الفصل 6

حركية الشبيكة Lattice Dynamics

6.1 المقدمة Introduction

يعد موضوع حركية الشبيكة في فيزياء الحالة الصلبة ذات اهمية بالغة جداً وذلك لتداخله في تفسير مفاهيم الخواص الفيزيائية للمواد الصلبة. ان المقصود بحركية الشبيكة هو دراسة اهتزازات ذرات الشبيكة . ان دراسة الحركة الاهتزازية للذرات المكونة للشبيكة البلورية تمكننا من وصف السلوك الاجمالي للمادة الصلبة من خلال الخواص الحرارية او الكهربائية او الميكانيكية او غيرها . ان هذه الدراسة تعمق فهمنا لهذه الخواص في حالة تعذر تفسير سلوك المادة الصلبة من خلال الفيزياء الكلاسيكية.

لقد بينا في الفصل الثاني ان الشبيكة البلورية متكونة من ذرات مستقرة مرتبة بشكل دوري منتظم ولكن لم نتطرق عن حالة وضع الذرات في الشبيكة ففي الحقيقية لايوجد شيء في الكون مستقر فالكل في حالة حركة . وهكذا بالنسبة الى الذرات داخل البنية البلورية فانها في حالة حركة اهتزازية ، اي انها تتحرك بحركة توافقية بسيطة دون ان تنتقل من موقعها الى موقع آخر. وعليه يمكن اعتبار الحركة الاهتزازية للذرة عبارة عن حركة توافقية بسيطة . فاذا اثرت قوة خارجية على الذرات فوق تزاح عن موقع اتزانها ولكن هنالك قوة معيدة (F) تعمل على ارجاع الوضع الطبيعي للذرات حيث تتغير طردياً مع ازاحة الذرة (x) من موقع اتزانها اي ان

$$F = -\mu x \qquad \ldots(6\cdot1)$$

حيث μ تمثل ثابت القوة.

الممسوحة ضوئيا بـ CamScanner

الممسوحة ضوئيا بـ CamScanner

تعتمد الحركة التوافقية للذرات على درجات الحرارة . فعند درجه حرارة الصفر المطلق تستقر الذرات داخل الشبيكة في مواقع الاتزان في حالة سكون ، فعند رفع درجات الحرارة تبدأ الذرات بالتذبذب حول مواقع الاتزان بازاحة تتوقف على درجة الحرارة وقد تصل هذه الازاحة الى عشرة بالمائة (10%) من المسافة بين الذرات المجاورة عندما تصبح درجة الحرارة مرتفعة جداً.

يعبر عن انماط الاهتزاز vibrational modes للذرات في داخل البنية البلورية بموجب النظريات الكلاسيكية على انها موجات صوتية مرنة تسير في وسط مستمر على طول معين ويمتد سريانه خلال بلورة غير محددة . اما في النظريات الحديثة فتعتبر انماط الاهتزاز مجموعة من جسيمات يتعذر تمييزها تدعى بالفونونات Phonons (راجع الفصل السابع بند 5).

ان الصفات الحرارية للمواد الصلبة كالسعة الحرارية والتوصيل الحراري وكذلك الاستطارة غير المرنة للنيوترونات اوالاشعة السينية بواسطة البلورات وغيرها تفسر جميعها من خلال اهتزاز الشبيكة والحاصل عنها فونونات.

