مجلة جامعة تشرين للدراسات والبحوث العلمية – سلسلة العلوم الأساسية المجلد /16/ العدد /3/ 1414 هـ 1994م.

مدخل إلى مفهوم الفونون

د . ضيف الله نصور*

◻ ملخص ◻

يعرض هذا المقال بطريقة مبسطة انتشار الأمواج المرنة في وسط دوري (أي في بلورة) ويُظهر النتائج المتعلقة بتكميم هذه الأمواج، (أي الفونون) ويضع النقاط فوق الحروف في المسائل الأساسية التالية:

– مفهوم علاقة التشتت التي تربط بين التواتر الزاوي للموجة ω وبين شعاع موجتها $\vec{k}$ وذلك من أجل كل نوع من الاستقطاب، هذا وإنّ التابع $\omega(\vec{k},p)$ يتعلق بطبيعة البلورة وحسابه معقد جداً بشكل عام ويتطلب بعض التقريبات كما فعل دوباي Debye مثلاً.

– لا يُمكن لطاقة البلورة التي تنتشر فيها الموجة المرنة أن تتغير إلا على هيئة كمات أي بأعداد صحيحة من $\hbar\omega$ وهذا يؤدي لمفهوم الفونون.

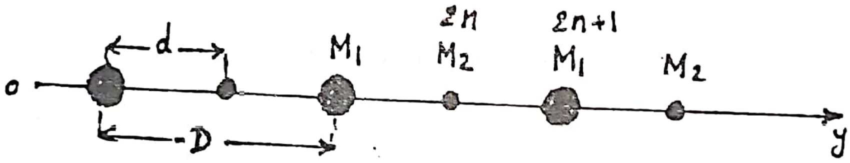
– يميز عدد فونونات الطاقة $\hbar\omega(\vec{k},p)$ الموجة المرنة المعتبرة، وفي حالة الأمواج الحرارية يكون هذا العدد متناسباً مع كثافة الطاقة في كل سوية ومع المعدل الوسطي لشغل هذه السوية المستمد من احصاء بوزة – أنشتاين.

* الدكتور ضيف الله نصور أستاذ مساعد في قسم الفيزياء بكلية العلوم – جامعة تشرين – اللاذقية – سورية.

I ـــــ انتشـــار موجـــة مرنـــة طوليـــة:
Propagation d'une onde élastique)
(longitudinale

لنعتبر عدداً لا نهائياً من الجزيئات (ذرات أو ايونات) تتوزع بشكل خطي على المستقيم oy بحيث تكون متساوية البعد عن بعضها في حالة التوازن ولنرمز لهذا العدد بـ

b. يتألف التوزع المفترض من نوعين من الجزيئات كتلة الجزيئة من النوع الأول M1 وترتيبها فردي 2n+1 ويتعين موضعها على المحور oy بإحداثياتها y_{2n-1}. وكتلة الجزيئة من النوع الثاني M2 وترتيبها زوجي 2n ويتعين موضعها على المحور oy بإحداثياتها y_{2n}.



الشكل (1): توزع خطي ودوري للجزيئات دوره D = 2d.

وهكذا يكون توزع كل من النوعين دورياً ودوره D = 2d

وعندما تنزاح جزيئة من الجزيئات عن وضع توازنها. لسبب من الأسباب فإنّ هذا التوزع الدوري يتشوه وتخضع كل جزيئة إلى تأثير الجزيئتين المجاورتين لها أي تخضع الجزيئة 2n مثلاً لتأثير الجزيئتين 2n-1 , 2n+1 أما تأثير باقي الجزيئات فسنعتبره مهملاً وضمن هذا التقريب يمكننا التعبير عن القوة المؤثرة في الجزيئة 2n استناداً إلى قانون هوك بالعلاقة:

$$(1)\ F_{2n}=-\alpha(y_{2n}-y_{2n-1})-\alpha(y_{2n}-y_{2n+1})$$

حيث α ثابت موجب $\alpha\rangle 0$ يدعى ثابت التفاعل بين الجزيئات وهو شبيه بعامل قساوة النابض كما أنّ المعادلة السابقة شبيهة تماماً بالحالة الكلاسيكية للنابض المستخدم في مجاله الخطي أي في المجال التي تكون فيه الطاقة الكامنة متناسبة مع مربع الإنتقال y. وبتطبيق قانون نيوتن في التحريك نحصل على معادلة حركة الجزيئة ذات الترتيب 2n:

$$(2a)\ M_2 y''_{2n}=\alpha(y_{2n-1}+y_{2n+1}-2y_{2n})$$

وبإعادة ما سبق من أجل الجزيئة ذات الترتيب 2n+1 نحصل على معادلة الحركة التالية:

$$(2b)\ M_1 y''_{2n+1}=\alpha(y_{2n}+y_{2n+2}-2y_{2n+1})$$

لنبحث عن حلول لهاتين المعادلتين من الشكل:

$$(3a) \ldots\ldots \quad y_{2n} = A_2 e^{i[wt-2nkd]} = A_2 e^{i(wt-kx_{2n})}$$
$$(3b) \ldots\ldots \quad y_{2n+1} = A_1 e^{i[wt-(2n+1)kd]} = A1 e^{i(wt-kx_{2n+1})}$$

حيث رمزنا بـ $x_{2n} = 2n\ kd$ و $x_{2n+1} =$ $(2n+1)\ kd$

التي تمثل إحداثيات الجزيئتين 2n و (2n+1) في حالة السكون.

w=2nv تُمثل التواتر الزاوي للموجة التي تواترها v،

$k = 2\pi / \lambda$ يُمثل شعاع الموجة التي طولها λ

تُمثل المعادلتان 3a , 3b أمواجاً طولية تنتشر على طول المحور oy، تخص المعادلة 3a موجة الجزيئات ذات الترتيب الزوجي فقط. أما المعادلة 3b فتخص موجة الجزيئات ذات الترتيب الفردي. بتعويض 3a , 3b في المعادلتين 2a , 2b نحصل على:

$$M_2 A_2 \omega^2 = \alpha\left(A_1 e^{ikd} + A_1 \bar{e}^{ikd} - 2A_2\right)$$
$$M_1 A_1 \omega^2 = \alpha\left(A_2 e^{ikd} + A_2 \bar{e}^{ikd} - 2A_1\right)$$

