

## الباب السادس عشر

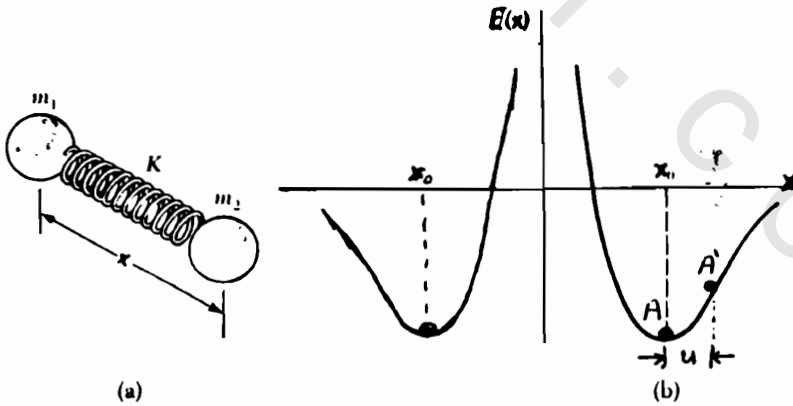
### ديناميكية الشبكة : Lattice Dynamics

عند درجة الصفر المطلق تستقر الذرات في أية شبكة في مواضع الاتزان في حالة سكون ولكن رفع درجة الحرارة يسبب تنديب هذه الذرات حول مواضع الاتزان بسعة حركة تتوقف على درجة الحرارة وقد تصل مقدار هذه السعة إلى ١٠٪ من المسافة بين الذرات المتجاورة عندما تصبح درجة الحرارة مرتفعة .

### التردد الذري : Atomic frequency of vibration

اعتبر شبكة بلورية يكون لكل ذرة فيها عدد  $Z$  جار قريب ، شكل ( ١٦ - ١ ) .  
 coordination number نفرض أن  $E(x_0)$  تمثل طاقة الموضع للذرة عند وضع الاتزان  
 $x_0$  نفرض أن التغيير في طاقة الذرة  $A$  عند إزاحتها إلى الموضع  $A^1$  هو  $E$  وأن الإزاحة  
 بين الوضعين هي  $u$

$$\begin{aligned} \therefore \Delta E &= \frac{2}{Z} \left[ \left| E(x_0 + u) - E(x_0) \right| - \left| E(x_0) - E(x_0 - u) \right| \right] \\ &= \frac{2}{Z} \left[ E(x_0 + u) + E(x_0 - u) - 2E(x_0) \right] \end{aligned}$$



شكل ١٦ - ١

يلاحظ أننا قسمنا المعادلة على  $Z$  عدد الجيران وذلك للحصول على التغير في الطاقة لكل ذرة كما أننا ضربنا المقدار في  $2$  وذلك لأن حركة أية ذرة بالنسبة لأخرى تجاورها يسبب زيادة في طاقة الموضع بنفس المقدار لكل من الذرتين .

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

$$\therefore E(x_0 + u) = E(x_0) + \frac{\partial E}{\partial x} \cdot u + 1/2 \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} \cdot u^2 + \dots$$

$$E(x_0 - u) = E(x_0) - \frac{\partial E}{\partial x} \cdot u + 1/2 \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} \cdot u^2 - \dots$$

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

بالجمع نحصل على :

$$E(x_0 + u) + E(x_0 - u) - 2E(x_0) = \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} \cdot u^2$$

$$\therefore \Delta E = \frac{2}{z} \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} u^2 = 1/2 \infty u^2$$

$$\infty = \frac{4}{z} \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} \quad \text{حيث}$$

أى أن التغير في الطاقة يتناسب طرديا مع مربع الإزاحة  $u$  وتكون القوة المؤثرة على كل ذرة بدلالة الإزاحة هي :

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

وتكون بذلك المعادلة التفاضلية للحركة :

$$m \frac{d^2 u}{dt^2} = - \infty \cdot u$$

حيث :  $m$  هي الكتلة الذرية

حل المعادلة السابقة ، وهي على شكل حركة توافقية بسيطة ، هو :

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

حيث :

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

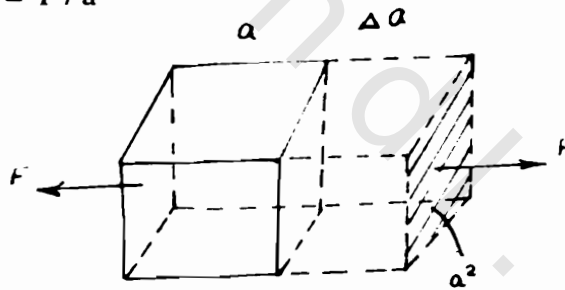
وبذلك يكون التردد الزرى هو :

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

حيث  $\infty$  هو ثابت القوة أى القوة التى تحدث وحدة الإزاحة ، ويمكن تقديره عمليا بالاستعانة بنظرية المرونة .

فإذا أثرتنا بقوة  $F$  على مكعب من المادة طول ضلعه الوحدة شكل ( ١٦ - ٢ ) تكون  $\infty$  هى القوة اللازمة لكى تحدث أستطالة فى المكعب مقدارها الوحدة وذلك بافتراض صحة قانون هوك .

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



شكل ( ١٦ - ٢ )

حيث  $Y$  هو معامل يونج للمرونة .

$Y = F = \infty$  وباعتبار أن كلا من  $a, \Delta a$  يساويان الوحدة تكون

أى أن ثابت القوة  $\infty$  يكون فى حدود القيمة ٢٥ نيوتن / متر وإذا اعتبرنا مادة مثل :

النحاس تكون كتلة الذرة الواحدة فيه هى : حوالى  $10^{-26}$  كيلوجرام وبالتعويض فى مادة

التردد نحصل على :

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

ومن الواضح أننا إذا اعتبرنا جميع الحركات الممكنة للذرات المختلفة فإننا نجد ضرورة وجود ترددات أخرى كثيرة .

### النظرية الكلاسيكية للحرارة الذرية :

Classical theory of specific heats of solids :

وجد ديولنج وبتي قديما بالتجربة أن حاصل ضرب الوزن الذري مضروباً في الحرارة النوعية يكون مقدار ثابتاً لمواد كثيرة ، ويساوي تقريباً العدد ٦ . وقد أوجت تلك المشاهدات أن ذرات المواد المختلفة لها نفس السعة الحرارية ، وأن الحرارة تختزن داخل المادة على شكل طاقة حركة داخلية .

استندت النظرية الكلاسيكية على قانون تساوي توزيع الطاقة Law of equipartition of energy لتفسير ثبوت الحرارة الذرية للمواد وينص هذا القانون على أن طاقة المتذبذب لكل درجة من درجات الحرية هي  $1/2 kT$  .  
في حالة المواد الصلبة يكون لكل ذرة طاقة حركة وطاقة موضع ، ولذلك فالطاقة المتوسطة للمتذبذب تكون  $kT$  .

يمكن الوصول لهذه النتيجة رياضياً باعتبار طاقة المهتز التوافقي

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

حيث  $\omega$  هي السرعة الزاوية ،  $p$  هي كمية الحركة ،  $u$  هي الإزاحة من وضع الاتزان .  
الحد الأول في المعادلة : يمثل طاقة الحركة والحد الثاني يمثل طاقة الموضع .  
بتطبيق الميكانيكا الاحصائية الكلاسيكية تكون الطاقة المتوسطة للمهتز هي

$$\bar{E} = \int_0^{\infty} E e^{-E/kT} dE / \int_0^{\infty} e^{-E/kT} dE = kT$$

حيث  $k$  هو ثابت بولتزمان

$T$  درجة الحرارة المطلقة .

اعتبر  $\nu$  جم ذرى من المادة يحتوى على عدد افوجادرو  $N$  ذرات . الطاقة الداخلية

للمجموعة هي :

$$U = N \times 3 kT$$

الحرارة الذرية هي :

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

حيث  $R$  هو ثابت الغاز ويساوى  $Nk$

يكون هذا القانون صحيحا فى درجات الحرارة المرتفعة فقط وقد وجد أن الحرارة

الذرية للمواد تنقص تدريجيا وتؤول إلى الصفر عند الصفر المطلق . هذه الحقيقة العملية

تجعل النظرية الكلاسيكية غير قادرة على تفسير نقص  $C_v$  مع  $T$  .

ولا يمكن أن يفسر هذا النقص باختفاء درجات من الحرية للمهتز التوافقى الذرى إذ

أن ذلك يستلزم أن يكون النقص فى  $C_v$  نقصا سلميا وليس متصلا كما أننا لا يمكننا

افتراض وجود كسور من درجات الحرية . fractional degrees of freedom .

