

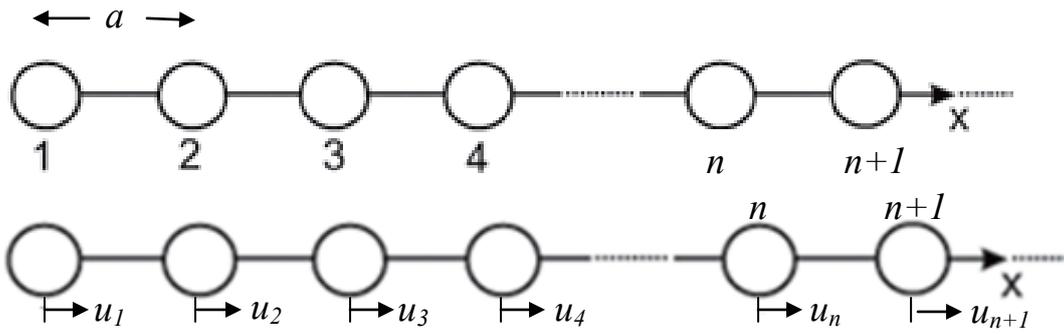
الفصل الرابع: اهتزازات الشبكة البلورية

1- المقدمة:

تعتبر الشبكة البلورية ذات أهمية خاصة نظراً للترتيب الطويل المدى الذي تتمتع به والذي ينتج قمم حادة في نماذج حيود الأشعة السينية وخاصة في الأبعاد الثلاثة. ومع ذلك فإن لاهتزازات الشبكة أهمية كبيرة تساهم في العديد من الخصائص الفيزيائية للجسم الصلب منها الخواص الحرارية و البصرية والكهربائية.

2- اهتزازات الشبكة أحادية الذرة أحادية البعد:

يحدث داخل الشبكة العديد من التفاعلات الموجية (الديناميكية) والتي تأتي من وجود إثارات أولية (فونونات) لها جميع خصائص الازدواجية الموجية-الجسيمية طبقاً لقاعدة دي برولى. نبدأ بأبسط الحالات وهي حالة شبكة أحادية الذرة أحادية البعد مع تفاعل مع أقرب الجيران، كما هو مبين بالشكل (4-1). عندما تكون الشبكة متزنة نجد أن كل ذرة تكون ساكنة في مكانها في الشبكة وتبعد كل ذرة عن الأخرى مسافة تساوى ثابت الشبكة (a). عند بدء الشبكة في الاهتزاز تتراح كل ذرة مسافة صغيرة عن موقعها. وبسبب أن الذرات تتفاعل بعضها مع بعض فإن جميع الذرات سوف تتحرك معا ويجب أن نأخذ حركة الشبكة ككل في الاعتبار. باعتبار الذرة رقم n ، فإن القوة التي تمارس عليها من قبل الذرة المجاورة رقم $(n+1)$ تعطى بالعلاقة $-\alpha(u_{n+1} - u_n)$ ، حيث u_{n+1} و u_n هما إزاحات الذرة رقم n و الذرة رقم $n+1$ على وجه الترتيب و $(u_{n+1} - u_n)$ تمثل الإزاحة النسبية. يعرف المتغير α بثابت القوة بين الذرات.



الشكل (4-1) سلسلة من الذرات في شبكة أحادية الذرة أحادية البعد.

تعرف فرضية أن القوة تتناسب مع الإزاحة النسبية بالتقريب التوافقي ومن المتوقع أن يتحقق بشكل جيد عندما تكون الإزاحة صغيرة. وهذا التقريب يكافئ قانون هوك المعروف من نظرية المرونة. وهكذا نفترض أن الذرات مرتبطة فيما بينها بنوابض مرنة. وبالمثل، فإن القوة التي تمارس على

الذرة رقم n من قبل الذرة المجاورة رقم $(n-1)$ تعطى بالعلاقة $-\alpha(u_{n-1} - u_n)$. بتطبيق

قانون نيوتن الثاني ($F=ma$) على حركة الذرة رقم n نحصل على

$$m \frac{d^2 u_n}{dt^2} = -\alpha(u_{n+1} - u_n) - \alpha(u_{n-1} - u_n) = -\alpha(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) \quad (5-1)$$

حيث m هي كتلة الذرة. ويمكن إعادة كتابة هذه المعادلة على الصورة

$$m\ddot{u} = -\alpha(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) \quad (5-2)$$

لاحظ أننا أهملنا التفاعل بين الذرة n وباقي الذرات ما عدا اقرب الجيران. ولحل هذه المجموعة اللانهائية من المعادلات التفاضلية دعنا نشترط أن المعادلة لا تتغير مع إزاحة النظام ككل بمقدار مضاعف صحيح لثابت الشبكة a . يتحقق هذا الشرط بأن يكون الحل على الصورة

$$u_n = Ae^{i(qx_n - wt)} \quad (5-3)$$

حيث x_n هو موضع الاتزان للذرة رقم n ، حيث $x_n = na$. المعادلة السابقة ما هي إلا معادلة موجة مستوية ولكن في الاحداثى المقنن na وتمثل كل الذرات التي تهتز بنفس التردد w ولها نفس السعة A . كما هو متوقع، فإن في مثل هذه الموجة تكون أطوار الذرات متشابكة بالشكل الذي معه يزداد الطور بانتظام من ذرة إلى الذرة التالية بمقدار qa . وباستخدام المعادلة (5-3) لحل المعادلة (5-3) يكون ممكنا فقط عند وجود التناظر الانتقالي في الشبكة.