التي يُمكن ترتيبها بالشكل:

$$(4)\begin{cases} 2A_1 \alpha Coskd + A_2\left(M_2\omega^2 - 2\alpha\right) = 0 \\ A_1\left(M_1\omega^2 - 2\alpha\right) + 2A_2 \cos kd = 0 \end{cases}$$

ولكي يكون لجملة هاتين المعادلتين الخطيتين في A_1 , A_2 حلاً مشتركاً غير تافه يجب أن يكون معين أمثالهما معدوماً أي:

$$\begin{vmatrix} 2\alpha \cos kd & M_2\omega^2 - 2\alpha \\ M_1\omega^2 - 2\alpha & 2\cos kd \end{vmatrix} = 0$$

ومن نستنتج أنَّ:

$$(5).\ \omega^4 - 2\alpha\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)\omega^2 + \frac{4\alpha}{M_1 M_2}\sin^2 kd = 0$$

تقبل هذه المعادلة حلين حقيقيين في ω^2 أي قيمتين لـ ω ونجد:

$$(5) \quad \omega^2(k) = \alpha\left[\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right] \pm \sqrt{\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)^2 - \frac{4}{M_1 M_2}\sin^2 kd}$$

التي تكتب:

$$(6) \quad \omega^2(k) = \frac{\alpha}{M_1 M_2}\left[M_1 + M_2 \pm \sqrt{M_1^2 + M_2^2 + 2M_1 M_2 \cos 2kd}\right.$$

تدعى هذه المعادلة بين ω و k (أي بين v و λ) علاقة التشتت Relation de dispersion من أجل الأمواج المرنة الطولية التي تنتشر على طول محور الجزيئات. وتعرّف سرعة الطور بأنها سرعة الموجة وحيدة التواتر وهي سرعة نظرية تحسب من العلاقة:

$$\lambda = \frac{V}{v}$$

أو من العلاقة:

$$(7) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots V = \omega/k$$

وهذه السرعة في حالة الموجة المرنة التي ندرسها هنا تكون تابعة لـ k (أو تابعة لـ ω) ويُمكن إظهار ذلك صراحةً من علاقة التشتت.

لا يُمكننا من النواحي العملية الحصول إلا على مجموعة من الأمواج المتقاربة جداً في تواتراتها، فيحدث بينها حادثة تراكب

الأمواج التي تؤدي إلى حدوث نهايات عظمى وصغرى. نقيس عملياً سرعة انتشار النهايات العظمى وندعوها سرعة المجموعة u، تُمثل سرعة المجموعة سرعة انتشار الطاقة التي تحملها الموجة وهي تساوي في حالة عدم وجود امتصاص إلى: $u = \partial \omega / \partial k$

إذا كانت سرعة الطور مستقلة عن k (أي ω متناسبة طرداً مع k) تكون سرعة المجموعة مساوية لسرعة الطور ويُقال عن الوسط أنه غير مشتت (non dispersif) وهذا بالطبع ليس حالة الموجة المرنة التي ندرسها هنا.

بتعويض قيمة ω^2 من المعادلة (6) في جملة المعادلتين (4) يُمكننا حساب نسبة سعة الموجتين $\frac{A_1}{A_2}$ فنجد:

$$\frac{A_1}{A_2} = \frac{2\alpha - M_2\omega^2}{2\alpha \cos kd} \quad \text{(8)}$$

II ــــ دراســـة التـــابع $\omega(k)$: $(\omega(k))$

Etude des Fonction

نلاحظ من علاقة التشتت أنه إذا بدلنا كل k بـ $\left(K + \pi/d\right)$ فإنَّ ω(k) لا تتغير أي أنَّ ω(k) تابع دوري دوره π/d، لذلك يكفي أن نقصر دراستنا على دور واحد أي أن نضع أنفسنا في المجال: $0 \le kd \langle \pi$.

وإذا أردنا ادخال الأمواج التي تنتشر باتجاه oy السالب $k < 0$ فإنه يُفضل اختيار المجال:

$$\frac{-\pi}{2d} \le K \langle \pi/2d$$

يُدعى هذا المجال بالمنطقة الأولى لبريوان التي تخص الشبكة البديلة

"Premiere Zone de Brillouin de reseau reciproque"

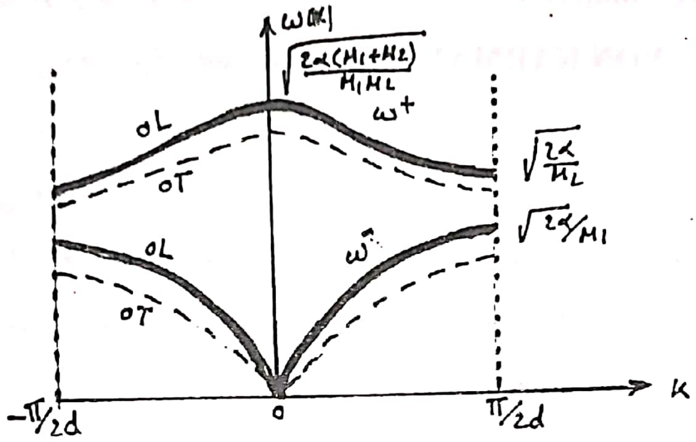
تتشكل الشبكة البديلة هنا من مجموعة من النقاط متساوية البعد عن بعضها وهذا البعد يساوي $\frac{2\pi}{D}$ حيث D=2d هو دور توزع الجزيئات على المحور oy في الشبكة المباشرة.

إذاً دور الشبكة البديلة هو مقلوب الشبكة المباشرة مضروباً بـ 2π.

يمكننا التعبير عن دورية $\omega(k)$ بالعلاقة:

$$\omega(k) = \omega(k + K)$$

حيث $k = P\frac{\pi}{d}$ و P عدد صحيح وهو يمثل القياس الجبري للشعاع البديل. $\bar{k}$ أي أنَّ نهاية وبداية هذا الشعاع هما عقدتان من الشبكة البديلة.



الشكل (2): منحني التشتت $\omega^{+}(k),\omega^{-}(k)$ من أجل الأمواج الطولية (oL) والعرضية (oT) التي تنتشر على طول المستقيم oy.

لقد مثلنا على الشكل (2) تغير $\omega^{+}(k)$ التي توافق الجذر الموجب في المعادلة (6) وتغير $\omega^{-}(k)$ التي توافق الجذر السالب بخطوط تامة وفرضنا في رسمه أنّ M1 > M2.