**نظرية أينشتين للحرارة الذرية Einstein's theory :**

فسر أينشتين فشل النظرية الكلاسيكية للحرارة الذرية بسبب اعتبار أن الطاقة

المتوسطة للمهتز هي  $kT$  لكل درجة من درجات الحرية . أدخل بدلا من ذلك نظرية بلانك

الكمية التى تنص على أن أى مهتز يبعث أو 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 إحصاء بولتزمان يكون عدد المتذبذبات ذات الطاقة  $\epsilon$  هو :

$$N_0 e^{-\epsilon/kT}$$

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

$$\begin{aligned} N &= N_0 + N_0 e^{-hf/kT} + N_0 e^{-2hf/kT} + \dots \\ &= N_0 (1 + e^{-x} + e^{-2x} + \dots) \end{aligned}$$

$$x = hf/kT \quad \text{حيث .}$$

مجموع هذه المتسلسلة هو :

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

ولإيجاد الطاقة نضرب عدد المهتزات فى طاقة كل منها ثم نجمع :

$$\begin{aligned} \therefore E &= 0 \cdot N_0 + hf N_0 e^{-x} + 2 hf N_0 e^{-2x} + \dots \\ &= hf N_0 e^{-x} (1 + 2e^{-x} + 3e^{-2x} + \dots) \\ &= hf N_0 e^{-x} (1 - e^{-x})^{-2} \end{aligned}$$

وبالتعويض بدلا من  $N_0$  نحصل على :

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

أى أن الطاقة المتوسطة الكمية للمهتز التوافقى الواحد هى :

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

اعتبر أينشتين أن ذرات المادة هى متذبذبات توافقية تردد كل منها  $f$  وأن جميع

التذبذبات لها نفس التردد .

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

بمفاضلة U بالنسبة إلى T نحصل على الحرارة الزرية

$$C_v = \frac{dU}{dT} = 3R \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} = 3R E(x)$$

$$= 3R E\left(\frac{\theta}{T}\right)$$

حيث E (x) هي دالة أينشتاين،  $\theta = \frac{hf}{k}$  هي درجة الحرارة المميزة للمادة

. characteristic temperature

بفحص دالة أينشتاين رياضيا عند الدرجات الصغيرة جدا والكبيرة جدا نجد الآتي :

$$\lim_{T \rightarrow 0} E\left(\frac{\theta}{T}\right) \rightarrow 0$$

$$\lim_{T \rightarrow \infty} E\left(\frac{\theta}{T}\right) \rightarrow 1$$

E (x) تؤول إلى الصفر عند درجة الصفر المطلق وتؤول إلى الواحد الصحيح عند

الدرجات المرتفعة ، أى أن الحرارة الزرية  $C_v$  عند الدرجات المرتفعة تساوى 3 R وهذا يتفق

مع نتائج النظرية الكلاسيكية بينما عند الدرجات المنخفضة تقل  $C_v$  تدريجيا حتى تؤول إلى

الصفر عند درجة الصفر المطلق .

وبالرغم من أن نظرية أينشتاين قد فسرت نقص  $C_v$  مع درجة الحرارة إلا أن قيم

$C_v$  التي أعطتها النظرية كانت عادة أقل كثيرا جدا مما أعطته التجربة .

ولذلك لم يكن نجاح النظرية كاملا ، وقد ظهر فيما بعد أن سبب هذا الاختلاف هو

افتراض أن جميع الذرات تهتز بتردد واحد فقط .

**نظرية الفونونات لديباي** : Debye's phonon theory

افتراض ديباي أن الذبذبات الزرية فى المادة تكون طيف ترددات له قيمة معينة لا يزيد

عنها cut - off frequency وتتوقف على تركيب الشبيكة لهذه المادة .

وسمى كل موجه mode of vibration فونون phonon وقد اعتبر أن الحركة الذرية فى داخل المادة تأخذ شكلا موجيا وذلك بالنسبة لوجود قوى بينية كبيرة بين الذرات ، ولا يعقل أن تتحرك كل ذرة حركة فردية دون ارتباط بالذرات المحيطة بها ، فقد صور ديباي الحركة الذرية على أنها موجات أو فونونات لها ترددات تتراوح بين الصفر وقيمة عظمى لا تتعداها Cut - off frequency .

### طيف الترددات لديباي :

أثبت ديباي أن دالة الترددات بالنسبة للفونونات  $N(\nu)$  frequency distribution function تتناسب طرديا مع مربع التردد أى مع  $\nu^2$  وذلك كما يأتى :

اعتبر كتلة من المادة على شكل متوازى مستطيلات أبعاده هى :

a , b , c

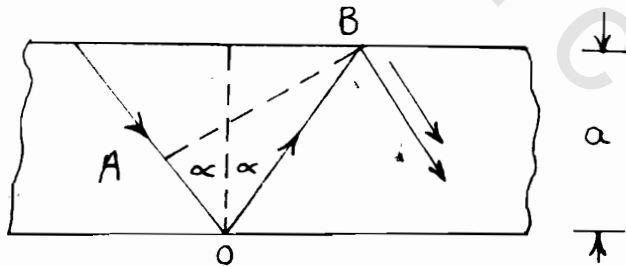
نفرض موجة صوتية ( فونون ) طول موجتها  $\lambda$  تنتقل فى المادة فى الاتجاه AO فى

شكل ( ١٦ - ٣ ) تنعكس على السطح الحر عند O ثم مرة أخرى عند B .

إذا تطابقت موجة ساقطة مع مثلتها التى انعكست مرتين وكانا فى اتجاه واحد نجد

أنهما يتحركان فى نفس الطور إذا كان فرق المسار عدد صحيح من طول الموجة أى أن

$$OA + OB = n\lambda$$



( شكل ١٦ - ٣ )



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 في 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  $\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3$  هي الزوايا التي تصنعها أحرف متوازي المستطيلات a b c

مع الاتجاه الموجي .

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  $\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3$  تساوى واحد .

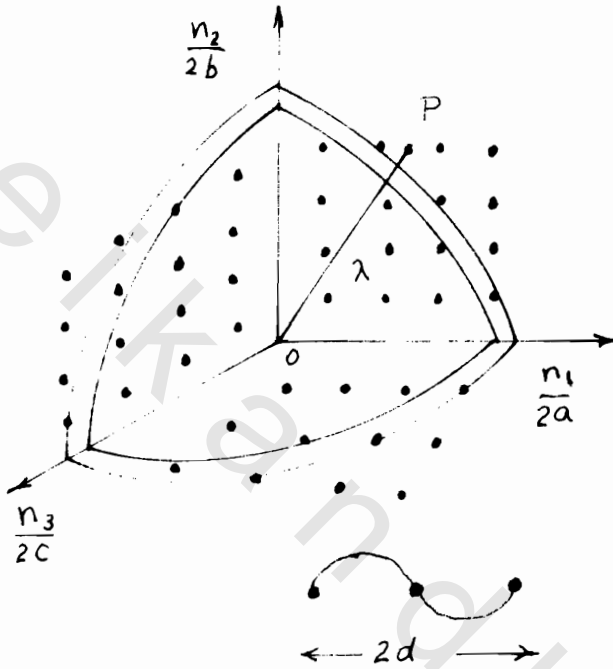
إذا رسمنا فراغ العدد الموجي space -  $\frac{1}{\lambda}$  وهو الفراغ الذي تكون إحداثياته

$$\frac{n_1}{2a}, \frac{n_2}{2b}, \frac{n_3}{2c} \quad \text{المتعامدة هي:}$$

تمثل أى نقطة في هذا الفراغ موجه ذات طول موجي معين  $\lambda$  انظر شكل ( ١٦ - ٤ )

ويطلق اسم فونون على مثل هذه الموجة phonon التي يتحدد طولها بالإعداد  $n_1 \cdot n_2 \cdot n_3$

وهي التي تحدد بعد النقطة P عن مركز الإحداثيات  $\left( OP = \frac{1}{\lambda} \right)$  تكون أبعد نقطة في هذا الفراغ عن المركز O هي التي لها أصغر طول موجي  $\lambda_{\min}$  ويحدد هذا الطول التركيب البلوري وأبعاد وحدة الخلية في المادة .



