi}-1} - \frac{3\,x}{e^{x}-1} \right)$$

$$= 3\,R\,D\,(x)$$

$$= 3\,R\,D\left(\frac{\Theta}{T}\right)$$

حيث $D(x)$ هى دالة ديباى

وباعتبار حالات الحدود نجد أن عند درجات الحرارة المرتفعة تكون قيم كل من x ، ξ صغيرة جدا وتؤول قيمة دالة ديبارى عندئذ الى الواحد الصحيح .

وهذا يعنى أن $Cv = 3\ R$ عند الدرجات المرتفعة اى أن النظرية الكلاسيكية تنطبق مع نظرية ديباى عند الدرجات المرتفعة .

أما عند درجات الحرارة المنخفضة تكون قيم x ، ξ كبيرة جدا وتؤول قيمة دالة ديباى الى الصفر .

حيث ان تغير المقام فى الدالة يكون بازدياد اكبر كثيرا من البسط لانه يتبع لدالة اسيه .

قانون ديباى — T^3 عند الدرجات المنخفضة

يمكن تقريب معادلة الحرارة الذرية لديباى عند الدرجات المنخفضة كمـا يأتى :

١ — نهمل الحد الثانى فى دالة ديباى اذ ان x تؤول الى مالانهاية عند الدرجات المنخفضة جدا (عند الصفر المطلق) ويؤول الكسر

$\left(\dfrac{3x}{e^{x} - 1} \right)$ الى الصفر اذ ان e^{x} تزداد زيادة كبيرة بالنسبة الى x

٢ — يمكن اثبات رياضيا ان

$$\lim_{x \to \infty} \int_{0}^{x} \frac{\xi^3 \, d\xi}{e^{\xi} - 1} = \frac{\pi^4}{15}$$

وبالتعويض فى معادلة ديباى نحصل على الحرارة الذرية عند الدرجات المنخفضـــة .

$$C_v = 3R \left(\frac{12}{x^3} \cdot \frac{\pi^4}{15} \right)$$

وبما ان $\dfrac{\Theta}{T} = x$ حيث Θ هى درجة حرارة ديباى المميزة

$$\therefore \quad C_v = \frac{12}{5} \pi^4 R (T/\Theta)^3$$

$$\therefore \quad C_v = \frac{12 \pi^4 R T^3}{5 \Theta^3}$$

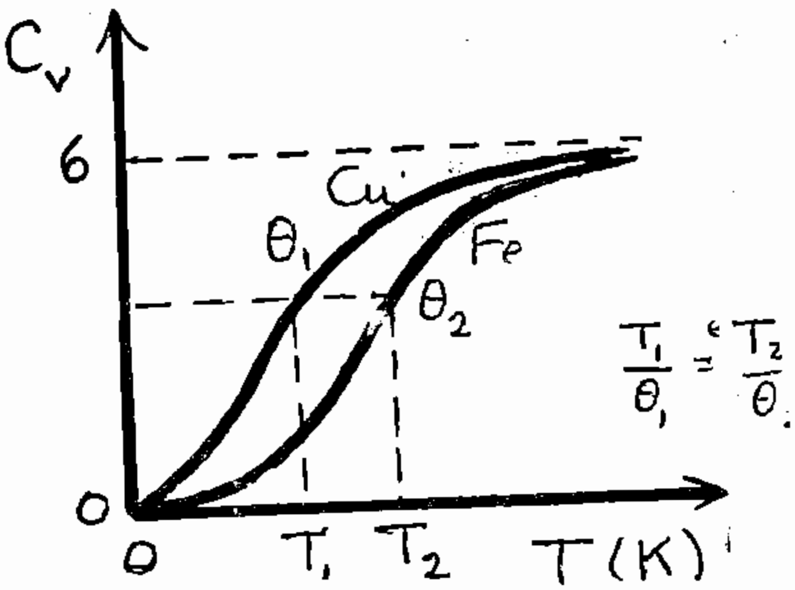
ای ان الحرارة الذرية تتناسب مع مكعب درجة الحرارة المطلقة (T صغيره) وتساوى درجة حرارة ديباى $\frac{h \nu_m}{k} = \Theta$ وهى تتوقف على المادة .

وقد وجد ان التقريب السابق يكون صحيحا فى حدود ١٪ عندما تكون $12 > x$ اى عندما تكون درجة الحرارة $\left(T < \frac{\Theta}{12}\right)$ اقل من $\frac{١}{١٢}$ من درجة ديباى المميزة .

نقد نظرية ديباى :

١ ـ وجد بحساب دالة ديباى عند درجات الحرارة المختلفة أن هناك تطابقا بين النتائج النظرية والنتائج التجريبية لعدد كبير من المواد البسيطة وهذا يدعم صحة النظرية .

٢ ـ بمعرفة درجات الحرارة المميزة لديباى لمواد مختلفة يمكن استنتاج منحنى C_v/T لاى مادة دون قياس وذلك بمعرفة هذا المنحنى لاى مادة أخرى يسهل القياس عليها • اذ أن درجتى الحرارة T_1 , T_2 التى تتساوى عندهما قيمة الحرارة الذرية C_v لمادتين مختلفتين ترتبط



بدرجات ديباى المميزة لهما Θ_1 ، Θ_2 بالمعادلة

$$\frac{T_1}{\Theta_1} = \frac{T_2}{\Theta_2}$$

٣ — من اخطاء النظرية انها تفترض وجود نوع واحد من اختزان الطاقة داخل المادة على شكل طاقة حركة تذبذبيه للذرات المكونة لها . ولكن تحدث حالات شاذة وانحراف عن صحة النظرية عند ادخال الطرق الاخرى الممكنة التى تختزن بواسطتها الطاقة مثل : —