6.2 الموجات الصوتية Sound Waves

عندما تعمل موجة ما على نقل الطاقة من موقع الى آخر دون ان يصاحب العملية اي انتقال في الكتلة يطلق عليها بالموجة الصوتية . والموجة الصوتية تحتاج اذن الى وسط مادي لانتقالها ولا يمكن لها ان تنتقل في الفراغ مطلقاً. أما الموجات التي يمكن لها ان تنتقل في الفراغ فهي الموجات الكهرومغناطيسية . وتعد حركة الموجات الصوتية نوع من انواع الحركة الموجية الميكانيكية . ان موجات الصوت تولدها اضطرابات ميكانيكية في وسط مادي ، وتنتقل الطاقة الناتجة عن تلك الاضطرابات خلال المادة الصلبة عن طريق ازاحات لذرات المادة الصلبة في خط انتشار الحركة الموجية. فموجات الصوت اذن طولية او انضغاطية وقد تصنف موجات الصوت الى نوعين ، فاذا حدث تغيراً في مادة الوسط كالضغط والكثافة واجهاداً لايتعدى حدود مرونتها فتسمى الموجات الصوتية من هذا النوع بالموجات المرنة ، اما اذا كان الاجهاد عالى جداً فيعرف هذا النوع من الموجات عندئذٍ بالموجات غير المرنة

الممسوحة ضوئيا بـ CamScanner

الممسوحة ضوئيا بـ CamScanner

إن انتقال الموجات الصوتية يحدث فقط في الاوساط المادية الممتدة التي تمتلك خاصيتي المرونة والقصور الذاتي . وهذه الموجات منشأها ازاحة موضعية لمجموعة من ذرات المادة الصلبة من مواقع توازنها بسبب تأثير قوة ما . ونتيجة ذلك يظهر دور خاصية المرونة التي تسبب في ظهور قوة الاستعادة التي تعمل على ارجاع الذرات المزاحة الى مواقع توازنها الاصلية . وحالما تبدأ هذه الذرات رحلة العودة الى مواقع توازنها تكتسب سرعة وهنا يبرز دور خاصية الاستمرارية التي تعمل على استمرار الذرات بالحركة وعبور مواقع توازنها الى الجهة المعاكسة لاتجاه الازاحة الاولى ، وحالما تتجاوز هذه الذرات مواقع توازنها يظهر دور خاصية المرونة من جديد لتحاول اعادة الذرات الى مواقع توازنها وهكذا تبرز خاصية الاستمرارية مرة اخرى لتحول دون توقف الذرات في مواقع توازنها وهكذا تتكرر العملية من جديد محدثة حركة اهتزازية حول موقع التوازن . وتكون هذه الحركة الاهتزازية مصدر الاضطراب في داخل البنية .

ونتيجة لخواص الوسط ينتقل هذا الاضطراب من منطقة الى اخرى وبالتالي ينتقل هذا الاضطراب او هذه الموجة في الوسط .

وفي الواقع ان الذرات المزاحة لاتبتعد كثيراً عن مواقع توازنها بسبب عاملين ، الاول وجود قوى التماسك المتبادلة فيما بينها . وثانيا وجود الذرات الآخرى المحيطة بها ، ولكن حالة الازاحة تنتقل الى الذرات المجاورة لها مباشرة وهذه بدورها تنقلها للذرات التي تليها وهكذا . وعليه نرى ان الذرات في مختلف اجزاء الوسط تتحرك حركات اهتزازية صغيرة في مسارات محددة حول مواقع توازنها بأنماط modes مختلفة .

إن سرعة انتقال الموجة الطولية في أي وسط مادي صلب تحت تأثير اجهاد Stress يعطى العلاقة التقريبية التالية

$$V_0 = \left(\frac{B_s}{\rho}\right)^{1/2} \qquad \ldots(6.2)$$

حيث ان B_s تمثل معامل المرونة الحجمية الكظمية adiabatic elastic bulk modulus

ρ تمثل كثافة المادة الصلبة

لقد وجد ان قيم سرعة V_0 لبعض المواد الصلبة المحسوبة بأستخدام المعادلة (6.2) مطابقة نوعاً ما لقيم التجريبية وكما هو مبين في الجدول (6.1)

