تعتبر الشبيكة 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 الشبيكة أهمية كبيرة تساهم في العديد من الخصائص الجسم الصلب مثال على ذلك تنتج التوصيلية الحرارية في المواد العازلة من انتشار اهتزازات الشبيكة والتي يمكن أن تكون كبيرة نسبيا (في الحقيقة، التوصيلية الحرارية للماس تساوى تقريبا ست مرات أكبر منها فى حالة معدن النحاس.كذلك في التشتت تقلل اهتزازات الشبيكة من الشدة النقطية وتسمح أيضا بحدوث التشتت غير المرن حيث تتغير طاقة المشتت (النيوترون) نتيجة امتصاص أو توليد فونونات داخل الهدف، كذلك تأتى التوصيلية الفائقة من تشتت الإلكترون – فونون المتعدد بين الكترونات الزمن المعكوس.

في الفصول السابقة تمت دراسة التركيب البنائى للبلورات حيث تم افتراض أن الذرات المكونة للبلورة ساكنة في أماكنها في الشبيكة البلورية. لكن في الحقيقة، الذرات ليست في حالة سكون ولكن الذرات تتذبذب حول موضع استقرارها نتيجة الطاقة الحرارية وذلك بسبب صعوبة وصول درجة حرارة المادة الى الصفر المطلق وكلما ارتفعت درجة الحرارة اتسع نطاق هذه الاهتزازات التي يطلق عليها ذبذبات الشبيكية التي تؤدي الى 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 الذرات عن مواضع استقرارها (اتزانها) ولكن هنالك قوة معيدة F تعمل على ارجاع الذرات الى وضعها الطبيعي حيث تتناسب هذه القوة المعيدة طرديا مع ازاحة الذرة x من موقع استقرارها ضمن حدود المرونة حسب قانون هوك.

$F=-\alpha x$ حيث α تمثل ثابت القوة.

تعتمد الحركة التوافقية للذرات على درجة الحرارة، فعند درجة حرارة الصفر المطلق تستقر الذرات داخل الشبيكة في مواقع اتزانها (اي في حالة سكون) ولكن عند رفع درجة الحرارة تبدأ الذرات بالتذبذب حول مواقع اتزانها ومقدار ازاحتها يعتمد على درجة الحرارة.

الفونونات

يمكن معاملة الموجات المرنة في الجسم الصلب كغاز من الفونونات طاقة تساوي $\hbar w =$ $h\nu$ وكمية تحركها تساوى $ph = \frac{\hbar w}{v} = \frac{h}{\lambda} = \hbar q$ حيث v سرعة *الصوت* و q هو العدد الموجى .باختصار يمكن القول أنه على غرار اعتبار أن الموجات الكهرومغناطيسية عبارة عن سيل من الفوتونات تنتشر بسرعة الضوء(كم الطاقة الضوئية)، فإنه يمكن اعتبار أن الموجات الصوتية المرنة عبارة عن سيل من الفونونات(شبه جسيم) تحمل طاقة$\hbar w$ وزخم الموجة$\hbar q$ وتنتشر بسرعة الصوت وتعتبر الفونونات اجسام غير مميزة لذلك تخضع لأحصاء بوز- انشتاين.
يوجد العديد من الشواهد التجريبية التي أكدت أن طاقة الموجات الصوتية في البلورة مقننة) أي على شكل فونونات ومنها

- تمكن العلماء من التفسير الصحيح للحرارة النوعية للصلب فقط عند افتراض أن طاقة المتذبذبات تكون مقننة

- في تجارب التشتت غير المرن للأشعة السينية والنيوترونات عند اصطدامها بذرات الشبيكة يحدث تغير في طاقة الأشعة .وأكدت التجارب أن هذا التغير يتناسب مع اختفاء أو ظهور فونون أو أكثر .على كل حال، فإن لمفهوم الفونون أهمية بالغة في فيزياء الحالة الصلبة عند دراسة تفاعلات الفونون مع الأشكال الأخرى للإشعاع مثل الأشعة السينية والنيوترونية والضوء.

الجذير بالملاحظة هو ان الفونونات تتولد ببساطة برفع درجة الحرارة وهكذا يكون عددها في النظام غير محفوظ

المرن التشتت غير والتشتت المرن Elastic And Non-Elastic Scattering

بفرض أن العدد الموجى للفونون q فإنه يتفاعل مع المجالات والجسيمات وكأن . له كمية تحركħq هو وبفرض أن الفونون طويل الموجة فإنه سيرى الوسط الصلب كوسط متصل ويكون تشتته مرن ويكون شرط الحيود هو،

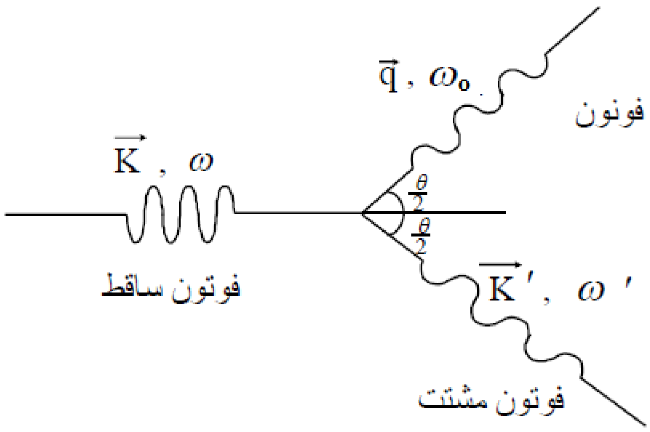
$$\overrightarrow{k'} = \vec{K} + \vec{G}$$