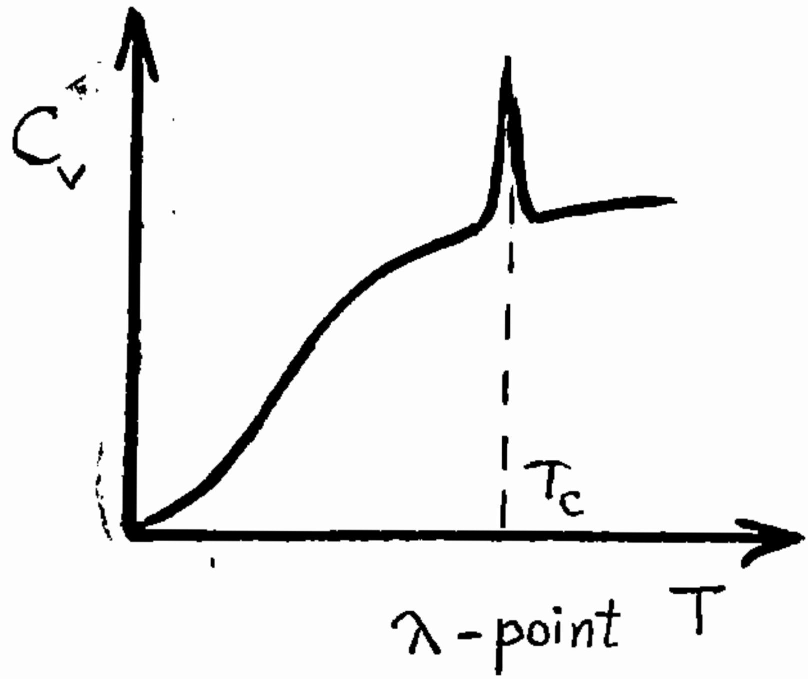
أ — يمكن أن يكون لجزيئات المادة درجة حريه دورانيه
Rotational degree of freedom.

ب — يمكن للطاقة أن تختزن فى حركة الالكترونات

جـ ــ تتغير الطاقة عند حدوث تحول داخل المادة وتظهر حينئذ phase transformation

ما يسمى بنقطة λ (λ — point) على منحنى Cv/T .

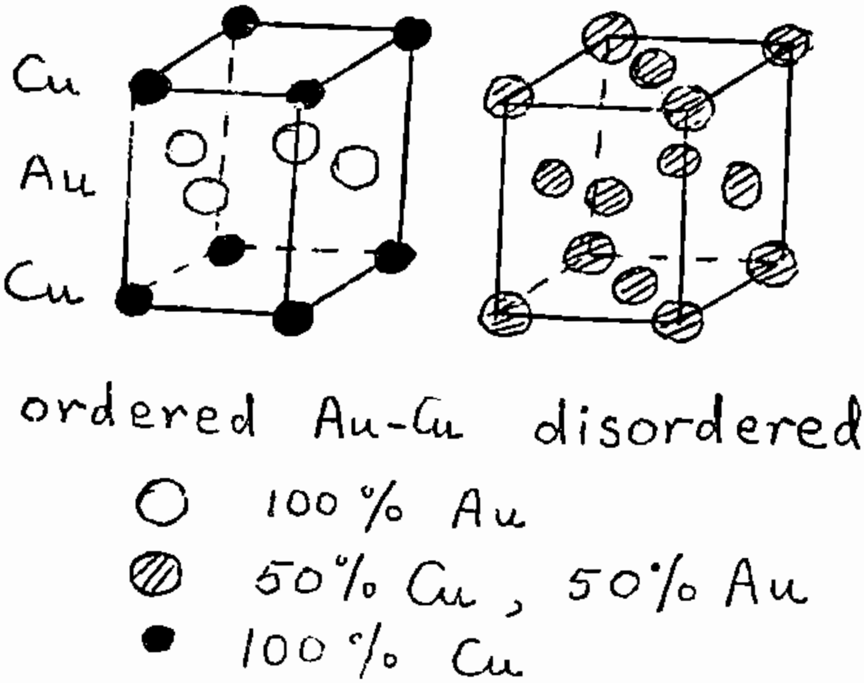
مثلا : عندما تتحول المادة الفيرومغناطيسية الى مادة بارامغناطيسية عند درجة حرارة كورى Tc يحدث امتصاص فجائى للطاقة لاحداث هذا التغير .



شكل (١٥ ــ ٩)

ومثال آخر : فى حالة بعض السبائك مثل Au Cu والتى قد يحدث لذراتها ترييب أولا ترتيب order-disorder هنا أيضا يلزم مقدار من الطاقة لتحويل الشبيكة من الحالة المرتبة الى الحالة الغير مرتبة انظر شكل (١٥ ــ ١٠) .

اذا فرضنا مثلا ان هناك طورين من اطوار المادة A & B حيث يكون A اكثر استقرارا عند درجات الحرارة الأقل من Tc بينما يكون B مستقرا اعلى من Tc



شكل (١٥ ـ ١٠)

لتوضيح ذلك نفرض بلوره حرارتها الذرية Cp سخنت تحت ضغط فارتفعت درجة حرارتها بمقدار d T . من قوانين الديناميكا الحرارية

