

## الفصل الأول: النظرية الكلاسيكية للبلورة التوافقية

### 1.1 التقريب التوافقي:

في الواقع لا يمكن إعتبار أن ذرات الشبكة البلورية ثابتة في مواقع برافي لأنها تهتز و هذا الإهتزاز هو ظاهرة نشطة حراريا. إن أخذ بعين الإعتبار اهتزاز الشبكات يعتمد على وجود البلور (شبكة برافي) و أن الطاقة الكلية الناتجة عن الإهتزاز (حركية و كامنة) تبقى صغيرة مقارنة مع طاقة الربط. و حتى يتحقق ذلك نفترض أن الإهتزازات صغيرة أي أن سعة الإهتزاز أقل بكثير من متوسط المسافة الفاصلة بين الذرات. أما إذا كان غير ذلك فإن البلور يقترب من مرحلة ذوبانه و تفكك الروابط الذرية. إذن في كل ما يلي سنعتبر :

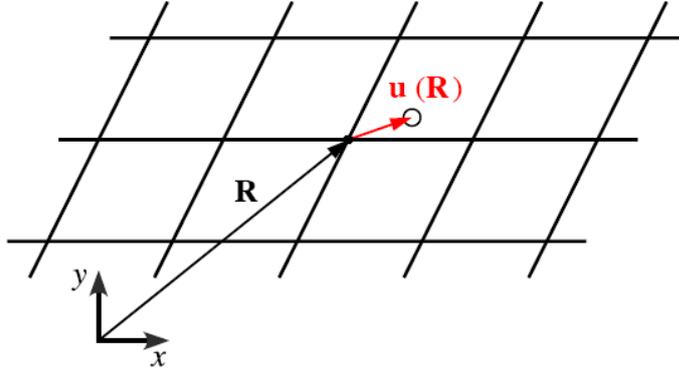
أ. وجود شبكة برافي حيث تمثل العقد أو مواقع برافي مواضع الإلتزان للذرات المهتزة.

ب. إنزياحات الأيونات عن مواضع اتزانها أو سعة الإهتزاز أثناء الحركة صغيرة مقارنة مع الفاصلة الذرية و هو ما يسمى بالتقريب التوافقي.

نعتبر أن الموضع اللحظي للأيون المهتز هو  $\vec{r}(\vec{R})$  حول الموضع الإلتزاني  $\vec{R}$  إذن :

$$\vec{r}(\vec{R}) = \vec{R} + \vec{u}(\vec{R}) \quad 1.1$$

حيث  $\vec{u}(\vec{R})$  هو انزياح الأيون عن موضع إلتزانه.



الشكل-1-: الموضع اللحظي للأيون المهتز.

إذا افترضنا أن كل ثنائية من الذرات المنفصلتين عن بعضهما البعض بمسافة  $r$  تساهمان في الطاقة الكامنة الكلية للبلور بالمقدار  $\Phi(r)$  , إذن فالطاقة الكامنة الكلية للبلور هي ببساطة مجموع مساهمات كل الثنائيات. في حال سكون الشبكة فإن الطاقة الكامنة الكلية هي :

$$U = \frac{N}{2} \sum_R \Phi(R) = \frac{1}{2} \sum_{R,R'} \Phi(R - R') \quad 1.2$$

ذلك أن المسافة الفاصلة بين ذرتين هو شعاع من أشعة برافي. أما في حال اهتزاز الشبكة فإننا نعتبر الموضع اللحظي عوض موضع الإلتزان

$$U = \frac{1}{2} \sum_{R,R'} \Phi(r - r') = \frac{1}{2} \sum_{R,R'} \Phi(R + u(R) - R' - u(R')) \quad 1.3$$

## الفصل الأول: النظرية الكلاسيكية للبلورة التوافقية

إن الطاقة الكلية حركية و كامنة أو ما يسمى أيضا بالهاملتوني تكتب بالشكل:

$$H = T + U = \sum_R \frac{\vec{p}(r)^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{R,R'} \Phi(r - r') \quad 1.4$$

بما أن الإنزياحات صغيرة مقارنة مع الفاصلة الذرية يمكن نشر الطاقة الكامنة حول قيمتها في حالة الإتزان حسب نشر تايلور و الإكتفاء بالرتبة الثانية للنشر التي تعبر عن الحد التوافقي:

$$\begin{aligned} \Phi(R - R' + u(R) - u(R')) &= \Phi(R - R') \\ + (u(R) - u(R')) \nabla \Phi(R - R') &+ \frac{1}{2} \left( (u(R) - u(R')) \nabla \right)^2 \Phi(R - R') \end{aligned} \quad 1.5$$

و منه فعبارة الطاقة الكامنة الكلية :

$$\begin{aligned} U &= \frac{1}{2} \sum_{R,R'} \Phi(R - R') + \frac{1}{2} \sum_{R,R'} (u(R) - u(R')) \nabla \Phi(R - R') \\ + \frac{1}{4} \sum_{R,R'} \left( (u(R) - u(R')) \nabla \right)^2 \Phi(R - R') \quad 1. \end{aligned} \quad 6$$

الحد الأول يمثل الطاقة الكامنة الكلية في حال سكون الشبكة في حال الإتزان. الحد الثاني هو مجموع مشتقات الطاقة الكامنة في حالة الإتزان أي مجموع القوى في حالة الإتزان و الذي لا يمكن إلا أن يكون معدوما. أما الحد الثالث فهو المشتقة الثانية للطاقة و هو الحد التوافقي للطاقة الكامنة. إن عبارة الطاقة الكامنة في حالة الإهتزاز:

$$U = U^{eq} + U^{harm} \quad 1. \quad 7$$

حيث:

$$\begin{aligned} U^{harm} &= \frac{1}{4} \sum_{R,R'} \left( (u(R) - u(R')) \nabla \right)^2 \Phi(R - R') \\ &= \frac{1}{4} \sum_{R,R'} \sum_{\mu,\nu=x,y,z} \left( u_\mu(R) - u_\mu(R') \right) K_{\mu,\nu}(R - R') \left( u_\nu(R) - u_\nu(R') \right) \end{aligned} \quad 1.8$$

حيث  $K_{\mu,\nu}(R - R') = \frac{\partial^2}{\partial \mu \partial \nu} \Phi(R - R')$  هي المشتقة الثانية للطاقة الكامنة في حالة الإتزان و تمثل ثابت الصلابة للناض المثالي.

بترتيب المجموع في الحد التوافقي يمكن إعادة كتابة الحد التوافقي للطاقة كما يلي:

$$U^{harm} = \frac{1}{2} \sum_{R,R'} u_\mu(R) D_{\mu\nu}(R - R') u_\nu(R') \quad 1.9$$

حيث :  $D_{\mu\nu}(R - R') = \delta_{RR'} \sum_{R'} K_{\mu\nu}(R - R'') - K_{\mu\nu}(R - R')$  ;  $\mu, \nu = x, y, z$

يمكن تبسيط العلاقات أعلاه بالنسبة لشبكة خطية كما يلي:

## الفصل الأول: النظرية الكلاسيكية للبلورة التوافقية

بما أن الشبكة أحادية البعد فإن كل إزاحة  $u(R)$  لا تملك إلا مركبة واحدة و المصفوفة  $K_{\mu\nu}$  تختصر إلى قيمة سلمية. الموضع اللحظي لكل أيون هو:  $r_j = R_j + u_j; R_j = j \cdot a$  و منه فالطاقة الكامنة التوافقية تصبح:

$$U^{harm} = \frac{1}{4} \sum_{j,j'} K(R_j - R_{j'}) (u_j - u_{j'})^2 \quad 1.10$$

إذا ما إفترضنا أن التأثير القوي هو تأثير الجوار الأقرب فإن ثابت الصلابة  $K(R_j - R_{j'}) = K(\pm a)$  يكتب ببساطة  $K$ :

$$K(R_j - R_{j'}) = \begin{cases} K; & |j - j'| = 1 \\ 0; & |j - j'| \neq 1 \end{cases}$$

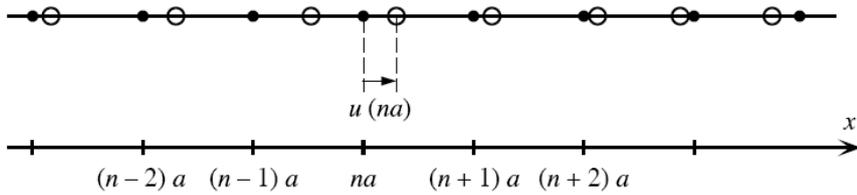
و الجمع  $\sum_{j,j'}$  يختصر إلى حدين  $j+1; j-1$  يشتركان في نفس الـ  $K$  و منه فالطاقة الكامنة التوافقية للشبكة الخطية أحادية الذرة تختصر إلى:

$$U^{harm} = \frac{1}{4} \sum_j K (u_j - u_{j-1})^2 + K (u_j - u_{j+1})^2 = \frac{1}{2} \sum_j K (u_j - u_{j+1})^2 \quad 1.11$$

### 2.1 الأنماط الطبيعية لإهتزاز شبكة خطية أحادية الذرة :

نعتبر مجموعة من الأيونات بكتلة  $M$  موزعة طوليا و منفصلة عن بعضها البعض بالفاصلة الذرية  $a$ . أشعة برافي لهذه الشبكة هي إذن  $R = na$  حيث  $n$  عدد صحيح. ليكن  $u(na)$  الإنزياح الطولي للأيون عن موضع توازنه ( $R = na$ ) و تفرض أن التفاعلات المعتبرة تقتصر على الأيونين المتجاورين. الطاقة الكامنة عند الموضع  $na$  هي :

$$U^{harm}(na) = \frac{1}{2} K (u(na) - u((n-1)a))^2 + \frac{1}{2} K (u(na) - u((n+1)a))^2 \quad 1.12$$



الشكل-2:- تمثيل إهتزاز شبكة خطية بقاعدة أحادية الذرة.