حيث $\vec{G}$ و $\vec{k}$ و $\overrightarrow{k'}$هو متجهات الشبيكة المقلوبة والفونون الساقط والفونون المشتت على نحو الترتيب. إما في حالة التشتت غير المرن فإن التفاعل يؤدى إلى اختفاءأو
ظهور فونون جديد طبقا لمبدأ حفظ كمية الحركة ويكون شرط الحيود هو

$$\overrightarrow{k'} \pm \vec{q} = \vec{k} + \vec{G}$$

حيث تدل الإشارة السالبة على اختفاء(امتصاص)فونون وتدل الإشارة الموجبة على تولد فونون جديد. بالإضافة إلى التفاعل السابق وعند سقوط فوتونات على الشبيكة كما في حالة الأشعة السينية يحدث تشتت للفوتون بواسطة فونونات الشبيكة عندما تكون طويلة الموجة (اكبر بكثير من ثوابت الشبيكة)، وفي هذه الحالة، سوف يعتبر الفونون الشبيكة كوسط متصل .بفرض فوتون له تردد زاوي w ومتجه موجة $\vec{k}$ يسقط على شبيكة لها معامل n ، حيث $k = \frac{nw}{c}$ و c هي سرعة الضوء

. ينتج عن التفاعل تغير متجه موجه الفوتون من$\vec{k}$ الى $\overrightarrow{k'}$ وتردده من w الى w' ويتغير اتجاهه وينتج أيضا ظهور أواختفاء فونون كما هو موضح في الشكل ادناه.



نفترض أن هذا التفاعل يؤدى إلى ظهور فونون له متجه موجة $\vec{q}$ وتردد زاوي$w_0 = v_s k$ حيث v_s تمثل سرعة الصوت، فإن مبدأ حفظ الطاقة يؤدى إلى العلاقة التالية

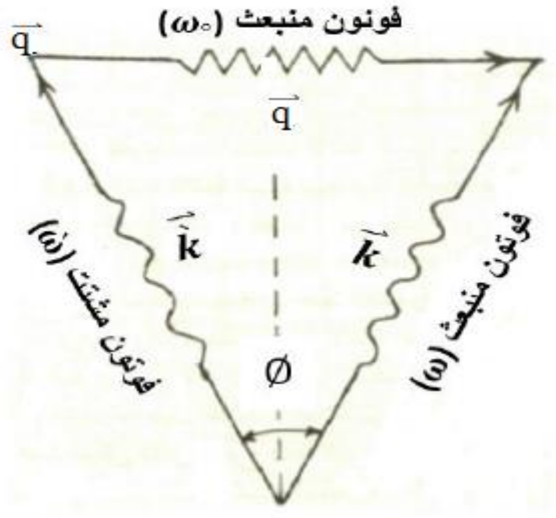
$$\hbar w = \hbar w^{`} + \hbar w_0$$

من مبدأ حفظ الزخم نحصل على ،

$$\vec{K} = \vec{k^{`}} + \vec{q}$$

وحيث أن سرعة الضوء اكبر بكثير من سرعة الصوت $(c \gg v_s)$ فإن طاقة الفونون تمثل جزء صغير جدا من طاقة الفوتون وبالتالي فإن تردد الفونون المتولد تكون اصغر بكثير من تردد الفوتون$(w \gg w_0)$ وهذا يؤدى إلى أن يكون تردد الفوتون المشتت تقريبا مساويا لتردد الفوتون الساقط$(w \approx w^{`})$ وبالتالي $(k \approx k^{`})$ ومن مثلث القوى كما في الشكل ادناه للتشتت نحصل على اتجاه الفونون من العلاقة الآتية

$$(q \approx 2k sin\frac{\theta}{2})$$



وعند التعويض عن قيمة $k = \frac{nw}{c}$ و التردد الزاوي $w_0 = v_s q$ نحصل على الزازية بين الفونون المشتت والفونون المتولد

$$(v_s q \approx \frac{2nv_s}{c} w sin\frac{\theta}{2})$$

بمان $w_0 = v_s k$

$$\left(w_0 \approx \frac{2nv_s}{c} w sin\frac{\theta}{2}\right)$$

عندما الزاوية تساوي π تصبح المعادلة اعلاه

$$\left(w_0(\max) \approx \frac{2nv_s}{c}\mathrm{w}\right) \rightarrow$$

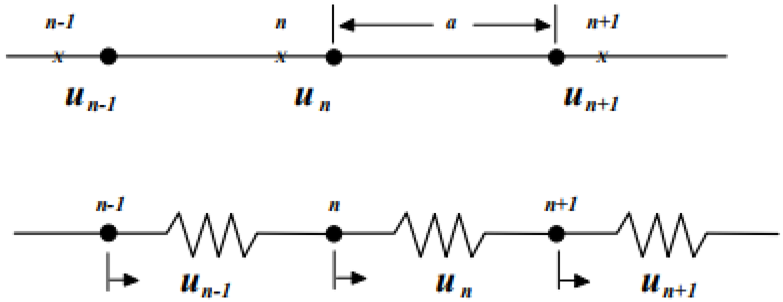
وبذلك نكون قد حصلنا على علاقة تقريبية لتردد فونونات متولدة في بلورة عند استطارة فوتونات استطارة غير مرنة عند زاوية θ ان اقصى تغير نسبي لتردد الفوتون(الضوء المرئي)في هذه العملية فنتيجة استطارته استطارة غير مرنة هو

$$\frac{w - w^{`}}{w} = \frac{w_0}{w} \cong \frac{2nv_s}{c} \quad or\ 2nv_s c^{-1}$$