بالتعويض مع اخذ التفاضل الثاني للمعادلة (5-3) في (5-2)، والتخلص من الكميات المشتركة واستخدام صيغة اويلر، $e^{iy} + e^{-iy} = 2\cos y$ يمكن الحصول على

$$mw^2 u_n = \alpha(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) \quad (5-4)$$

بتقسيم طرفي المعادلة (5-4) على u_n نحصل على

$$w^2 = \frac{\alpha}{m} \left(2 - \frac{u_{n+1}}{u_n} - \frac{u_{n-1}}{u_n} \right) \quad (5-5)$$

ولكن

$$u_{n+1} = Ae^{i[q(n+1)a - wt]} \quad (5-6)$$

$$u_{n-1} = Ae^{i[q(n-1)a - wt]} \quad (5-7)$$

و بالتعويض عن قيمة u_{n+1} و u_{n-1} يمكن الحصول على

$$w^2 = \frac{\alpha}{m} \left[2 - 2 \left(\frac{e^{iqa} + e^{-iqa}}{2} \right) \right] \quad (5-8)$$

$$w^2 = 4 \frac{\alpha}{m} \sin^2 \frac{qa}{2} \quad (5-9)$$

$$w = w_m \sin \left(\frac{qa}{2} \right) \quad (5-10)$$

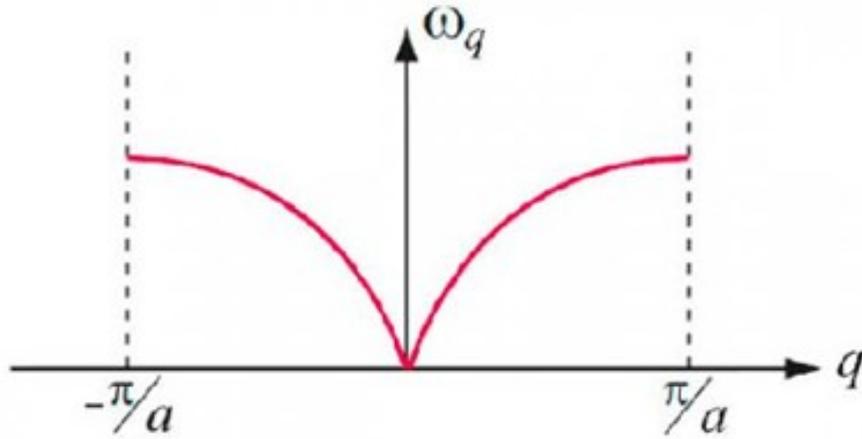
$$w_m = \sqrt{\frac{4\alpha}{m}} = 2 \sqrt{\frac{\alpha}{m}} \quad (5-11)$$

هذه هي علاقة التفريق (dispersion relation) بين w و q في شبكة ذات نوع واحد من الذرات في بعد واحد. يشترط أن تكون w في هذه المعادلة موجبة فقط وذلك بسبب المعنى الفيزيائي للتردد. تسمى المعادلة (5-10) بقانون الانتشار، وتختلف عن علاقة الانتشار للوتر المتجانس الذي يكون على الصورة $w = v_s q$.

عند رسم العلاقة البيانية بين w و q نحصل على منحنى ذي فرعين أحدهما موجب والآخر سالب، كما يبين الشكل (5-2). من هذا الشكل يتضح أن علاقة الانتشار في فضاء- q عبارة عن دالة جيبية

لها زمن دوري مقداره $\frac{2\pi}{a}$ وحد أقصى للترددات الموجية التي يمكن أن تنتشر على هذه الشبكة،

. w_m



الشكل (5-2) منحنى الانتشار لشبكة أحادية البعد مع تفاعل مع اقرب جوار وهو عبارة عن موجة جيبيية.

3- حدود الموجات الطويلة:

بما أن منحنى الانتشار يكون دورياً ومتماثلاً لا حول نقطة الأصل، يمكننا حصر الاهتمام، على

سبيل المثال، في المدى $0 < q < \frac{\pi}{a}$. نجد أن الترددات تغطي المدى المتصل $0 < w < w_m$

وهذه الترددات فقط هي التي تنتقل بواسطة الشبكة، بينما يتم إعاقة الترددات الأخرى بشدة. ويمكن

القول أن الشبكة تعمل كمرشح ميكانيكي للتمرير-المنخفض.

بالنسبة للأمواج ذات الأطوال الموجية الكبيرة تكون قيمة q صغيرة جداً ($qa \ll 1$) ولذلك يمكن

اعتبار أن الجيب مساوياً للزاوية، أي أن $\sin \frac{qa}{2} = \frac{qa}{2}$ ويصبح التردد الزاوي (علاقة الانتشار)

على الصورة،

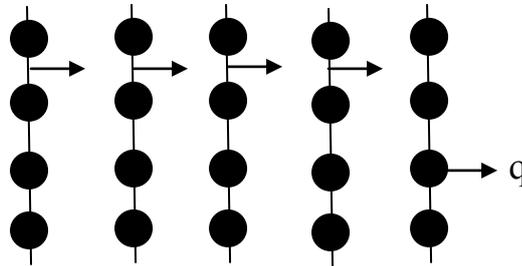
$$w = \left(\frac{w_m a}{2} \right) q \quad (5-12)$$

والتي هي عبارة عن علاقة خطية بين w و q . وهذه العلاقة متوقعة لأنه في هذا المدى تتصرف

الفونونات ككمية متصلة مرنة. تعطى سرعة الصوت v_s بالعلاقة $v_s = \left(\frac{w_m a}{2} \right)$. يمكن استخدام

المعادلة السابقة لربط ثابت القوة بين الذرات، a ، مع معامل يونك Y ، كما يلي.

نفترض شبكة مكعبة كالمبينة بالشكل (5-3).



الشكل (5-3) حركة المستويات الذرية.

