الفصل الرابع: حركية الشبيكة Lattice Dynamics

في الفصول السابقة تم افتراض أن الذرات المكونة للبلورة ساكنة في أماكنها في الشبيكة البلورية. فيالحقيقة، الذرات ليس في حالة سكون ولكنها تتذبذب حول مواضع اتزانها نتيجة الطاقة الحرارية وذلك لصعوبة وصول درجة حرارة المادة إلى الصفر المطلق وكلما ارتفعت درجة الحرارة اتسع نطاق هذه الاهتزازات التي يطلق عليها الذبذبات الشبيكية وتؤدى هذه الذبذبات إلى انتقال الموجات داخل البلورة.

ان الذرات داخل البنية البلورية في حالة حركة اهتزازية (حركة توافقية بسيطة) دون ان تنتقل من موقعها الى موقع اخر. فاذا اثرت قوة خارجية على الذرات فسوف تزاح عن موقع اتزانها ولكن هناك قوة معيدة F تعمل على ارجاع الوضع الطبيعي للذرات حيث تتغير طرديا مع إزاحة الذرة x من موقع اتزانها ضمن حدود المرونة وحسب قانون هوك: $F = -\propto x$ حيث $\propto$ تمثل ثابت القوة.

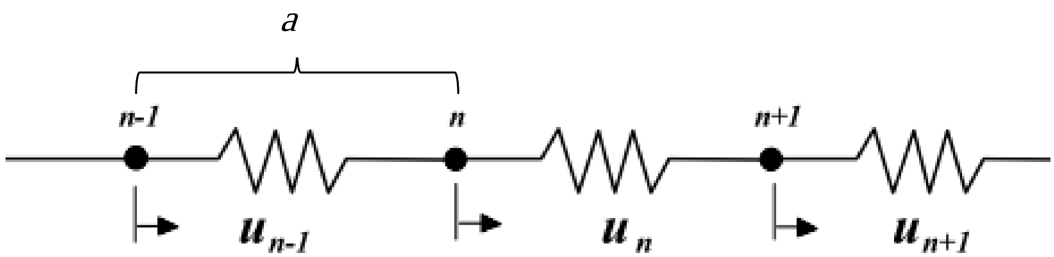
تعتمد الحركة التوافقية للذرات على درجة الحرارة، فعند درجة حرارة الصفر المطلق تستقر الذرات داخل الشبيكة في موقع الاتزان في حالة السكون. وعند رفع درجة الحرارة تبدأ الذرات بالتذبذب حول مواقع اتزانها ومقدار ازاحتها يعتمد على درجة الحرارة.

انماط اهتزاز الشبيكة احادية الذرات في بعد واحد Vibrational Modes of Linear Monoatomic Lattice

نعتبر سلسلة خطية مؤلفة من نوع واحد من الذرات وتتمثل هذه الحالة كلاسيكيا بكتل متماثلة تحتل عقد الشبيكة البلورية ، نفرض ان تلك الكتل متصلة مع بعضها البعض بنوابض مرنة مهملة الكتلة ثابت مرونتها α وسوف نتعامل مع تفاعل الجوار المباشر فقط بين الذرات ونفرض أن الذرات الثانية والثالثة والرابعة ليس لها تاثير، وهذا يعرف بالتقريب التوافقي وهو ينطبق بصورة جيدة في الحالة التي تكون فيها الازاحة بين الذرات صغيرة جدا وكأن الذرات مرتبطة فيما بينها بنوابض مثالية فينطبق عليها قانون هوك في المرونة.

عندما تكون الشبيكة في حالة الاستقرار فان كل ذرة تكون مستقرة في موقعها (موقع اتزانها) وعندما تتذبذب الشبيكة فان كل ذرة تزاح عن موقع استقرارها بمقدار صغير، وبما ان الذرات تتفاعل فيما بينها فان الذرات المتجاورة تتاثر بهذه الحركة بنفس الوقت بحيث علينا مراعاة الشبيكة ككل.

نفرض ذرة مثل n كمرجع لسلسلة من الذرات كما في الشكل ادناه، تؤثر عليها قوة مثل F_n نتيجة التفاعل مع الذرات المجاورة (n+1) و (n−1) حيث $(U_n - U_{n+1})$، $(U_{n-1} - U_n)$ الازاحة النسبية،



إزاحات شبيكة أحادية الذرة أحادية البعد

لتكن X_n محصلة ازاحة الذرة n عن موضع استقرارها، والتي نحتاجها لايجاد محصلة القوى F_n المؤثرة على الذرة n، بحيث:

$$X_n = U_R - U_L = (U_n - U_{n+1}) - (U_{n-1} - U_n) = (2U_n - U_{n+1} - U_{n-1})$$

$$F_n = -\alpha(2U_n - U_{n+1} - U_{n-1})$$

α هو ثابت القوة بين الذرتين المتجاورتين و a مسافة الاتزان بينهما (ثابت الشبيكة). وبتطبيق قانون نيوتن الثاني في الحركة على الذرة n التي لها كتلة مقدارها m،

$$m\frac{d^2U_n}{dt^2} = -\alpha(2U_n - U_{n+1} - U_{n-1}) \quad \dots\dots\dots 1$$