في جميع المعالجات السابقة، تم إهمال تفرد الشبيكة واعتبارها كوسط متصل،حيث تم افتراض أن علاقة التشتت للفونون علاقة خطية $w_0 = v_s k$ وهذا صحيح فقط عند اعتبار الأطوال الموجية الأكبر بكثير من ثوابت البلورة .عندما يتناقص الطول الموجى ويتزايد العدد الموجى k فإن الموجة تبدأ في التشتت. يؤدى هذا التشتت إلى إعاقة انتشار للموجة وبالتالي إلى تقليل سرعتها. ومع زيادة العدد الموجى k يصبح التشتت أكثر فعالية(حيث تزداد قوة التشتت) ويؤدى ذلك إلى تتناقص سرعة الموجة.

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

نفترض سلسلة خطية مؤلفة من نوع واحد من الذرات متصلة مع بعضها البعض بنوابض مرنة مهملة الكتلة مرونتها α ونفترض وجود تفاعل مع الجوار المباشر فقط وبقية الذرات ليس لها تأثير ،عندما تكون الشبيكة في حالة استقرارفأن كل ذرة تكون مستقرة في موقعها (موقع اتزانها) وعند التذبذب تزاح كل ذرة عن موضع استقرارها بمقدار صغير وبما ان الذرات تتفاعل فيما بينها فان اذرات المتجاورة تتأثر بهذه الحركة بنفس الوقت .نفترض الذرة n كمرجع لسلسة من الذرات كما في الشكل ادناه : تؤثرعليها قوة مثل F_n نتيجة التفاعل مع الذرات (n+1) و (n-1) حيث (U_n - U_{n+1}) ، (U_{n-1} - U_n) الازاحة النسبية



الشكل رقم (1) ازحات شبيكية احادية الذرة في بعد واحد

تؤثرعليها قوة مثل F_n نتيجة التفاعل مع الذرات $(n+1)$ و $(n-1)$ حيث $(U_n - U_{n+1})$ ، $(U_{n-1} - U_n)$ الازاحة النسبية ،ولتكن x_n محصلة ازاحة الذرة n عن موضع استقرارها والتي نحتاجها لايجاد محصلة القوى F_n المؤثرة على الذرة n بحيث:

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

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

α هو ثابت القوة بين الذرتين المتجاورتين و a هي ثابت الشبيكة كما موضح بالشكل رقم (1).

وبتطبيق قانون نيوتين الثاني في الحركة على الذرة n التي كتلتها m تصبح المعادلة رقم (1)

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

وهي معادلة تفاضلية من المرتبة الثانية ، فاذا كانت Nعدد من الذرات فيكون لدينا N من المعادلات التفاضلية وحل هذه المعادلة هو معادلة موجة مستوية في الوسط الصلب المتجانس عند الموضع X_n وتعطى بالعلاقة

$$U_n= U_0\, e^{i(kX_n-wt)}$$

من المعادلة اعلاه نلاحظ ان كل الذرات تهتز بنفس التردد w ولها السعة U_0 والعدد الموجي k و X_n يمثل محصلة ازاحة الذرة n عن موضع استقرارها وان $X_n=an$.
ويمكن التعبير عن ازاحة الذرة n عن موضع استقرارها بالعلاقة

$$U_n= U_0\, e^{i(nka-wt)}$$

نعوض المعادلة اعلاه في معادلة رقم (1) نحصل على

$$-m\frac{d^2}{dt^2}U_0\, e^{i(nka-wt)}= -\alpha (2 U_0\, e^{i(nka-wt)} - U_0\, e^{i((n+1)ka-wt)} - U_0\, e^{i((n-1)ka-wt)})$$

$$-mw^2U_0\, e^{i(nka-wt)}= -\alpha (2 U_0\, e^{i(nka-wt)} - U_0\, e^{i((n+1)ka-wt)} - U_0\, e^{i((n-1)ka-wt)})$$

نقسم طرفي المعادلة على $-mU_0\, e^{i(nka-wt)}$ فنحصل على

$$w^2= \frac{\alpha}{m}(2 - e^{i ka} - e^{-ika})$$

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

نحصل على $\sin^2(\frac{ka}{2})= \frac{1-\cos(ka)}{2}$ وباستخدام العلاقة , $\cos\Theta = \frac{1}{2}(e^{i\Theta} + e^{-i\Theta})$: حيث ان

$$w^2 = \frac{4\alpha}{m}\sin^2(\frac{ka}{2}) \Longrightarrow w= 2\sqrt{\frac{\alpha}{m}}\sin(\frac{ka}{2})\ldots\ldots\ldots(2)$$

نأخذ فقط الاشارة الموجبة للتردد بسبب المعنى الفيزيائي ل w .

عندما $ka=\pi$ فأن $w= w_m= 2\sqrt{\frac{\alpha}{m}}$ فتصبح العلاقة رقم (2)

$$w= w_m \sin\left(\frac{ka}{2}\right)\text{……..(3)}$$

تسمى العلاقة رقم (3) بعلاقة التفريق(dispersion relation) بين w و k لشبيكةاحاديةالذرات في بعد واحد .ونلاحظ انها علاقة جيبية وبدورية مقدارها $\frac{2\pi}{a}$ في فضاء k ، واقصى تردد يساوي w_m عندما $k = \frac{\pi}{a}$.