حيث  $K = \frac{\partial^2 \phi}{\partial u(na)^2}$  هيث معامل المرونة.

تكتب معادلة الحركة للأيون المهتز حول الموضع  $na$  كما يلي:

$$M\ddot{u}(na) = F = - \frac{\partial U^{harm}}{\partial u(na)} \quad 1.13$$

الفصل الأول: النظرية الكلاسيكية للبلورة التوافقية

$$M\ddot{u}(na) = -\frac{\partial}{\partial u(na)} \left[ \frac{1}{2}K \left( u(na) - u((n-1)a) \right)^2 + \frac{1}{2}K \left( u(na) - u((n+1)a) \right)^2 \right]$$

$$M\ddot{u}(na) = -K[2u(na) - u((n-1)a) - u((n+1)a)] \quad 1.14$$

تخضع الأيونات المهتزة إلى الشروط الحدودية الدورية لبورن-فان كارمن. بالنسبة لشبكة خطية تحتوي على  $N$  ذرة نعبر عن هذه

$$u((N+1)a) = u(a); u(Na) = u(0)$$

تقبل المعادلة التفاضلية حولا من الشكل :  $u(na, t) \propto \expi(kna - \omega t)$

و بإخضاع الحلول للشروط الحدودية الدورية نجد أن:  $\expi(kNa) = 1$

و منه  $k = \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{m}{N}$  أي أن قيمة مسموحة لـ  $k$  تكون ضمن المجال  $\Delta k = \frac{2\pi}{aN}$  و منه في المجال  $\frac{2\pi}{a}$  يوجد  $N$  قيمة مسموحة لـ  $k$

بنفس عدد الخلايا الأساسية التي تتطابق مع عدد الذرات في الشبكة البسيطة . من ناحية أخرى نعلم أن  $\frac{2\pi}{a}$  تمثل حدود منطقة بريلمان

الأولى للشبكة الخطية إذن فجميع القيم المسموحة لـ  $k$  موجودة داخل منطقة بريلمان الأولى و كذلك الحال بالنسبة للحلول

$$. u(na, t) \propto \expi(kna - \omega t)$$

بتعويض الحل المقترح في المعادلة التفاضلية للحركة نجد:

$$\begin{aligned} -M\omega^2 \expi(kna - \omega t) &= -K[2 - \exp(-ika) - \exp(+ika)] \expi(kna - \omega t) \\ &= -2K[1 - \cos(ka)] \expi(kna - \omega t) \end{aligned} \quad 1.15$$

$$\omega^2 = \frac{2K}{M} [1 - \cos(ka)] = \frac{4K}{M} \sin^2 \left( \frac{ka}{2} \right) \Rightarrow \omega = 2 \sqrt{\frac{K}{M}} \left| \sin \left( \frac{ka}{2} \right) \right| : \quad 1.16 \quad \text{و منه}$$

تسمى العلاقة  $\omega(k) = 2 \sqrt{\frac{K}{M}} \left| \sin \left( \frac{ka}{2} \right) \right|$  بعلاقة التبدد لأنماط الإهتزاز. و عدد أنماط الأهتزاز هو أيضا  $N$  حسب القيم

المسموحة لـ  $k$ . تصف علاقة التبدد ترددات الموجة الطولية المنتشرة على طول الشبكة بدلالة شعاع الموجة.

تتميز أمواج الإهتزاز أيضا بسرعة الطور  $v_{ph}$  و سرعة المجموعة  $v_g$ . تعبر سرعة الطور عن السرعة التي ينتقل بها طور الموجة.

سرعة الطور هي ببساطة طول الموجة على دور الموجة :

$$v_{ph} = \frac{\lambda}{T} = \frac{\omega}{k} \quad 1.17$$

أما سرعة المجموعة فهي السرعة التي تنتقل بها حزمة الموجة ككل و يشترط مفهوم سرعة المجموعة أن يتغير التردد مع شعاع

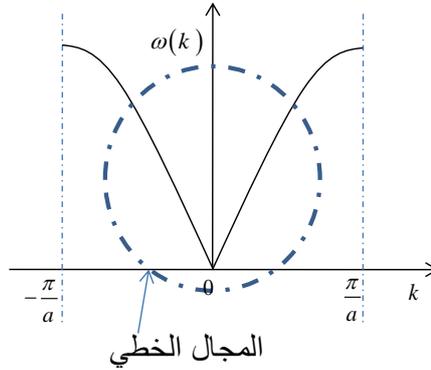
الموجة. سرعة المجموعة تعبر عن تغيرات التردد مع شعاع الموجة :

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} \quad 1.18$$

## الفصل الأول: النظرية الكلاسيكية للبلورة التوافقية

نوضح في الشكل 3 تغيرات التردد مع شعاع الموجة  $k$ . تنتقل الموجة طوليا عبر السلسلة الخطية بسرعة طور  $v_p$  و سرعة مجموعة  $v_g$ . عندما يكون  $k$  أقل بكثير من  $\frac{\pi}{a}$  ( $k = \frac{2\pi}{\lambda} \ll \frac{\pi}{a}$ ) أي أن طول الموجة  $\lambda$  أكبر بكثير من الفاصلة الذرية  $a$ , يتغير التردد  $\omega$  خطيا مع شعاع الموجة  $k$ :

$$\left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right| \approx \frac{a}{2} \cdot |k| \Rightarrow \omega = a \sqrt{\frac{K}{M}} \cdot |k| \quad 1.19$$



الشكل-3:- تغيرات منحنى التردد في منطقة برييلوان الأولى

و هذا هو السلوك الإعتيادي لتردد الأمواج المرنة (مثل الأمواج الصوتية) المنتشرة في وسط مستمر. في المجال الخطي تتساوى سرعة الطور مع سرعة المجموعة و كليهما مستقل عن التردد:

$$v_p = v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{\omega}{k} = a \sqrt{\frac{K}{M}} \quad 1.20$$

من خصائص الأمواج المنتشرة في وسط متقطع أن التناسب الخطي لا يدوم من أجل أطوال الموجة القصيرة المقاربة للفاصلة الذرية. يتناقص التردد عن التغيرات الخطية عندما يزداد  $k$  أي تنقص  $\lambda$  و يصبح منحنى التردد مسطحا بالقرب من حدود منطقة برييلوان الأولى بمعنى آخر تنعدم سرعة المجموعة ( $\frac{\partial \omega}{\partial k} = 0$ ) لما  $k = \frac{\pi}{a}$  مما يعني أن الموجة لا تنتشر (مستقرة عند  $k = \frac{\pi}{a}$ ) و نفس ذلك بوجود ذرات متتابة و تهتز على تعاكس.



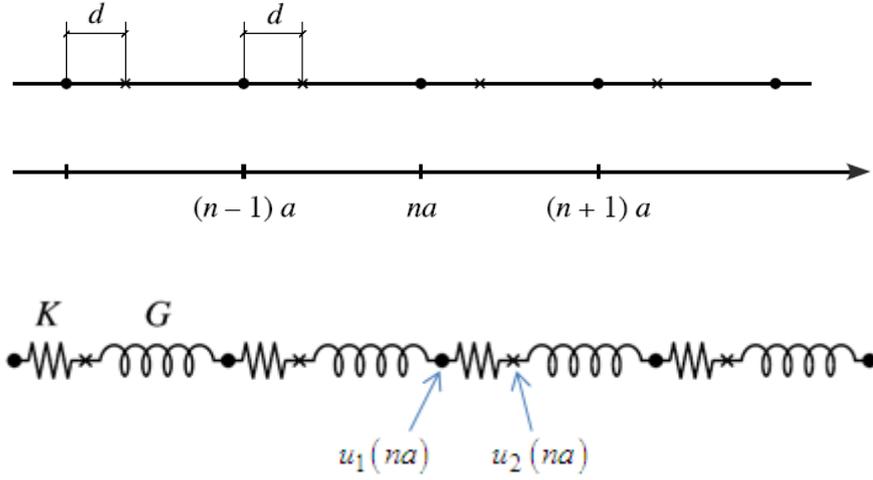
الشكل-4:- تعاكس إهتزاز الذرات المتتابة.