يحقق اهتزاز المستويات الذرية نفس المعادلات كما هي في حالة الشبكة أحادية البعد. بمساواة

سرعات الصوت التي نحصل عليها من المعادلة (5-12) للربط بين ثابت القوة الداخلية (α) بين

الذرات ومعامل يونك (Y) (Young's modulus) للمرونة:

$$v_s = \sqrt{\frac{Y}{\rho}} \quad (5-13)$$

حيث Y معامل يونك و ρ كثافة الوسط ومن المعادلتين (5-12) و (5-13) نحصل

$$\sqrt{\frac{Y}{\rho}} = \frac{w_m a}{2} \quad (5-14)$$

وبالتعويض عن $w_m = \left(\frac{4\alpha}{m}\right)$ ، و $\rho = \frac{m}{a^3}$ من معادلة (5-14) نحصل

$$\alpha = aY \quad (5-15)$$

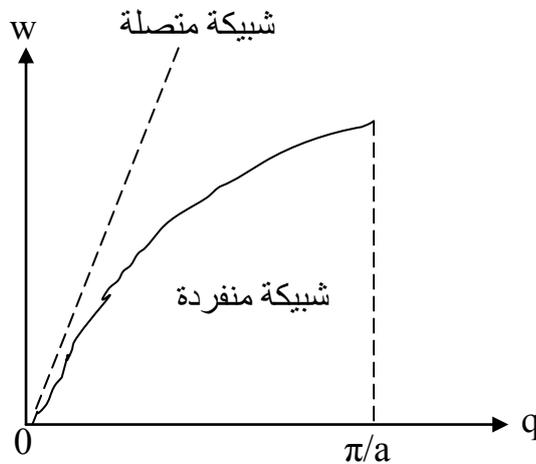
وهذه العلاقة مفيدة لتعيين قيمة α . بالتعويض بقيم فعلية لثابت الشبكة ومعامل يونك نحصل على

$\alpha = 5 \times 10^8 \text{ cm} (10^{11} \text{ dynes/cm}^2) = 5 \times 10^3 \text{ dynes/cm}$ لاحظ انه مع زيادة q فإن منحنى

الانتشار يحميد عن الخطية وينحني لأسفل كما هو متوقع و واضح في الشكل (5-4) وأخيرا يتشبع

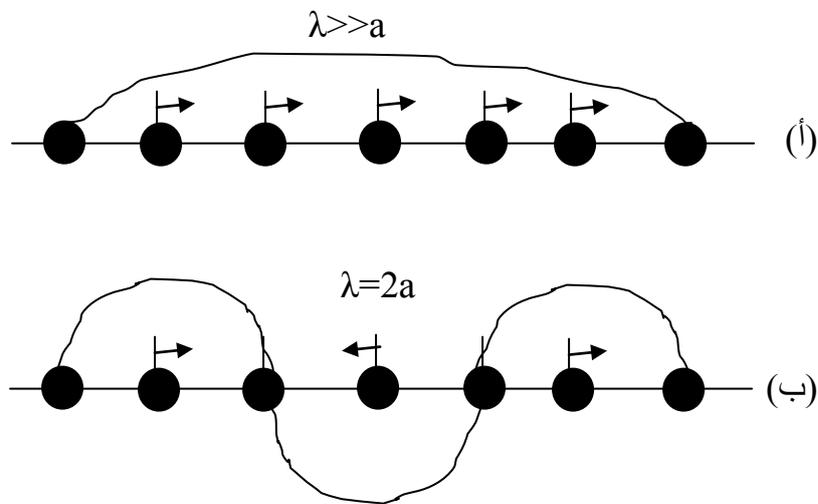
عند أقصى تردد w_m ، حيث،

$$w_m = \sqrt{\frac{4\alpha}{m}} \quad (5-16)$$



الشكل (5-4) ي الانتشار المتوقع للشبكة المنفردة.

يكون اعتماد هذا التردد على كل من ثابت القوة وكتلة الذرة كما هو متوقع في حالة المتذبذب التوافقي. يفرض أن $\alpha = 5 \times 10^3$ dynes/cm و $m = 2 \times 10^{-24}$ g (لذرة الهيدروجين)، يمكن حساب قيمة $w_m = 2 \times 10^{13}$ s⁻¹ وهي في مدى الأشعة تحت الحمراء. يمكن أيضا فهم النتيجة السابقة لسلوك منحنى التشتت في المدى $0 < q < \pi/a$ بطريقة كيفية كالآتي: عندما تكون قيم q صغيرة، تكون $\lambda \ll a$ وتتحرك الذرات معا في طور واحد، كما هو مبين في الشكل (5-5) ولهذا تكون قوة الاسترجاع (المخزنة) لذرة ما نتيجة تأثير الذرات المجاورة صغيرة، وهذا هو سبب أن w تكون صغيرة أيضا. في الحقيقة عندما تكون $q = 0$ تكون $\lambda = \infty$ وتتحرك الشبكة ككل كما لو كانت جسم جاسئ وهذا يؤدي إلى تلاشي قوة الاسترجاع يحدث الحد المقابل عند $q = \pi/a$ (الشكل (5-5))، حيث $\lambda = 2a$ ، كما يتضح من الشكل فإن الذرات المجاورة تكون خارج الطور وبالتالي تكون قوة الاسترجاع والتردد اكبر ما يمكن.



الشكل (5-5) (أ) اللإزاحات الذرية في مدى الموجات الطويلة. (ب) اللإزاحات الذرية عند $\lambda = 2a$.

4- سرعة الطور والمجموعة:

الآن، سنناقش بعض خصائص الاهتزازات ذات الموجات الطويلة. عندما تكون q صغيرة فإن علاقة الانتشار تكون على الصورة، $w = v_s q$.

