حيث $\boldsymbol{n = \frac{N_A}{V}}$ تركيز الذرات في المادة الصلبة.

من علاقة تردد ديباي نجد ان:

$$\boldsymbol{v_s^3 = \frac{\omega_D^3}{6\pi^2 n}}$$

نعوض عن v_s^3 في معادلة معدل طاقة المتذبذب (معادلة رقم ١ اعلاه) ،

$$U = \frac{3V}{2\pi^2}\,\frac{6\pi^2 n}{\omega_D^3}\int_0^{\omega_D}\frac{\hbar\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{K_B T}}-1}\,d\omega$$

و حيث ان $n = \frac{N_A}{V}$ فان،

$$U = \frac{9N_A}{\omega_D^3}\int_0^{\omega_D}\frac{\hbar\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{K_B T}}-1}\,d\omega$$

نعرف درجة حرارة ديباي $\theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{K_B}$ ونفرض $x_D = \frac{\hbar\omega_D}{K_B\,T} = \frac{\theta_D}{T}$ و $x = \frac{\hbar\omega}{K_B T}$ فيصبح التكامل،

$$U = 9RT\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3\int_0^{x_D}\frac{x^3}{e^x-1}\,dx \quad \text{..... (H.W)} \quad (2)$$

ويسمى الحد $f(x_D) = f\left(\frac{\theta_D}{T}\right) = \int_0^{x_D}\frac{x^3}{e^x-1}\,dx$ دالة ديباي

<u>ولمناقشة هذه المعادلة،</u>

١-عند درجات الحرارة الواطئة، أي عندما تكون $T \ll \theta_D$ او $\frac{\theta_D}{T} \gg 1$ فأن:

$x_D = \frac{\theta_D}{T} \gg 1$ فيمكن القول ان $x_D = \infty$ وبذلك تصبح علاقة الطاقة (علاقة رقم ٢) ،

$$U = 9RT\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3\int_0^{\infty}\frac{x^3}{e^x-1}\,dx$$

وحيث ان ناتج التكامل $\int_0^{\infty}\frac{x^3}{e^x-1}\,dx = \frac{\pi^4}{15}$ فتصبح علاقة الطاقة،

$$\boldsymbol{U = \frac{3\pi^4}{5\,\theta_D^3}\,R\,T^4}$$

و الحرارة النوعية $\boldsymbol{C_V = \frac{dU}{dT} = \frac{12\,\pi^4}{5}\,R\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3}$ هذه المعادلة تعرف بقانون ديباي.

٢-عند درجات الحرارة العالية أي عندما تكون $T \gg \theta_D$ او $\frac{\theta_D}{T} \ll 1$ فان: $e^x = 1 + x$ حيث اهملنا الحدود العليا ونعوض في معادلة الطاقة (علاقة رقم ٢) فنحصل على،

$$U = 9RT\left(\frac{1}{x_D}\right)^3 \int_0^{x_D} \frac{x^3}{1+x-1}\,dx = 9RT\left(\frac{1}{x_D}\right)^3 \int_0^{x_D} x^2\,dx = 9RT\,\frac{1}{x_D^3}\frac{x_D^3}{3}$$

$$\boldsymbol{U = 3RT}$$

و الحرارة النوعية تساوي $\boldsymbol{C_V = \frac{dU}{dT} = 3R}$

وهذه النتيجة تتفق مع النموذج الكلاسيكي ونموذج اينشتاين عند درجات الحرارة العالية.

ملاحظة: ان نموذج ديباي يتفق مع النتائج العملية عند درجات الحرارة الواطئة والعالية ولكنه لا يتفق معها عند درجات الحرارة المتوسطة.

س/ كيف نحصل على درجة حرارة ديباي θ_D عمليا:

ان درجة حرارة ديباي هي $\theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{K_B}$ وتردد ديباي $\omega_D = (6\pi^2 n)^{1/3}\,v_S$ و $n=N_A/V$

و سرعة الصوت v_S يمكن حسابها بدلالة معامل يونك Y والكثافة ρ حسب العلاقة $v_S = \sqrt{\frac{Y}{\rho}}$ ومنه يمكن حساب درجة حرارة ديباي كما يلي:

$$\theta_D = \frac{\hbar\,\omega_D}{K_B}$$

$$= \frac{\hbar}{K_B}\,(6\pi^2 n)^{\frac{1}{3}}\,v_S$$

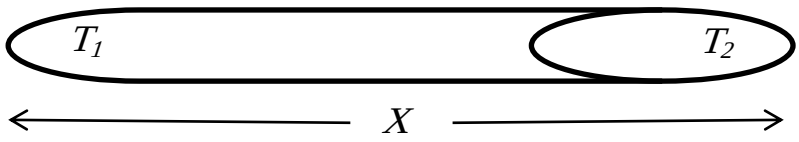
$$\boldsymbol{\theta_D = \frac{\hbar}{K_B}\,(6\pi^2 n)^{1/3}\sqrt{\frac{Y}{\rho}}}$$