وسوف نعرض بعض النتائج تاركين للقارئ نهمة الحساب وذلك في المنطقة الأولى لبريوان.

إذا كان k = 0 فإن ω^{-} تساوي الصفر أما ω^{+} فتساوي: $\sqrt{\frac{2\alpha(M_1+M_2)}{M_1M_2}}$.

إذا كان $k=\pm\pi/2d$ فإنّ $\omega^{-}=\sqrt{2\alpha/M_1}$ أما $\omega^{+}=\sqrt{\frac{2\alpha}{M_2}}$.

نلاحظ من العلاقة (6) أنّ $\omega^{-}(k)$ تزداد بدءاً من ($\omega^{-}=0$ ، k = 0) إلى القيمة $\left(\omega^{-}=\sqrt{\frac{2\alpha}{M_1}},k=\frac{\pi}{2d}\right)$ وفق قانون قطع مكافئ. كما أنه في الدور التال_ تكون نقطة البدء منطبقة على النقطة الموافقة لـ $\left(\omega^{+}=\sqrt{\frac{2\alpha}{M_2}},k=\frac{\pi}{2d}\right)$ وتتناقص $\omega^{-}(k)$ إلى الصفر وفق القانون نفسه.

نلاحظ أيضاً من العلاقة (6) أنّ $\omega^{-}(k)$ تتناقص بدءاً من $\left(\omega^{+}=\sqrt{\frac{2\alpha(M_1+M_2)}{M_1M_2}},k=0\right)$ إلى القيمة $\left(\omega^{+}=\sqrt{\frac{2\alpha}{M_2}},k=\frac{\pi}{2d}\right)$ وفق قانون قطع مكافئ، وفي الدور التالي ينعكس الأمر أي أنّ ω^{+} تزداد من النقطة $\left(\omega^{+}=\sqrt{\frac{2\alpha}{M_2}},k=\frac{\pi}{2d}\right)$ إلى النقطة $\left(\omega^{+}=\sqrt{\frac{2\alpha(M_1+M_2)}{M_1M_2}},k=0\right)$ وفق القانون نفسه.

يدعى الفرع ω^- بالفرع الصوتي branch acoustique لأنَّ التواترات الموافقة له تقع في المجال الصوتي وفوق الصوتي hypersonique. بينما يدعى الفرع ω^+ بالفرع الضوئي branche optique لأنَّ التواترات الموافقة له تقع في المجال الضوئي.

هذا وأن عرض عصابة النافذة من أجل الفرع الصوتي تكون محصورة بين $\omega_1 = 0$ و $\omega_2 = \sqrt{\frac{2\alpha}{M_1}}$ بينما تكون في الفرع الضوئي محصورة بين $\omega_1 = \sqrt{\frac{2\alpha}{M_2}}$ و $\omega_2 = \sqrt{\frac{2\alpha(M_1+M_2)}{M_1M_2}}$.

يمكن للقارئ أن يدرس تغيّر سعتي الموجتين $\frac{A_1}{A_2}$ على بداية ونهاية المجال الأول لبريوان من أجل كل فرع أي من أجل: k=0 و $k = \pm\frac{\pi}{2d}$.

ملاحظة: الأمواج العرضية (ondes transversales)

تتولد هذه الأمواج من اهتزازات الجزيئات بشكل عمودي على المحور oy ويُمكن دراستها بالطريقة ذاتها فنحصل على المعادلات نفسها، والذي يتغير هو فقط الثابت α إذ يكون أصغر في هذه الحالة، وقد مثلنا على الشكل (2) ω^-, ω^+ الموافقة لهذه الحالة بخطوط منقطة.

III ـــ الشروط الحدية لبورن ـــ فون كارمان: Conditions aux limites: BORN - VON KARMAN

لقد تمت الدراسة السابقة كما لو أنَّ الشبكة الخطية ذات الدور D = 2d لا نهائية الأبعاد ولكن بالحقيقة للشبكة دائماً طول محدود L = N2d حيث يُمثل N عدد الأدوار.

لذا فإنَّ الموجة المنتشرة على هذه الجزيئات تخضع لشروط حدية، وإذا اعتبرنا شروطاً حدية دقيقة فإنَّ ذلك لن يؤثر كثيراً على خصائص الأمواج المنتشرة في البلورة وذلك لأنَّ N كبير جداً L>>D ولهذا فإننا نُدخل شروط حدية عشوائية تكمن فائدتها في بساطتها الرياضية تدعى هذهالشروط بالشروط الدائرية لبورن ـ فون كارمان وهي تفرض الدورية على كل من الأمواج (3a) و (3b) على طول مساوٍ لـ L = 2Nd = ND بحيث يكون:

$$(9a)........y(x) = y(x+ND)$$

$$(9b)........\frac{\partial\, y(x)}{\partial\, x} = \frac{\partial}{\partial\, x}(x+ND)$$

بالتعويض في (3a) , (3b) نحصل على: $e^{iKND} = 1$

ومنه: KND = 2πn حيث n عدد صحيح.

أما طول الموجة فهو:

$$(10).........\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi ND}{n\pi} = L/_n$$

وهكـذا فإنـه يُمكننـا تمثيـل قيـم k في الشـبكة البديلة بنقاط متساوية البعد عن بعضهـا وهـذا البعد مساوٍ لـ $\frac{\pi}{Nd}$.

لـذا فإنـه يكـون لدينـا في المجـال $N \; o \le kd\langle\pi$ نقطة توافق $n= 0,1,2....N-1$ كما ويكون لدينا N نقطة أيضـاً في المنطقة الأولى لبريوان: $\frac{-\pi}{2d}\langle k\langle\frac{\pi}{2d}$

تجدر الملاحظة بأنـه مـن أجـل كـل موجة يكون عـدد القيـم الممكنـة لــ k مسـاوٍ تماماً لعدد درجات الحرية للجملة الـتي نـدرس انتشار الموجة فيها. فبالحقيقة كل موجـة تمثـل حركة اهتزازية طولية لـ N جزيئـة (الجزيئـات ذات الـترتيب الزوجـي الممثـلة بالمعادلـة 3a والجزيئـات ذات الـترتيب الفـردي الممثـلـة بالمعادلـة 3b) وهـذا يوافق N درجـة حريـة انسحابية.