### 3.1 الأنماط الطبيعية لإهتزاز شبكة خطية بقاعدة ثنائية الذرة :

تكون علاقات التردد نوعيا مختلفة بالنسبة للبلورات التي تحتوي خليتها الأولية على ذرتين أو أكثر، مثلما هي الحال في البلورات الأيونية مثل  $NaCl$  أين تحتوي القاعدة على ذرتين مختلفتين، أو بلورات الماس و الجرمانيوم أين تحتوي القاعدة على ذرتين

## الفصل الأول: النظرية الكلاسيكية للبلورة التوافقية

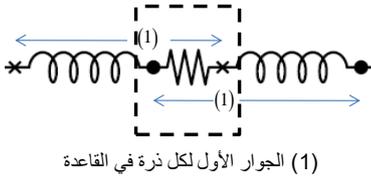
متماثلتين. لدراسة هذه الحالة نفرض فيما يلي شبكة برافي أحادية البعد بقاعدة مكونة من ذرتين متماثلتين في الخلية الأولية بالوضع الإتزان  $na + d$  و  $na$  حيث  $d \leq \frac{a}{2}$ . القوة بين الأيونين المتجاورين متعلقة بالمسافة بينهما  $d$  أو  $a - d$ .



الشكل-5:- شبكة خطية بقاعدة مكونة من ذرتين متماثلتي الكتلة.

للتبسيط نفرض أن التفاعل المعتبر هو مع الجوار الأقرب و أن ثوابت المرونة بين ذرتي القاعدة الواحدة و بين قاعدتين متجاورتين هما على التوالي  $K$  و  $G$ . في الموضع  $na$  تأخذ الطاقة الكامنة التوافقية العبارة التالية:

$$U^{harm}(na) = \frac{G}{2} (u_1(na) - u_2((n-1)a))^2 + \frac{K}{2} (u_1(na) - u_2(na))^2 + \frac{G}{2} (u_2(na) - u_1((n+1)a))^2 \quad 1.21$$



بما أن  $a - d > d$  فإن معامل المرونة  $K > G$ .

تكتب معادلتي الحركة للأيونين  $u_1(na)$  و  $u_2(na)$  على التوالي

كما يلي:

$$M\ddot{u}_1(na) = -\frac{\partial U^{harm}}{\partial u_1(na)} = -K[u_1(na) - u_2(na)] - G[u_1(na) - u_2((n-1)a)] \quad 1.22.a$$

$$M\ddot{u}_2(na) = -\frac{\partial U^{harm}}{\partial u_2(na)} = -K[u_2(na) - u_1(na)] - G[u_2(na) - u_1((n+1)a)] \quad 1.22.b$$

نبحث من جديد عن حلول من الشكل :

$$u_1(na) = \epsilon_1 \expi(kna - \omega t); u_2(na) = \epsilon_2 \expi(kna - \omega t) \quad 1.23$$

حيث تمثل  $\epsilon_1; \epsilon_2$  سعتي الإهتزاز للأيونين في القاعدة. كما هي الحال للشبكة الخطية فإن الشروط الحدودية الدورية تعطي قيمة  $N$  مختلفة ل  $k$  المعطاة بالعلاقة السابقة  $k = \frac{2\pi m}{Na}$  بنفس عدد الخلايا الأساسية.

إذا عوضنا بالحلين 1.23 في معادلتي الحركة , فإننا نحصل على جملة معادلتين من الشكل:

الفصل الأول: النظرية الكلاسيكية للبلورة التوافقية

$$[M\omega^2 - (K + G)]\epsilon_1 + [K + G \exp(-ika)]\epsilon_2 = 0 \quad 1.24.a$$

$$[K + G \exp(ika)]\epsilon_1 + [M\omega^2 - (K + G)]\epsilon_2 = 0 \quad 1.24.b$$

يكون لهذه الجملة حل إذا انعدم محدد المعاملات  $\epsilon_1; \epsilon_2$  :

$$\begin{aligned} [M\omega^2 - (K + G)]^2 &= [K + G \exp(-ika)] \cdot [K + G \exp(ika)] = [K + G \cdot \cos(ka) - iG \cdot \sin(ka)] \cdot \\ &[K + G \cdot \cos(ka) + iG \cdot \sin(ka)] = (K + G \cdot \cos(ka))^2 + G^2 \sin^2(ka) = K^2 + G^2 + 2KG \cdot \\ \cos(ka) &= |K + G \exp(ika)|^2 \end{aligned} \quad 1.25$$

$$[M\omega^2 - (K + G)] = \pm |K + G \exp(ika)| = \pm \sqrt{K^2 + G^2 + 2KG \cdot \cos(ka)}$$

$$\omega^2 = \frac{(K + G)}{M} \pm \frac{1}{M} \sqrt{K^2 + G^2 + 2KG \cdot \cos(ka)}$$

$$\omega_1(k) = \left[ \frac{(K+G)}{M} + \frac{1}{M} \sqrt{K^2 + G^2 + 2KG \cdot \cos(ka)} \right]^{1/2} \quad 1.26.a$$

$$\omega_2(k) = \left[ \frac{(K+G)}{M} - \frac{1}{M} \sqrt{K^2 + G^2 + 2KG \cdot \cos(ka)} \right]^{1/2} \quad 1.26.b$$

بالعودة للمعادلة a.1.24 يمكن إستنتاج كذلك النسبة بين سعتي الإهتزاز لكل أيون داخل القاعدة.

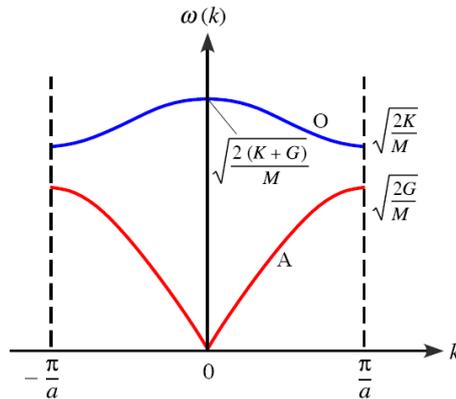
$$[K + G \exp(ika)]\epsilon_1 + [M\omega^2 - (K + G)]\epsilon_2 = 0; [M\omega^2 - (K + G)] = \pm |K + G \exp(ika)|$$

$$[K + G \exp(ika)]\epsilon_1 \pm |K + G \exp(ika)|\epsilon_2 = 0$$

$$\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} = \frac{-[K + G \exp(ika)]}{\pm |K + G \exp(ika)|}; \omega_1(-), \omega_2(+) \quad 1.27$$

إذن من أجل كل قيمة من الـ  $N$  قيمة لـ  $k$  يوجد حلين  $\omega_1(k)$  و  $\omega_2(k)$  يعطيان في الأخير  $2N$  نمط طبيعي للإهتزاز.

بالنسبة لنمط الإهتزاز  $\omega_2(k)$  تكون النسبة بين سعتي الإهتزاز موجبة أي أن الإهتزاز على توافق أما بالنسبة لـ  $\omega_1(k)$  فيكون الإهتزاز على تعاكس. وجود أيونين في الخلية الأولية يعطي  $2N$  نمط إهتزاز. يسمى المنحنيان  $\omega_1(k)$  و  $\omega_2(k)$  بفرعي منحني التبدد و نوضحهما في الشكل-6- .



## الفصل الأول: النظرية الكلاسيكية للبلورة التوافقية

الشكل-6-: تمثيل فرعي لمنحنى التبدد.

الفرع السفلي  $\omega_2(k)$  له شكل مشابه لمنحنى التبدد للشبكة الخطية أحادية الذرة. ينعدم التردد عند 0 و يتغير خطيا مع  $k$  من أجل أطوال الموجة الطويلة. و يصبح المنحني مسطحا عند حدود منطقة بريليون الأولى. يسمى هذا الفرع **بالفرع الصوتي acoustique** لأن علاقة التبدد من الشكل  $v \cdot k$  وهذه الخاصية تميز الأمواج الصوتية من أجل أطوال الموجة الطويلة. كذلك عند تطبيق إثارة صوتية فإن اهتزاز الذرات يكون على توافق و هو ما يحدث أيضا بالنسبة للفرع الصوتي (العلاقة 1.27).

الفرع العلوي  $\omega_1(k)$  يبدأ من القيمة  $\sqrt{\frac{2(K+G)}{M}}$  و يتناقص مع زيادة  $k$  حتى يصل إلى القيمة  $\sqrt{\frac{2K}{M}}$  عند حدود منطقة بريليون الأولى. يسمى هذا الفرع **بالفرع الضوئي optique** لأن تردداته أعلى من الفرع الصوتي و كذلك بينت التجربة أنه حين نعرض بلورة أيونية (القاعدة تحتوي على أيونين بشحنتين متضادتين) إلى موجة كهرومغناطيسية (ضوئية)، يؤثر حقلها الكهربائي على الأيونين فيهتزان على تعاكس. و هو ما نلاحظه بالنسبة للفرع العلوي .