شكل (١٦ - ٤)

فإذا كان  $d$  هو البعد بين ذرتين متجاورتين في اتجاه معين تكون أقل طول موجة يمكن

لها أن تنتشر في هذا الاتجاه هي :  $\lambda_{\min} = 2d$

ويكون بذلك حدود فراغ العدد الموجي  $\left( \frac{1}{\lambda} - \text{space} \right)$  في هذا الاتجاه هو  $\frac{1}{\lambda_{\min}}$

ويطلق على مثل هذه الحدود في فراغ العدد الموجي بمنطقة بريلوين Brillouin zone وتعرف بأنها تلك المنطقة داخل فراغ العدد الموجي التي تحتوى بداخلها على جميع الفونونات الطبيعية بداخل البلورة .

علاقة ماديلنج Madelung relation :

إذا فرضنا أن منطقة بريلوين عبارة عن كرة مركزها O ونصف قطرها  $\frac{1}{\lambda_{\min}}$  يكون

العدد الكلى للفونونات داخل البلورة هو :

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

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

وقد ضربنا في  $\frac{1}{8}$  لأننا نعتبر فقط الثمن الموجب من فراغ  $\frac{1}{\lambda}$  وذلك منعاً لتكرار قيم

$\lambda$  حيث أن هناك في فراغ  $\frac{1}{\lambda}$  ثمانية نقط تمثل نفس الفونون . مثلاً :

وهكذا  $(-n_1, n_2, n_3), (n_1, n_2, n_3)$

وبما أن حجم البلورة أصلاً هو  $a b c$  فإن عدد الفونونات لوحدة الحجم من البلورة

هو :

$$N = \frac{4\pi}{3} \left( \frac{1}{\lambda_m} \right)^3 / c.c.$$

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

ولكن سرعة الصوت في المادة

$$C_0 = \lambda_{\min} v_{\max} \\ = \sqrt{G/\rho}$$

حيث  $G$  هو معامل الصلابة ،  $\rho$  هي كثافة المادة وتساوى  $N m$  لأن  $N$  هو عدد

المهتزازات لوحدة الحجم ،  $m$  هي الكتلة الذرية

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

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

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

وتعطي هذه المعادلة قيمة أكبر تردد للفونونات داخل البلورة أو بمعنى آخر حدود طيف

الترددات الداخلية .

وقد تمكن ماديلنج من استنتاج هذه العلاقة عمليا قبل أن تتبلور النظرية على الشكل

السابق وهذا الاتفاق بين التجربة والنظرية يحقق صحة النظرية .

ويلاحظ أن ماديلنج كان يوجد قيم  $m$  ،  $\rho$  ،  $G$  بالطرق المعتادة وكان يحسب  $v_{\max}$

عن طريق قياس تغير  $C_v / T$  عند درجات الحرارة المنخفضة وكذلك من معاملات المرونة .

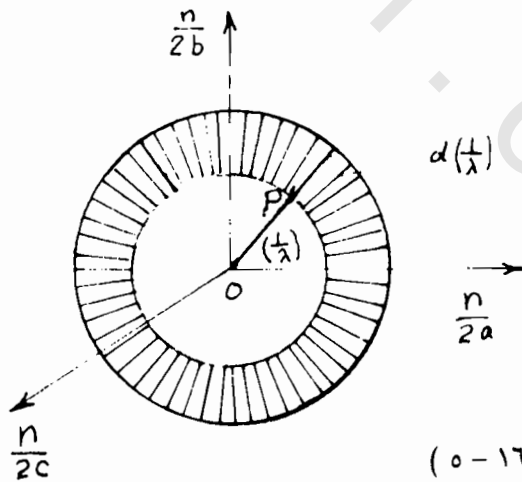
**دالة طيف التردد لديباي :**

لإيجاد دالة توزيع التردد  $N(\nu)$  للفونونات بدلالة التردد  $\nu$  نعتبر قشرة رقيقة في

فراغ  $1/\lambda$  مركزها  $O$  نصف قطرها  $\frac{1}{\lambda}$  وسمكها  $d \left( \frac{1}{\lambda} \right)$  ، شكل (١٦ - ٥) .

عدد الفونونات داخل القشرة تساوي

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



(شكل ١٦ - ٥)

وبالقسمة على حجم البلورة  $a b c$  نحصل على عدد الفونونات من هذه القشرة لكل

وحدة حجوم من البلورة وهذا يساوي :

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

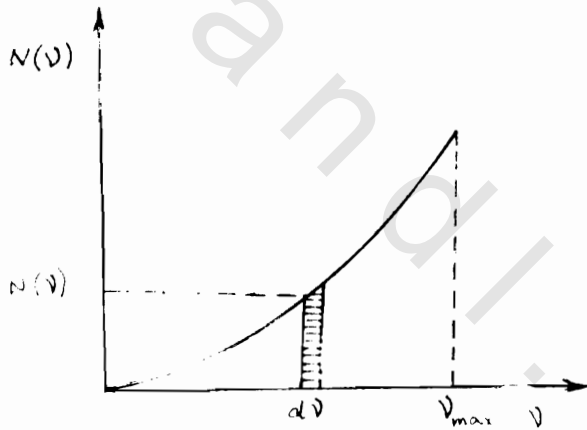
$$\therefore N(v) dv = \frac{4 \pi v^2}{C_0^3} dv$$

« وقد استعملنا هنا المعادلة  $v = \lambda \cdot C_0$  وتفاضلها لإيجاد  $d\lambda$ ,  $dv$  » المعادلة

السابقة تعطى  $N(v) \propto v^2$  أى أنها دالة قطع مكافئ يكون لها حدا لأقصى تردد cut - off frequency : ( $v_{\max}$ ) . ( شكل ١٦ - ٦ ) .

**نظرية ديبيى لحساب الحرارة الذرية  $C_v$  :**

تنتشر الاهتزازات الميكانيكية داخل أى مادة صلبة على شكل نوعين من الأمواج :



( شكل ١٦ - ٦ )

١ - أمواج مستعرضة سرعتها  $C_t = \sqrt{\frac{G}{\rho}}$  حيث  $G$  هى معامل الصلابة ،  $\rho$

كثافة المادة ويمكن اعتبار الموجة المستعرضة على أنها موجتين مستقطبتين فى اتجاهين متعامدين ( مثل الأمواج الكهرومغناطيسية ) .

٢- أمواج طولية سرعتها  $C_1 = \sqrt{(B + 4/3 G) / \rho}$  حيث B معامل المرونة

الحجمي .

عدد الأمواج ، مستعرضة وطولية ، والتي لها ترددات تقع بين  $v$  ،  $v + dv$  هي :

$$N(v) dv = 4 \pi v^2 \left( \frac{2}{C_1^3} + \frac{1}{C_1^3} \right) dv$$

وقد ضربنا  $\frac{1}{ct^3}$  في 2 ، حيث أن الموجة المستعرضة تعتبر اثنتين مستقطبتين .

العدد الكلي للأمواج أو الفونونات في وحدة الحجم من المادة هو :

$$\int 4 \pi v^2 \left( \frac{2}{C_1^3} + \frac{1}{C_1^3} \right) v^2 \cdot dv$$

ولابد أن يساوي هذا العدد  $3N$  أى يساوي العدد الكلاسيكي لدرجات الحرية ، ومن

الواجب أن يكون حد التكامل الأعلى  $v_m$  محدودا إذ أن عدد درجات الحرية أيضا محدودا .

إذا اعتبرنا  $\nu$  جم جزيء تكون  $N$  هي عدد أفوجادرو ويأجراء التكامل السابق نحصل

على :

$$v_m^3 = \frac{9N}{4\pi \left( \frac{2}{C_1^3} + \frac{1}{C_1^3} \right)}$$

وتعطي هذه المعادلة قيمة أقصى تردد  $v_m$  في طيف الترددات .