حيث v_s هي سرعة الصوت في الوسط المرن المتجانس. في الحالة العامة تعتمد سرعة الصوت على العدد الموجي q وبالتالي يوجد انتشار للموجات. يمكن التمييز بين سرعة الطور، v_p ، وسرعة المجموعة، v_g ، من خلال المفاهيم التالية. تكون سرعة الطور هي المسؤولة عن انتشار المستويات ذات الطور المتساوي، بينما تصف سرعة المجموعة انتقال الطاقة. تعرف سرعة الطور وسرعة المجموعة بالعلاقات التالية،

$$v_p = \frac{w}{|q|} = v_s \left| \frac{\sin\left(\frac{aq}{2}\right)}{aq/2} \right| \quad (5-17)$$

$$v_g = \left| \frac{\partial w}{\partial q} \right| = v_s \left| \cos\left(\frac{aq}{2}\right) \right| \quad (5-18)$$

سنفحص الآن سلوك سرعة المجموعة في الشبكة المتفرقة (غير المتصلة). في مدى الموجات الطويلة، حيث $w = v_s q$ ، تكون سرعة المجموعة، v_g مساوية لسرعة الطور، v_p وكلاهما تساوي سرعة الصوت v_s . في هذا المدى، تسلك الشبكة سلوك الجسم المتصل ولا يحدث انتشار. ولكن، مع زيادة q فإن v_g تتناقص بانتظام (كما يتبين من الشكل (4-5)، حيث v_g ميل منحنى الانتشار)

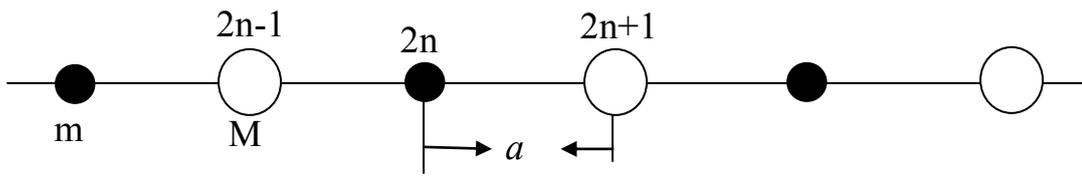
وتصل إلى قيمة الصفر عند النقطة $q=\pi/a$. وسبب هذا التناقص هو انه، مع زيادة q فإن تشتت الموجة بواسطة الذرات المتفردة يصبح واضحا وملموساً.

انه من الشيق أن نلاحظ انه عند $q=\pi/a$ في الشكل (4-5)، تتلاشى سرعة المجموعة، فما هو الشيء الذي يجعل قيمة q هذه تؤدي إلى تلاشى v_g . عند هذه القيمة نجد أن $\lambda=2a$ ، وبالتالي فإن الموجات المشتتة من الذرات المجاورة تكون خارج الطور بمقدار π . لكن عندما تصل الموجة المنعكسة بواسطة الذرة B للموجة المنعكسة من الذرة A تكونا الاثنتين في طور واحد. وحيث أن هذا يحدث أيضا لكل الموجات الأخرى يترتب على ذلك إنه عند $q=\pi/a$ تتداخل كل الموجات المنعكسة تداخل بناء ويكون للإنعكاس قيمة عظمى. من الواضح أن ما يحدث شبيهه لشرط براغ ولكن هنا يطبق على الموجات المرنة. الآن قد فهمنا لماذا تكون $v_g=0$ عندما $q=\pi/a$ ، والسبب هو أن الموجات المنعكسة تكون قوية بالقدر الذي يجعلها تتحد مع الموجات الساقطة وتكون موجات موقوفة، والتي تتلاشى فيها سرعة المجموعة.

5- أنماط اهتزاز الشبكة ثنائية الذرة أحادية البعد:

الآن، نعتبر شبكة ثنائية الذرة في بعد واحد. بالإضافة إلى الملامح التي تملكها الشبكة أحادية الذرة، فإن الشبكة ثنائية الذرة تظهر بعض الخصائص الإضافية المهمة في طيف الاهتزاز الأكثر تعقيدا، حيث أن الشبكة تحتوى على أكثر من ذرة لكل وحدة بسيطة في الجسم. من أهم هذه الملامح هو ظهور مدى من الذبذبات الممنوعة وكذلك مدى من الذبذبات المسموحة، كما سوف نبين. اعتبر شبكة خطية شبكة ثنائية الذرة، كما يبين الشكل (6-5)، كما في حالة كلوريد الصوديوم على سبيل

المثال. تتكون خلية وحدة من ذرتين هما الصوديوم والكلور ولهما الكتل m و M والمسافة التي تفصل بين الذرتين المتجاورتين هي a . يمكن معالجة حركة الشبكة بنفس الأسلوب الذي اتبعناه في الشبكة أحادية الذرة. وبما انه توجد ذرتين مختلفتين فإنه يكون لدينا معادلتين للحركة على الصورة الآتية:



الشكل (5-6) شبكة ثنائية الذرة أحادية البعد وفيها يكون طول خلية الوحدة $2a$.

$$m \frac{d^2 u_{2n+1}}{dt^2} = -\alpha(2u_{2n+1} - u_{2n} - u_{2n+2}) \quad (5-19)$$

$$M \frac{d^2 u_{2n+1}}{dt^2} = -\alpha(2u_{2n+2} - u_{2n+1} - u_{2n+3}) \quad (5-20)$$

حيث α ثابت القوة و n عدد صحيح موجب.