يفصل بين الفرع الصوتي و الفرع الضوئي نطاق ممنوع للترددات. يمكن تحديد الفرق بين النمط الصوتي و الضوئي بشكل أفضل بدراسة الحالات الخاصة:

أ.  $k \ll \frac{\pi}{a}$  حول مركز منطقة بريليون الأولى:

نقرب  $\cos ka \approx 1 - \frac{(ka)^2}{2}$  و منه من أجل : الفرع الصوتي يكون لدينا:

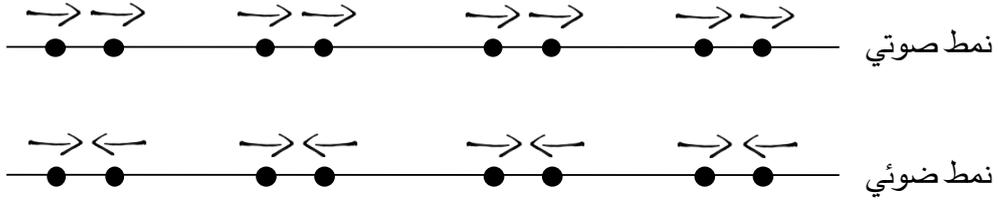
$$\begin{aligned} \omega_2(k) &= \left[ \frac{(K+G)}{M} - \frac{1}{M} \sqrt{K^2 + G^2 + 2KG - KG(ka)^2} \right]^{1/2} = \left[ \frac{(K+G)}{M} - \frac{1}{M} \sqrt{(K+G)^2 - KG(ka)^2} \right]^{1/2} = \\ &= \left[ \frac{(K+G)}{M} - \frac{(K+G)}{M} \sqrt{1 - \frac{KG(ka)^2}{(K+G)^2}} \right]^{1/2} \approx \left[ \frac{(K+G)}{M} - \frac{(K+G)}{M} \left( 1 - \frac{1}{2} \frac{KG(ka)^2}{(K+G)^2} \right) \right]^{1/2} \approx \left[ \frac{(K+G)}{M} \left( \frac{1}{2} \frac{KG(ka)^2}{(K+G)^2} \right) \right]^{1/2} \approx \\ &= \left[ \left( \frac{KG}{2M(K+G)} \right) \right]^{1/2} ka \end{aligned} \quad 1.28.a$$

و من أجل الفرع الضوئي:

$$\begin{aligned} \omega_1(k) &= \left[ \frac{(K+G)}{M} + \frac{1}{M} \sqrt{K^2 + G^2 + 2KG - KG(ka)^2} \right]^{1/2} = \left[ \frac{(K+G)}{M} + \frac{1}{M} \sqrt{(K+G)^2 - KG(ka)^2} \right]^{1/2} = \\ &= \left[ \frac{(K+G)}{M} + \frac{(K+G)}{M} \sqrt{1 - \frac{KG(ka)^2}{(K+G)^2}} \right]^{1/2} \approx \left[ \frac{(K+G)}{M} + \frac{(K+G)}{M} \left( 1 - \frac{1}{2} \frac{KG(ka)^2}{(K+G)^2} \right) \right]^{1/2} \approx \left[ \frac{2(K+G)}{M} - \frac{1}{2M} \frac{KG(ka)^2}{(K+G)} \right]^{1/2} \approx \\ &= \left( \frac{2(K+G)}{M} \right)^{1/2} \left[ 1 - \frac{1}{8} \frac{KG(ka)^2}{(K+G)^2} \right] \approx \left( \frac{2(K+G)}{M} \right)^{1/2} - O(ka)^2 \end{aligned} \quad 1.28.b$$

عندما  $k = 0$  فإن  $\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} = \frac{-[K+G \exp(ika)]}{\pm[K+G \exp i(ka)]} = \pm 1$  الإشارة (+) خاصة بالفرع الصوتي و تصف الحركة التي يكون فيها الأيونين على توافق في الإهتزاز . في حين أن الإشارة (-) تصف تعاكس الأيونين في الخلية الأولية و هي خاصة بالفرع الضوئي. نوضح في الشكل-7- التالي نمطي الإهتزاز لكل من الفرع الصوتي و الضوئي على التوالي.

الفصل الأول: النظرية الكلاسيكية للبلورة التوافقية



الشكل-7-: النمط الصوتي و الضوئي عندما يكون شعاع الموجة في مركز م.ب.أ

ب.  $k = \frac{\pi}{a}$  عند حد منطقة بريلمان الأولى:

الفرع الصوتي:

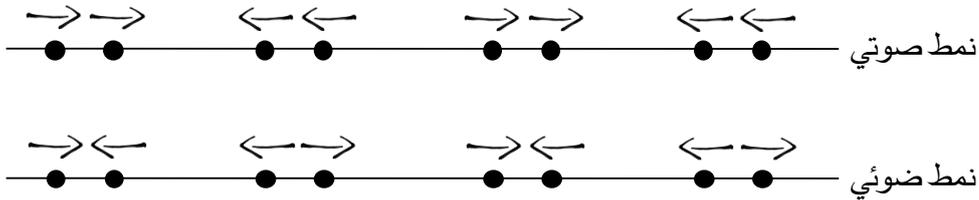
$$\omega_2(k) = \left(\frac{2G}{M}\right)^{1/2}; \epsilon_1 = \epsilon_2 \quad 1.29.a$$

الفرع الضوئي:

$$\omega_1(k) = \left(\frac{2K}{M}\right)^{1/2}; \epsilon_1 = -\epsilon_2 \quad 1.29.b$$

عندما يكون  $k = \frac{\pi}{a}$  فإن هذا يعني أننا في حدود منطقة بريلمان أين تتسطح منحنيات التبدد و بالتالي إنعدام سرعة المجموعة أي أن الأمواج تكون غير منتشرة (مستقرة) نتيجة تعاكس الإهتزاز بين القاعدة و القاعدة التي تليها. أي أن هناك فرق طور  $180^\circ$  بين إهتزاز قاعدتين متجاورتين و منه :

بالنسبة للفرع الصوتي:  $\epsilon_1 = \epsilon_2$  فالأيونين في الخلية الأولية يهتزان على توافق أما القاعدتين فهما على تعاكس أما بالنسبة للفرع الضوئي:  $\epsilon_1 = -\epsilon_2$  فالأيونين في الخلية الأولية يهتزان على تعاكس إضافة إلى تعاكس إهتزاز القاعدتين المتجاورتين ، كما هو موضح بالشكل-8-.



الشكل-8-: النمط الصوتي و الضوئي عندما يكون شعاع الموجة عند حد م.ب.أ

ت.  $K = G$  :

عند تماثل معاملات المرونة فإن الشبكة تتحول الى شبكة خطية أحادية الذرة بثابت شبكة  $a/2$  و بالتالي يخفني الفرع الضوئي.

ث.  $K \gg G$  :

بالنسبة للفرع الضوئي:

$$\omega_1(k) = \sqrt{\frac{2K}{M}} \cdot [1 + O(G/K)]; \epsilon_1 \approx -\epsilon_2 \quad 1.30.a$$

بالنسبة للفرع الصوتي:

$$\omega_2(k) = \sqrt{\frac{2G}{M}} \cdot \left| \sin \frac{ka}{2} \right| \cdot [1 + O(G/K)]; \epsilon_1 \approx \epsilon_2 \quad 1.30.b$$

لنمط الضوئي في هذه الحالة تردد مستقل عن  $k$  مساو إلى اهتزاز جزيئة واحدة مكونة من أيونين و يرتبطان بنايضع معامل مرونته  $K$  . مثل اهتزاز الجزيئات الذي يتم بشكل مستقل من جزيئة لأخرى .

أما الفرع الصوتي فيمثل اهتزاز شبكة خطية كتلة خليتها الأولية  $2M$  .

كخلاصة : في حالة النمط الصوتي يكون اهتزاز الأيونات في الخلية الأولية على توافق وديناميكا اهتزاز الشبكة تحدد بالتفاعلات بين كل الخلايا أما في حالة النمط الضوئي فالأيونات في الخلية الأولية تهتز على تعاكس و تردد الإهتزازات يتوسع إلى عصابة من الترددات بفضل التفاعلات بين الخلايا .

#### 4.1 الأنماط الطبيعية لإهتزاز شبكة ثلاثية البعد بقاعدة أحادية الذرة:

في الحالة العامة لشبكة ثلاثية البعد بقاعدة أحادية الذرة تأخذ الطاقة الكامنة التوافقية الشكل المصفوفي التالي:

$$U^{harm} = \frac{1}{2} \sum_{R, \hat{R}} \mathcal{U}(R) \cdot \mathcal{D}(R - \hat{R}) \cdot \mathcal{U}(\hat{R}) \quad 1.31$$

لدراسة أنماط الإهتزاز للبلور من المفيد إستغلال بعض التناظرات العامة التي تحققها المصفوفة  $\mathcal{D}(R - \hat{R})$  بغض النظر عن شكل قوى التفاعل بين الأيونات.