٤-التوصيل الحراري ***Thermal Conductivity***

ان التوصيل الحراري في المواد الصلبة هي ظاهرة انتقال الفونونات والالكترونات الحرة (لانهما يمتلكان معدل طاقة عالٍ) من منطقة ذات طاقة معينة الى منطقة اخرى ذات طاقة ادنى.

في المواد الصلبة تنتقل الحرارة بواسطة الفونونات او الالكترونات الحرة. و تعدّ الالكترونات المساهم الاكبر في عملية التوصيل الحراري في المواد الفلزية (المعادن) النقية (خالية من العيوب نسبياً) والفونونات يكون دورها ثانويا، بينما في المواد شبه الموصلة والتي تحوي في تركيبها نسبة عالية من الشوائب فأن الفونونات تلعب دورا اساسيا في التوصيل الحراري ويكون للالكترونات الحرة دورا ثانويا. لكن، في المواد الصلبة غير الموصلة (العوازل) فيتم التوصيل الحراري عن طريق الفونونات فقط بحيث تعدّ الناقل الوحيد للطاقة الحرارية في تلك المواد.

عند درجات الحرارة العالية، فأن الفونونات تؤدي الدور الرئيسي في عملية التوصيل الحراري و لجميع انواع المواد الصلبة. و لحساب التيار الفونوني، نفترض قضيباً بلوريا طوله X و درجة حرارة نهايتيه T_1 و T_2 وكما موضح بالشكل ادناه:



من المعلوم ان يكون الانحدار الحراري من الطرف الذي درجة حرارته عالية الى الطرف الذي درجة حرارته واطئة، وثبات قيمة التيار الفونوني المار في اي نقطة من نقاط الوسط الناقل عند اي لحظة زمنية، لذا فأن:

$$\frac{dQ}{dt} \propto \frac{dT}{dx} \quad \Rightarrow \frac{dQ}{dt} = -C_i \frac{dT}{dx}$$

حيث ان C_i يمثل معامل التوصيل الحراري. والاشارة السالبة تعني ان اتجاه تدفق التيار الحراري يكون باتجاه معاكس لاتجاه تدرج الزيادة في درجة الحرارة.

ان الطاقة الحرارية تنتشر خلال البلورة بمسارات مختلفة حيث تتغير تلك المسارات من موقع الى اخر و بطريقة ممكن اعتبارها عشوائية، ولهذا السبب فأن الطاقة المنتقلة تعتمد على طول البلورة (الوسط الناقل) و الانحدار الحراري لطرفي البلورة (الفرق بين درجتي حرارة الاطراف).

عند مناقشة عملية التوصيل الحراري، فمن المناسب ان نتصور ان الفونونات كجزيئات الغاز وان عملية التوصيل الحراري تتم في هذا الغاز الفونوني. عدد الفونونات عند درجة حرارة معينة تعطى بالعلاقة المارة بنا سابقا:

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{K_B T}} - 1}$$

معامل التوصيل الحراري للغاز الفونوني يعطى بالعلاقة التالية:

$$\boldsymbol{C_i = \frac{1}{3} C_v \, v_s \, \lambda}$$

C_v الحرارة النوعية للفونونات بثبوت الحجم. v_s سرعة الصوت وهي سرعة الفونونات.

λ متوسط معدل المسار الحر للفونون، وهو معدل المسافة التي يقطعها الفونون بين تصادمين فونونيين متعاقبين. من اهم عمليات التصادم الفونوني هي:

١- تصادم فونون مع فونون اخر.

٢- تصادم فونون مع العيوب البلورية.

٣- تصادم فونون مع الحدود الخارجية للبلورة (سطح البلورة).

لكل عملية من عمليات التصادم اعلاه معدل مسار حر خاص بها. اما معدل المسارات الحرة الكلية للبلورة فيعطى بالعلاقة:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_2} + \frac{1}{\lambda_3}$$

حيث ان $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ هي معدل المسار الحر لعملية التصادم الاول و الثاني والثالث.

عملية التصادم من النوع الاول (فونون- فونون) في البلورة مهمة من الناحية العملية خاصة عند درجات الحرارة العالية حيث تكون المسافة بين الذرات كبيرة نوعا ما و بالتالي ان معدل المسار الحر يتناسب تناسباً عكسياً مع درجة الحرارة.