التغير فى الطاقة الحره dF Free energy

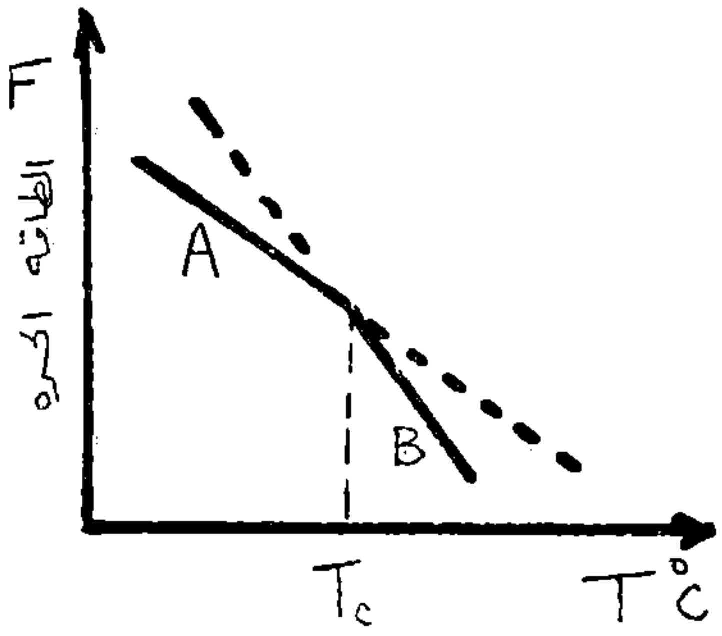
$$dF = d\,(U - TS)$$

$$= dU - TdS - S\,dT$$

$$= -\,p\,dV - S\,dT$$

التغير فى الحجم dV فى حالة الاجسام الصلبة يكون عادة صغيرا ولذلك يمكن اهمال الحد $p\,dV$

$$\therefore \quad dF = -S\,dT$$



شكل (١٥ ـ ١١)

اذا كانت قيمة الطاقة الحرة عند درجة الصفر المطلق هى F_0 والطاقة الداخلية هى E_0 فان تكامل المعادلة السابقة يعطى

$$F = E_0 - \int_0^T \left(\int_0^T \frac{C\,dT}{T} \right) dT$$

وقد عوضنا هنا بدلا من dS بالمقدار $\frac{dQ}{T}$ اى $\frac{cdT}{T}$ والمعادلة السابقة تبين حدوث نقص فى الطاقة الحرة عندرفع درجة الحرارة ويكون النقص كبيرا كلما زادت قيمة الحرارة الذرية c_p

وتبعا لقاعدة اقل طاقة حرة Minimum free energy condition «الوضع المستقرهو الذى يكون فيه الطاقةالحرة اقل مايمكن»لذلكنجدانهعندما نرتفع بدرجة الحرارة عن Tc يصبح طور المادة B هو الاكثر استقرارا فتتحول اليه جميع المادة من الطور A ويصاحب هذا التحول امتصاص كمية من الطاقة هى التى تظهر على منحنى T / Cv على شكل نقطة λ - point

اهتزاز الشبيكة وامتصاص البلورات للضوء

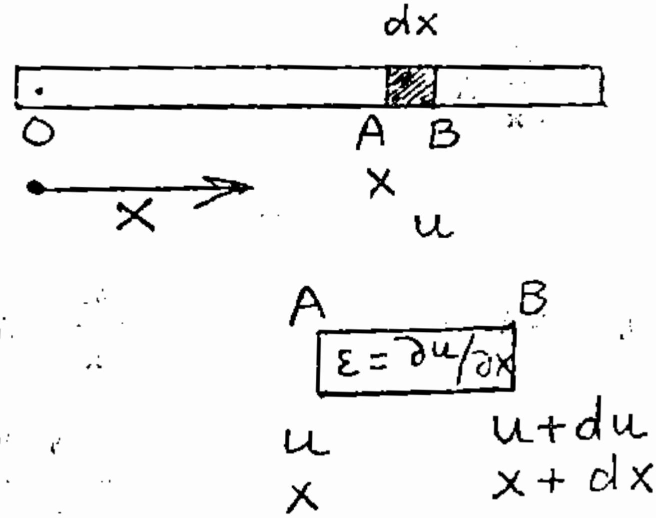
Lattice Vibrations and optical absorption of crystals.

قبل معالجة اهتزاز الشبيكة نبدأ اولا بدراسة : ــ

معادلة انتشار الامواج فى قضيب مرن :

اعتبر بلورة على شكل قضيب مرن متجانس ونفرض انتشار موجه فى اتجاه طوله (نعتبر هنا فقط الحالة الخطية)

نفرض ρ هى الكثافة الطولية للتضيب ، G هى معامل الصلابة



شكل (١٥ ـ ١٢)

نفرض جزءا صغيرا dx من القضيب يبعد مسافة x من مركز الاحداثيات الواقع فى نقطة ما على القضيب وأن الازاحة عن وضع الاتزان عند مرور الموجه الميكانيكية هى u

نفرض ازاحة الطرف A هى u وازاحة الطرف B هى
$u + du$

التغير فى طول الجزء dx هو du

∴ الانفعال الطولى الناشىء عن مرور الموجه هو $\varepsilon = \dfrac{du}{dx}$

القوة المؤثرة والتى تسبب هذا الانفعال هى $F = G \cdot \varepsilon$

اعتبر الان نقطتين على القضيب البعد بينهما Δx فيكون الانفعال عند الاولى $\varepsilon(x)$ وعند الثانية $\varepsilon(x + \Delta x)$ وهذا يساوى

$$\xi(x) + \frac{\partial \xi}{\partial x} \Delta x$$

∴ القوة المؤثرة على Δx هى

$$G\,[\,\xi(x+\Delta x) - \xi(x)\,] = G \frac{\partial \xi}{\partial x} \Delta x$$

$$= G \,..\, \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} . \Delta x$$

∴ كتلة الجزء Δx تساوى $\rho \Delta x$

وبوضع القوة = الكتلة × العجلة تكون معادلة الحركة الموجبه فى النضيب هى

$$G . \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} . \Delta x = \rho . \Delta x . \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$$

$$\therefore \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{G}{\rho} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = C^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