**التناظر (1):** ينبثق هذا التناظر من التعريف العام لعناصر مصفوفة المرونة  $\mathcal{D}_{\mu, \nu}(R - \hat{R})$  بما أنها تمثل المشتقة الثانية لطاقة التفاعل بين الذرات:

$$\mathcal{D}_{\mu, \nu}(R - \hat{R}) = \frac{\partial^2 U}{\partial u_{\mu}(R) \partial u_{\nu}(\hat{R})} = \frac{\partial^2 U}{\partial u_{\nu}(\hat{R}) \partial u_{\mu}(R)} = \mathcal{D}_{\nu, \mu}(\hat{R} - R)$$

$$\mathcal{D}_{\mu, \nu}(R - \hat{R}) = \mathcal{D}_{\nu, \mu}(\hat{R} - R), \mu, \nu = x, y, z \quad 1.32$$

**التناظر (2):** و ينتج من التناظر الإنسحابي لشبكات برافي.

$$\mathcal{D}_{\mu, \nu}(R - \hat{R}) = \mathcal{D}_{\mu, \nu}(\hat{R} - R), \mu, \nu = x, y, z \quad 1.33$$

$$\mathcal{D}(R) = \mathcal{D}(-R) \text{ أو}$$

و من التناظر (1) :

$$\mathcal{D}_{\mu,\nu}(R - \hat{R}) = \mathcal{D}_{\nu,\mu}(\hat{R} - R) = \mathcal{D}_{\nu,\mu}(R - \hat{R}) \quad 1.34$$

إذن هيئة الأيون ذو الموضع الإتراني  $R$  و الإنزياح  $u(R)$  مماثلة لهيئة الأيون ذو الموضع الإتراني  $-R$  و الإنزياح  $u(-R)$ .

**التناظر (3):**

إذا أعطينا لكل أيون في الشبكة نفس الإنزياح  $d$  بالنسبة لوضع الإتران فكل البلور سينزاح دون حدوث أي تغيرات بداخله و بالتالي فالطاقة الكامنة التوافقية تملك نفس القيمة قبل حدوث الإنزياح. إذن لا وجود لتغيرات في الطاقة الداخلية عند امتلاك كل الأيونات نفس الأنزياح و منه فمشتقات الطاقة بالنسبة للإزاحات معدومة و ينتج عن ذلك التناظر (3):

$$0 = \sum_{R,\hat{R}} d_{\mu} \cdot \mathcal{D}_{\mu,\nu}(R - \hat{R})d_{\nu} \Rightarrow \sum_R \mathcal{D}_{\mu,\nu}(R) = 0 \quad 1.35$$

نعود الآن لحل معادلة الحركة للأيون المهتز. يتعلق الأمر بـ  $3N$  معادلة للحركة (معادلة لكل مركبة من المركبات الثلاث للإنزياح  $u_{\mu}(R)$ ):

$$M \cdot \ddot{u}_{\mu}(R) = -\frac{\partial U^{harm}}{\partial u_{\mu}(R)} = -\sum_{\hat{R},\nu} \mathcal{D}_{\mu,\nu}(R - \hat{R})u_{\nu}(\hat{R}) \quad 1.36$$

$$M \cdot \ddot{u}(R) = -\sum_{\hat{R}} \mathcal{D}(R - \hat{R})u(\hat{R}) \quad \text{أو بالشكل المصفوفي :}$$

كما هي الحال في الحالات أحادية البعد نبحث عن حلول من شكل أمواج بسيطة مستوية:

$$u(R, t) = A \exp(i(kR - \omega t)) \quad 1.37$$

حيث  $A$  شعاع بثلاث مركبات لسعة الإهتزاز و يطلق عليه إسم شعاع إستقطاب النمط الطبيعي. نواصل في إستخدام الشروط الحدودية الدورية  $u(R + N_i a_i) = u(R)$  حيث  $i = 1, 2, 3$  و  $N = N_1 N_2 N_3$  هو عدد الخلايا الأساسية. القيم المسموحة لـ  $k$  تكون من الشكل:

$$\exp(i\vec{k} \cdot N_i \vec{a}_i) = 1 \quad 1.38$$

يكتب الشعاع الموجي  $k$  بدلالة الأشعة الأساسية للشبكة العكوسة كما يلي:

$$\vec{k} = k_x \vec{b}_1 + k_y \vec{b}_2 + k_z \vec{b}_3 \quad 1.39$$

حيث يحقق الجداء السلمي بين الأشعة الأساسية للشبكة الحقيقية و الشبكة العكوسة العلاقة :

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi, i = j; \vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 0, i \neq j \quad 1.40$$

$$\vec{k}N_i\vec{a}_i = 2\pi k_\mu N_i; \mu = x, y, z; i = 1, 2, 3 \quad \text{ومنه :}$$

$$\exp i\vec{k}N_i\vec{a}_i = \exp i2\pi k_\mu N_i = \cos 2\pi k_\mu N_i = 1$$

$$k_\mu N_i = n_i \Rightarrow k_x = \frac{n_1}{N_1}, k_y = \frac{n_2}{N_2}, k_z = \frac{n_3}{N_3}$$

و منه حسب الشروط الحدودية الدورية تكتب القيم المسموحة لشعاع الموجة كما يلي:

$$\vec{k} = \frac{n_1}{N_1}\vec{b}_1 + \frac{n_2}{N_2}\vec{b}_2 + \frac{n_3}{N_3}\vec{b}_3 \quad 1.41$$

و بالتالي فقيمة مسموحة واحدة لـ  $k$  تكون محتواة في الحجم  $\frac{\vec{b}_1}{N_1} \cdot (\vec{b}_2 \wedge \vec{b}_3)$  و بما أن  $\vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \wedge \vec{b}_3)$  تمثل حجم الخلية الأولية في الشبكة العكوسة فكل القيم  $N$  المسموحة لـ  $k$  موجودة في الخلية الأولية للشبكة العكوسة و هي اصطلاحا منطقة بريلمان الأولى . **من ش.ح.د عدد القيم المسموحة لشعاع الموجة بنفس عدد الخلايا الأساسية.**

إذن بتعويض شكل الحل في معادلة الحركة نجد:

$$-\omega^2 \cdot M \cdot A \exp i\vec{k}R = -\sum_R \mathcal{D}(R - \hat{R}) A \exp i\vec{k}\hat{R}$$

$$\omega^2 \cdot M \cdot A = \{\sum_R \mathcal{D}(R - \hat{R}) \exp i\vec{k}(\hat{R} - R)\}A$$

بوضع  $R'' = R - \hat{R}$

$$\omega^2 \cdot M \cdot A = \{\sum_{R''} \mathcal{D}(R'') \exp i\vec{k}(-R'')\}A$$

الجمع على  $R$  أو  $R''$  يؤدي إلى نفس النتيجة و منه يمكن إستبدال  $R''$  بـ  $R$  :

$$\omega^2 \cdot M \cdot A = \{\sum_R \mathcal{D}(R) \exp i\vec{k}(-R)\}A$$

$$\omega^2 \cdot M \cdot A = \mathcal{D}(k) \cdot A; \mathcal{D}(k) = \{\sum_R \mathcal{D}(R) \exp i\vec{k}(-R)\} \quad 1.42$$

العلاقة الأخيرة تمثل جملة ثلاث معادلات لمركبات شعاع الإستقطاب. و بالتالي لقيمة واحدة لـ  $k$  هناك ثلاث أنماط إهتزاز و عدد أنماط الإهتزاز الإجمالي هو  $3N$ . لدراسة هذه الحلول نستفيد من التناظرات السابقة لـ  $\mathcal{D}(R)$ . من التناظر (2) و التناظر (3) يمكن كتابة  $\mathcal{D}(k)$  بالشكل:

$$\mathcal{D}(k) = \sum_R \mathcal{D}(R) \exp i\vec{k}(-R) = \frac{1}{2} \{\sum_R \mathcal{D}(R) \exp i\vec{k}(-R) + \sum_{-R} \mathcal{D}(-R) \exp i\vec{k}(R)\}$$

و بما أن  $\mathcal{D}(R) = \mathcal{D}(-R)$  و  $\sum_R \mathcal{D}(R) = 0$

$$\mathcal{D}(k) = \frac{1}{2} \{\sum_R \mathcal{D}(R) (\exp(-i\vec{k}R) + \exp(i\vec{k}R))\} - \frac{1}{2} \sum_R 2 \cdot \mathcal{D}(R)$$

$$\mathcal{D}(k) = \frac{1}{2} \{\sum_R \mathcal{D}(R) \{2 \cos kR - 2\}\} = \sum_R \mathcal{D}(R) \{\cos kR - 1\}$$

$$\mathcal{D}(k) = -2 \sum_R \mathcal{D}(R) \sin^2 \frac{kR}{2} \quad 1.43$$

## الفصل الأول: النظرية الكلاسيكية للبلورة التوافقية

$D(k)$  عبارة عن مصفوفة حقيقية متناظرة و زوجية. في الجبر الخطي أي مصفوفة ثلاثية حقيقية متناظرة تملك ثلاث أشعة ذاتية حقيقية و منه للمعادلة 1.43 ثلاث أشعة ذاتية  $A_1, A_2, A_3$  تحقق العلاقة:

$$D(k) \cdot A_s(k) = \lambda_s(k) \cdot A_s(k) \quad 1.44$$

حيث  $s$  يمثل رقم الفرع و  $\lambda_s(k)$  القيم الذاتية (متعلقة بمعاملات المرونة وشعاع الموجة) للمصفوفة  $D(k)$  . وبالتالي فالأنماط الطبيعية الثلاث لشعاع الموجة  $\vec{k}$  لها أشعة إستقطاب  $A_s(k)$  و ترددات  $\omega_s(k)$  معطاة بـ:

$$\omega_s(k) = \sqrt{\frac{\lambda_s(k)}{M}} \quad 1.45$$

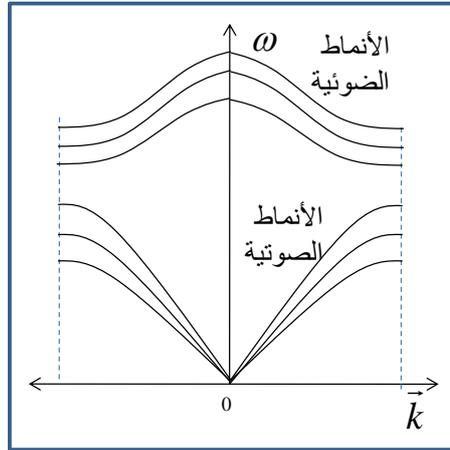
لقيم  $k$  الصغيرة نلاحظ كما هي الحال في الشبكة أحادية البعد:  $\sin^2 \frac{k}{2} \approx \frac{1}{4} (kR)^2$  ومنه تصبح  $D(k)$  كما يلي:

$$D(k) = -\frac{1}{2} \sum_R D(R) (kR)^2 = -\frac{k^2}{2} \sum_R (\hat{k}R)^2 D(R); \hat{k} = \frac{\vec{k}}{k} \quad 1.46$$

$$\omega_s^2(k) \cdot M \cdot A = -\frac{k^2}{2} \sum_R (\hat{k}R)^2 D(R) \cdot A$$

$$\Rightarrow \omega_s(k) = C_s(\hat{k}) \cdot k; C_s(\hat{k}) = \sqrt{\text{Eigenvalues} \left( -\frac{1}{2M} \sum_R (\hat{k}R)^2 D(R) \right)} \quad 1.47$$

بالنسبة لبلورة ثلاثية الأبعاد و ذات قاعدة من ذرتين متماثلتين يجب إضافة الفروع الضوئية فنحصل على الشكل التالي:



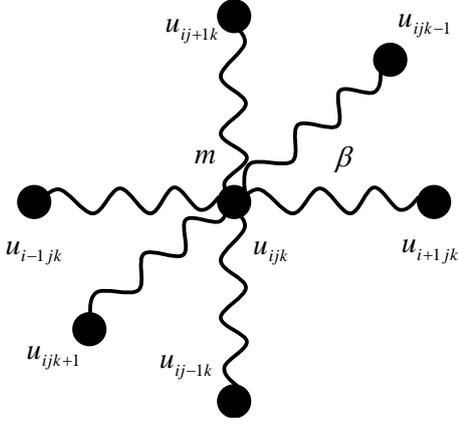
الشكل-9-: الفروع الصوتية و الضوئية لشبكة ثلاثية البعد بقاعدة ثنائية الذرة.

و في الحالة العامة لشبكة ثلاثية البعد بقاعدة مكونة من  $p$  ذرة، فإن عدد الفروع الصوتية دوما 3 و باقي الفروع  $3p-3$  يمثل الفروع الضوئية.

و كقاعدة عامة العدد الإجمالي لكل الفروع يساوي بعد الشبكة جداء عدد الذرات في القاعدة. عدد الفروع الصوتية دوما مطابق لعدد الشبكة و باقي الفروع ضوئية.

مثال: شبكة مكعبة بسيطة

تكتب عبارة الطاقة الكامنة التوافقية للشبكة المكعبة البسيطة بإعتبار الجوار الأول في الموضع  $(i, j, k)$  كما يلي :



$$U^{harm}(i, j, k) = \frac{1}{2}\beta(u_{i,j,k} - u_{i-1,j,k})^2 + \frac{1}{2}\beta(u_{i,j,k} - u_{i+1,j,k})^2 + 12\beta u_{i,j,k} - u_{i,j-1,k} + 12\beta u_{i,j,k} - u_{i,j+1,k} + 12\beta (u_{i,j,k} - u_{i,j,k-1})^2 + \frac{1}{2}\beta(u_{i,j,k} - u_{i,j,k+1})^2$$

و عليه تكون معادلة الحركة للأيون المهتز كما يلي :

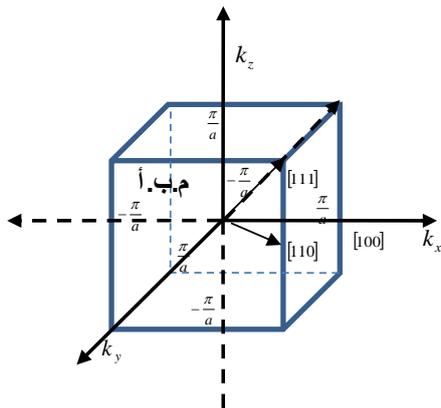
$$m\ddot{u}_{i,j,k} = -\frac{\partial U^{harm}}{\partial u_{i,j,k}} = -\{\beta(u_{i,j,k} - u_{i-1,j,k}) + \beta(u_{i,j,k} - u_{i+1,j,k}) + \beta u_{i,j,k} - u_{i,j-1,k} + \beta u_{i,j,k} - u_{i,j+1,k} + \beta u_{i,j,k} - u_{i,j,k-1} - 1 + \beta u_{i,j,k} - u_{i,j,k+1}\} = -\beta\{2u_{i,j,k} - u_{i-1,j,k} - u_{i+1,j,k} - u_{i,j-1,k} - u_{i,j+1,k} - u_{i,j,k-1} - u_{i,j,k+1}\}$$

الحل من الشكل :  $u_{i,j,k} = Ae^{i(k_x a + j k_y a + k k_z a - \omega t)}$  و منه نستنتج علاقة التبدد :

$$-m\omega^2 u_{i,j,k} = -\{\beta(2u_{i,j,k} - e^{-ik_x a} u_{i,j,k} - e^{ik_x a} u_{i,j,k}) + \beta(2u_{i,j,k} - e^{-ik_y a} u_{i,j,k} - e^{ik_y a} u_{i,j,k}) - e^{-ik_z a} u_{i,j,k} - e^{ik_z a} u_{i,j,k}\}$$

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \left\{ \sin^2 \frac{k_x a}{2} + \sin^2 \frac{k_y a}{2} + \sin^2 \frac{k_z a}{2} \right\}^{1/2}$$

لتمثيل منحنيات التبدد ، نرسم منطقة بريوان الأولى للشبكة المكعبة البسيطة و نحدد الإتجاهات البلورية التي ستمثل من أجلها علاقة التبدد.



علاقة التبدد وفق الإتجاه [100] :

$$k = k_x; k_y = 0; k_z = 0$$

$$\omega_{100}(k) = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \left\{ \sin^2 \frac{ka}{2} \right\}^{1/2} = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|$$

علاقة التبدد وفق الإتجاه [110] :

$$k_x = k_y = \frac{k}{\sqrt{2}}; k_z = 0$$

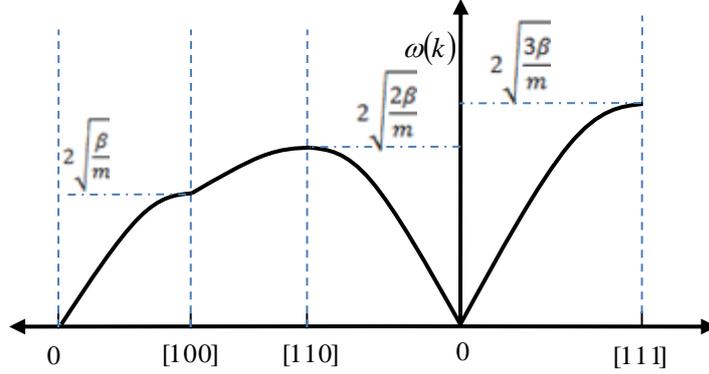
$$\omega_{110}(k) = 2\sqrt{\frac{2\beta}{m}} \left\{ \sin^2 \frac{ka}{2\sqrt{2}} \right\}^{1/2} = 2\sqrt{\frac{2\beta}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2\sqrt{2}} \right|$$

علاقة التبدد وفق الإتجاه [111] :

$$k_x = k_y = k_z = \frac{k}{\sqrt{3}}$$

## الفصل الأول: النظرية الكلاسيكية للبلورة التوافقية

$$\omega_{111}(k) = 2\sqrt{\frac{3\beta}{m}} \left\{ \sin^2 \frac{ka}{2\sqrt{3}} \right\}^{1/2} = 2\sqrt{\frac{3\beta}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2\sqrt{3}} \right|$$



نوضح في الشكل منحنيات التردد وفق الإتجاهات الثلاث.