IV ــ الشبكة ثلاثية البعد: (Reseaux Tridimensionneles)

البلورة هي شبكة ثلاثية الأبعاد مبنيـة على عـروة أساسـية معرفـة بثلاثـة أشـعة $\bar{D}_1,\bar{D}_2,\bar{D}_3$ أما الشبكة البديلة لهـذه الشـبكة فمبنية على عروة أساسـية أشـعتها $\bar{a}_1,\bar{a}_2,\bar{a}_3$ ترتبط بالأشعة السابقة بالعلاقة:

$$\bar{D}_i.\bar{a}_j = 2\pi\delta ij$$

حيث δ ij هو رمز كرونيكر:

$$\delta ij = \begin{cases} 1 & \text{عندما } i = j \\ 0 & \text{عندما } i = j \end{cases}$$

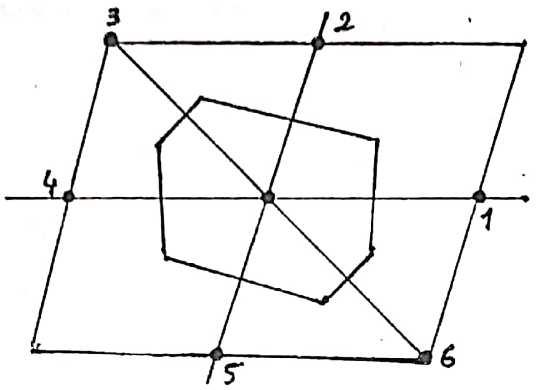
وهذا ما هو إلا تعميم للشبكة البديلة وحيدة البعد.

يُعرّف حجم العروة الأساسية في الشبكة المباشرة V_d بأنه الجداء المختلط للأشعة $(\bar{D}_1,\bar{D}_2,\bar{D}_3)$ كما يُعرّف حجم العروة الأساسية في الشبكة البديلة Vr بالجداء المختلط للأشعة $(\bar{a}_1,\bar{a}_2,\bar{a}_3)$ ونلاحظ أنهما يرتبطان بالعلاقة:

$$(11).......V_r = \frac{(2\pi)^3}{V_d}$$

إذا كانت (o) تُمثل عقدة في الشبكة البديلة واعتبرناها مبدءاً للأشعة فإننا نُعرّف الشعاع $\bar{K}$ من الشبكة البديلة بالعلاقة: $\bar{K} = \vec{OA}$، حيث A عقدة لا على التعيين من الشبكة البديلة وتكون المنطقة الأولى لبريوان في الشبكة البديلة هي أصغر شكل متعدد الوجوه مركزه (o) ومحدود بالمستويات الوسطى للأشعة $\bar{K}$ ذات المبدأ (o).

يُمثل الشكل (3) المنطقة الأولى لبريوان لشبكة ثنائية البعد ويبرهن أنَّ حجم المنطقة الأولى لبريوان يساوي V_r. (لمزيد من المعلومات يُمكن للقرئ العودة إلى كتاب بريوان نفسه [1]).



الشكل (3): المنطقة الأولى لبريوان لشبكة ثنائية البعد وهو محدود بالمستويات الوسطى للقطاعات التي تصل العقدة المركزية بالعقد المرقمة. سطح هذه المنطقة يساوي مساحة متوازي الأضلاع.

V ـ انتشار موجة مرنـة في بلـورة: (Onde Elasique dans un Cristal)

سوف نُبسط انتشار الأمواج المرنة في البلورة ولذلك سنقصر دراستنا على الحالة التي تكون فيها البلورة حاوية على ذرة واحدة في كل عروة. فإذا رمزنا بـ N للعدد الكلي للعرى (أي N ذرة) فإنَّ العدد الكلي لدرجات الحرية هو 3N. ولقد عرضنا في الفقرة الأولى من هذه المقالة نموذج بلورة وحيدة البعد تحوي كل عروة فيها على ذرتين ولكننا أدخلنا موجتين منفصلتين تنتشر كل منهما على نوع واحد من الذرات أي أنه لدينا N ذرة.

إنه لمن المستبعد وخصوصاً في حدود هذه المقالة أن نقوم بحساب دقيق لتكميم الموجة المرنة المنتشرة في البلورة حتى في الحالة التي نفرضها هنا والتي يكون فيها كمون التفاعل بين الجزيئات له شكل توافقي وننصح القرئ بالعودة إلى كتاب فيزياء الجسم الصلب لشارل كيتل [2].

سنستند إلى النتيجة الأساسية لهذا الحساب التي تخص الطاقة الوسطى E الحركية والكامنة لذرات البلورة التي تنتشر فيها الموجة المرنة. يدل الحساب على أنه من أجل كمون تفاعل توافقي والأخذ بعين الاعتبار لقاعدة تكميم الموجة فإنَّ هذه الطاقة تأخذ الشكل التالي:

$$(12)\ldots E=\sum_{\vec{k},p}\hbar\omega(\vec{k},p)\left[n(\vec{k},p)+\frac{1}{2}\right]$$

ـ $\hbar = h/_{2\pi}$ حيث h هو ثابت بلانك.

ـ $\vec{k}$ يلعب دور شعاع الموجة.

ـ P قرينة يُمكن لها أن تأخذ الأعداد (P = 1,2,3) وتصف حالة الاستقطاب الممكنة للموجة المرنة وبشكل أكثر دقة من أجل كل قيمة للشعاع k يُمكننا أن نميز بين نوعين من الأمواج:

أمـــــواج مســــــتقطبة طوليـــــاً (Longitudinale) يكون فيها انتقال الذرات موازٍ للشعاع k ويوافق ذلك قيمة لـ p (مثلاً: p = 1).

أمـــــواج مســــــتقطبة عرضيـــــاً (Transversale) يكون فيها انتقـال الـذرات معـامداً للشـعاع $\vec{k}$ فمن أجـل $\vec{k}$ معـين لا يوجد سوى اتجاهين ممكنين معامدين له وهـذا يوافـق قيمتـين P همـا (P = 2,3). يُمكننـا تلخيص ذلك بقولنا أنـه مـن أجـل كـل قيمـة للشعاع K يوجه ثلاثة أشعة واحـدة $\vec{e}(\vec{k},p)$ هي: $\vec{e}_1(\vec{k},1)$ موازٍ للشـعاع $\vec{k}$ و $\vec{e}_2(\vec{k},2)$، $\vec{e}_3(\vec{k},3)$ معـامدين لـ $\vec{k}$ تُمثـل هـذه الأشـعة الثلاثـة حـالات الاسـتقطاب الخطـي الممكنـة للموجة، وهي متعامدة فيما بينها. نحصل على موجة ما بعملية التراكب أي بعملية جمع على P من أجل $\vec{k}$ معروف ومن ثـمَّ بعمليـة جمـع على $\vec{k}$.