<u>نستنتج من علاقة التفريق بين w و k لشبيكة احادية الذرات في بعد واحد مايلي:</u>

1- عندما $w=0$ فأن $\sin\left(\frac{ka}{2}\right)=0$ وهذا يتحقق عندما

$$\frac{ka}{2}= 0,\pm\pi, \pm2\pi, \pm3\pi \ldots\ldots$$

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

وعندما $w= w_m$ فأن $\sin\left(\frac{ka}{2}\right)=1$ وهذا يتحقق عندما

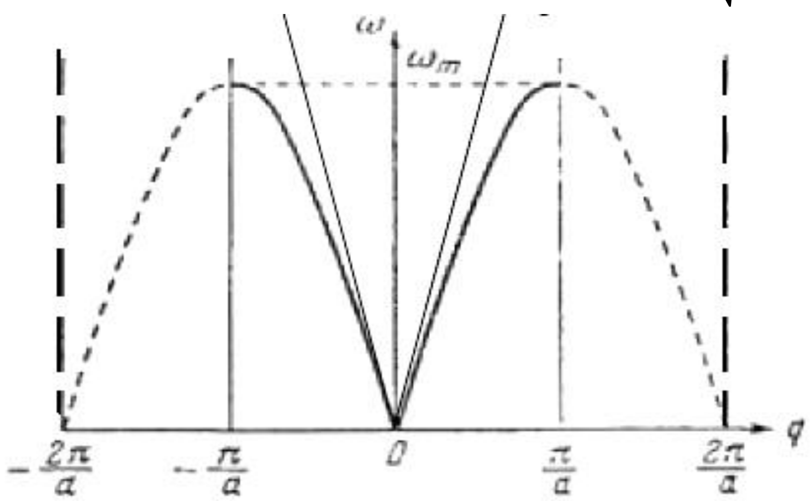
$$\frac{ka}{2}=\pm\frac{\pi}{a}, \pm\frac{3\pi}{a}, \pm\frac{5\pi}{a}\ldots\ldots$$

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

2- الشبيكة تعمل كمرشح ميكانيكي للترددات الواطئة :

بماان منحي التفريق يكون دوري ومتماثل حول نقطة الاصل يمكننا حصر الاهتمام في المدى $0 < k < \frac{\pi}{a}$ وبالمقابل الترددات تغطي المدى $0 < w < w_m$ وهذه الترددات‌فقط هي التي تنتقل بواسطة الشبيكة ويتم اعاقة الترددات الأخرى اذن يمكن القول ان الشبيكة تعمل كمرشح ميكانيكي للترددات الواطئة .وان اعلى تردد مسموح هو w_m

ومن العلاقة $w_m= 2\sqrt{\frac{\alpha}{m}}$ يتضح ان اعلى تردد يتناسب مع كتلة الذرة عكسيا.



3- بالنسبة للأمواج ذات الاطوال الموجية الكبيرة تكون قيمة k صغيرة جدا ($K \to 0$),
($K=\frac{2\pi}{\lambda}$) وعليه فأن ($ka \ll 1$) لذلك يمكن اعتبار $\sin(\frac{ka}{2}) = \frac{ka}{2}$ وتصبح علاقة التفريق في العلاقة رقم (3)كما يلي:

$$w = \frac{w_m a}{2} k$$

حيث $v_s = \frac{w_m a}{2} = a\sqrt{\frac{\alpha}{m}}$ وهي سرعة الصوت

وتصبح علاقة التفريق $w = v_s k$ وهي علاقة خطية بين w و k و v_s ، αهو ثابت القوى ، حيث تسلك هذه الشبيكة ضمن حدود هذه الترددات سلوك الوسط المستمر المرن.

4- للربط بين ثابت القوة α بين الذرات ومعامل يونك Y، نفترض شبيكة مكعبة ثابت الشبيكة لها a واهتزاز المستويات الذرية فيها يعطي نفس المعادلات كما في الشبيكة احادية االبعد ، حيث ترتبط سرعة الصوت v_sترتبط بمعامل يونك Y وكثافة الوسط ρ كما في العلاقة الاتية