حيث سرعة الامواج C تمطى بالمعادلة $C = \sqrt{G/\rho}$

حل المعادلة السابقة يكون على الصورة :

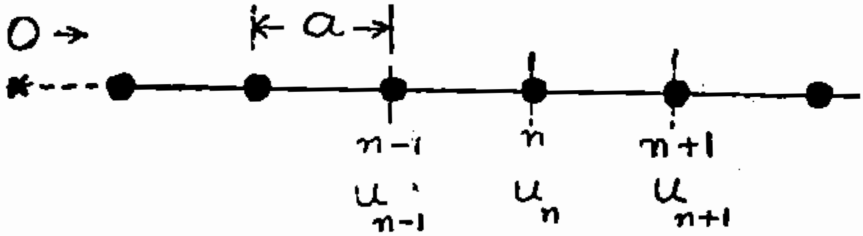
$$u = \zeta\, e^{\,i\,(wt \pm kx)}$$

حيث

$\omega = k \cdot e$ ، $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ وهـو المتجـه المـوجى

الحركة الموجية على شبيكة خطية احادية الذرة mono atomic

اعتبر شـبيكة خطية مكـونة من سـلسلة من الذرات المسـافة بين كل اثنتين متجـاورتين هى a وان كتـلة كل ذرة هى M ناخذ نقطة مـا على الشـبيكة كمركز احـداثيات ثم نعتبر حـركة الذرات اثناء انتشار الموجة .



شكل (١٥ ـ ١٣)

نفرض أن u_n هى ازاحة الذرة ذات الرقم n

u_{n+1} هى ازاحة الذرة $n + 1$

u_{n-1} هى ازاحة الذرة $n - 1$ عن وضع الاتزان

الزيادة فى طول الرابطة Bond length بين الذرتين n ، $n + 1$

هو

$$\left(u_{n+1} - u_n \right)$$

وباعتبار تأثير الجيران القريبة فقط من الذرة n تكون القوة Fn المؤثرة عليهـــا هى

$$F_n = \beta \left[\left(u_{n+1} - u_n \right) - \left(u_n - u_{n-1} \right) \right]$$

حيث β هو ثابت القوة اى القوة لوحدة الاستطالة .

وبمقارنة هذه الحالة بحالة القضيب نجد أن : ــ

أولا : الكثافة الطولية $\rho = \frac{M}{a}$ حيث a المسافة بين الذرتين المتتاليتين . وقد حصلنا على هذه العلاقة باعتبار طول ١ سم من الشبيكة فيه عدد $\frac{1}{a}$ ذرات كتلة كل منها هى M فيكون كتلة وحدة الأطوال ρ هى $\frac{M}{a}$ ،

ثانيا : القوة اللازمة لكى تستطيل الرابطة هى

$$F = \beta \left(u_n - u_{n-1} \right) = \beta \varepsilon \quad a$$

وذلك باعتبار أن الانفعال ε هو التغير النسبى فى طول الرابطة :

$$\varepsilon = \frac{u_n - u_{n-1}}{a} \qquad \frac{\Delta x}{a} \qquad =$$

$$\therefore \quad \frac{F}{e} = \beta \cdot a = G$$

ثالثا : تصبح معادلة الحركة هى

$$M \ddot{u} = \beta \left(u_{n+1} + u_{n-1} - 2 u_n \right)$$

حل المعادلة السابقة يكون على الصورة :

$$u_n = \xi e^{i(\omega t + kna)}$$

وقد استبدلنا الاحداثى x للذرة n بالمقدار n . a فى المعادلة الموجيه فى القضيب المرن .

وبمفاضلة المعادلة السابقة مرتين بالنسبة للزمن وبالتعويض فى معادلة الحركة التفاضلية نحصل على : ـ

$$\dot{u}_n = i \omega u_n \qquad \ddot{u}_n = - \omega^2 u_n$$

$$\therefore - M \omega^2 u_n =$$

$$\beta \left[u_n e^{ika} + u_n e^{-ika} - 2 u_n \right]$$

ويكون حل المعادلة صحيحا فقط عندما تكون المعادلة السابقة صحيحة اى عندما يكون :

٣٣

$$- \omega^2 M = \beta \left(e^{ika} + e^{-ika} - 2 \right)$$

$$= \beta \;(\cos ka + i \sin ka + \cos ka - i \sin ka - 2)$$

$$= \beta \;(2 \cos ka - 2)$$

$$= 4\beta \left(\frac{\cos ka - 1}{2} \right)$$

$$= -4 \beta \sin^2 \frac{ka}{2}$$

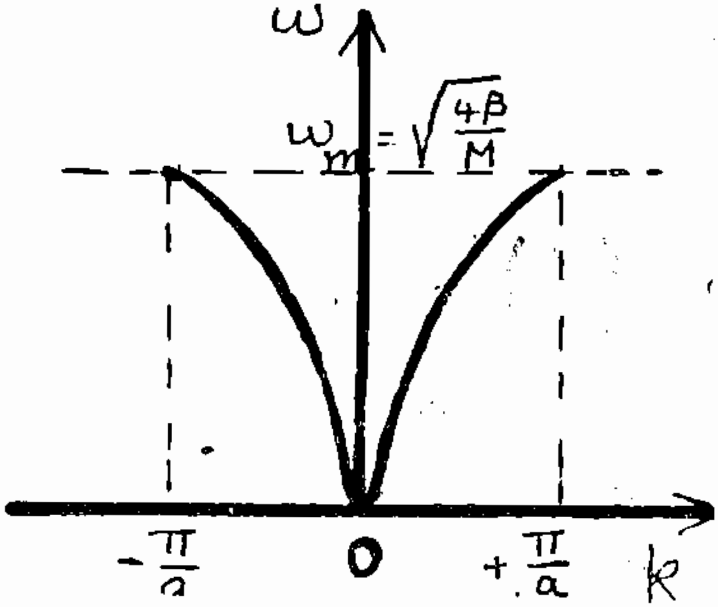
$$\therefore \omega^2 = \frac{4\beta}{M} \sin^2 \frac{ka}{2}$$

$$\therefore \omega = \pm \left(\frac{4 \beta}{M} \right)^{1/2} \sin \frac{ka}{2}$$