الممسوحة ضوئيا بـ CamScanner

الجدول 6.1 معامل المرونة الحجمية وسرعة الصوت في بعض المواد الصلبة النموذجية

المادة	الرمز	الكثافة ρ (kg/m^3)	معامل المرونة الحجمية B_s ($10^{10}N/m^2$)	القيمة النظرية لسرعة الصوت $V_s=(B_s/\rho)^{1/2}$ (m/s)	القيمة العملية السرعة الصوت (m/s)
الصوديوم	Na	970	0.52	2320	2250
النحاس	Cu	8960	13.4	3880	3830
الخارصين	Zn	7130	8.3	3400	3700
الالمنيوم	Al	2700	7.35	5200	5110
الرصاص	Pb	11340	4.34	1960	1320
النيكل	Ni	8900	19.0	4650	4970
الجرمانيوم	Ge	5360	7.9	3830	5400
السليكون	Si	2330	10.1	6600	9150
اوكسيد السليكون	SiO_2	2650	5.7	4650	5720
كلوريد الصوديوم	NaCl	2170	2.5	3400	4730
فلوريد الليثيوم	LiF	2600	6.7	5100	4950
فلوريد الكالسيوم	CaF_2	31800	8.9	5300	5870

6.3الاهتزاز الذري في الشبيكة Atomical vibration in the lattice

إن النظرية الكلاسيكية لاهتزاز الشبيكة تفترض ان كل ذرة تهتز بصورة مستقلة بعضها عن بعض بصفة متذبذب توافقي بسيط في جهد مجال قوى الذرات المجاورة لها. وعليه سوف نجد التردد الزاوي (ω) للذرات المهتزة.

نفرض ان شبيكة تحتوي على عد من الذرات ، ونفرض ان مواقع الذرات عند موقع الاتزان (x_o).