بحيث ان جميع الذرات التي كتلتها m اشير اليها بالاعداد الفردية وتلك التي كتلتها M بالاعداد الزوجية. و افترض حل المعادلتين اغلاه ياخذ الصورة التالية:

$$u_{2n} = A_1 e^{i(q2na - wt)} \quad (5-21)$$

$$u_{2n+1} = A_2 e^{i[q(2n+1)a - wt]} \quad (5-22)$$

$$u_{2n+3} = A_2 e^{i[q(2n+3)a - wt]} \quad (5-23)$$

من الطبيعي استخدام شرط تماثل الانتقال مرة أخرى والبحث عن حل على صورة موجة تنتشر
تكتب على هيئة المصفوفة الآتية:

$$\begin{bmatrix} u_{2n+1} \\ u_{2n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_2 e^{iq(2n+1)a} \\ A_1 e^{i(q2na)} \end{bmatrix} e^{-iwt} \quad (5-24)$$

لاحظ أن جميع الذرات التي لها الكتلة m يكون لها سعة اهتزاز A_1 وجميع الذرات التي لها الكتلة
 M يكون لها السعة A_2 . بالتعويض بالمعادلة (5-24) و (5-19) و (5-20) وعمل بعض التبسيط
المباشر نجد

$$\begin{bmatrix} 2\alpha - mw^2 & -2\alpha \cos(qa) \\ -2\alpha \cos(qa) & 2\alpha - Mw^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix} = 0 \quad (5-25)$$

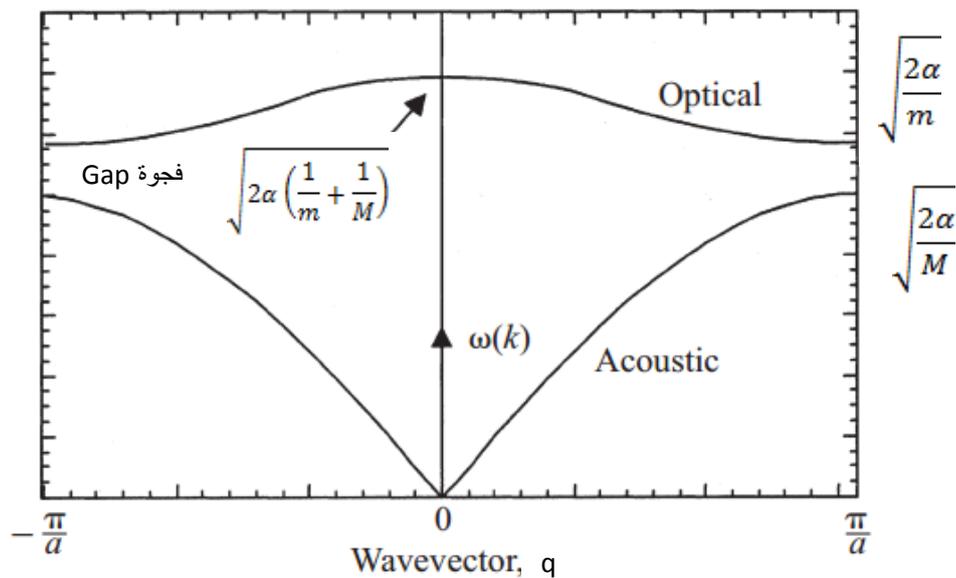
وحيث أن المعادلات في المصفوفة السابقة تكون متجانسة فإنه يوجد حلولاً حقيقية فقط إذا تلاشى
محدد مصفوفة المعاملات وهذا يؤدي إلى المعادلة،

$$\begin{bmatrix} 2\alpha - mw^2 & -2\alpha \cos(qa) \\ -2\alpha \cos(qa) & 2\alpha - Mw^2 \end{bmatrix} = 0 \quad (5-26)$$

المعادلة السابقة عبارة عن معادلة تربيعية في w^2 ويكون جذريها على الصورة،

$$w^2 = \alpha \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) \pm \alpha \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)^2 - \frac{4\sin^2(qa)}{mM}} \quad (5-27)$$

تعرف المعادلة السابقة بعلاقة الانتشار. وطبقا للإشارات في هذه المعادلة فإنه توجد علاقتي انتشار وبالتالي يوجد منحنيين للانتشار أو فرعين مصاحبين للشبكة ثنائية الذرة يسميان بالفرع الضوئي والفرع السمعي وبين هذين الفرعين توجد فجوة تردد، كما هو مبين بالشكل (5-7). يكون الفرع السفلى مقابلا للإشارة السالبة في المعادلة السابقة ويسمى الفرع السمعي، بينما يسمى الفرع العلوي بالضوئي.



الشكل (5-7) فروع اهتزاز الشبكة ثنائية الذرة الضوئي والسمعي.

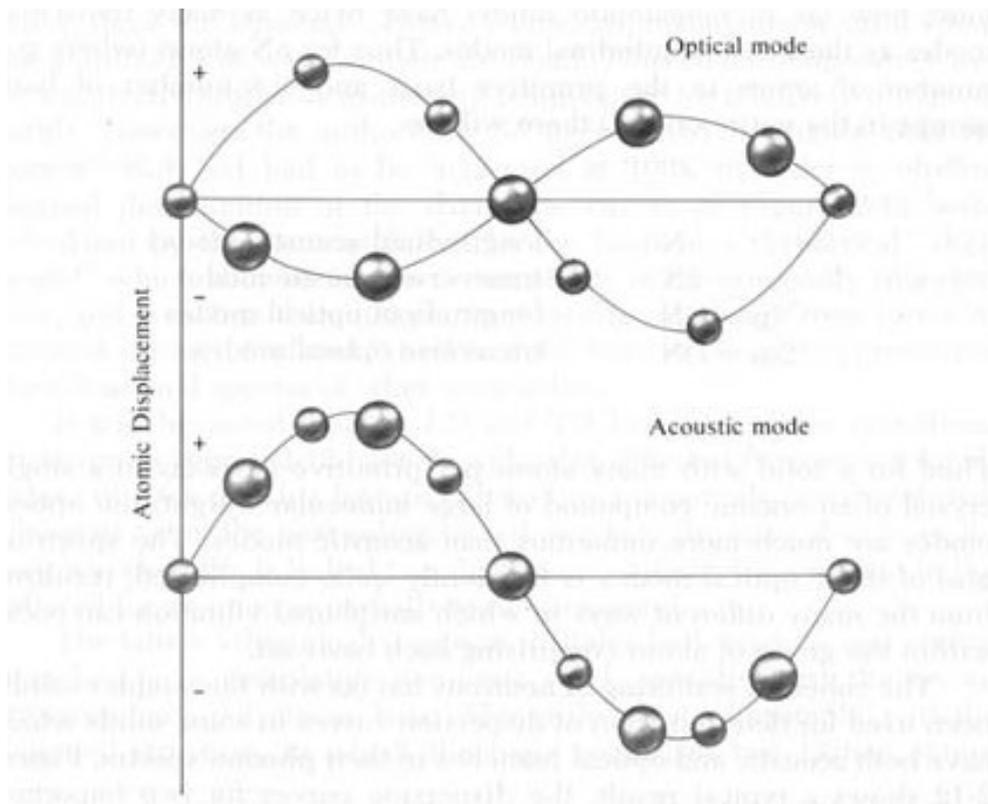
يبدأ الفرع السمعي من نقطة الأصل ويزداد خطياً في البداية (وهذا يفسر لماذا يسمى بالسمعي) ثم يتناقص معدل الزيادة حتى يثبت التردد عند القيمة $(2\alpha/M)^{1/2}$ وذلك عند $q=\pi/2a$ ، كما يتضح من المعادلة (5-27)، بفرض أن $m < M$. على الجانب الآخر، يبدأ الفرع الضوئي عند قيمة محددة للتردد مقدارها $w = \sqrt{2\alpha \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)}$ ثم يتناقص ببطء حتى يثبت عند القيمة