وتسمى هذه العلاقة Dispersion relation علاقة التشتيت ٠ وعند رسم بيانيا ω بدلالة k نحصل على منحنى ذى فرعين احدهما موجب والاخر سالب كما فى شكل ١٥ — ١٤

ويلاحظ ان هناك حداً اقصى للترددات الموجيه التى يمكن لها ان تنتشر على هذه الشبيكه وهذه نحصل عليها بوضع القيمة القصوى لـ $\sin ka/2$ وهى الواحد الصحيح

∴ معادلة أكبر تردد هى



شكل (١٥ ــ ١٤)

$$\omega_m = \left(\frac{4\beta}{M} \right)^{½}$$

وهذه تناظر اكبر متجه موجى

$$k_m = \pm \frac{\pi}{a}$$

ونستنتج من ذلك ما يأتى : ــ

اولا : بالنسبة للامواج ذات الاطوال الكبيرة (k تكون صغيرة) يمكن اعتبار الجيب مساويا للزاويه اى ان

$$\sin\frac{ka}{2} = \frac{ka}{2}$$

وتصـــــبح السرعة الزاوية

$$\omega = \left(\frac{\beta}{M}\right)^{1/2} \cdot ka$$

لكن $G/a = B$ وكذلك $M/a = \rho$ ∴ بالتعويض

$$\omega^2 = \frac{G}{Ma}k^2a^2 = \frac{G}{a^2\rho}k^2a^2$$

$$\therefore \omega = \sqrt{\frac{G}{\rho}} \cdot k = C \cdot k$$

حيث c هى السرعة الموجيه على قضيب مرن مكافىء .

ثانيا : تعطى علاقة التشتيت نهاية قصوى للتردد عندما يكون

$k_m = \frac{\pi}{a}$ حيث يكون الجيب مساويا واحد .

اى ان اقصر طول موجة هو

$$k_m = \frac{2\pi}{\lambda_{min}} = \frac{\pi}{a}$$

$$\therefore \lambda_{min} = 2a$$

وواضح ان اطوال الموجات الاقل من هذا لاتستطيع الانتشار فى هذه الشبيكة .

وبالنسبة للمواد المعتادة يكون

$$k_m = \frac{\pi}{a} = 10^{8} \ /\text{em}$$

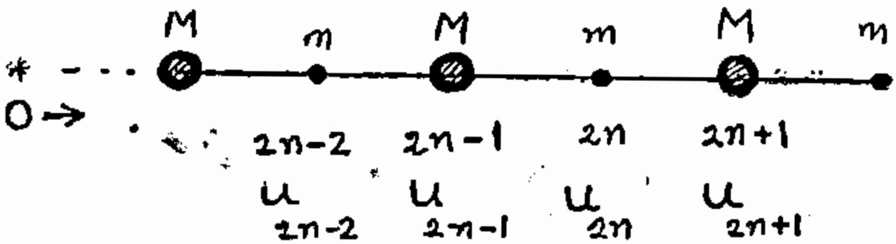
ولكن سرعة الصوت تساوى تقريبا ٣×١٠^{٥} سم / ثانية لذلك تكون قيمة اكبرد تردد هى

$$f_{max} = 3 \times 10^{12} \quad c/s$$

ويقع هذا التردد فى منطقة ترددات الاشعة تحت الحمراء ولكن هذه الموجات هى موجات ميكانيكية وليست كهرومغناطيسية لذلك فمن الصعب جدا اثارة الشبيكة لكى تهتز بهذه الترددات المرتفعة . للآن اكبر تردد للمهتز الميكانيكى هو $١٠^{٩}$ ذبذبة / ثانيه وقد امكن الحصول عليه بواسطة بلورات من الكوارتز .

ذبذبة الشبيكة الخطية ثنائية الذرة

اعتبر شبيكة خطية ثنائية diatomic linear lattice الذرة (مثال ذلك بلورات كلوريد الصوديوم NaCl) نفرض أن كتلة



شكل (١٥ ـ ١٥)

نوعى الذرات المكونة للشبيكة هى m ، M وان المسافات بين الذرات هى a نفرض مركز احداثيات ثابت على الشبيكة تكون الذرات من نوع m موجودة فى المواضع الزوجيه مثلا

$$2n, \quad 2n+2, 2n+4 \cdots$$

بينما الذرات من نوع M تكون فى المواضع الفردية

$$(2n-1), \quad (2n-3), \cdots$$

نعتبر فقط التأثير البينى بين اقرب جيران ونهمل غير ذلك .