وهي معادلة تفاضلية من المرتبة الثانية ، ويجب الانتباه إلى أن كل ذرة من ذرات الشبيكة لها نفس المعادلة (فإذا كان عدد الذرات N فيكون لدينا N من المعادلات التفاضلية المرتبطة بحاجة الى حل متزامن مع

تطبيق الشروط الحدودية والتي يجب أن تؤخذ بالحسبان وخصوصا الذرة الأخيرة. و حل هذه المعادلة هو معادلة موجة مستوية في الوسط الصلب المتجانس عند الموضع x_n وتعطى بالعلاقة:

$$U_n = U_o \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathrm{k}x_n - \omega \mathrm{t})}$$

من المعادلة اعلاه نلاحظ ان كل الذرات تهتز بنفس التردد ω ولها السعة U_o والعدد الموجي k و x_n يمثل بعد موضع استقرار الذرة عن نقطة المرجع وان $x_n = na$.

يمكن التعبير عن إزاحة الذرة n عن موضع استقرارها بالعلاقة، $U_n = U_o \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathrm{nk}a - \omega \mathrm{t})}$

نعوض المعادلة الاخيرة بمعادلة رقم (1) فنحصل على،

$$m\frac{d^2}{dt^2}\left(U_o \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathrm{nk}a-\omega \mathrm{t})}\right) = -\alpha\left(2U_o \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathrm{nk}a-\omega \mathrm{t})} - U_o \mathrm{e}^{\mathrm{i}((\mathrm{n}+1)\mathrm{k}a-\omega \mathrm{t})} - U_o \mathrm{e}^{\mathrm{i}((\mathrm{n}-1)\mathrm{k}a-\omega \mathrm{t})}\right)$$

$$-m\omega^2 U_o \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathrm{nk}a-\omega \mathrm{t})} = -\alpha(2U_o \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathrm{nk}a-\omega \mathrm{t})} - U_o \mathrm{e}^{\mathrm{i}((\mathrm{n}+1)\mathrm{k}a-\omega \mathrm{t})} - U_o \mathrm{e}^{\mathrm{i}((\mathrm{n}-1)\mathrm{k}a-\omega \mathrm{t})})$$

نقسم طرفي المعادلة على $-mU_o \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathrm{nk}a-\omega \mathrm{t})}$ فنحصل على:

$$\omega^2 = \frac{\alpha}{m}(2 - \mathrm{e}^{\mathrm{ika}} - \mathrm{e}^{-\mathrm{ika}})$$

$$\omega^2 = \frac{2\alpha}{m}\left(1 - \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{ika}} + \mathrm{e}^{-\mathrm{ika}}}{2}\right) = \frac{2\alpha}{m}(1 - \cos(\mathrm{ka}))$$

حيث ان: $cos\theta = \frac{1}{2}\left(e^{i\,\theta} + e^{-i\,\theta}\right)$. وباستخدام العلاقة: $sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{1-\cos\ \mathrm{ka}}{2}$ نحصل على،

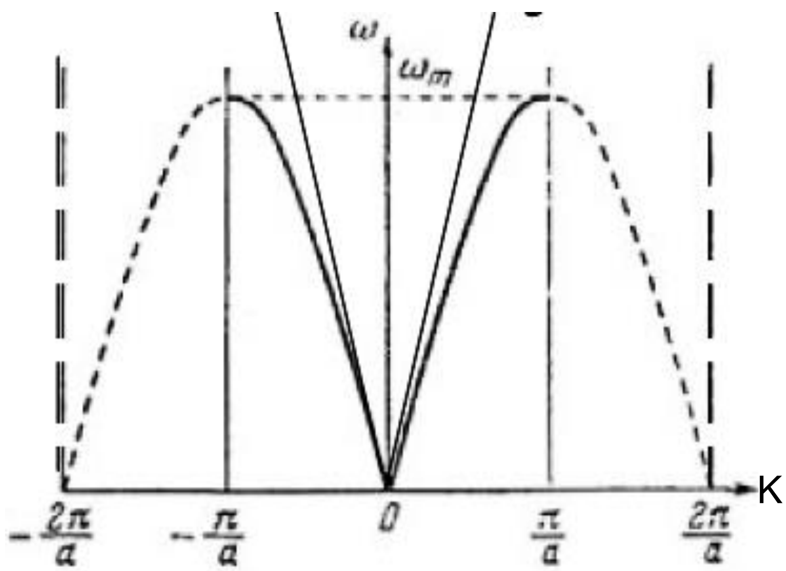
$$\omega^2 = \frac{4\alpha}{m} sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{\omega = 2\sqrt{\frac{\alpha}{m}} sin\left(\frac{ka}{2}\right)} \qquad \ldots\ldots 2$$