$w = \sqrt{\frac{2\alpha}{M}}$ عند $q=\pi/2a$. يعرف مدى التردد بين أقل قيمة للتردد في الفرع السمعي وأعلى قيمة

للتردد في الفرع الضوئي بفقوة التردد. ولذلك يمكن القول أن الشبكة ثنائية الذرة تعمل كمرشح ميكانيكي لتميرير الشريط.

يمكن رؤية الفرق الديناميكي بين الفرع السمعي والفرع الضوئي بوضوح عند مقارنتهما عند $q=0$ طول موجي لانتهائي. (يمكن استخدام المعادلة (5-25) للحصول على النسبة بين السعات، $\frac{A_1}{A_2}$.

بوضع $w=0$ للفرع السمعي نجد أن المعادلة تتحقق فقط عند $A_1=A_2$ ، ويكون للذرتين (الجزئ) السعة نفسها وتكونا في الطور نفسه. ويمكن القول أن الجزئ (وبالاحرى الشبكة ككل) يتذبذب كجسم جاسئ له مركز ثقل يتحرك إلى الأمام والى الخلف، كما هو مبين في الشكل (5-8) وعند زيادة q يغيب تحقق المعادلة (5-25) مع الشرط $A_1=A_2$ ولكن يظل تحرك الذرات في نفس الطور تقريبا.



الشكل (5-8) الازاحات الذرية في الفرع البصري $\lambda \approx a$. و الفرع السمعي $\lambda \rightarrow \infty$ لشبكة ثنائية الذرة ذات بعد واحد.

بوضع في $w = \sqrt{2\alpha \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)}$ الفرع الضوئي نجد أن

$$mA_1 + MA_2 = 0 \quad (5-28)$$

وهذا يعنى أن التذبذب الضوئي يحدث بالشكل الذي معه يظل مركز كتلة الخلية ثابت في مكانه. أي

أن يكون تحرك الذرتين خارج الطور بمقدار π وتكون نسبة السعات هي $\frac{A_2}{A_1} = \frac{M_1}{M_2}$.

والسبب الفيزيائي لتسمية الفرع العلوي بالضوئي هو: أولاً، أن تردد هذا الفرع يعطى تقريبا

بالمقدار $w = \sqrt{\frac{2\alpha}{M}}$ ، والذي له قيمة نموذجية تساوى المقدار $10^{13} \approx 3 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ (بالمقدار $10^3/2 \times 5$)

(²³) عند استخدام قيم نموذجية لكل من α و m . يقع هذا التردد في مدى الأشعة تحت الحمراء .

علاوة على ذلك، إذا كانت الذرات مشحونة، كما في حالة بلورة كلوريد الصوديوم (NaCl). فإن

الخلية تحمل عزم ثنائي قطب كهربائي قوى عندما تتذبذب الشبكة في النمط الضوئي وهذا يؤدي إلى

انعكاس وامتصاص قوى للأشعة تحت الحمراء بواسطة الشبكة.

أخيراً، نلاحظ أن منحنى الانتشار للشبكة ثنائية الذرة يحقق نفس خصائص التماثل في فضاء q كما

في حالة الشبكة أحادية الذرة. على سبيل المثال، تكون موجة الانتشار دورية ولها دورة مقدارها

$\pi/2a$ ولها تماثل انعكاسي حول $q=0$. لاحظ أن منطقة بريليون الأولى تقع في المدى

$-\frac{\pi}{2a} < q < \frac{\pi}{2a}$ ، حيث أن فترة الشبكة الحقيقية هي $2a$ وليس a . بالرجوع إلى الشكل (5-7)

وباستخدام الشروط الحدودية الدورية، يمكن رؤية أن عدد قيم q المسموحة داخل المنطقة الأولى

هو N وبالتالي يكون العدد الكلي للأنماط داخل هذه المنطقة هو $2N$ حيث يوجد نمطين سمعي وضوئي لكل q ، ويمكن فهم طبيعة هذين النمطين إذا اعتبرنا حركة الذرات المختلفة في الشبكة. تتحرك الذرات في الفرع السمعي بنفس الطريقة وتكون حركة الذرات كلها في طور واحد، أي أن الموجة تعتبر موجة طولية ولهذا سميت سمعية، أما بالنسبة للفرع الضوئي نجد أن الذرات تتحرك بحيث تكون عكسية في الطور، أي موجات مستعرضة وتشبه الموجات الكهرومغناطيسية ولذا سمي بالفرع الضوئي وتكون أشكال الموجة في النمطين كما هو مبين بالشكل (5-8).