ـ $\omega(\vec{k},p)$ يُمثل التواتر الزاوي للموجة ذات الاسـتقطاب P وشـعاع الموجـــة $\vec{k}$. أمـــا $\hbar\omega(\vec{k},p)=h\nu(\vec{k},p)$ فيُمثل طاقة.

هـذا وأنَّ التـابع $\omega(\vec{k},p)$ يُعطـى دائماً بعلاقة التشـتت مـن أجـل P مفروضـة. وعلاقات التشتت هذه هي التي تؤدي بشـكل أساسي لادخال شكل البلـورة وحلها متعـذر بشكل عام إلا ضمن بعض التقريبات وسـوف نعرض في فقـرة قادمـة طريقـة مـن التقريـب السهلة وهي طريقـة دوبـاي. وكمـا في حالـة البلورة وحيدة البعد فإنَّ شروط الدورية يؤدي إلى كتابة:

$$\omega(\vec{k},p)=\omega(\vec{k}+\vec{K},p)$$

حيث $\vec{K}$ يُمثل شعاع الشبكة البديلة.

في النواحي العلمية وعوضاً عن تحديد قيم $\vec{k}$ للعروة الأساسية للشـبكة البديلـة فإننـا نحـدد قيمتـه في المنطقـة الأولى لـبريوان بحيـث يشغل هذا التحديـد جميـع اتجاهـات الانتشـار الممكنة (اتجاه $\vec{k}$ يُحـدد اتجـاه الانتشـار) وإذا أخذنا الشروط الحدية لبورن ــ فـون كارمـان فلا يوجد بداخل المنطقة الأولى لبريوان سـوى N قيمة ممكنة لـ $\vec{k}$. إذاً تحـوي المعادلـة (12) على 3N حداً (ناتجة عن N قيمة لـ $\vec{k}$ وثلاثـة قيم لـ P) وهذا يوافق 3N درجـة مـن الحريـة لذرات البلورة.

ـ $n(\vec{k},p)$ يُمثـل عـدداً صحيحـاً موجبـاً أو معدوماً يميز الموجة المنتشرة في البلورة وسـوف نعـرض في الفقـرة IX الحسـاب التقريـبي لهـذا التابع من أجل موجة حرارية.

ملاحظة:

تجدر الملاحظـة بـأنَّ كـل حـد مـن المجموع الممثل بالمعادلة (12) أي كل طاقة:

$$E(\vec{k},p)=\hbar\omega(\vec{k},p)\left[n(\vec{k},p)+\frac{1}{2}\right]$$

تُمثـل سـوية الطاقــة لهـزاز توافقـي كوانتي. لهذا يُمكننا اعتبار البلورة التي تنتشـر فيهـا الموجـة المرنـة وكأنهـا مجموعـة مـن 3N هزاز توافقي وذلـك مـن وجهـة نظر الطاقـة.

وكل هزاز يتميز بزوج $(\vec{k},p)$ وطاقة $E(\vec{k},p)$ وهذه الطاقة التي توافق $\omega(\vec{k},p)$ هي التي تُدخل طبيعة البلورة في الحساب أما العدد الصحيح $n(\vec{k},p)$ فيتعلق بالموجة المعتبرة.

VI ـ الفونون: (Phonons)

تبين العلاقة (12) أنَّ الطاقة E مكممة لأنه لا يُمكن لها أن تتغير إلا بأعداد صحيحة من $\hbar\omega$ وهذا ما يقودنا لمفهوم الفونون أو ما يُسمى كوانتوم الطاقة المرنة. إذاً يُدين الفونون باسمه إلى تكميم طاقة الأمواج الصوتية (Ondes Acoustiques). نربط من خلاله كل زوج مرتب $(\vec{k},p)$ بفونون طاقته $\hbar\omega(\vec{k},p)$

يُمثل المقدار $n(\vec{k},p)$ الوارد في العلاقة (12)، من وجهة نظر الطاقة هذه، عدد الفونونات التي شعاع موجتها $\vec{k}$ واستقطابها P أي عدد كمات الطاقة $\hbar\omega(\vec{k},p)$ الموجودة داخل البلورة التي تنتشر فيها الموجة المرنة وأي تغير في الطاقة E يفسر بتوليد أو امتصاص للفونونات.

إنه لمن الصعب المرور من مفهوم كوانتم الطاقة إلى مفهوم النقطة المادية لأنه من المستحيل مثلاً اعتبار الفونون وكأنه نقطة مادية كمية حركتها تعطى بعلاقة دوبروي (de Broglie) أي بالشعاع: $\vec{P}=\hbar\vec{k}$.

الذي قياسه: $|\vec{P}|=\dfrac{h}{2\pi}\dfrac{2\pi}{\lambda}=\dfrac{h}{\lambda}$

كما هو الحال عند دراسة جسيم مادي عادي. وهذا يأتي من حقيقة كون $\vec{k}$ محدود داخل المنطقة الأولى لبريوان ومن حقيقة أنه إذا أضفنا إلى الشعاع $\vec{k}$ شعاعاً آخراً $\vec{K}$ من الشبكة البديلة فإنه يكون لدينا $E(\vec{k},p)=E(\vec{k}+\vec{k},p)$ أي أنَّ كمية الحركة تصبح معرفة بتقريب $\hbar\vec{K}$. يلعب المقدار $\hbar\vec{k}$ دوراً أساسياً في كتابتنا لقوانين الانحفاظ عند دراستنا للتفاعل بين الموجة المرنة المنتشرة في البلورة وبين موجة كهرطيسية (سيل من الفوتونات) أو بين جسيمات أخرى (الكترونات أو نترونات).