$$v_s = \sqrt{\frac{Y}{\rho}} \qquad \because \quad v_s = \frac{w_m a}{2}$$

بمساواة العلاقتين نحصل على

$$\frac{w_m a}{2} = \sqrt{\frac{Y}{\rho}}$$

وبتربيع الطرفيk

$$\frac{w_m^2 a^2}{4} = \frac{Y}{\rho}$$

وبما ان,

$$w_m = 2\sqrt{\frac{\alpha}{m}} \qquad , \qquad \rho = \frac{m}{a^3}$$

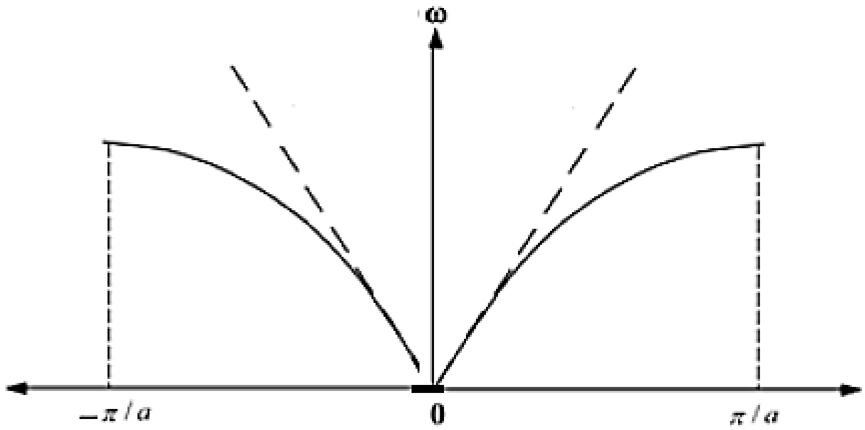
نحصل على

$$\frac{4\alpha a^2}{4m} = \frac{Ya^3}{m}$$

$$\therefore \ \alpha = aY$$

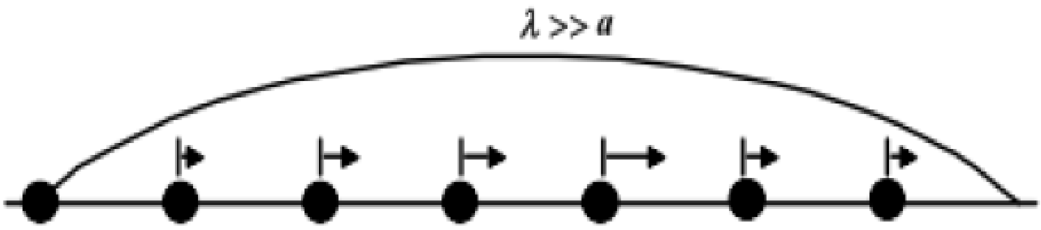
هذه العلاقة $\alpha = aY$ مفيدة لأيجاد ثابت القوة α عند التعويض عن قيم فعلية لثابت الشبيكة ومعامل يونك للمرونة لنوع محدد من الذرات (لشبيكة محددة).

5- عند ازدياد قيمة K فأن منحني الفريق يميل عن الخط المستقيم وينحني نحو الاسفل بينما يصل الى القيمة العظمى عندما $K=\frac{\pi}{a}$ حيث يكون التردد اعلى ما يمكن و $w_m= 2\sqrt{\frac{\alpha}{m}}$ وهو يعتمد ثابت القوة بين الذرات والكتلة .
مثال على ذلك ذرة الهيدروجين فيها $\alpha = 5 * 10^3$ day/cm و m=3*10^{-24} g
فنحصل على $w_m= 2\sqrt{\frac{5*10^3}{2*10^{-24}}} = 10^{14}$Hz و *والتي تقع ضمن حدود منطقة الترددات تحت الحمراء.*



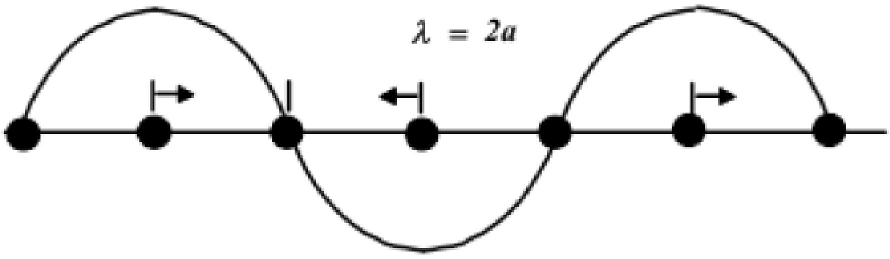
يمكن فهم سلوك منحني التفريق ضمن مدى قيم k المحصورة بين $0 < k < \frac{\pi}{a}$ من خلال مايلي:

- عندما يكون العدد الموجي kصغيرا فأن الطول الموجي يكون كبيرا جدا $\boldsymbol{\lambda} \gg a$ وفي هذه الحالة تتحرك الذرات بأتجاه واحد وبنفس الطور ممايؤدي الى تقليل القوة المعيدة التي تؤثر على كل ذرة بسبب ذرات الجوار



وعندما ($K \to 0$)فأن الطول الموجي ($\boldsymbol{\lambda} \to \infty$) وهذا يعني ان الشبيكة البلوربة تتحرك كلها كجسم واحد وتكون القوة المعيدة الخطية متلاشية وهذا يفسر كون w=0 عندما k=0

- اما عندما $K=\frac{\pi}{a}$ فأن $\boldsymbol{\lambda}=\frac{2\pi}{k}=2a$ ففي هذه الحالة تتحرك الذرات المتجاورة بحيث تكون القوة المعيدة والتردد اعلى ما يمكن.



6- حدود منطقة بريليون الولى : علاقة التفريق تتوفر فيها اغلب المعلومات اذا ما درست في منطقة بريليون الاولى $-\frac{\pi}{a} < k < \frac{\pi}{a}$ حيث ان بقية المناطق $-\frac{\pi}{a} > k > \frac{\pi}{a}$ تكون مكررة.

فعند حدود $k_{max} = \pm\frac{\pi}{a}$ تهتز اذرات المتناوبة باطوار مختلفة بحيث لا تنتقل الموجة الى اليسار ولا الى اليمين ، في هذه الحالة تسمى موجات واقفة standing wave وتكون مكافئة لانعكاس براك للاشعة السينية ،فعندما يتحقق شرط براك لايمكن للموجة المنتقلة ان تنتشر في الشبيكة وبذلك تكون موجة واقفة.