لإيجاد الطاقة الداخلية للجرام جزيء من المادة نضرب عدد الفونونات في الطاقة

الكمية quantized energy للمهتز التوافقي

$$\begin{aligned} \therefore U &= 4\pi \left( \frac{2}{C_1^3} + \frac{1}{C_1^3} \right) \int_0^{v_m} \frac{h v^3 dv}{(e^{hv/kT} - 1)} \\ &= \frac{9N}{v_m^3} \int_0^{v_m} \frac{h v^3 dv}{(e^{hv/kT} - 1)} \end{aligned}$$

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

$$C_v = \frac{9N}{v^3} \int_0^{v_m} \frac{h^2 v^4}{kT^2} \cdot e^{hv/kT} \cdot dv$$

$$d\zeta = \frac{h dv}{kT} \quad \text{نحصل على} \quad x = \frac{hv_m}{kT}, \quad \zeta = \frac{hv}{kT} \quad \text{وبوضع}$$

$$\therefore C_v = \frac{9Nk}{x^3} \int_0^x \frac{\zeta^4 e^\zeta d\zeta}{(e^\zeta - 1)^2}$$

وبإجراء التكامل بالتجزئة

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

$$\begin{aligned} \therefore C_v &= -\frac{9R}{x^3} \int_0^x \zeta^4 d\left(\frac{1}{e^\zeta - 1}\right) \\ &= \frac{9R}{x^3} \left( \int \frac{1}{e^\zeta - 1} d\zeta^4 - \left| \frac{\zeta^4}{e - 1} \right| \int_0^x \right) \\ &= \frac{9R}{x^3} \left( \int_0^x \frac{4\zeta^3 d\zeta}{(e^\zeta - 1)} - \frac{x^4}{e^x - 1} \right) \\ &= 3R \left( \frac{12}{x^3} \int \frac{\zeta^3 d\zeta}{e^\zeta - 1} - \frac{3x}{e^x - 1} \right) \\ &= 3R D(x) \\ &= 3R D\left(\frac{\theta}{T}\right) \end{aligned}$$

حيث  $D(x)$  هي دالة ديبياي .

وباعتبار حالات الحدود نجد أن عند درجات الحرارة المرتفعة تكون قيم كل من  $x$  ،  $\zeta$

صغيرة جدا ، وتؤول قيمة دالة ديبياي عندئذ إلى الواحد الصحيح .

وهذا يعني أن  $C_v = 3R$  عند الدرجات المرتفعة أي أن النظرية الكلاسيكية تنطبق

مع نظرية ديبيى عند الدرجات المرتفعة .

أما عند درجات الحرارة المنخفضة تكون قيم  $x$  ،  $\zeta$  كبيرة جدا وتؤول قيمة دالة ديبيى إلى الصفر .

حيث أن تغير المقام فى الدالة يكون بازدياد أكبر كثير من البسط لأنه يتبع لدالة أسية.

### قانون ديبيى $T^3$ عند الدرجات المنخفضة :

يمكن تقريب معادلة الحرارة الذرية لديبيى عند الدرجات المنخفضة كما يأتى :

١ - نهمل الحد الثانى فى دالة ديبيى إذ أن  $x$  تؤول إلى ما لا نهاية عند الدرجات المنخفضة جدا ( عند الصفر المطلق ) ويؤول الكسر .

$$\left( \frac{3x}{e^x - 1} \right) \text{ إلى الصفر إذ أن } e^x \text{ تزداد زيادة كبيرة بالنسبة إلى } x$$

٢ - يمكن إثبات رياضيا أن :

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \int_0^x \frac{\zeta^3 d\zeta}{e^\zeta - 1} = \frac{\pi^4}{15}$$

وبالتعويض فى معادلة ديبيى نحصل على الحرارة الذرية عند الدرجات المنخفضة .

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

وبما أن  $x = \frac{\theta}{T}$  حيث  $\theta$  هى درجة حرارة ديبيى المميزة .

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

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

أى أن الحرارة الذرية تتناسب مع مكعب درجة الحرارة المطلقة ( $T$  صغيرة) وتساوى

درجة حرارة ديبيى  $\theta = \frac{h\nu_m}{k}$  وهى تتوقف على المادة .

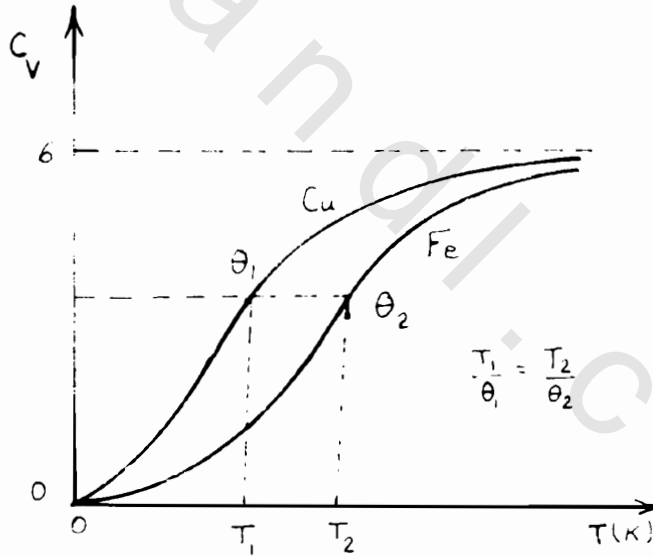


وقد وجد أن التقريب السابق يكون صحيحا في حدود ١٪ عندما تكون  $x > 12$  أى

عندما تكون درجة الحرارة  $\left( T < \frac{\theta}{12} \right)$  أقل من  $\frac{1}{12}$  من درجة ديباي المميزة .

### نقد نظرية ديباي :

- ١ - وجد بحساب دالة ديباي عند درجات الحرارة المختلفة أن هناك تطابقا بين النتائج النظرية والنتائج التجريبية لعدد كبير من المواد البسيطة وهذا يدعم صحة النظرية .
- ٢ - بمعرفة درجات الحرارة المميزة لديباي لمواد مختلفة يمكن استنتاج منحنى  $C_v / T$  لأي مادة بون قياس وذلك بمعرفة هذا المنحنى لأي مادة أخرى يسهل القياس عليها شكل (١٦ - ٧) . إذ أن درجتى الحرارة  $T_1$  .  $T_2$  التى تتساوى عندهما قيمة الحرارة الذرية  $C_v$  لمادتين مختلفتين ترتبط



شكل (١٦ - ٧)

بدرجات ديباي المميزة لهما  $\theta_1$  ؛  $\theta_2$  بالمعادلة

$$\frac{T_1}{\theta_1} = \frac{T_2}{\theta_2}$$

٣ - من أخطاء النظرية أنها تفترض وجود نوع واحد من اختزان الطاقة داخل المادة على شكل طاقة حركة تذبذبية للذرات المكونة لها ، ولكن تحدث حالات شاذة وانحراف عن صحة النظرية عند ادخال الطرق الأخرى الممكنة التي تختزن بواسطتها الطاقة مثل :

أ - يمكن أن يكون لجزيئات المادة درجة حرية دورانية .

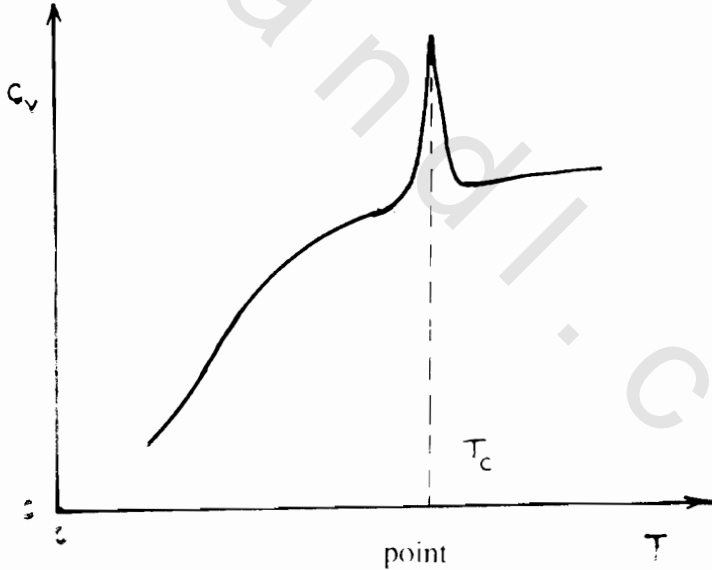
Rotational degree of freedom .

ب - يمكن للطاقة أن تختزن في حركة الإلكترونات .

ج - تتغير الطاقة عند حدوث تحول داخل المادة وتظهر حينئذ .

phase transformation .

ما يسمى بنقطة  $\lambda$  (  $\lambda$  - point ) على منحنى  $C_v / T$  . شكل ( ١٦ - ٨ )



شكل ( ١٦ - ٨ )

ومثال آخر : في حالة بعض السبائك مثل  $Cu_3 Au$  ،  $Cu Au$  والتي قد يحدث

لذراتها ترتيب يعقبه عدم ترتيب order-disorder هنا أيضا يلزم مقدار من الطاقة لتحويل

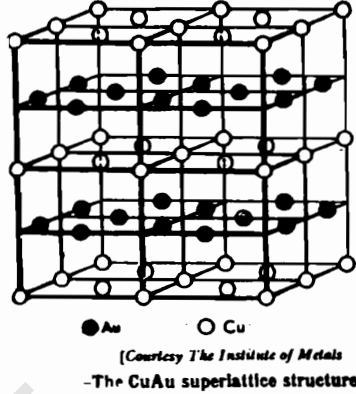
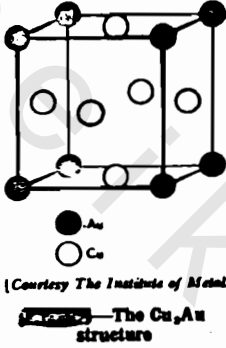
الشبيكة من الحالة المرتبة الى الحالة الغير مرتبة .