إذا كانت $\hbar\vec{k}_i$ و $\hbar\omega_i$ يُمثلان طاقة وكمية حركة الجسيم المتفاعل مع الموجة المرنة على الترتيب فإنَّ هذا التفاعل يؤدي إما إلى توليد أو امتصاص الفونونات التي شعاع موجتها $\vec{k}$. وبتطبيق قانوني انحفاظ الطاقة وانحفاظ كمية الحركة نجد:

$$(13)\ldots\ldots\ldots\hbar\omega_i=\hbar\omega_i'+\hbar\omega$$

(فونون)

$$(14)\ldots\ldots\ldots\ldots\hbar\vec{k}_i=\hbar\vec{k}_i'+\hbar\vec{k}+\hbar\vec{K}$$

(فونون)

حيث تُمثل $\hbar\vec{k}_i'$ و $\hbar\omega_i'$ طاقة وكمية حركة الجسيم بعد التفاعل أما $\vec{k}$ فيمثل شعاع الشبكة البديلة والحد $\hbar\vec{k}$ يُمثل كمية الحركة المنقولة بنتيجة التفاعل إلى كامل البلورة. ووجود هذا الحد معروف تماماً إذا تذكرنا انعراج براغ (Diffraction Bragg) للفوتونات التي تعبر البلورات. تعرج البلورة

الفوتون الذي شعاع موجته $\vec{k}_t$ دون تغيير في الطاقة أي دون أي تغيير في تواتر الفوتون ولكن يكون هناك كمية حركة منقولة إلى البلورة. فإذا كان $\vec{k}'_t$ يُمثل شعاع موجة الفوتون المنعرج فإنَّ علاقة فون لو (Von Laue)

$$\vec{k}_t - \vec{k}'_t = \vec{K} \quad .... (15)$$

تبين شرط التداخل البناء وتقود إلى علاقة براغ الكلاسيكية وبضربها بـ $\hbar$ نجد علاقة شبيهة بالعلاقة (14) وهي علاقة خاصة منها تحدث عندما لا يكون هناك موجة مرنة منتشرة في البلورة. إذاً $\hbar\vec{K}$ يُمثل كمية الحركة المنتقلة إلى البلورة نتيجة للتفاعل بين الموجة المرنة والموجة الكهرطيسية.

VII ــ تفاعل فوتون ــ فونون: (Interaction photon phonon)

يوصف التفاعل بين موجة كهرطيسية وموجة صوتية تنتشر في البلورة بالعلاقة:

فونون $(\vec{k},\omega)$ + فوتون $(\vec{k}'_t,\omega'_t)$ $\leftrightarrow$ فوتون $(\vec{k}_t,\omega_t)$.

كما أنَّ علاقتي الانحفاظ (13) و (14) تكتبان بالشكل:

$$\omega_t = \omega'_t + \omega$$
$$\vec{k}_t = \vec{k}'_t + \vec{k}$$

حيث قصرنا دراستنا على الحالة $\vec{K} = 0$.

عندما يعبر فوتون بلورة ينتشر فيها موجة صوتية أو فوق صوتية فإنَّ ذلك يؤدي إما إلى توليد فونون أو امتصاص فونون، وبما أنَّ تواتر الموجة الصوتية أصغر بكثير من تواتر الموجة الضوئية فإنه يُمكننا اهمال (ω) أمام ω_t و ω'_t وكتابة $\omega_t \approx \omega'_t$ مما يؤدي إلى القول أن الفونون المتولد أو الممتص يكون ذا طاقة مهملة.

إذا رمزنا بـ n لقرينة انكسار البلورة فإنَّ كمية حركة كل من الفوتون الوارد والفوتون النافذ إلى داخلها تكتبان بالشكل:

$$\hbar|\vec{k}_t| = \frac{n\hbar\omega_t}{c}, \quad \hbar|\vec{k}'_t| = \frac{n\hbar\omega'_t}{c}$$

بالمقارنة نستنتج أنَّ: $|\vec{k}_t| = |\vec{k}'_t|$

أي أنَّ التفاعل يقتصر على تغيير اتجاه كمية حركة الفوتون. إذا كانت θ تمثل الزاوية بين الشعاعين $\vec{k}_t$ و $\vec{k}'_t$ (زاوية تبعثر الفوتون) فإنه يمكننا كتابة:

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} = 2k_t \sin\frac{\theta}{2} = 2\frac{2\pi}{\lambda_t}\sin\theta/2 \quad (16)$$

تمثل λ_t في هذه العلاقة طول الموجة المرتبطة بالفوتون المنتشر داخل البلورة.

يمكننا إذن استنتاج العلاقة بين طول الموجة λ للفوتون المتولد وطول موجة الفوتون النافذة:

$$\lambda = \lambda_t \Big/ 2\sin\frac{\theta}{2}$$

نلاحظ أنه عندما $\theta = \pi$ فإن الحالة الحادثة هي حالة صدم يعود فيها الفوتون إلى خارج البلورة: $\lambda = \frac{\lambda_t}{2}$

.... والخلاصة إنَّ ما يحدث هو انعراج للموجة الضوئية من قِبَلْ الموجة المرنة، وقد

أُكتشفت هذه الظاهرة من قِبَلْ لوقا وبيكارت (Lucas & Biquart).

VIII ـــ كثافة الطاقة لكل سوية: (Densite Energetique Detats)

سنجري الحساب في الفضاء البديل المحدود بالمنطقة الأولى لبريوان. حيث يوجد (3N) قيمة ممكنة لكل زوج $(\bar{k},p)$ أي N قيمة ممكنة لكل حالة من حالات الاستقطاب. نذكر أنّ N تُمثل عدد ذرات البلورة (ذرة في كل عروة أساسية). ندعو سوية القيمة الموافقة للزوج $(\bar{k},p)$ وبذلك يكون عدد السويات في واحدة الحجم من الفضاء البديل وفي كل حالة من حالات الاستقطاب هو: $\frac{N}{V_r}$ حيث $V_r = {(2\pi)^3}/{V_d}$ وهو يُمثل كما ذكرنا حجم العروة الأساسية من الفضاء البديل أو حجم المنطقة الأولى لبريوان.