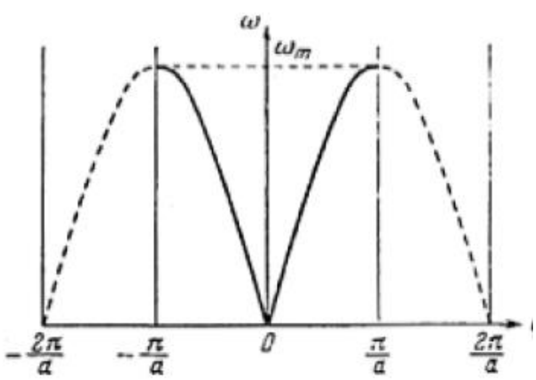
س/ اثبت ان $k = \pm\frac{\pi}{a}$ تحقق شرط براك؟

<u>سرعة الطور وسرعة المجموعة</u>

هناك ثلاث سرع في الحركة الموجية متميزة عن بعضها البعض ولكن ترتبط بعلاقة رياضية فيما بينها.

1- سرعة الذرة atom velocity: وهي السرعة التوافقية للذرات حول موقع اتزانها وهي صغيرة المقدار واعلى قيمة لها لحظة مرور الذرة بموقع الاتزان بينما تساوي صفرا عندما تكون في اقصى ازاحة عن موقع الاتزان.

2- سرعة الطور phase velocity :وهي سرعة تقدم طور معين للموجة المفردة وهي مقدار ثابت في الوسط الواحد وهي تمثل سرعة انتشار موجة نقية ذات ترددw ومتجه موجة k ويعبر عنها رياضيا :



$$v_{ph} = \frac{w}{k}$$

3- سرعة المجموعة group velocity : في حالة التعامل مع مجموعة من الموجات ذات الاطوال الوجية المختلفة التي تتحرك انيا في وسط ما فأنه ينبغي التعامل مع السلوك الجماعي لجميع الموجات في ان واحد وعدم التعامل مع كل موجة على انفراد.

تمثل سرعة المجموعة سرعة النبضة pulse والتي متوسط ترددها w وبمتجه موجي $\vec{k}$ وبما ان الطاقة (الزخم) تنتقل عمليا بواسطة النبضات وليس الموجات النقية لذا فان سرعة المجموعة هي الاكثر اهمية فيزيائيا وتعطى بالعلاقة :

$$v_g = \frac{dw}{dk}$$

من علاقة التفريق $w= 2 \sqrt{\frac{\alpha}{m}} \sin\left(\frac{ka}{2}\right)$

اذن نجد قيمة كلا من سرعة الطور والمجموعة

$$v_{ph} = \frac{w}{k} = \frac{2 \sqrt{\frac{\alpha}{m}} \sin\left(\frac{ka}{2}\right)}{k} = \frac{2\ v_s \sin\left(\frac{ka}{2}\right)}{ka}$$

$$v_g = \frac{dw}{dk} = \frac{d}{dk}\left(2 \sqrt{\frac{\alpha}{m}} \sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right) = v_s \cos\left(\frac{ka}{2}\right)$$

عند الاطوال الموجية الطويلة ($K \rightarrow 0$) فأن $\sin\left(\frac{ka}{2}\right) \approx \left(\frac{ka}{2}\right)$ وبذلك

$$v_{ph} = \frac{w}{k} = \frac{v_s k}{k} = v_s$$

$$v_g = \frac{dw}{dk} = \frac{d}{dk}(v_s k) = v_s$$

اذن

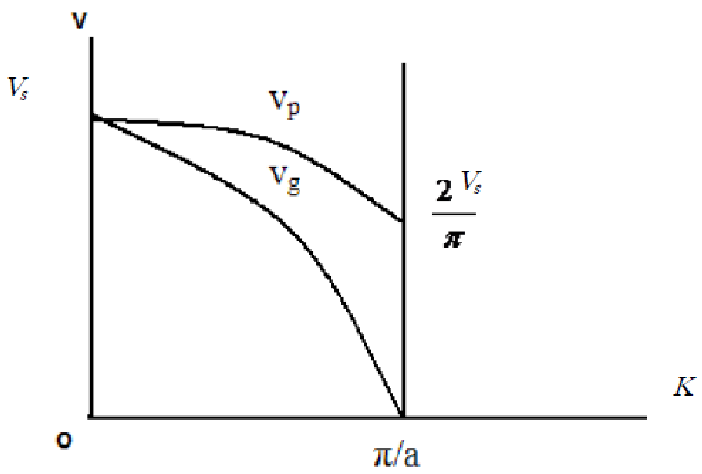
$$v_{ph} = v_g = v_s$$

اماعندما $k = \pm\frac{\pi}{a}$ فأن

$$v_{ph} = \frac{2\ v_s \sin\left(\frac{ka}{2}\right)}{ka} = \frac{2\ v_s}{\pi}$$

$$v_g = v_s \cos\left(\frac{ka}{2}\right) = 0$$

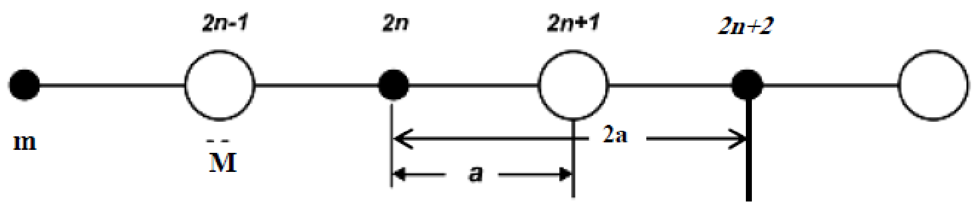
وهذا يعني عدم انتقال الطاقة (لان انتقال الطاقة في الوسط يعتمد على سرعة المجموعة) وهذا مكافئ لأنعكاس براك.