معادلة الحركة الموجية للذرات (او الايونات) من نـــوع m هى :

$$m \frac{d^2u}{dt^2} 2n = \beta \left(u_{2n+1} + u_{2n-1} - 2u_{n} \right)$$

وبالمثل بالنسبة للايونات من النوع M معادلة الحركة هى

$$M \frac{d^2u}{dt^2}^{(2n+1)} = \left(u_{2n+2} + u_{2n} - 2u_{2n+1} \right)$$

وحل المعادلتين السابقتين يكون على الصورة :

$$u_{2n} = \xi e^{i(\omega t + 2nka)}$$

ســـعة الحركة للذرة m هى ξ

$$u_{2n+1} = \eta \, e^{i(\omega t + \overline{2n+1}\, ka)}$$

سعة الحركة للذرة m هى η

ولايجاد شرط ان تكون الحلول السابقة صحيحة تفاضل الحلين ونوجد $\dot{u}_{2n}$ ، $\ddot{u}_{2n}$. $\dot{u}_{2n+1}$. $\ddot{u}_{2n+1}$ وبالتعويض فى المعادلات التفاضليه للحركة نحصل على المعادلتين التاليتين :

$$-\omega^2 m \zeta = \beta \eta \left(e^{ika} + e^{-ika} \right) - 2\beta\xi$$

$$-\omega^2 M \eta = \beta\xi \left(e^{ika} + e^{-ika} \right) - 2\beta\eta$$

يكون للمعادلتين السابقتين حلولا حقيقية اذا تلاشى المحدد من معاملات ξ ، η اى ان

$$(2\beta - \omega^2 m)\,\xi - (2\beta \cos ka)\,\eta = 0$$

$$(-2\beta \cos ka)\,\xi + (2\beta - M\omega^2)\,\eta = 0$$

$$\therefore \begin{vmatrix} 2\beta - \omega^2 m & 2\beta \cos ka \\ -2\beta \cos ka & 2\beta - M\omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

وبفك المحدد نحصل على :

$$\omega^2 = \beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)$$

$$\pm \beta \left[\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 ka}{M m} \right]^{1/2}$$

وتسمى المعادلة السابقة بعلاقه التشتيت dispersion relation

وقبل رسم العلاقة بيانيا بين ω ، k نوجد أولا حالات الحدود عندما تكون k صغيرة جدا أو كبيرة

أولا : عند قيم k الصغيرة جدا أى التى تؤول الى الصفر .

(أ) نعتبر الجزء الموجب من علاقه التشتيت ونضع قيمة دالة الجيب تساوى صفرا فنحصل على .

$$\omega_0^2 = 2\beta\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right)$$

(ب) عند اعتبار الجزء السالب فى العلاقة لانضع الجيب مساويا للصفر حتى لانحصل على قيمة صفرية لـ ω ولذلك نعتبر $\text{Sinka} = ka$ فنحصل على :

$$\omega_0^2 = \frac{2\beta}{M + m} \cdot k^2 a^2$$

ثانيا : لقيم k الكبيرة (واقصى قيمة لها هى $k_m = \frac{\pi}{2a}$)

أ ــ نعتبر الجزء الموجب من العلاقه ونضع قيمة الجيب مساوية للواحد الصــــــحيح .

$$\therefore \ \omega_m^2 = \beta\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M}\right) +$$

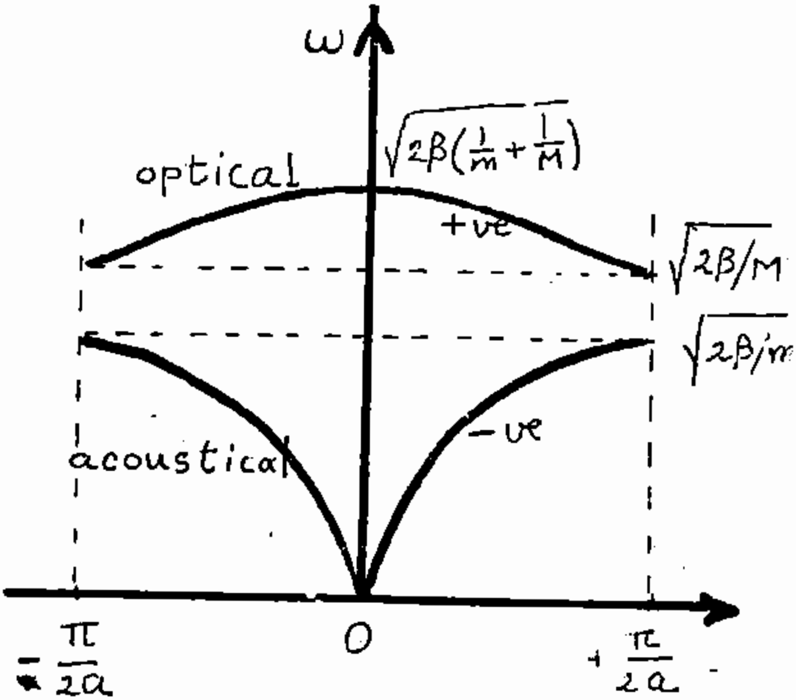
$$\beta\left[\left(\frac{1}{m}\right)^2+\left(\frac{1}{M}\right)^2+\frac{2}{mM}-\frac{4}{mM}\right]^{1/2}$$

$$=\beta\left(\frac{1}{M}-\frac{1}{m}\right)+\beta\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)$$

$$=2\beta\ /\ M$$

ب ــ وعند اعتبار الجزء السالب نحصل على

$$\omega^2_m=\beta\left(\frac{1}{M}+\frac{1}{m}\right)-\beta\left(\frac{1}{m}-\frac{1}{M}\right)$$



شكل (١٥ ــ ١٦)