لمعرفة عدد السويات $n_p(E)dE$ نقوم بتثبيت P وعندها تكون الطاقة $E(\bar{k},p)=\hbar\omega(\bar{k},p)$ محصورة بين E و E+dE ذلك لأنّ $\bar{k}$ متغير، ثم نحسب الحجم $d\tau_{\text{p}}$ من الفضاء البديل المحصور بين E=cte و E+dE=cte من أجل قيمة P الثابتة عندئذٍ يكون:

$$n_p(E)dE=\frac{N}{V_r}d\tau_{\text{p}}$$

تدعى $n_p(E)$ بكثافة الطاقة لكل سوية من أجل الاستقطاب P، ولا يمكننا استخراج عبارة صريحة لـ $d\tau_{\text{p}}$ لأنّ ذلك يتطلب معرفة التابع المعبّر عن الطاقة $E(\bar{k},p)$ أو $\omega(\bar{k},p)$ أي معرفة علاقة التشتت. عندما $E(\bar{k},p)$ تزداد بثبات P وتغيّر $\bar{k}$ فإنّ السطح $E(\bar{k},p)$ يقطع حدود المنطقة الأولى لبريوان وهنا يجب أن نعدم تأثير المجالات الخارجية عن هذه المنطقة، ويوجد من أجل كل قيمة ثابتة لـ P طاقة عظمى E_{pm} تدعى طاقة القطع (énergie de coupure) بحيث يكون:

$n_p(E_{pm})=0$ ويكون لدينا بالضرورة:

$$\int_0^{E_{mp}} n_p(E)dE=N$$

فإذا أخذنا الآن بعين الاعتبار حالات الاستقطاب الثلاثة فإنّ الكثافة الكلية لكل سوية تكتب:

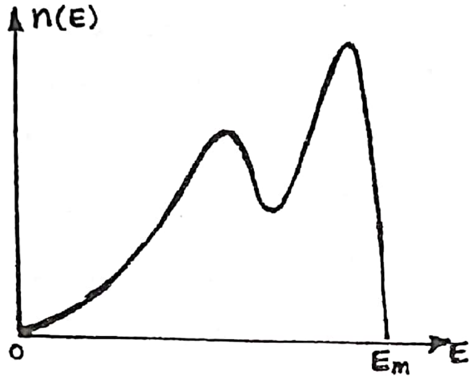
$$n(E)=\sum_{p=1,2,3} n_p(E)$$

يوجد من أجل كل قيمة ثابتة لـ P طاقة قطع E_{pm} نرمز لأكبر طاقة قطع بـ (E_m). يُمثل الشكل (4a) الشكل النموذجي للتابع n(E) نلاحظ أنه يُمكن تقريب منحني هذا التابع n(E) من أجل قيم E الصغيرة بمنحني قطع مكافئ وبشكل أكثر دقة بالمنحني

$$n_p(E)=A_pE^2$$

ومنه: $$n(E)=\sum_P A_pE^2=\left(\sum_P A_p\right)E^2$$

وهذا ما فعله دوباي لذا يُدعى هذا التقريب بتقريب دوباي (approximation de Debye).



الشكل (4a)

شكل نموذجي يمثل كثافة الطاقة لكل سوية

وسوف ندرس هذا التقريب بشيء من التفصيل. إنَّ فرضية دوباي هذه تعني القبول بعلاقة تشتت من الشكل:

$$(17)........\omega(\vec{k},p) = kv_p$$

حيث: $k = |\vec{k}|$

و v_p تمثل سرعة الطور التي تعتبر ثابتة أي مستقلة عن K.

استناداً إلى العلاقة (17) فإنَّ سرعة المجموعة $\frac{\partial\,\omega}{\partial\,k}$ تساوي أيضاً v_p ولكنها تتعلق بالاستقطاب P. كما أنه استناداً إلى العلاقة المذكورة يُمكننا كتابة:

$$E(\vec{k},p) = \hbar k \tau_p$$

ولكن عدد السويات dn_p في الحجم المحصور بين الكرتين المعينتين بنصفي القطرين+ k , k هو: kd_k

$$dn_p = 4\pi\ k^2 dk \frac{N}{V_r}$$

حيث فرضنا أنَّ عدد السويات في واحدة الحجم $\left(\frac{N}{V_r}\right)$ كبيراً جداً مما يسمح لنا بكتابة العلاقة السابقة. كما أن عدد السويات في الحجم اللامتناهي في الصفر $4\pi\ k^2 dk$ هو الآخر كبيراً جداً.

بتعويض k بقيمتها بدلالة E نحصل على:

$$dn_p = \frac{4\pi}{\hbar^3}\frac{E^2}{v_p^3}\frac{N}{V_r}dE$$

التي تُكتب بالشكل: $dn_p = A_p E^2 dE$

حيث: $A_p = \frac{4\pi}{\hbar^3}\frac{N}{V_r}\frac{1}{v_p^3}$

ونتوصل بذلك إلى فرضية دوباي .$\left(n_p(E) = A_p E^2\right)$

XI ـ طاقة البلورة في حالة الموجة الحرارية:
Energie d'un Cristal dans le cas d'une onde Thermique.

تعتمد نظرية الحرارة النوعية للجوامد على حساب الطاقة الداخلية لبلورة في حالة التوازن الحراري، وفي درجة حرارة معينة T. وسوف نتعرض فقط للمواد العازلة وذلك لنتمكن من اهمال مساهمة الالكترونات الحرة في حساب الطاقة الداخلية U التي تصبح مساوية للطاقة الوسطى للحركة الاهتزازية للذرات في درجة الحرارة المفروضة T. ويُمكننا النظر إلى هذه المسألة بطريقة أخرى والقول أنَّ الحركة الاهتزازية للذرات نتجت عن موجة حرارية. أي عن عدد الفونونات أو عن عدد من كمات الطاقة الاهتزازية للموجة في البلورة. هذا وإنَّ رفع درجة حرارة البلورة يُكافئ زيادة في عدد الفونونات.

بالحقيقة أنه من غير الممكن حساب U إلا بطرق تقريبية لذا فإننا سوف نعتمد في حسابها تقريب دوباي. بالعودة إلى المعادلة (12):

$$U = E = \sum_{\vec{k},p} \hbar\omega(\vec{k},p)\left[n(\vec{k},p)+\frac{1}{2}\right]$$

نلاحظ أنَّ المسألة هنا هي تقدير عدد الفونونات من أجل موجة حرارية أي تقدير $n(\vec{k},p)$ وهذا العدد هو دائماً أكبر بكثير من $\frac{1}{2}$ لذا فإنه يُمكننا اهمال $\frac{1}{2}$ أمام هذا العدد وكتابة:

$$U \approx \sum_{\vec{k},p} E(\vec{k},p)\,n(\vec{k},p) \quad \text{.........(19)}$$

سوف نعتمد قوانين الفيزياء الاحصائية في تحديد عدد الفونونات التي تشغل سوية الطاقة E وهذا حق لنا إذ أنَّ قوانين الميكانيك الاحصائي تعتمد بشكل أساسي على مفهوم المعدل الوسطي لشغل سوية من سويات الطاقة. من وجهة النظر الاحصائية هذه فإنَّ الفونون يتشابه مع البوزن (Boson) ذلك لأنَّ عدد الفونونات في سوية ما هو عدد غير محدود. وهذا التشبيه يقودنا لاستخلاص أنَّ سبين (Spin)الفونون (J) هو عدد صحيح. وبما أننا نفترض وجود ثلاثة حالات استقطاب للفونون فإننا نستنتج من العلاقة n = 2j +1 أنَّ سبين الفونونJ =1 .