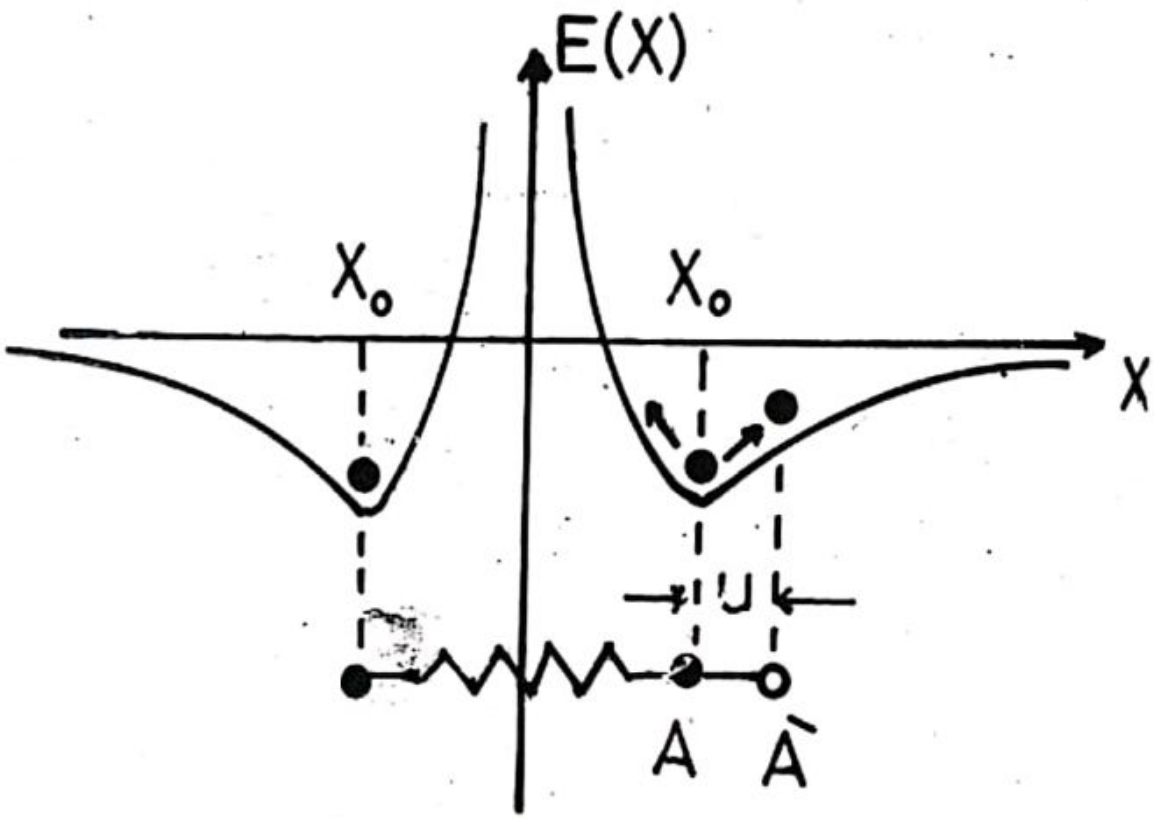
الممسوحة ضوئيا بـ CamScanner

ونفرض ان $E(x_0)$ تمثل طاقة الموقع للذرة عند موقع الاتزان (x_0). نفرض ان التغيير في طاقة الذرة عند ازاحتها الى الموقع (x) هو (E) وان الازاحة بين الموقعين هي (u) وكما هو مبين في الشكل 6.1. فعليه تكون قيمة

$$\Delta E = \frac{2}{Z}[\{E(x_0 + u) - E(x_0)\} - \{E(x_0 - u)\}]$$

اي ان

$$\Delta E = \frac{2}{Z}[E(x_0 + u) + E(x_0 - u) - 2E(x_0)] \quad ..(6.3)$$



الشكل (6.1) الاهتزاز اللدري في الشبيكة.

من الملاحظ اننا قسمنا المعادلة(6.3)على (Z) الذي يمثل عدد الذرات المجاورة وذلك للحصول على التغيير في الطاقة لكل ذرة كما اننا ضربنا المقدار في (2) وذلك لان حركة اي ذرة بالنسبة لاخرى تجاورها يسبب زيادة في طاقة الموقع بنفس المقدار لكل من الذرتين.
نفك المقدارين $E(x_0 + u)$ و $E(x_0 - u)$ بمفكوك تايلور لنحصل على :

الممسوحة ضوئيا بـ CamScanner

$$E(x_0 + u) = E(x_0) + u\frac{dE}{dx} + \frac{1}{2}u^2\frac{d^2E}{dx^2} + \cdots \quad ...(6.4)$$

$$E(x_0 - u) = E(x_0) - u\frac{dE}{dx} + \frac{1}{2}u^2\frac{d^2E}{dx^2} + \cdots \quad ...(6.5)$$

فبتعويض هاتين المعادلتين في المعادلة (6.3) نحصل على :

$$\Delta E = \frac{2}{Z}u^2\frac{d^2E}{dx^2} \quad ...(6.6)$$

أو

$$\Delta E = \frac{1}{2}\mu u^2 \quad ...(6.7)$$

حيث ان μ تمثل ثابت القوة وتساوي

$$\mu = \frac{4}{Z}\frac{d^2E}{dx^2} \quad ...(6.8)$$

تبين المعادلة (6.7) ان التغيير في الطاقة يتناسب طردياً مع مربع الازاحة u وتكون القوة المؤثرة على كل ذرة بدلالة الازاحة هي :

$$F = -\frac{d}{du}(\Delta E) = -\alpha u \quad ...(6.9)$$

وبما ان القوة F تساوي القانون الثاني لنيوتن ، فعليه

$$m\frac{d^2u}{dt^2} = -\alpha u \quad ...(6.10)$$

حيث ان m تمثل كتلة الذرة

ولايجاد قيمة u نحل هذه المعادلة رياضيا لنحصل على :