$= \ ^{-} 2\beta \ / m$

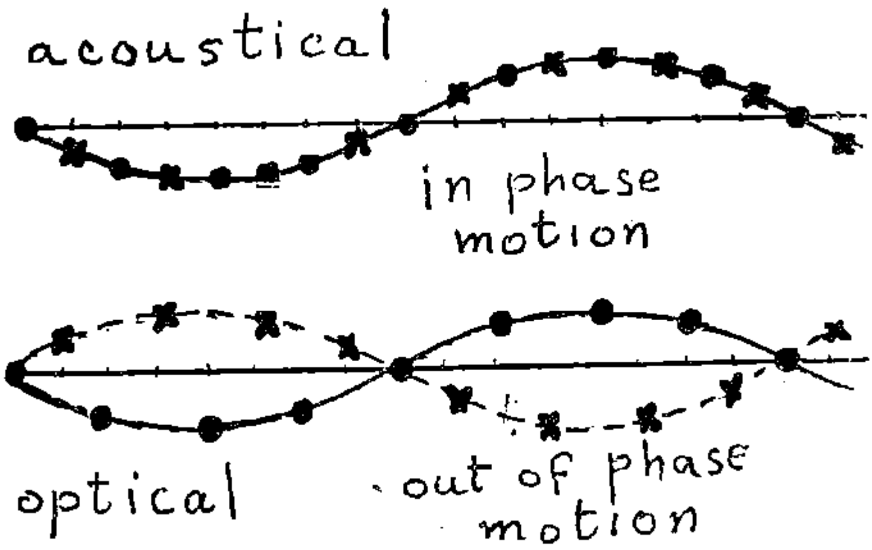
وبرسم العلاقه بين ω & k نحصل على منحنى ذى فرعين يسميان عادة :

الفرع الصـــوتى acoustical branch

والفرع الضـــوئى optical branch.

ويمكن لنا فهم طبيعة هذين الفرعين اذا اعتبرنا حركة الذرات المختلفة فى الشـــبيكة .

تتحرك الذرات فى الفرع الصوتى بنفس الطريقة اى ان الموجه تعتبر موجه طوليه ولهذا سميت صوتيه وتكون حركة الذرات كلها فى طور واحد in phase



شـــكل (١٥ ــ ١٧)

اما بالنســـبة للفرع الضوئى نجد ان الذرات تتحرك بحيث تكون عكسية فى الطور anti - phase

وهذا النوع من الامواج مستعرض ويشبه الامواج الكهرمغناطيسيه ولذا سمى هذا الفرع بالضوئى

ولاظهار تلك الحركات الذرية نوجد النسبة بين سعتى الحركة للذرتين M , m

اى نوجد (ξ , η) من معادلتى المحدد .

$$\therefore \quad \frac{\zeta}{\eta} = \frac{2\beta \cos k a}{2\beta - \omega^2 m}$$

وتختصر هذه المعادلة للقيم الصغيرة لـ k الى

$$\frac{\zeta}{\eta} = \frac{2\beta}{2\beta - \omega^2 m}$$

وباعتبار الفرع الضوئى (البصرى) حيث

$$\omega_o^2 = 2\beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)$$

وبالتعويض نحصـــل على :

$$\frac{\zeta}{\eta} = \frac{2\beta}{2\beta - 2\beta m \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)}$$

$$= - \frac{M}{m}$$

الاشارة السالبة هنا تعنى فيزيائيا ان حركة الذرات M تكون فى عكس طور الذرات m . anti-phase motion

وباعتبار الفرع الصوتى حيث o ← o ω يكون

$$\frac{\zeta}{\eta} = \frac{2\beta}{2\beta - o} = 1$$

وهذا يدل على ان حركة الذرات جميعها فى نفس الطور .

امتصاص البلورات للاشعة تحت الحمراء I R absoorption

أمكن التحقق عمليا من صحة النظرية البسيطة السابقة عن اهتزاز الشبيكه وذلك باعتبار تأثر شبكية خطية ثنائيةالذرة عند تشعيعها بأمواج كهرومغناطيسية فى منطقة الاشعة تحت الحمراء ، شدتها : —

$$E = E_0 \, e^{i \omega t}$$

التردد ω لهذه الاشعة فى منطقة حول 3×10^{12} ذبذبة فى الثانية وطول موجتها حوالى ١٠٠ ميكرون وهذا يعطى متجه موجى

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = 600 \ / \text{cm}$$

وهذه القيم لـ k صغيرة جدا عند مقارنتها بقيمة اكبر متجه موجى لاهتزاز الشبيكة

$$k_m = \frac{\pi}{2a} = 10^8 \ / \ cm \quad \text{تقريبا}$$

ولذلك عند تشعيع الشبيكه بأمواج تحت الحمراء نعتبر علاقة التشتيت dispersion relation عندما يؤول متجه الموجه الى الصفر .

يجب فى هذه الحالة تعديل معادلات الحركة للذرات وحلولها بحيث تتضمن حدا جديدا هو $\pm e E_0$ يعبر عن القوة التى يؤثر بها المجال الكهرمغناطيسى للاشعة تحت الحمراء على ايونات الشبيكه الموجبهوالسالبة

اذا كانت سعة شدة المجال الكهربى
Amplitude of the electric intensitty E_0
وكانت الشحنات على الايونات المتجاورة هى $\pm e$ فان القوة المؤثرة عليها هى $\pm e E_0$

ويصبح حلا المعادلاتين الموجتين للايونين m , M هما

$$-\omega^2 m \zeta = \beta \eta \left(e^{ika} + e^{-ika}\right) - 2\beta\zeta - e E_0$$

$$-\omega_0 M \eta = \beta \zeta \left(e^{ika} + e^{-ika}\right) - 2\beta_\eta + e E_0$$

وعندما تكون k صغيرة تصبح المعادلتين

$$-\omega^2 m \zeta = 2\beta(-\zeta + \eta) - e E_0$$

$$- \omega^2 M \eta = 2 \beta . (\zeta - \eta) + e E_0$$

وبحل المعادلين لايجاد η ، ζ نجد ان

$$\eta = \frac{e E_0/M}{\omega_0^2 - \omega^2} \qquad \zeta = \frac{- e E_0 /m}{\omega_0^2 - \omega^2}$$