وشكل ( ١٦ - ٩ ) يبين ترتيب الذرات في الشبيكتين في الحالة المنتظمة ordered.

نفرض مثلا أن هناك طورين من أطوار المادة A & B حيث يكون A أكثر استقرارا

عند درجات الحرارة الأقل من  $T_c$  بينما يكون B مستقرا أعلى من  $T_c$

#### SUPERLATTICE STRUCTURES IN ALLOYS



شكل ( ١٦ - ٩ )

لتوضيح ذلك نفرض بلورة حرارتها الذرية  $C_p$  سخنت تحت ضغط فارتفعت درجة

حرارتها بمقدار  $dT$  . من قوانين الديناميكا الحرارية

التغير في الطاقة الحرة  $dF$  Free energy

$$\begin{aligned} dF &= d(U - TS) \\ &= dU - TdS - SdT \\ &= pdV - SdT \end{aligned}$$

التغير في الحجم  $dV$  في حالة الأجسام الصلبة يكون عادة صغيرا ولذلك يمكن إهمال

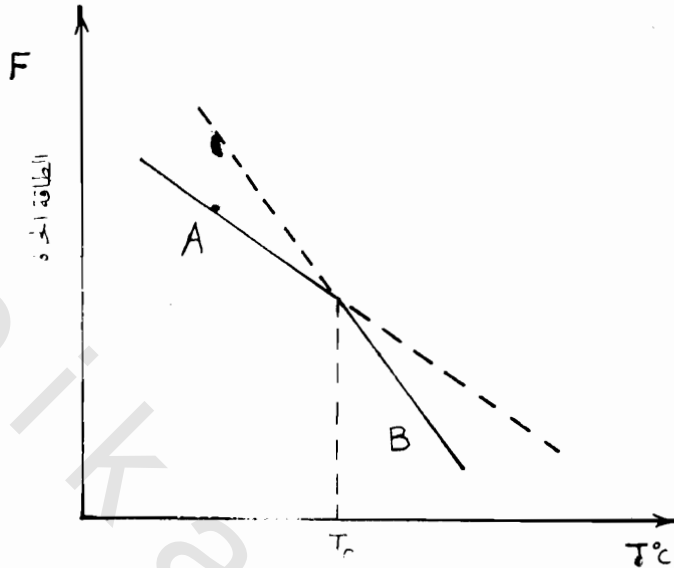
الحد  $pdV$

$$\therefore dF = -SdT$$

إذا كانت قيمة الطاقة الحرة عند درجة الصفر المطلق هي  $F_0$  والطاقة الداخلية هي

$E_0$  فإن تكامل المعادلة السابقة يعطى :

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



شكل (١٦ - ١٠)

وقد عوضنا هنا بدلا من  $dS$  بالمقدار  $\frac{dQ}{T}$  أى  $\frac{cdT}{T}$  والمعادلة السابقة تبين حدوث نقص فى الطاقة الحرة عند رفع درجة الحرارة ويكون النقص كبيرا كلما زادت قيمة الحرارة الذرية  $C_p$  ، شكل (١٦ - ١٠) .

وتبعا لقاعدة أقل طاقة حرة « Minimum free energy condition » الوضع المستقر هو الذى يكون فيه الطاقة الحرة أقل ما يمكن « لذلك نجد أنه عندما نرتفع بدرجة الحرارة عن  $T_c$  يصبح طور المادة B هو الأكثر استقرارا فتتحول إليه جميع المادة من الطور A ويصاحب هذا التحول امتصاص كمية من الطاقة هى التى تظهر على منحنى  $T/C_v$  على شكل  $\lambda$  - point .

### اهتزاز الشبكة وامتصاص البلورات للضوء

Lattice Vibrations and optical absorption of crystals .

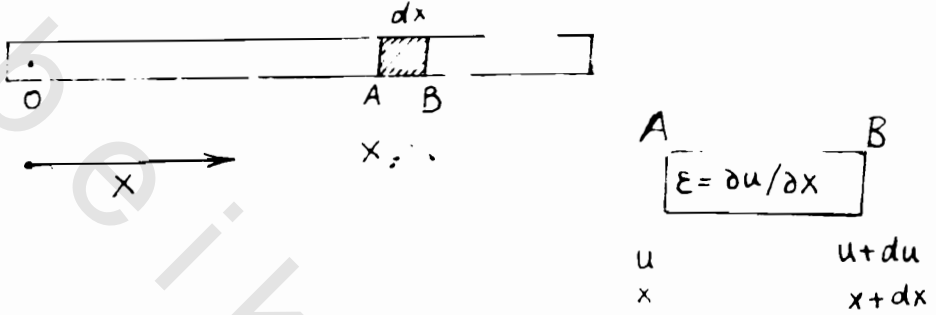
قبل معالجة اهتزاز الشبكة نبدأ أولا بدراسة :

## معادلة انتشار الأمواج في قضيب مرن :

اعتبر بلورة على شكل قضيب مرن متجانس ونفرض انتشار موجة في اتجاه طوله

(نعتبر هنا فقط الحالة الخطية) شكل ( ١٦ - ١١ ) .

نفرض  $\rho$  هي الكثافة الطولية للقضيب ،  $G$  هي معامل الصلابة



شكل ( ١٦ - ١١ )

نفرض جزءا صغير  $dx$  من القضيب يبعد مسافة  $x$  من مركز الإحداثيات الواقع في

نقطة ما على القضيب ، وأن الإزاحة عن وضع الاتزان عند مرور الموجه الميكانيكية هي  $u$

نفرض إزاحة الطرف  $A$  هي  $u$  وإزاحة الطرف  $B$  هي  $u + du$  :

التغير في طول الجزء  $dx$  هو  $du$  :

$$\epsilon = \frac{du}{dx} \quad \therefore \text{الانفعال الطولي الناشئ عن مرور الموجه هو :}$$

القوة المؤثرة والتي تسبب هذا الانفعال هي  $F = G \cdot \epsilon$  اعتبر الآن نقطتين على القضيب

البعد بينهما  $\Delta x$  فيكون الانفعال عند الأولى  $\epsilon(x)$  وعند الثانية  $\epsilon(x + \Delta x)$  وهذا

يساوي

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

$\therefore$  القوة المؤثرة على  $\Delta x$  هي :

$$G \left[ \varepsilon(x + \Delta x) - \varepsilon(x) \right] = G \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} \Delta x$$

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

∴ كتلة الجزء  $\Delta x$  تساوى  $\rho \Delta x$

وبوضع القوة = الكتلة  $x$  العجلة تكون معادلة الحركة الموجية فى القضيب هى :

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

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

حيث سرعة الأمواج  $C$  تعطى بالمعادلة  $C = \sqrt{G/\rho}$

حل المعادلة السابقة يكون على الصورة :

$$u = \eta e^{i(\omega t \pm kx)}$$

حيث  $\eta$  سعة الحركة ،

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \text{ ، } \omega = k \cdot c$$

وهو المتجه الموجى

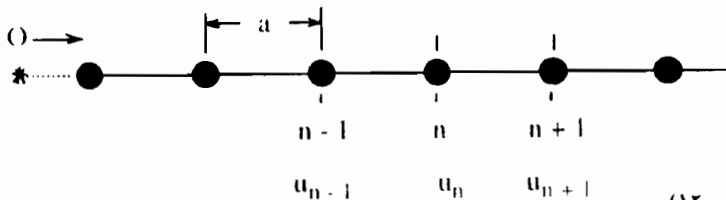
**الحركة الموجية على شبكة خطية أحادية الذرة mono atomic :**

اعتبر شبكة خطية مكونة من سلسلة من الذرات المسافة بين كل اثنتين متجاورتين هى

$a$  وأن كتلة كل ذرة هى  $M$  شكل ١٦ - ١٢ نأخذ نقطة ما على الشبكة كمركز إحداثيات

ونرقم الذرات ترقيميا متسلسلاً  $1, 2, 3, \dots, n, \dots$  ثم نعتبر حركة الذرات أثناء

انتشار الموجة .