نأخذ فقط الإشارة الموجبة للتردد بسبب المعنى الفيزيائي لـ ω. عندما $ka = \pi$ فان $\omega = \boldsymbol{\omega_m} = \mathbf{2}\sqrt{\frac{\boldsymbol{\alpha}}{\boldsymbol{m}}}$

فتصبح العلاقة (2)،

$$\boldsymbol{\omega = \omega_m sin\left(\frac{ka}{2}\right)} \quad ......3$$

تسمى العلاقة (3) بعلاقة التفريق *(dispersion relation)* بين ω و k لشبيكة من نوع واحد من الذرات وفي بعد واحد. ونلاحظ انها علاقة جيبية وبدورية مقدارها $\frac{2\pi}{a}$ في فضاء k، واقصى تردد يساوي ω_m عند $k = \frac{\pi}{a}$.



<u>نستنتج من علاقة التفريق بين ω و k لشبيكة من نوع واحد من الذرات وفي بعد واحد مايلي:-</u>

١-عندما $\omega = 0$ فان $sin\left(\frac{ka}{2}\right) = 0$ وهذا يتحقق اذا كانت،

$\frac{ka}{2} = 0, \pm\pi, \pm2\pi, \pm3\pi, ...$ او $k = 0, \pm\frac{2\pi}{a}, \pm\frac{4\pi}{a}, \pm\frac{6\pi}{a}, ...$ (قيم زوجية)

و عندما $\omega = \omega_m$ فان $sin\left(\frac{ka}{2}\right) = 1$ وهذا يتحقق اذا كانت،

$\frac{ka}{2} = \pm\frac{\pi}{2}, \pm\frac{3\pi}{2}, \pm\frac{5\pi}{2}, ...$ او $k = \pm\frac{\pi}{a}, \pm\frac{3\pi}{a}, \pm\frac{5\pi}{a}, ...$ (قيم فردية)

٢-**الشبيكة تعمل كمرشح ميكانيكي للترددات الواطئة:** بما ان منحنى التفريق يكون دوري ومتماثل حول نقطة الأصل يمكننا حصر الاهتمام في المدى $0 < k < \frac{\pi}{a}$ وبالمقابل الترددات تغطي المدى $0 < \omega < \omega_m$ وهذه الترددات فقط هي التي تنتقل بواسطة الشبيكة ويتم إعاقة الترددات الأخرى اذن يمكن القول **ان الشبيكة تعمل كمرشح ميكانيكي للترددات الواطئة.** وان اعلى تردد مسموح هو ω_m ومن العلاقة $\omega_m = 2\sqrt{\frac{\alpha}{m}}$ يتضح ان اعلى تردد يتناسب عكسيا مع كتلة الذرة.

٣-بالنسبة للامواج ذات الاطوال الموجية الكبيرة تكون قيمة k صغيرة جدا $(k \to 0)$، $\left(k = \frac{2\pi}{\lambda}\right)$ وعليه فأن $(ka \ll 1)$ لذلك يمكن اعتبار $\sin\frac{ka}{2} = \frac{ka}{2}$ وتصبح علاقة التفريق (علاقة رقم (3)):

$$\boldsymbol{\omega = \frac{\omega_m a}{2} k}$$

حيث: $\boldsymbol{v_s = \frac{\omega_m a}{2} = a\sqrt{\frac{\alpha}{m}}}$ وهي سرعة الصوت وتصبح علاقة التفريق: $\boldsymbol{\omega = v_s k}$

وهي عبارة عن علاقة خطية بين k, ω وثابت التناسب فيها هو سرعة الصوت v_s. وتسلك الشبيكة ضمن حدود هذه الترددات سلوك الوسط المستمر المرن.

٤-للربط بين ثابت القوة بين الذرات α ومعامل يونك Y ، نفرض شبيكة مكعبة ثابت الشبيكة لها a واهتزاز المستويات الذرية فيها يعطي نفس المعادلات كما في الشبيكة أحادية البعد، سرعة الصوت v_s ترتبط بمعامل يونك Y وكثافة الوسط ρ بالعلاقة، $\boldsymbol{v_s = \sqrt{\frac{Y}{\rho}}}$ وكذلك ان سرعة الصوت تعطى بالمعادلة $v_s = \frac{\omega_m a}{2}$ و بمساوات العلاقتين نحصل على، $\frac{\omega_m a}{2} = \sqrt{\frac{Y}{\rho}}$ ونربع الطرفين :

$\frac{\omega_m^2 a^2}{4} = \frac{Y}{\rho}$ ولكن $\rho = \frac{m}{a^3}$ و $\omega_m = 2\sqrt{\frac{\alpha}{m}}$ ومنها نجد ان: $m = \frac{4\alpha}{\omega_m^2}$ ، لذا فأن :