$$u = A\cos\omega t \quad ...(6.11)$$

$$\omega = 2\pi\nu = \sqrt{\frac{\mu}{m}} \quad ...(6.12)$$

$$\omega = \left(\frac{\mu}{m}\right)^{1/2} \quad ...(6.13)$$

الممسوحة ضوئيا بـ CamScanner

ولأجل معرفة التردد ν والطول الموجي λ لذرة تهتز، اعتبر مادة صلبة مثل النحاس تكون كتلة الذرة الوحدة فيها حوالي 10^{-25}kgm وأن قيمة ثابت القوة μ بحدود 25N/m بتعويض هذه القيم في معادلة (6.13) نجد ان التردد الزاوي ω يساوي $1.6X10^{13}$ أي أن قيمة التردد لها يساوي 2.6×10^{12}Hz إن مثل هذا التردد يقع في منطقة ترددات الاشعة تحت الحمراء ولكن هذه الموجات هي موجات ميكانيكية وليست كهرومغناطيسية لذلك فمن الصعب جداً اثارة الشبيكة لكي تهتز بهذه الترددات العالية. فلقد وجد أن أعلى تردد للمهتز الميكانيكي بحدود 10^3c/s. وقد امكن الحصول عليه بواسطة بلورات الكوارتز.

إن نظرية المرونة الكلاسيكية، أي افتراض المادة الصلبة بوضعها وسط مستمراً لاتصلح لاعطاء المعلومات الكافية عن طيف الاهتزاز للمواد الصلبة عندما يصبح الطول الموجي للاهتزاز أقصر فأقصر ويقترب من المسافة بين الذرات المهتزة ولذلك يجب الاخذ بنظر الاعتبار كيفية سيطرة الطبيعة الدورية للمواد البلورية والقوى بين الازاوج المنفردة من الذرات على تعيين طبيعة ومواصفات أنماط الاهتزاز ويطلق على هذه الافكار المعالجة لكيفية اهتزاز الشبيكة بالنظرية المجهرية Microscopic theory

إن النظرية المجهرية تعد الموجة الحاصلة من اهتزاز شبيكة بلورة هي تكرار منظم للازاحات الذرية المتعاقبة سواءً كانت طولية او مستعرضة أو أي نوع من التوافق بين الطولية والمستعرضة والتي يمكن وصفها بالصيغ الفيزياوية التالية:

سرعة الانتشار	V	
متجه الموجة	$\frac{2V}{\lambda} = \lvert k \rvert$	...(6.14)
التردد الزاوي	$Vk = 2\pi\nu = \omega$	

6.4 انماط الاهتزاز لشبيكة خطية احادية الذرات

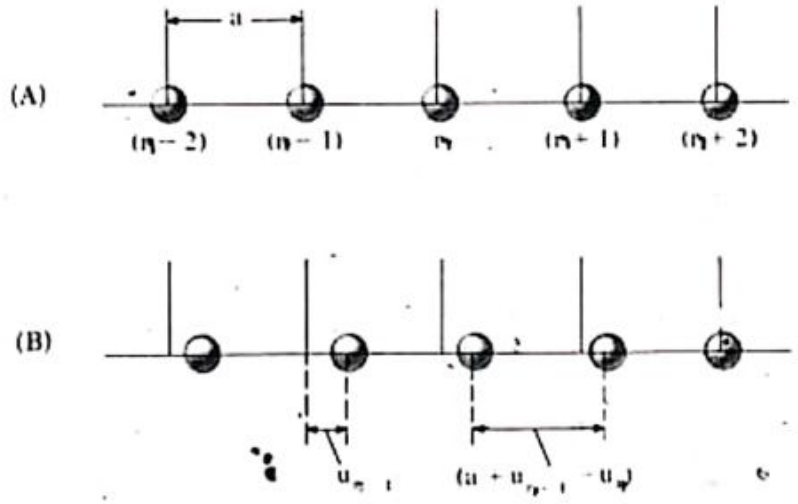
Vibrational modes of linear monoatomic lattice

إن أبسط انواع أنماط الاهتزاز هو اهتزاز الشبيكة الخطية المكونة من سلسلة خطية من الذرات الاحادية Monoatomic linear chain. إن الهدف الاساس من دراسة هذا النمط من الاهتزاز هو ايجاد علاقة التفريق الذي تضم التردد الزاوي (ω) للذرة المهتزة ومتجه الموجة (k) للموجة الحاصلة من ذلك الاهتزاز.