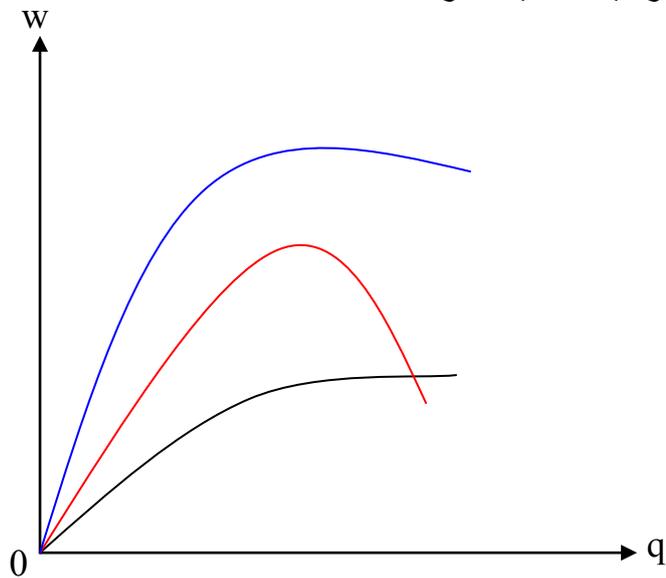
6- أنماط اهتزاز الشبكة ثلاثية الأبعاد:

نستطيع الآن وصف الحالة العامة للشبكة ثلاثية الأبعاد. نعتبر شبكة برافية التي فيها خلية الوحدة تحتوى على ذرة واحدة. ترتبط الذرات بعضها مع بواسطة التفاعل المتبادل. يمكن كتابة معادلة الحركة لكل ذرة على غرار المعادلة (5-11) ويمكن كتابة نمط الحل الطبيعي على الصورة

$$\vec{u}_n = \vec{A} e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad (5-29)$$

حيث يصف متجه الموجه \vec{q} كل من الطول الموجي واتجاه الانتشار. في هذا المقام، يكون الحديث بدلالة المتجه مهم لان الانتشار يحدث في ثلاثة أبعاد. يصف المتجه \vec{A} كل من السعة و اتجاه اهتزاز الذرات وبالتالي يصف استقطاب الموجة، بمعنى هل تكون الموجة طولية (\vec{A} يوازي \vec{q}) أو أن الموجة مستعرضة (\vec{A} عمودي على \vec{q}). في الحقيقة، لا تكون الموجة في الشبكة طولية تماما ولا مستعرضة تماما بل خليط من النوعين.

عند التعويض بالمعادلة (5-29) في معادلة الحركة نحصل على ثلاث معادلات في نفس الوقت تتضمن A_x و A_y و A_z وهي مركبات متجه السعة \vec{A} . ترتبط هذه المعادلات معا وهي تكافئ مصفوفة معادلات $|3 \times 3|$. بكتابة المعادلة العددية لهذه المصفوفة نحصل على المعادلة المحددة، على غرار المعادلة (5-26) والتي تكون من الدرجة الثالثة في w^2 . تعطى جذور هذه المعادلة ثلاثة علاقات انتشار (منحنيات انتشار)، كما هو مبين بالشكل (5-9). تمر الفروع الثلاثة بنقطة الأصل وهذا يعني أن كل الفروع في هذه الشبكة عبارة عن فروع سمعية. طبعا، من المتوقع هذا لأننا نعالج شبكة برافية أحادية الذرة.



الشكل (5-9) منحنيات الانتشار لشبكة برافية أحادية الذرة في الأبعاد الثلاثة.

لاحظ انه، في حالة الأبعاد الثلاثة ليس بالضرورة أن تكون علاقات الانتشار متجانسة في فضاء q بل تعتمد بشكل أساسي على اتجاه الاستقطاب (مستوى الانتشار) ويمكن الحصول على مزيج من الأنماط منها الضوئي الطولي والضوئي المستعرض والسمعي الطولي والسمعي المستعرض كلها

معا أو بعضها وهذا يعتمد على نوع الشبكة واتجاه الانتشار. ويمكن قياس منحنيات الانتشار في الشبكة بواسطة التشتت غير المرين للأشعة السينية أو أشعة النيوترونات، كما يمكن حسابها نظريا بطريقة مماثلة للطريقة المستخدمة في حالة البعد الواحد. في هذه الحالة يتم افتراض ثابت قوة طبقا لتفاعل الذرة مع ذرات الجوار المختلفة ويتم التعويض في معادلة الحركة للحصول على الحل في شكل معادلات عددية تعطى منحنيات الانتشار. حينئذ يمكن مقارنة منحنيات الانتشار هذه مع النتائج العملية واختيار ثابت قوة يؤدي إلى توافق بين النظري مع العملي. نناقش الآن خصائص التماثل في فضاء- q ومنطقة بريليون الأولى في الأبعاد الثلاثة. يمكن كتابة علاقة الانتشار في الشبكة ثلاثية الأبعاد على الصورة،

$$w = w_j(q) \quad (5-30)$$

حيث يصف المدلول الحرفي z فرع الانتشار المراد. تحقق علاقة الانتشار لكل فرع على حده خصائص التماثل تماما كما شرحنا في حالة الشبكة أحادية البعد. في المناقشة التالية، سنحذف التفاصيل الرياضية، لأنها تكون شبيهة لمثيلتها في حالة الشبكة أحادية البعد.