نفرض أن  $u_n$  هي : إزاحة الذرة ذات الرقم  $n$

$u_{n+1}$  هي : إزاحة الذرة  $n + 1$

$u_{n-1}$  هي : إزاحة الذرة  $n - 1$  عن وضع الاتزان

الزيادة في طول الرابطة Bond length بين الذرتين  $n + 1$  ،  $n$  هو :

$$(u_{n+1} - u_n)$$

وباعتبار تأثير الجيران القريبة فقط من الذرة  $n$  تكون القوة  $F_n$  المؤثرة عليها هي :

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

حيث  $\beta$  هو ثابت القوة أى القوة لوحدة الاستطالة .

وبمقارنة هذه الحالة بالحالة الماكروسكوبية لقضيب نجد أن :

أولا : الكثافة الطولية  $\rho = \frac{M}{a}$  حيث  $a$  المسافة بين الذرتين المتتاليتين . وقد حصلنا

على هذه العلاقة باعتبار طول  $\lambda$  سم من الشبكة فيه عدد  $\frac{1}{a}$  ذرات كتلة كل منها هي  $M$

فيكون كتلة وحدة الأطوال  $\rho$  هي :  $\frac{M}{a}$  .

ثانيا : القوة اللازمة لكى تستطيل الرابطة هي :

$$F = \beta (u_n - u_{n-1}) = \beta \cdot \epsilon \cdot a$$

وذلك باعتبار أن الانفعال  $\epsilon$  هو التغير النسبى فى طول الرابطة :

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

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

ثالثا : تصبح معادلة الحركة هي :

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

حل المعادلة السابقة يكون على الصورة :

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

وقد استبدلنا الإحداثى  $x$  للذرة  $n$  بالمقدار  $n \cdot a$  فى المعادلة الموجية فى القضيب

المرن .

وبمفاضلة المعادلة السابقة مرتين بالنسبة للزمن وبالتعويض فى معادلة الحركة

التفاضلية نحصل على :

$$\begin{aligned} \ddot{u}_n &= i \omega u_n & u_n &= -\omega^2 u_n \\ \therefore -M \omega^2 u_n &= \beta [u_n e^{ika} + u_n e^{-ika} - 2u_n] \end{aligned}$$

ويكون حل المعادلة صحيحا فقط عندما تكون المعادلة السابقة صحيحة أى عندما

يكون:

$$\begin{aligned} -\omega^2 M &= \beta (e^{ika} + e^{-ika} - 2) \\ &= \beta (\cos ka + i \sin ka + \cos ka - i \sin ka - 2) \\ &= \beta (2 \cos ka - 2) \\ &= 4 \beta \left( \frac{\cos ka - 1}{2} \right) \\ &= -4 \beta \sin^2 \frac{ka}{2} \end{aligned}$$

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

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

وتسمى هذه العلاقة Dispersion relation علاقة التشتيت . وعند رسم بيانيا  $\omega$

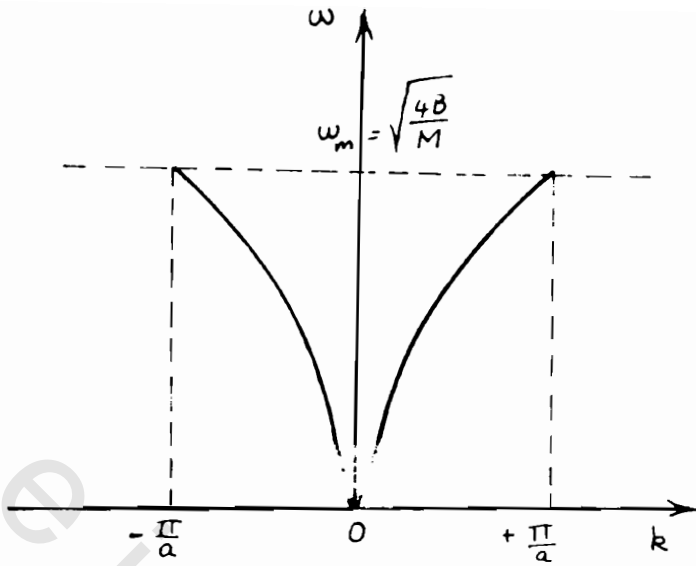
بدلالة  $k$  نحصل على منحنى ذى فرعين أحدهما موجب والاخر سالبا كما فى شكل ١٦-١٣ . ويلاحظ أن هناك حدا أقصى للترددات الموجية التى يمكن لها أن تنتشر على هذه

الشبيكة وهذه نحصل عليها بوضع القيمة القصوى لـ  $\sin ka / 2$  وهى الواحد الصحيح

∴ معادلة أكبر تردد هى :

$$\omega_m = \left( \frac{4 \pi}{M} \right)^{1/2}$$





شكل (١٦ - ١٣)

وهذه تناظر أكبر متجه موجي

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

ونستنتج من ذلك ما يأتي :

أولاً : بالنسبة للأمواج ذات الأطوال الكبيرة ( k تكون صغيرة ) يمكن اعتبار الجيب

مساوياً للزاوية أى أن :

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

وتصبح السرعة الزاوية :

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

لكن  $\beta = G/a$  وكذلك  $\rho = M/a$   $\therefore$  بالتعويض

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

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

حيث c هي السرعة الموجية على قضيب مرن مكافئ .

**ثانيا** : تعطى علاقة التشتيت نهاية قصوى للتردد عندما يكون  $k_m = \frac{\pi}{a}$  حيث يكون الجيب مساويا واحد .

$$k_m = \frac{2\pi}{\lambda_{\min}} = \frac{\pi}{a} \quad \text{أى أن اقصر طول موجة هو :}$$

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

وواضح أن أطوال الموجات الأقل من هذا لا تستطيع الانتشار فى هذه الشبكة .

$$10^8 \text{ cm} \cong \frac{\pi}{a} = k_m \quad \text{وبالنسبة للمواد المعتادة يكون}$$

ولكن سرعة الصوت تساوى تقريبا  $3 \times 10^5$  سم / ثانية لذلك تكون قيمة أكبر تردد

هى :

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

ويقع هذا التردد فى منطقة ترددات الأشعة تحت الحمراء ، ولكن هذه الموجات هى

موجات ميكانيكية وليست كهرومغناطيسية لذلك فمن الصعب جدا إثارة الشبكة لكى تهتز بهذه الترددات المرتفعة ، لأن أكبر تردد للمهتز الميكانيكى هو  $10^9$  ذبذبة / ثانية ، وقد أمكن الحصول عليه بواسطة بلورات من الكوارتز .

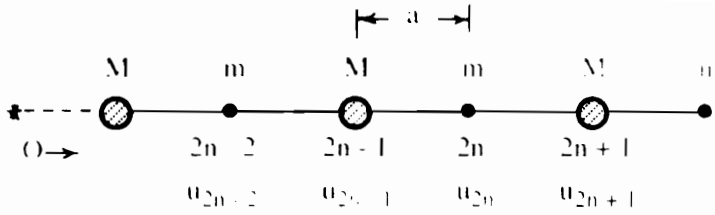
### ذبذبة الشبكة الخطية ثنائية الذرة

اعتبر شبكة خطية ثنائية الذرة diatomic linear lattice ( مثال ذلك بلورات

كلوريد الصوديوم NaCl ) نفرض أن كتلة نوعى الذرات المكونة للشبكة هى  $M$  ، وأن

المسافات بين الذرات هى  $a$  نفرض مركز إحداثيات ثابت على الشبكة ونجرى ترقيم الذرات.

تكون الذرات من نوع  $m$  موجودة فى المواضع الزوجيه مثلا :



شكل ( ١٦ - ١٤ )

$0, 2, 4, \dots, 2n, (2n + 2), (2n + 4), \dots$

بينما الذرات من نوع M تكون في المواضع الفردية :

$1, 3, 5, \dots, (2n - 1), (2n - 3), \dots$

انظر شكل ( ١٦ - ١٤ )

نعتبر فقط التأثير البيئي بين أقرب جيران ونهمل غير ذلك .