العلاقة بين سرعة الطور والمجموعة والعدد الموجي.

اهتزاز شبيكة ثنائية الذرة في بعد واحد

نفترض خلية الوحدة تحتوي على نوعين من الذرات كتلتيهما m و M حيث $M > m$ والمسافة بينها a .كما موضح في الشكل الاتي



يمكن معالجة حركية الشبيكة بنفس الاسلوب الذي اتبعناه في الشبيكة احادية الذرة . وبما انه توجد ذرتين مختلفتين فأنه يكون لدينا معادلتين للحركة وهما

عندما تكون الذرة m عند 2n هي المرجع فأن :

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

عندما تكون الذرة M عند 2n+1 هي المرجع فأن :

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

نفرض ان حل هذه المعادلتين اعلاه بأخذ الصيغ الأتية:

$U_{2n} = A\,e^{i(2nka-wt)}$

$U_{2n+1} = A\,e^{i((2n+1)ka-wt)}$

واذا عوضنا هذه الحلول في معادلتي الحركة نحصل على

$$-mw^2U_{2n} = \alpha\,(\mathrm{U_{2n+1}} + \mathrm{U_{2n-1}} - 2\mathrm{U_{2n}})$$

$$-Mw^2U_{2n+1} = \alpha\,(\mathrm{U_{2n+2}} + 2\mathrm{U_{2n}} - \mathrm{U_{2n+1}})$$

بعد اجراءبعض التبسيطات كما في مسألة الشبيكة احادية الذرة على المعادلتين اعلاه نحصل على :

$$(2\alpha - mw^2)A - (2\alpha\mathrm{coska})\mathrm{B} = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(1)$$

$$(-2\alpha\mathrm{coska})A + (2\alpha - Mw^2)\mathrm{B} = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots(2)$$

وبأستخدام طريقة المصفوفات في حل المعادلتين الانيتين اعلاه نجد ان ,

$$\begin{vmatrix} 2\alpha - mw^2 & -2\alpha\mathrm{coska} \\ -2\alpha\mathrm{coska} & 2\alpha - Mw^2 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} A \\ B \end{vmatrix} = 0$$

وبما ان A و B يمثلان سعة الاهتزاز للذرتين m وM لذا فأنهما لا يساويان صفرا ، اذن المحدد هو الذي يجب ان يساوي صفرا.

$$\begin{vmatrix} 2\alpha - mw^2 & -2\alpha\mathrm{coska} \\ -2\alpha\mathrm{coska} & 2\alpha - Mw^2 \end{vmatrix} = 0$$

$$(2\alpha - mw^2)(2\alpha - Mw^2) - (2\alpha\mathrm{coska})^2 = 0$$

$$Mmw^4 - 2\alpha(m+M)w^2 + 4\alpha^2(1-\cos^2\mathrm{ka}) = 0$$

$$w^4 - 2\alpha\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)w^2 + \frac{4\alpha^2\sin^2\mathrm{ka}}{Mm} = 0$$

المعادلة اعلاه عبارة عن معادلة من الدرجة الثانية في w^2 وتحل بالدستور فيعطي:

$$w^2 = \alpha\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right) \pm \alpha\sqrt{\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4\sin^2\mathrm{ka}}{Mm}}$$

وهذه هي علاقة التفريق لشبيكة ثنائية الذرة في بعد واحد

<u>هذه العلاقة لها اربعة حلول كما يلي .</u>

<u>الحالة الاولى:</u> عندما $k = \frac{n\pi}{2a}$ حيث n=0, 2, 4……… (اعداد زوجية) تصبح المعادلة:

$$w^2 = \alpha\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right) \pm \alpha\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)$$

1- عندما نأخذ الاشارة سالبة فأن $w_1^- = 0$

2- عندما نأخذ الاشارة موجبة فأن $w^2 = 2\alpha\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)$

$$w_2^+ = \sqrt{2\alpha\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)}$$

الحالة الثانية: عندما $k = \frac{n\pi}{2a}$ حيث n=1, 3, 5……… (اعداد فردية) تصبح المعادلة:

$$w^2 = \alpha\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right) \pm \alpha\sqrt{\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4}{Mm}}$$

أو

$$w^2 = \alpha\left(\frac{M+m}{mM}\right) \pm \alpha\left(\frac{M-m}{mM}\right)$$

1- عندما نأخذ الاشارة سالبة فأن

$$w^2 = \alpha\left(\frac{M+m}{mM}\right) - \alpha\left(\frac{M-m}{mM}\right)$$

$$w_3^- = \sqrt{\frac{2\alpha}{M}}$$

2- عندما نأخذ الاشارة موجبة فأن

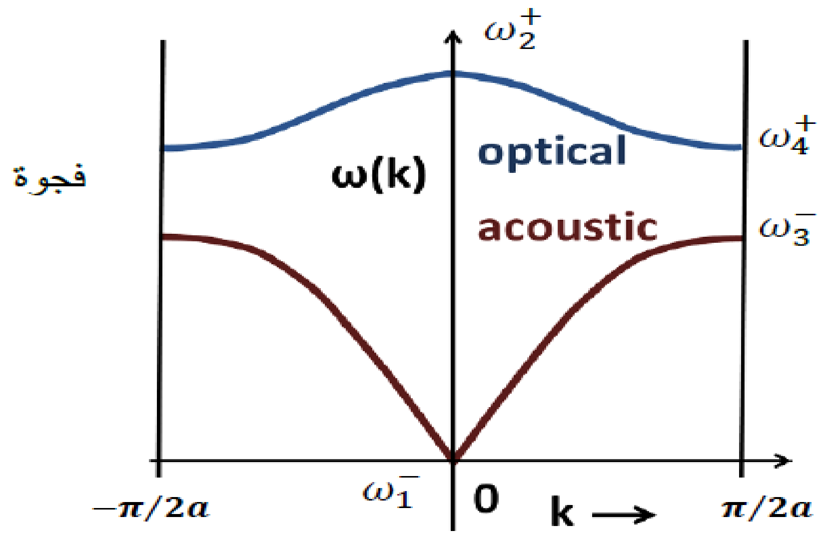
$$w^2 = \alpha\left(\frac{M+m}{mM}\right) - \alpha\left(\frac{M-m}{mM}\right)$$