لنطبق الآن قانون بوزا ــ أنشتاين (Bose - Einstein) في حساب العدد الكلي للفونونات التي يُمكن أن تثفل سوية الطاقة E في جسم صلب متوازن حرارياً ودرجة حرارة توازنه (T).

$$P(E) = 1\Big/ e^{E/kT-1} \quad \text{.........(20)}$$

قد يتسائل القارئ قائلاً أنَّ القانون يُطبق على جسيمات مستقلة عن بعضها (كما في الغازات مثلاً)، ونحن نقول أنَّ استقلالية الفونونات عن بعضها تأتي من فرضيتنا الأساسية بأنَّ كمون التفاعل هو كمون

توافقي (أي مقتصر على حدود من الدرجة الثانية) وإذا لم تؤخذ هذه الفرضية بالحسبان فإنَّ مفهوم الفونونات المستقلة يفقد معناه.

لنكتب العلاقة (19) بشكل تكاملي:

$$U=\sum_{p=1,2,3}\int_0^{E_{pm}} E(\vec{k},p)\,dn_p(\vec{k})$$

حيث $dn_p(\vec{k})$ يُمثل عدد الفونونات ذات الاستقطاب P والتي طاقتها محصورة بين E, E + dE في جسم صلب متوازن حرارياً ودرجة حرارة التوازن T. للحصول dn_p نضرب عدد سويات الطاقة $n_p(E)dE$ بالمعدل الوسطي لثقل سوية الطاقة (E) فنجد:

$$dn_p=n_p(E)\,dE\Big/ e^{\frac{E}{kT}-1}$$

ومنه:

$$U=\sum_P\int_0^{E_{pm}}\frac{E\,n_p(E)\,dE}{e^{\frac{E}{kT}-1}}$$

وإذا أخذنا بعين الاعتبار تقريبات دوباي:

$$n_p(E)=A_pE^2$$

فإنَّ العلاقة السابقة تُصبح:

$$(21)\ldots\ldots\ldots\ldots U=\sum_p\int_0^{E_{pm}}\frac{A_pE^2\,dE}{e^{E/kT-1}}$$

لحساب طاقة القطع E_{pm} نكتب أنَّ عدد السويات الكلية من أجل كل قيمة من قيم P يجب أن يساوي N أي:

$$\int_0^{E_{pm}} n_p(E)\,dE=N$$

أو:

$$A_p\int_0^{E_{pm}} E^2\,dE=N$$

ومنه:

$$E_{pm}=\left(\frac{3N}{A_p}\right)^{1/3}$$

وباستخدام العلاقة (18) نحصل على:

$$E_{pm}=h\vartheta_p\left(\frac{3V_r}{4\pi}\right)^{1/3}=\hbar v_p\left(\frac{3}{4\pi V_d}\right)^{1/3}$$

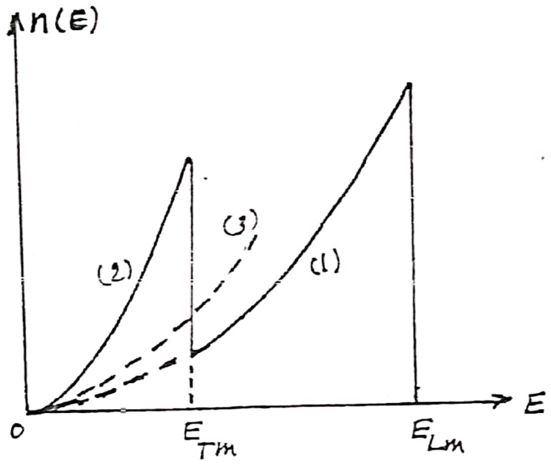
حيث V_d يُمثل حجم العروة الأساسية في البلورة.

إنَّ نظرية الحرارة النوعية للأجسام الصلبة لدوباي تأتي مباشرة من العلاقة (21) ويُمكن للقارئ العودة إلى المرجع (2) لمزيد من المعلومات أو إلى أي كتاب في الفيزياء الإحصائية. ونشير فقط إلى أنَّ الأمواج الطولية توافق (P =1) ذات سرع v_T أكبر من سرع الأمواج العرضية v_L التي توافق (P = 2,3) لذا فإنَّ طاقة القطع E_{Lm} للموجة الطولية أكبر من طاقة القطع للموجة العرضية E_{Tm} وضمن هذه الشروط فإنَّ كثافة الطاقة لكل سوية n(E) تكتب:

من أجل $E\langle E_{Tm}$
(أو من أجل $A_L\langle A_T$) ← $(22a)\ldots\ldots n(E)=A_LE^2+2A_TE^2$

b) من أجل $E_{Tm}\langle E\langle E_{Lm}$ ← $(22b)\ldots\ldots\ldots\ldots n(E)=A_LE^2$

يُمثل الشكل (4b) هذا التابع ويُساعد في فهم المنحني الممثل على الشكل (4a) وخاصةً وجود نهايتين أعظميتين لـ n(E) نذكر بأنَّ نظرية دوباي تتوقع أنَّ الطاقة تتناسب مع القوة الرابعة لدرجة الحرارة أي مع T^4 وذلك في درجات الحرارة المنخفضة أي أنَّ الحرارة النوعية تحت حجم ثابت متناسبة مع القوة الثالثة لدرجة الحرارة (T^3).



الشكل (4b): كثافة الطاقة لكل سوية في تقريب دوباي

(1) يُمثل القطع المكافئ $A_L E^2$

(2) يُمثل القطع المكافئ $A_T E^2$

(3) الخط المنقط يدل على المنحني الممثل بالمعادلتين (22a) و (22b)

المراجع

(1) L.BRILLOUIN et M.PARODI

propagation des ondes dans les milieux periodiques

[Masson Ed. 1956]

(2) C.Kittel

Introduction a la physique de l'elat solide

[Dunod 1979]