أولا، الدالة $w_j(q)$ تحقق خاصية الدورية، أي انه

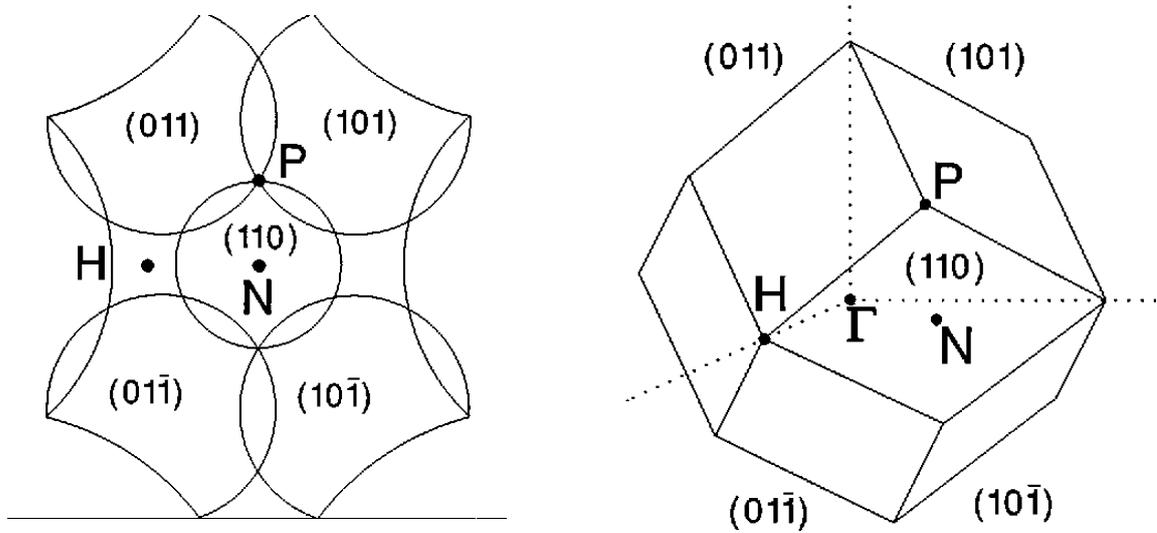
$$w_j(\vec{q} + \vec{G}) = w_j(\vec{q}) \quad (5-31)$$

حيث \vec{G} هو متجه الشبكة الانتقالية. هذا يعنى أنه يمكننا حصر اهتمامنا في منطقة بريليون الأولى فقط.

ثانيا، أيضا يتحقق التماثل لانعكاسي في علاقة الانتشار وبالتالي يمكن كتابة

$$w_j(-\vec{q}) = w_j(\vec{q}) \quad (5-32)$$

لاحظ مرة أخرى، أن خصائص التماثل هذه تأتي مباشرة من التماثل الانتقالي للشبكة الحقيقية وتتحقق دائما بغض النظر عن نوع الصلب المأخوذ في الاعتبار. يبين الشكل (5-10) منطقة بريليون الأولى لعنصر الألمينيوم ذات الشبكة المكعبة المتمركزة الأوجه ورسم لحدود التردد في هذه المنطقة. يتضح من الرسم تحقق عناصر التماثل الدوري والانعكاسي والدوراني.



الشكل (5-10) (أ) منطقة بريليون الأولى لشبكة مكعبة. (ب) نمط لمساقط الجسم عند زاوية 180° .

7- امتصاص البلورات للأشعة تحت الحمراء:

تمكن العلماء من التحقق العملي من صحة اهتزاز الشبكة وذلك باعتبار تأثير شبكة خطية ثنائية الذرة عند تعريضها لأشعة كهرومغناطيسية (في مدى تردد الأشعة تحت الحمراء) لها شدة تعطى بالعلاقة التالية،

$$E = E_0 e^{i\omega t} \quad (5-33)$$

حيث ω هو التردد ويكون في حدود $3 \times 10^{12} \text{ Hz}$ والطول الموجي 100 microns تقريبا.

تكون قيمة المتجه الموجي لهذه الأشعة حوالي $k = \frac{2\pi}{\lambda} = 600 \text{ cm}^{-1}$. تكون قيمة k هذه اصغر

بكثير من قيمة أكبر متجه موجي لاهتزاز الشبكة، حيث $k = \frac{2\pi}{\lambda} = \dots \text{ cm}^{-1}$ ، ولذلك عند

تعريض الشبكة لأموج الأشعة تحت الحمراء نعتبر علاقة الانتشار عندما يؤول المتجه k إلى

الصفر. في هذه الحالة يجب تعديل معادلات الحركة للذرات وحلولها بحيث تتضمن حد جديد وهو

$(\pm eE_0)$ والذي يعبر عن القوة التي يؤثر بها المجال الكهرومغناطيسي للأشعة على الايونات

الموجبة والسالبة. وبذلك يصبح حل المعادلتين الموجيتين للأيونين m و M وهو

$$-m\omega^2 A = \beta B(e^{ika} + e^{-ika}) - 2\beta A - eE_0 \quad (5-34)$$

$$-M\omega^2 A = \beta A(e^{ika} + e^{-ika}) - 2\beta B - eE_0 \quad (5-34)$$

وعندما تكون k صغيرة تصبح المعادلتان على الصورة،

$$-mw^2A = 2\beta(B - A) - eE_0 \quad (5-35)$$

$$-Mw^2B = 2\beta(A - B) - eE_0 \quad (5-35)$$

يمكن حل المعادلتين السابقتين وتعيين الثوابت A و B على الصورة،

$$A = \frac{eE_0}{M(w_0^2 - w^2)} \quad \& \quad B = \frac{eE_0}{m(w_0^2 - w^2)}$$

حيث $w_0^2 = \frac{2\beta(m+M)}{mM}$ هي القيمة التي تناظر $k=0$ ، أي عند حدود الفرع الضوئي. من المعادلتين

السابقتين يتضح حدوث أكبر سعة حركة للذرات عندما تقترب قيمة w من w_0 ويتم عندئذ

امتصاص طاقة الحركة اللازمة من طاقة الأشعة تحت الحمراء الساقطة وكلما ازدادت سعة الحركة

تزداد درجة الامتصاص الداخلي للطاقة المستخدمة في إثارة ذبذبات الشبكة.