### 5.1 السعة الحرارية للبلور الكلاسيكي - قانون (Dulong et Petit) :

سبق و أن أشرنا أن إهتزاز الشبكة هو ظاهرة نشطة حراريا. حسب النظرية الكلاسيكية فإن مساهمة حرارة الوسط  $k_B T$  في الطاقة الكلية لأيون مهتز  $E$  تخضع للإحتمال الكلاسيكي لماكسويل-بولتزمان،  $e^{-\frac{E}{k_B T}}$ . لتحديد السعة الحرارية حسب النظرية الكلاسيكية ، يجب تحديد الطاقة الكلية بدلالة درجة الحرارة كلاسيكيا و من ثم إشتقاقها بالنسبة لدرجة الحرارة. الطاقة الكلية لأيون مهتز تتكون من طاقة الإتران، الطاقة الحركية و الطاقة الكامنة :

$$E = \frac{p^2}{2m} + U_{eq} + \frac{1}{2}Ku^2 \quad 1.48$$

و حسب الإحصاء الكلاسيكي لماكسويل-بولتزمان يعطى متوسط الطاقة كما يلي :

$$\langle E \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} E e^{-\beta E} d\Gamma}{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta E} d\Gamma} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left( \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta E} d\Gamma \right) \quad 1.49$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(Z); Z = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta E} d\Gamma; \beta = \frac{1}{k_B T} \quad 1.50$$

نعوض  $E$  بعبارتها لحساب التكامل :

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta E} d\Gamma = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta \left( \frac{p^2}{2m} + U_{eq} + \frac{1}{2}Ku^2 \right)} dp du$$

$$Z = e^{-\beta U_{eq}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta \left( \frac{p^2}{2m} \right)} dp \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta \left( \frac{1}{2}Ku^2 \right)} du = e^{-\beta U_{eq}} \cdot \left( \frac{2m\pi}{\beta} \right)^{1/2} \cdot \left( \frac{2\pi}{\beta K} \right)^{1/2}$$

$$-\ln(Z) = \beta U_{eq} + \frac{1}{2} \ln \left( \frac{\beta}{2m\pi} \right) + \frac{1}{2} \ln \left( \frac{\beta K}{2\pi} \right)$$

ومنه متوسط الطاقة الكلية:

الفصل الأول: النظرية الكلاسيكية للبلورة التوافقية

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(Z) = U_{eq} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\beta} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\beta} = U_{eq} + k_B T \quad 1.51$$

كثافة الطاقة الكلية للبلور ككل وفق الإتجاهات الثلاث :

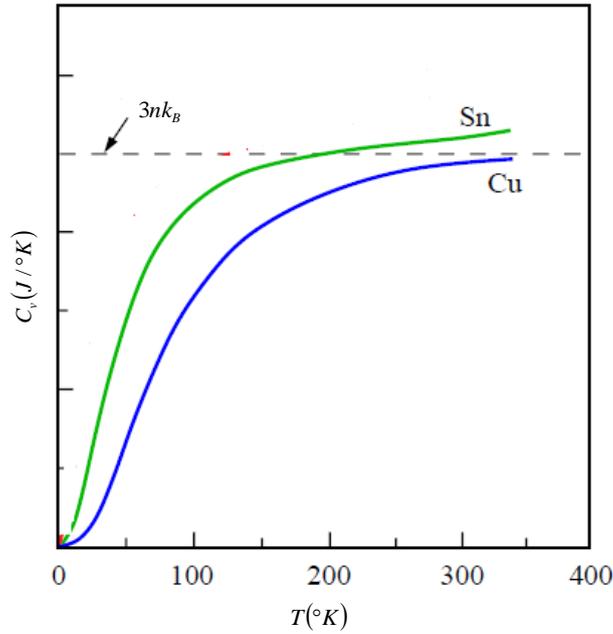
$$\varepsilon = u_{eq} + 3nk_B T \quad 1.52$$

السعة الحرارية للبلور بثبوت الحجم هي:

$$C_v = \frac{\partial \varepsilon}{\partial T} = 3nk_B \quad 1.53$$

تسمى هذه العلاقة بعلاقة **Dulong & Petit** و هي تبين أن السعة الحرارية للبلور التوافقي ثابتة.

في حين أن التجربة (الشكل 10) تبين أن السعة الحرارية تنعدم في الصفر المطلق ، تتزايد تقريبا ك  $T^3$  في الدرجات الحرارية المنخفضة و أنها تقترب فقط من قيمة **Dulong & Petit** في الدرجات الحرارية العالية.



الشكل -10-: تغيرات تجريبية للسعة الحرارية.

النظرية الكلاسيكية لم تجد تفسيراً للسعة الحرارية في الدرجات المنخفضة و هو من بين أسباب اللجوء إلى النظرية الكمية.

6.1 كثافة أنماط الإهتزاز :

## الفصل الأول: النظرية الكلاسيكية للبلورة التوافقية

رأينا سابقا حسب الشروط الحدودية الدورية أن قيمة مسموحة لشعاع الموجة للأموج الطولية في شبكة خطية تكون ضمن مجال طوله  $\frac{2\pi}{L}$  و أن القيم المسموحة منقطعة و غير مستمرة. بالنسبة للحالة العامة للشبكة ثلاثية البعد فإن القيمة المسموحة لـ  $k$  تكون ضمن الحجم  $\frac{(2\pi)^3}{V}$ .

نعلم أن علاقة التبدد توضح كيف يتغير التردد بدلالة شعاع الموجة،  $\omega(k)$ . من أجل تردد معين (أي مثبت) ستكون لدينا معادلة من الشكل:

$$\omega(k) = cst \quad 1.54$$

يمكن أن نعبّر عن شعاع الموجة بدلالة مركباته  $k_x, k_y, k_z$ . وبالتالي يمكن تمثيل المعادلة :

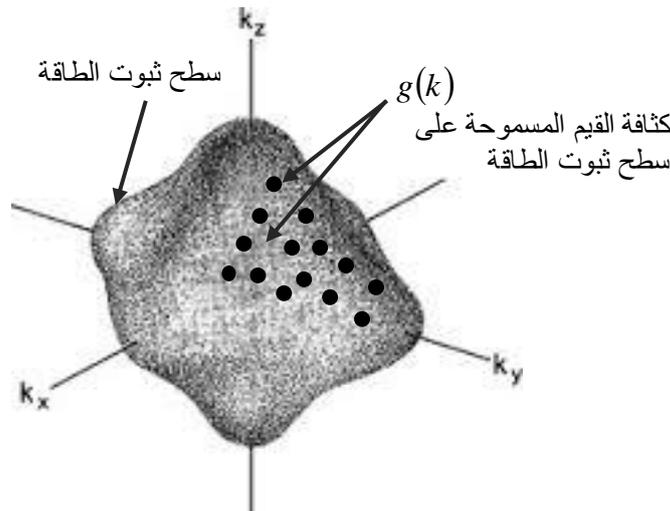
$$\omega(k_x, k_y, k_z) = cst \quad 1.55$$

في الفضاء العكسي ننتحصل على سطح ذو تناظر ما يسمى **سطح ثبوت التردد**. بوجود التناظر يمكن أن تشترك مجموعة من أشعة الموجة (بمركباتها) في نفس قيمة التردد. (شكل -11-)

سطح ثبوت التردد ما إلا هو تمثيل هندسي لعلاقة التبدد من أجل تردد معين في الفضاء العكسي  $(k_x, k_y, k_z)$ . عندما يتغير التردد بالمقدار  $d\omega$  فإنه يرسم سطحا آخر  $\omega + d\omega = cst$ . إتجاه تغير سطح ثبوت التردد هو شعاع تدرج التردد  $\vec{\nabla}_k \omega$  (شكل -12-).

عدد النقاط  $k$  أو القيم  $k$  المنقطعة التي تشترك في نفس قيمة التردد أي تتواجد على نفس السطح تسمى بكثافة الحالات المسموحة لـ  $k$ ،  $g(k)$ ، و تعبر أيضا على كثافة أنماط الإهتزاز.

و بالتالي ماذا نقصد بكثافة الأنماط؟ هي عدد أنماط الإهتزاز التي تشترك في نفس التردد أي التي تتواجد على سطح ثبوت التردد. نرسم لها بالرمز  $g(\omega)$  و كثافة أنماط الإهتزاز في المجال  $d\omega$  هي  $g(\omega)d\omega$ .



الشكل -11-: سطح ثبوت الطاقة و كثافة الحالات المسموحة  $g(k)$

لتحديد كثافة أنماط الإهتزاز، يجب أولاً تحديد كثافة القيم المسموحة لـ  $k$  بإتباع القاعدة الثلاثية التالية :

الفصل الأول: النظرية الكلاسيكية للبلورة التوافقية

محتواة في الحجم  $\frac{(2\pi)^3}{V} \rightarrow 1$  قيمة لشعاع الموجة .