معادلة الحركة الموجية للذرات ( أو الأيونات ) من نوع m هي :

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

وبالمثل بالنسبة للأيونات من النوع M معادلة الحركة هي :

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

وحل المعادلتين السابقتين يكون على الصورة :

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

سعة الحركة للذرة m هي :  $\zeta$

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

سعة الحركة للذرة M هي :  $\eta$

ولإيجاد شرط أن تكون الحلول السابقة صحيحة نفاضل الحين ونوجد

وبالتعويض في المعادلات التفاضلية للحركة نحصل  $\ddot{u}_{2n}, \ddot{u}_{2n+1}, \dot{u}_{2n}, \dot{u}_{2n+1}$

على المعادلتين التاليتين :

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

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

يكون للمعادلتين السابقتين حلولا حقيقية إذا تلاشى المحدد من معاملات  $\zeta$  ،  $\eta$  أى أن:

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

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

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

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 بعلاقة التشتيت dispersion relation وقبل رسم العلاقة بين

$\omega$  ،  $k$  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 علاقة 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 لا نضع الجيب مساويا للصفر حتى لا

نحصل على قيمة صفرية لـ  $\omega$  ولذلك نعتبر  $\sin ka = ka$  فنحصل على :

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

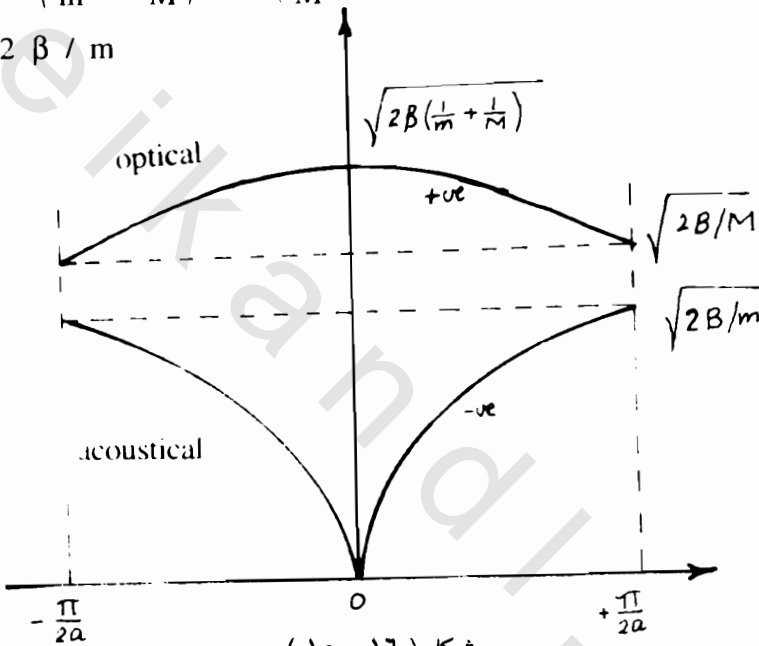
ثانيا : لقيم  $k$  الكبيرة (وأقصى قيمة لها هى  $k_m = \frac{\pi}{2a}$ )

أ - نعتبر الجزء الموجب من العلاقة ونضع قيمة الجيب مساوية للواحد الصحيح .

$$\begin{aligned} \therefore \omega_m^2 &= \beta \left( \frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) + \beta \left[ \left( \frac{1}{m} \right)^2 + \left( \frac{1}{M} \right)^2 + \frac{2}{mM} - \frac{4}{mM} \right]^{1/2} \\ &= \beta \left( \frac{1}{M} - \frac{1}{m} \right) + \beta \left( \frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) \\ &= 2 \beta / M \end{aligned}$$

ب - وعند اعتبار الجزء السالب نحصل على :

$$\begin{aligned} \omega_m^2 &= \beta \left( \frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) - \beta \left( \frac{1}{M} - \frac{1}{m} \right) \\ &= 2 \beta / m \end{aligned}$$



شكل (١٥ - ١٦)

ويرسم العلاقة بين  $\omega$  &  $k$  نحصل على منحنى ذى فرعين شكل (١٥ - ١٦) يسميان

عادة :

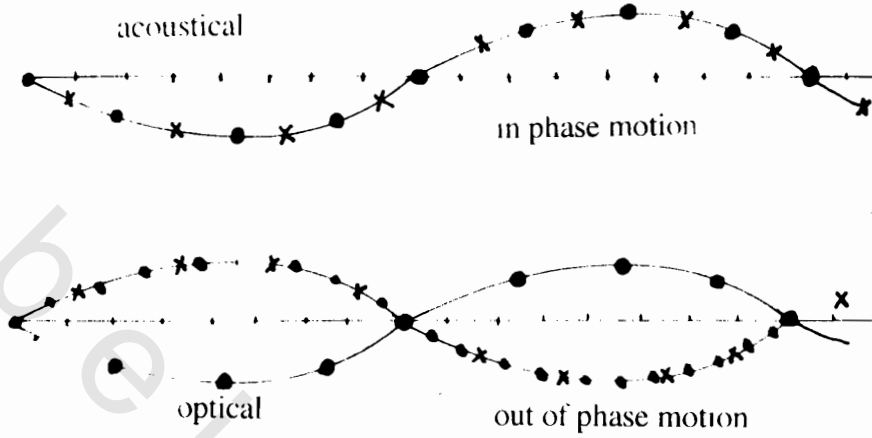
الفرع الصوتى : acoustical branch

والفرع الضوئى . optical branch

. ويمكن لنا فهم طبيعة هذين الفرعين إذا اعتبرنا حركة الذرات المختلفة فى الشبكة .

تتحرك الذرات فى الفرع الصوتى بنفس الطور أى أن الموجة تعتبر موجه طولية

ولهذا سميت صوتية وتكون حركة الذرات كلها فى طور واحد in phase شكل (١٦ - ١٦).



شكل (١٦ - ١٦)

أما بالنسبة للفرع الضوئى نجد أ الذرات تتحرك بحيث تكون عكسية فى الطور .  
anti-phase  
وهذا النوع من الأمواج مستعرض ويشبه الأمواج الكهرومغناطيسية ولذا سمي هذا  
الفرع بالضوئى .

ولإظهار تلك الحركات الذرية نوجد النسبة بين سعتي الحركة للذرتين  $M$  ,  $m$   
أى نوجد النسبة بين  $(\zeta , \eta)$  من معادلتى المحدد .

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

وتختصر هذه المعادلة للقيم الصغيرة لـ  $k$  إلى :

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

وباعتبار الفرع الضوئى حيث :

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

وبالتعويض نحصل على :

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

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

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

وباعتبار الفرع الصوتى حيث  $\omega_0 \rightarrow 0$  يكون :

$$\frac{\zeta}{\eta} = \frac{2\beta}{2\beta - 0} = 1$$

وهذا يدل على أن حركة الذرات جميعها فى نفس الطور .

**امتصاص البلورات للأشعة تحت الحمراء I R absorption :**

أمكن التحقق عمليا من صحة النظرية البسيطة السابقة عن اهتزاز الشبكة ، وذلك باعتبار تأثر شبكية خطية ثنائية الذرة عند تشعيها بأموج كهرمغناطيسية فى منطقة الأشعة تحت الحمراء ، شدتها :

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

التردد  $\omega$  لهذه الأشعة فى منطقة حول  $3 \times 10^{12}$  ذبذبة فى الثانية وطول موجتها

حوالى ١٠٠ ميكرون وهذا يعطى متجه موجى

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

وهذه القيم لـ k صغيرة جدا عند مقارنتها بقيمة أكبر متجه موجى لاهتزاز الشبكة .

$$k_m = \frac{\pi}{2a} = 10^6 / \text{cm} \quad \text{تقريبا}$$

ولذلك عند تشعيح الشبكة بأموج تحت الحمراء نعتبر علاقة التشتيت عندما يؤول

متجه الموجة إلى الصفر . dispersion relation .

يجب فى هذه الحالة تعديل معادلات الحركة للذرات وحلولها بحيث تتضمن حداً جديداً هو  $\pm e E_0$  يعبر عن القوة التى يؤثر بها المجال الكهرمغناطيسى للأشعة تحت الحمراء على أيونات الشبكة الموجبة والسالبة .