حيث

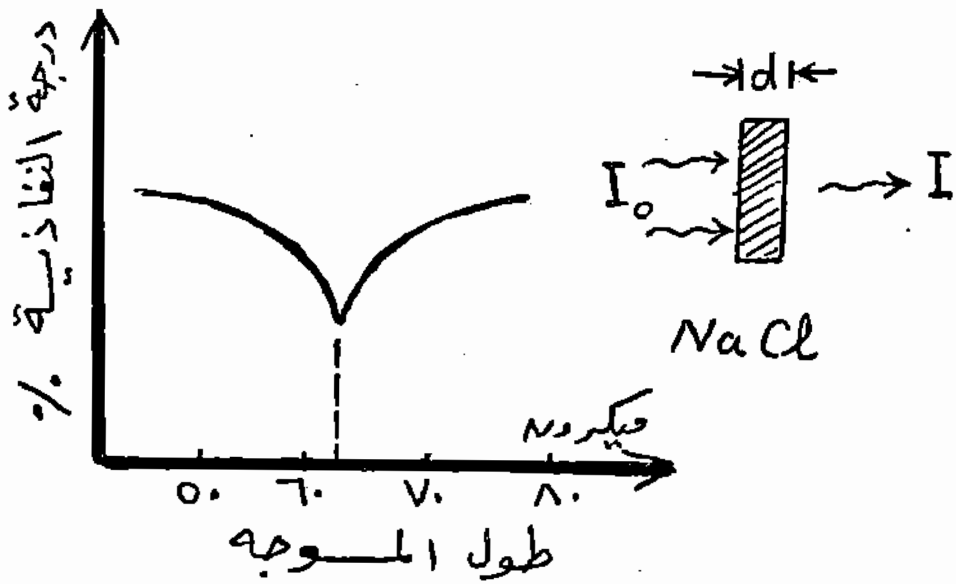
$$\omega_0^2 = 2 \beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)$$

وهى القيمة التى تناظر $k = 0$ اى عند حدود الفرع الضوئى optical branch .

من المعادلتين السابقتين يتضح حدوث أكبر سعة حركة للذرات عندما تقترب ω من ω_0 وتمتص طاقة الحركة اللازمة للذرات عندئذ من طاقة الاشعة الساقطة . وكلما ازدادت سعة الحركة كلما ازدادت درجة الامتصاص الداخلى للطاقة المستخدمة فى اثارة ذبذبات الشبيكه .

تطبيق على شبيكة كلوريد الصوديوم

عند تشعيع بلورة من كلوريد الصوديوم بامواج تحت الحمراء وجد حدوث اكبر امتصاص اى اقل نفاذية عندما كانت أطوال الموجات الساقطة ٦١ر١ ميكرون كما لوحظ ايضا حدوث اكبر انعكاس للاشعة على سطح البلورة وهو مايسمى : Selective reflection عند طول موجه قريب من هذا (حوالى ٥٢ ميكرون)



شكل (١٥ — ١٨) طول الموجه بالميكروب

ولكى نتمكن من مقارنة النظرية بالتجربة نعتبر معامل الصلابة C_{11} لبلورة كلوريد الصوديوم ويساوى ٥ × ١٠ ^١١^ واين / سم٢) فى (D — 3)

ثابت القوة β للشبيكه الخطيه (D— 1) يساوى G / a
حيث a هو البعد بين الذرات المتجاورة G هو معامل الصلابة الخطى

باعتبار البلورات الحقيقة يمكن اعتبار أن هناك عدد $\frac{1}{a^2}$ شبيكه خطيه فى كل وحده مساحات (انظر شكل ١٥ — ١٩)

يكون ثابت القوة

$$\beta = a \cdot c_{11}$$

$$«\beta_{3-D} = \frac{c_{11}}{a} \quad ; \quad \frac{1}{a^2} \text{ linear lattices involved}»$$

شكل (١٥ — ١٩)

$$\because \beta_{1-D} = \frac{c_{11}}{a} / \frac{1}{a2} = a \,.\, c_{11}$$

$$C_{11} = 5 \times 10^{11} \quad dys/cm^2$$

بوضع $a = 3 \times 10^{-8}$ cm لكلوريد الصوديوم يكون ثابت القوة

$$\beta = 1.5 \times 10^4 \quad dyn/cm$$

ومن النظرية السابقة

$$\omega_o^2 = 2 \beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)$$

حيث m كتلة ذرة الصوديوم وتساوى ٢٣ وحدة كتلة ذرية

M كتلة ذرة الكلور وتساوى ٣٥٫٥ وحدة كتله ذريه

وبمعرفة ان وحدة الكتلة الذرية = ١٫٦٧ × ١٠ $^{-٢٤}$ جم تكون

$$\omega_o^2 = 2 \times 1.5 \times 10^4 \times \left(\frac{1}{35.5} + \frac{1}{23} \right) \times \frac{1}{1.67 \times 10^{-24}}$$

$$\therefore \quad \omega = 3.6 \times 10^{13} \text{ rad. / sec.}$$

لكن باعتبار التردد f_0 تكون

$$\omega_0 = 2 \pi f_0$$

ايضـــــا

$$c = 3 \times 10^{10} \text{ cm/s}$$

$$\therefore \quad \lambda_0 = \frac{c}{f_0} = \frac{c}{\omega_0 / 2\pi} = 50 \ \mu$$

اى ان طول الموجه الذى يحدث عنده اكبر سعة حركة للذرات وبالتالى اكبر امتصاص لطاقة الاشعة هو ٥٠ ميكرون بينما القيمة المناظرة لذلك مقاسة فى المعمل هى ٦١ر١ ميكرون وتعد هذه النتيجة العملية محققة للنظرية

وعموما يكون لكل البلورات الايونية التى يمكن تطبيق عليها نظرية الشبيكة ثنائية الذره ، يكون لها امتصاص مميز فى منطقة الاشعة تحت الحمراء characteristic absorption .