(حجم القشرة)  $d^3k \rightarrow \int_{\text{القشرة}} dk \times g(k)$  كثافة الحالات في القشرة

$$g(k)dk = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\text{القشرة}} d^3k \quad 1.54$$

و بالتالي تكون كثافة أنماط الإهتزاز  $g(\omega)$ :

$$g(\omega)d\omega = g(k)dk = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\text{القشرة}} d^3k \quad 1.55$$

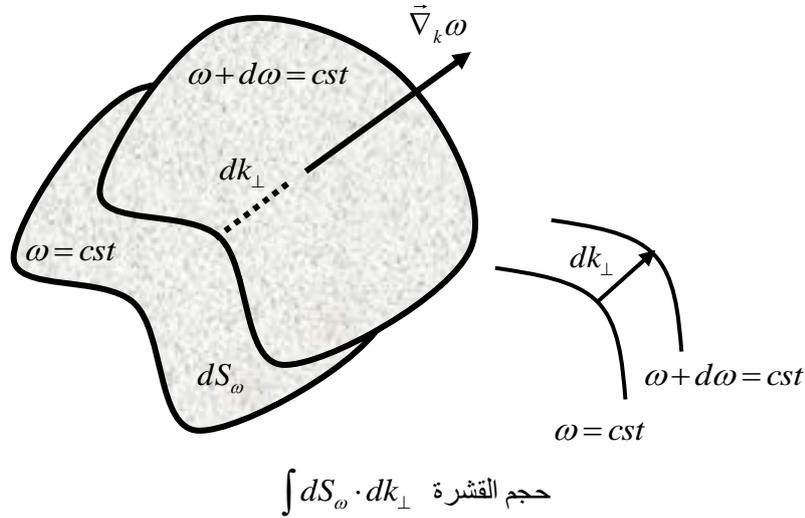
و بالتعويض بحجم القشرة نجد :

$$g(\omega)d\omega = \frac{V}{(2\pi)^3} \int dS_\omega \cdot dk_\perp \quad 1.56$$

من ناحية أخرى يمكن أن نعبر عن تدرج التردد بالمركبة العمودية على سطح ثبوت الطاقة لشعاع الموجة :

$$d\omega = \vec{\nabla}_k \omega \cdot d\vec{k} = |\nabla_k \omega| \cdot dk_\perp \Rightarrow dk_\perp = \frac{d\omega}{|\nabla_k \omega|} \quad 1.57$$

$$g(\omega)d\omega = \frac{V}{(2\pi)^3} \int dS_\omega \cdot \frac{d\omega}{|\nabla_k \omega|} \Rightarrow g(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{dS_\omega}{|\nabla_k \omega|} \quad 1.58$$



الشكل - 12-: تحديد حجم القشرة التي تحتوي على كثافة الأنماط.

العلاقة الأخيرة 1.58 تمثل عبارة كثافة أنماط الإهتزاز في الحالة العامة.

مثال : لتحديد كثافة أنماط الإهتزاز لشبكة خطية بقاعدة أحادية الذرة، نقوم أولاً بتحديد كثافة القيم المسموحة  $g(k)$ ، ومن ثم نحدد

كثافة الأنماط  $g(\omega)$ .

## الفصل الأول: النظرية الكلاسيكية للبلورة التوافقية

قيمة مسموحة لـ  $k$  ضمن المجال  $\frac{2\pi}{L}$  و نبحث عن  $g(k)dk$  في المجال  $2dk$  ( $dk$  في الجهة الموجبة و نظيره في الجهة السالبة) ،  
و عليه بتطبيق القاعدة الثلاثية نجد:

$$g(k)dk = \frac{L}{2\pi} 2dk = \frac{L}{\pi} dk$$

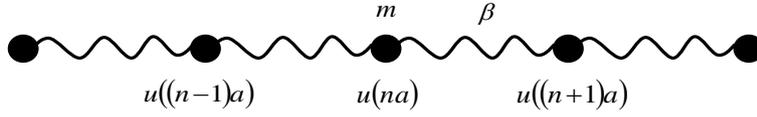
$$g(\omega)d\omega = g(k)dk = \frac{L}{\pi} dk \Rightarrow g(\omega) = \frac{L}{\pi} \frac{dk}{d\omega}$$

يمكن تحديد كثافة الأنماط حسب عبارة علاقة التبدد  $\left(\frac{d\omega(k)}{dk}\right)$ .

تمارين الفصل الأول

التمرين 1 :

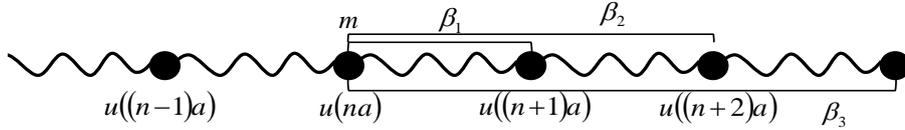
نعتبر سلسلة خطية من ذرات متماثلة الكتلة  $m$  ، الفاصلة الذرية  $a$  و ثابت المرونة هو  $\beta$  .



- 1 - باعتبار تأثير الجوار الأقرب (الجوار الأول) ، حدد عبارة الطاقة الكامنة التوافقية في الموضع  $na$  .
- 2 - أكتب معادلة الحركة للأيون المهتز المميز بالإزاحة  $u(na)$  .
- 3 - إستنتج علاقة التبدد  $\omega(k)$  (نمط الإهتزاز) و مثلها بيانيا ضمن حدود منطقة بريلوان الأولى .

التمرين 2 :

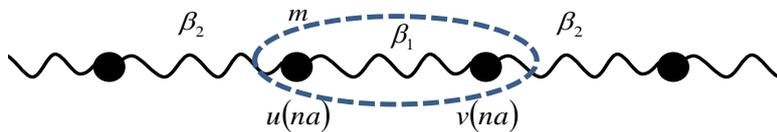
نعتبر سلسلة خطية مكونة من ذرات متماثلة الكتلة  $m$  حيث الفاصلة الذرية  $a$  . نفرض أن التفاعل بين الأيونات يشمل جميع الذرات (الجوار 1-2-3-....-الجوار  $p$ ) . ثوابت المرونة هي  $\beta_1, \beta_2, \beta_3, \dots, \beta_p$  حسب رتبة الجوار .



- 1 - أعط علاقة الطاقة الكامنة التوافقية في موضع الأيون  $na$  باعتبار تأثير كل الجوارات .
- 2 - أكتب معادلة الحركة للأيون باعتبار تأثير كل الجوارات .
- 3 - إستنتج علاقة التبدد  $\omega(k)$  .

التمرين 3 :

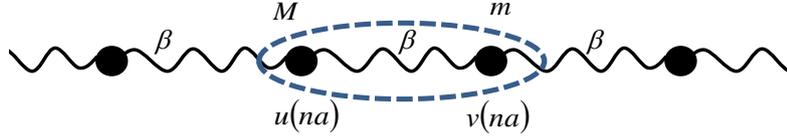
نعتبر سلسلة خطية بقاعدة ثنائية الذرة بثابتي مرونة مختلفين  $\beta_1, \beta_2$  و بذرات متماثلة الكتلة  $m$  .



- 1 - أكتب علاقة الطاقة الكامنة المرونية في الموضع  $na$  باعتبار تأثير الجوار الأول .
- 2 - أكتب معادلتى الحركة للأيونين المهتزتين  $u_n, v_n$  في القاعدة .
- 3 - إستنتج علاقات التبدد .
- 4 - إستنتج النسبة بين سعتي الإهتزاز للأيونين و قيم الترددات في مركز و عند حد م.ب.أ. مثل علاقات التبدد بيانيا .

**التمرين 4:**

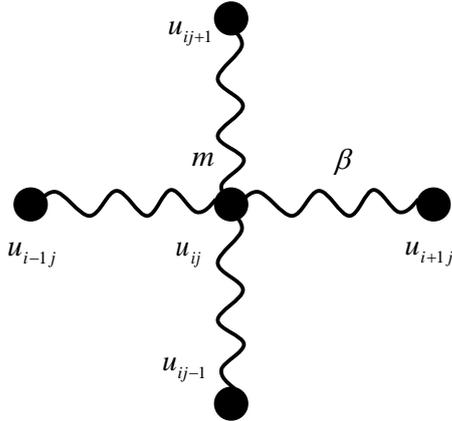
شبكة خطية بثابت شبكة  $a$  و بثابت مرونة  $\beta$  مع الجوار الأول. تتكون القاعدة من ذرتين مختلفتي الكتلة  $M, m$  ( $M > m$ ).



- 1- أكتب عبارة الطاقة الكامنة المرونية في الموضع  $na$  بإعتبار تأثير الجوار الأول.
- 2- إستنتج معادلتى الحركة للأيونين في القاعدة ذات الموضع الإتراني  $na$ .
- 3- إستنتج علاقات التبدد
- 4- حدد النسبة بين سعتي الإهتزاز للأيونين و قيم الترددات في مركز و عند حد م.ب.أ. مثل علاقات التبدد بيانيا.

**التمرين 5:**

نعتبر شبكة مربعة بسيطة بذرات متماثلة حيث  $a$  ثابت الشبكة .



- 1- أعط عبارة الطاقة الكامنة التوافقية بإعتبار تأثير الجوار الأول.
- 2- إستنتج معادلة الحركة للأيون المهتز
- 3- إستنتج علاقة التبدد
- 4- مثل علاقة التبدد بيانيا وفق الإتجاهين [10] و [11] على التوالي