$$w_4^+ = \sqrt{\frac{2\alpha}{m}}$$

ان الترددات المسموحة للانتشار تنقسم الى فرعين:

1- حلول الأشارة السالبة (w_1^-, w_3^-) يسمى الفرع السمعي Acoustical branch (المنحي الأسفل في الشكل ادناه)

2- حلول الأشارة الموجبة (w_2^+, w_4^+) يسمى الفرع البصري Optical branch (المنحي الأعلى في الشكل ادناه)



ملاحظات:

1- يسمى الفرع البصري بهذا الاسم لان ترددات هذا الفرع تقع في منطقة الأشعة تحت الحمراء اي بحدود 10^{13}هرتز وهو يمثل المنحي الاعلى

2- يسمى الفرع الصوتي بهذا الاسم لان قيم w تقع ضمن الترددات الواطئة وهويمثل المنحي الاسفل.

3- تغير w و k في الفرع السمعي ملحوظ اما في الفرع البصري فتغيره بسيط ويكاد ان يكون w ثابته بالنسبة الى k .

4- مدى التردد بين اعلى قمة للفرع السمعي وأوطا نقطة للفرع البصري هي منطقة الترددات الممنوعة وتسمى الفجوة الممنوعة forbidden gap ويعتمد عرض هذه المنطقة على كتلتي الذرتين.

5- ان حدود منطقة بريليون الأولى هي $\frac{-\pi}{2a} \leq k \leq \frac{\pi}{2a}$.

مقارنة بين الفرع السمعي والفرع البصري

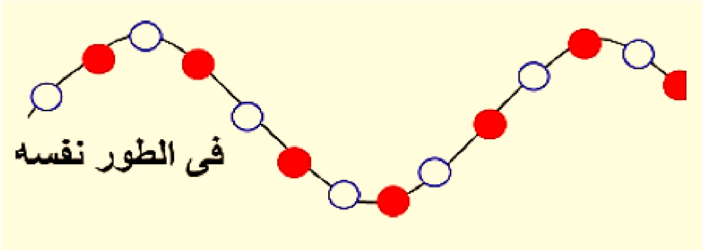
عندما $k \to 0$ في الفرع السمعي فأن $w \to 0$ وبتعويضهما في المعادلة (1) ينتج :

$$(2\alpha - mw^2)A - (2\alpha \cos ka)B = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (1)$$

$$2\alpha A - 2\alpha B = 0$$

$$A = B$$

وهذا يعني ان الذرتين في الفرع الصوتي تمتلكان سعة تذبذب متساوية وكذلك لهما نفس الطور ، اي ان الشبيكة تتحرك كجسم هلامي. وهذا مشابه جدا للموجات الطولية (موجات الصوت)، للذلك سمي بالفرع الصوتي.



$$|k| \ll \frac{\pi}{2a} \approx \frac{1}{a} \quad and \quad w = \sqrt{2\alpha(\frac{1}{m}+\frac{1}{M})} \;\rightarrow\; v_{ph} = a\sqrt{2\alpha(\frac{1}{m}+\frac{1}{M})}$$

وبزيادة قيمة k عند حافة منطقة بريليون الأولى $k = \pm\frac{\pi}{2a}$ فأن قيمة w في الفرع السمعي وبسبب تساوي Aو B حيث يتحركان بنفس الطور تكون مساوية الى

$$|k| \rightarrow \frac{\pi}{2a} \quad and \quad w = \sqrt{\frac{2\alpha}{M}} \quad \rightarrow v_{ph} = \frac{2a}{\pi}\sqrt{\frac{2\alpha}{M}} = \sqrt{\frac{8\,a^2\alpha}{M\pi^2}}$$

في الفرع البصري عندما $k = 0$ فأن $w = \sqrt{2\alpha(\frac{1}{m}+\frac{1}{M})}$ وبالتعويض في المعادلة (2) :

$$(-2\alpha\text{coska})A + (2\alpha - Mw^2)\text{B} = 0 \ldots\ldots\ldots\ldots(2)$$

$$-2\alpha A + 2\alpha\left(1-(1+\frac{M}{m}\right)\text{B} = 0$$

$$A = -\frac{M}{m}\text{B} \qquad or \qquad \frac{A}{B} = -\frac{M}{m}$$

هذا معناه ان التذبذب البصري يحدث عندما تكون مركز كتلة الخلية (الحاوية على الذرتين) يبقى ثابتا بينما تتحرك الذرات بفارق طور مقداره $v_{ph} = 0, \pi$.

وعندما تزداد k نجد ان اهتزاز الذرات يتناقص ولكن ليس بشكل كبير وان الذرات تستمر بالاهتزاز بفارق طور π .تكون قيمة سرعة المجموعة في الفرع السمعي والبصري تساوي $(v_g = 0)$