إذا كانت سعة شدة المجال الكهربى  $E_0$

Amplitude of the electric intensity

وكانت الشحنات على الأيونات المتجاورة هى  $\pm e$  فإن القوة المؤثرة عليها هى  $\pm e E_0$

ويصبح حلا المعادلتين الموجبتين للأيونين  $M, m$  هما

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

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

وعندما تكون  $k$  صغيرة تصبح المعادلتين

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

$$-\omega_0^2 M \eta = 2 \beta (\zeta - \eta) + e E_0$$

ويحل المعادلتين لإيجاد  $\eta, \zeta$  نجد أن :

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

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

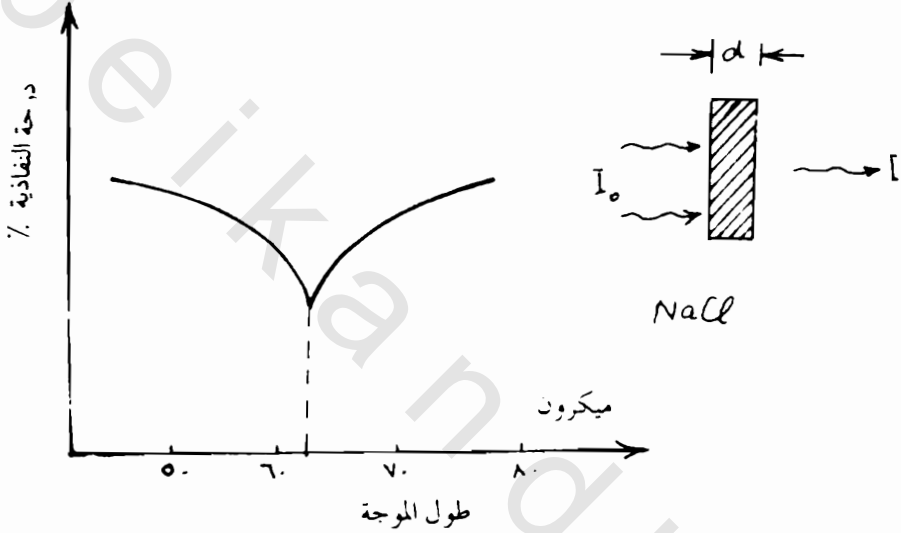
وهى القيمة التى تناظر  $k = 0$  أى عند حدود الفرع الضوئى optical branch .

من المعادلتين السابقتين يتضح حدوث أكبر سعة حركة للذرات عندما تقترب  $\omega$  من  $\omega_0$  وتمتص طاقة الحركة اللازمة للذرات عندئذ من طاقة الأشعة الساقطة ، وكلما ازدادت سعة الحركة كلما ازدادت درجة الامتصاص الداخلى للطاقة المستخدمة فى إثارة ذبذبات الشبكة .



## تطبيق على شبكة كلوريد الصوديوم :

عند تشعيع بلورة من كلوريد الصوديوم بأمواج تحت الحمراء وجد حدوث أكبر امتصاص أى أقل نفاذية عندما كانت أطوال الموجات الساقطة 61.1 ميكرون . شكل ( ١٦-١٧ ) كما لوحظ أيضا حدوث أكبر انعكاس للأشعة على سطح البلورة وهو ما يسمى Selective reflection عند طول موجة قريب من هذا ( حوالى 52 ميكرون )



شكل ( ١٦-١٧ )

ولكى نتمكن من مقارنة النظرية بالتجربة نعتبر معامل الصلابة  $C_{11}$  لبلورة كلوريد الصوديوم ويساوى  $5 \times 10^{11}$  دايين / سم<sup>2</sup> فى ( 3 - D ) ثابت القوة  $\rho$  للشبيكة الخطية ( 1 - D ) يساوى  $G / a$  حيث  $a$  هو البعد بين الذرات المتجاورة  $G$  هو معامل الصلابة الخطى . باعتبار البلورات الحقيقية يمكن اعتبار أن هناك عدد  $\frac{1}{a^2}$  شبيكة خطية فى كل وحدة مساحات ( انظر شكل ١٦ - ١٨ )

$$\beta_{3-D} = a \cdot C_{11} \quad \text{يكون ثابت القوة}$$



شكل (١٦ - ١٨)

$$\beta_{3-D} = \frac{C_{11}}{a} / \frac{1}{\alpha^2} = a \cdot C_{11}$$

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

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

$$\beta = 1.5 \times 10^4 \text{ dyn / cm}$$

ومن النظرية السابقة

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

حيث  $m$  كتلة ذرة الصوديوم وتساوي 23 وحدة كتلة ذرية

$M$  كتلة ذرة الكلور وتساوي 35.5 وحدة كتلة ذرية وبمعرفه أن وحدة الكتلة الذرية

$$= 1.67 \times 10^{-24} \text{ جم تكون}$$

$$\omega_0^2 = 2 \times 1.5 \times 10^4 \times \left( \frac{1}{35.5} + \frac{1}{23} \right) \times \frac{1}{1.67 \times 10^{-24}}$$

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

لكن باعتبار التردد  $f_0$  تكون

$$\omega_0 = 2 \pi f_0$$

أيضا :

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

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

أى أن طول الموجة الذى يحدث عنده أكبر سعة حركة للذرات ، وبالتالي أكبر امتصاص لطاقة الأشعة هو 50 ميكرون بينما القيمة المناظرة لذلك مقاسة فى المعمل هى 61.1 ميكرون وتعد هذه النتيجة العملية محققة للنظرية .

وعموماً يكون لكل البلورات الأيونية التى يمكن تطبيق عليها نظرية الشبكة ثنائية الذرة ، يكون لها امتصاص مميز فى منطقة الأشعة تحت  $\text{characteristic absorption}$  الحمراء .

## مسائل علي الباب السادس عشر

١ - تمتص بلورة من كلوريد الصوديوم الأشعة تحت الحمراء امتصاصا شاذا عند طول الموجة  $50 \mu$  . احسب البعد الشبكي للبلورة ؟

الوزن الذرى للكور 35.5 وللصوديوم 23  
معامل صلابة كلوريد الصوديوم  $5 \times 10^{11}$  دايين / سم<sup>٢</sup> .

٢ - شبكية خطية أحادية الذرة بعدها الشبكي  $5 \text{ \AA}$  . إذا كانت سرعة انتشار الأمواج فيها  $3 \times 10^5 \text{ cm/s}$  . أوجد أكبر تردد لها ؟

٣ - يبين الجدول التالي السعة الحرارية الجزيئية C لشبكية من % 10 فانيديوم 90 % كروم بالقرب من درجة الصفر المطلق .

T K	1.45	1.5	1.618	1.824	2.106	2.994	3.236	3.637	3.848	4.073	°K
C	7.57	7.94	9.67	9.67	11.2	16.5	18	20.6	22	23.6	cal/g mole K

ارسم العلاقة بين ( C / T ) بدلالة ( T<sup>2</sup> ) ، وأثبت أن القراءات تحقق العلاقة

$$C = \gamma T + \infty T^3$$

ثم أوجد الثوابت (  $\gamma, \infty$  ) وما يمكن استنتاجه منهما من ثوابت طبيعية .

٤ - أوجد قيمة تقريبية للتردد الذرى فى النحاس إذا علم أن معامل يونج لمرونة النحاس  $25 \text{ N.m}^2$  والوزن الذرى له 63.5 .

٥ - اشرح مستعينا بمبادئ الديناميكا الحرارية لماذا تتحول المادة الصلبة من طور

إلى آخر عند رفع درجة الحرارة ؟ ثم عرف نقطة  $\lambda$  . point -  $\lambda$  ؟

٦ - احسب السعة الحرارية للغاز الإلكتروني في النحاس عند درجة حرارة الغرفة .  
 اعتبر الكترونا واحدا حرا في كل ذرة ، ثم قارن هذه القيمة بقيمة السعة الحرارية  
 المقاسة عمليا  $2.4 \times 10^4 \text{ J (kg mole)}^{-1} \text{ K}^{-1}$

٧ - أوجد الحرارة الذرية لكل من الألومنيوم والنحاس عند درجة  $1 \text{ K}$  .  
 درجة حرارة ديباي  $\theta (\text{Cu}) = 315$  ;  $\theta (\text{Al}) = 398$   
 قارن هذه القيم بالحرارة الذرية الإلكترونية عند نفس الدرجة  
 طاقة فيرمي  $E_F (\text{Cu}) = 7.1 \text{ eV}$  ;  $E_F (\text{Al}) = 11.7 \text{ eV}$

٨ - اعتبر شبكة خطية من  $N$  ذرات . ماذا يكون التوزيع الطيفي للترددات باعتبار  
 تقريب ديباي ؟ افترض أن سرعة الصوت  $V_0$  وارسم هذا التوزيع بيانيا ؟  
 ماذا يكون أكبر تردد لانتشار الفوتونات على الشبكة ؟ أوجد الطاقة الداخلية للشبكة  
 $U$  عند درجة الحرارة  $T$  ، ثم أثبت أن الحرارة الذرية لهذه الشبكة عند الدرجات المنخفضة  
 تتناسب طرديا مع درجة الحرارة المطلقة  $T$  . ؟

obeikandi.com