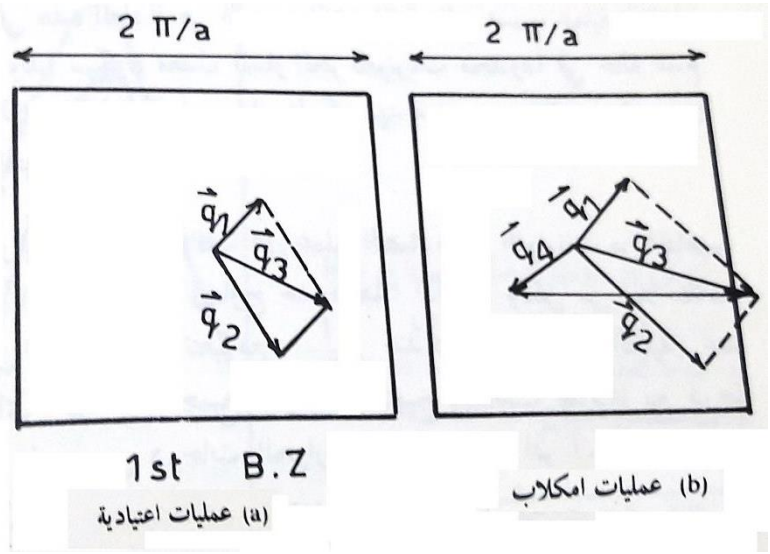
اما بالنسبة للتصادم من النوع الثاني (الفونون – العيوب البلورية)، بما ان العيوب البلورية تحطم صفة الدورية التامة في الشبيكة (التي هي الاساس للانتشار الحر لموجات فونونات الشبيكة) فان هذه العيوب تشتت الفونونات لاسيما عند درجات الحرارة العالية.

وعند درجات الحرارة الواطئة فان كلا من هذين النوعين (١و٢) من التصادمات يمكن اهمال تاثيرهما بسبب قلة اعداد الفونونات المثارة. و في هذه الحالة تبرز اهمية النوع الثالث من التصادمات (فونون – حدود خارجية) و الذي يؤدي الى ما يسمى بالتاثيرات الحجمية، لان الطول الموجي للفونون المثار يكون كبيرا جدا مقارنة مع حجم النموذج ومتوسط المسار الحر.

العمليات الاعتيادية وعمليات اومكلاب (التصادم الفونوني من النوع الاول):

نفرض ان لدينا فونونين احدهما بالمتجه الموجي $\overrightarrow{q_1}$ والاخر بالمتجه الموجي $\overrightarrow{q_2}$، تصادما فتولد عنهما فونونا ثالثا بالمتجه الموجي $\overrightarrow{q_3}$ وهو يخضع لقانون حفظ الزخم: $\overrightarrow{q_1} + \overrightarrow{q_2} = \overrightarrow{q_3}$.

بالرغم من ان الفونونين $\overrightarrow{q_1}, \overrightarrow{q_2}$ يقعان ضمن منطقة برليون الاولى الا ان الفونون الثالث الناتج من التصادم $\overrightarrow{q_3}$ قد لا يقع ضمن منطقة برليون الاولى (الشكل a)، فاذا بقي ضمن هذه المنطقة معناها ان الزخم محفوظ قبل وبعد التصادم. وان عملية التصادم هذه لا تؤثر على المقاومة الحرارية ولا تؤثر على جريان الفونونات. هذا النوع من التصادمات يسمى بـ **العمليات الاعتيادية**.



وعلى نقيض ذلك، اذا كان المتجهان $\overrightarrow{q_1}, \overrightarrow{q_2}$ كبيران (وهذا يحدث عند درجات الحرارة الحالية) فان المتجه $\overrightarrow{q_3}$ سيتخطى منطقة برليون الاولى (الشكل b). و لكي يبقى $\overrightarrow{q_3}$ ضمن منطقة برليون الاولى سيدخل عامل جديد اخر وهو متجه الشبيكة المقلوبة $\vec{G}$ ومن ملاحظة الشكل يتبين ان: $\overrightarrow{q_3} + \vec{G} = \overrightarrow{q_4}$ و اتجاه المتجه الرابع يكون معاكسا لاتجاه المتجهين $\overrightarrow{q_1}, \overrightarrow{q_2}$. وبالتالي لا يتحقق قانون حفظ الزخم، اي ان في هذه العملية حصل تغير في زخم الفونونات و كذلك حصل تغيير في معدل المسار الحر للفونونات و بالتالي تغيير في التوصيلية الحرارية. هذه العملية تدعى بـ **عملية اومكلاب**.