الممسوحة ضوئيا بـ CamScanner

الممسوحة ضوئيا بـ CamScanner

يبين الشكل(6.2)سلسلة من نوع واحد من الذرات كتلة كل ذرة فيها (m). وان المسافة بين كل ذرتين متجاورتين هي (a). فعندما تكون الشبيكة الخطية في حالة الاتزان ، فهذا يعني أن كل ذرة في حالة اتزان ايضاً. فعند مرور نبضة أو موجة خلال الشبيكة الخطية فأنها تؤدي الى حدوث ازاحة (u) لكل ذرة عن موقعها بمقدار صغير وبذلك تكون الموجات الناتجة من اهتزاز الذرات المزاحة موجات طولية فقط.



الشكل (6.2)
a – سلسلة خطية من الذرات المتشابهة في مواقع اتزانها
b – ازاحة الذرات عن مواقع اتزانها

إن الحركة التي تصنعها الذرة المزاحة هي حركة توافقية بسيطة. إن الاواصر وبفضل خاصية المرونة ستبدي قوة مساوية بالمقدار ومعاكسة بالاتجاه للقوة المؤثرة لحدوث الازاحة. إن قوة الاواصر هذه ناجمة على قوة التجاذب الكهربائية بين الذرات وتدعى هنا بقوة الاستعادة ، أي القوة التي تحاول اعادة الذرات المزاحة الى مواقع اتزانها. يعبر عن قوة الاستعادة بقوة هوك. (Hooks). ينص قانون هوك على أن قوة الاستعادة تتناسب طردياً مع مقدار الازاحة ضمن حدود المرونة ، أي أن

$$F = -\mu x \quad \ldots(6.15)$$

حيث أن μ تمثل ثابت قوة الاواصر

دعنا نختار احد الذرات على السلسلة الخطية كمرجع ، ونفرض أن موقعها رقمه (n) فعليه تكون مواقع الذرات على يمين الذرة المرجعية بـ $(n + 1)$ و $(n + 2)$ و $(n + 3)$.. وهكذا. وكذلك مواقع الذرات على يسار الذرة المرجعية بـ $(n - 1)$ و $(n - 2)$ و $(n - 3)$... وهكذا.

الممسوحة ضوئيا بـ CamScanner

نفرض ان مقدار ازاحة الذرة المرجعية بـ U_n ومقادير ازاحات الذرات على يمين الذرة المرجعية بـ U_{n+1} و U_{n+2} و U_{n+3} .. وهكذا وكذلك مقادير ازاحات الذرات على يسار الذرة المرجعية بـ U_{n-1} و U_{n-2} .. وهكذا. إن الزيادة في طول الآصرة Bond length بين الذرتين في الموقعين n و n + 1 هو $U_{n+1} - U_n$ وأن الزيادة في طول الآصرة بين الذرتين في الموقعين n و (n − 1) هو $(U_n - U_{n-1})$. إن القوة F_n المؤثرة على الذرة (n) هي في الحقيقة محصلة القوة المؤثرة على الذرات الواقعة على يمين ويسار الذرة المرجعية اذن

$$F_n = -\mu [(u_{n+1} - u_n) - (u_n - u_{n-1})]$$

$$= \mu [u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n] \quad ...(6.16)$$

إن المعادلة (6.16) تمثل معادلة الحركة لأي ذرة في السلسلة تحت تأثير قوة أول جيرة First neighbour لتلك الذرة ، ويمكن حلها كحل أية موجبة من دون الخوض في التعقيدات الرياضية .

فعليه يمكن حل المعادلة (6.16) بأستخدام معادلة الازاحة وذلك بأعتبار أن حركة انتقال الموجة على طول جسم صلب متجانس بأتجاه محور معين مثل X .

اذن :

$$u = A \exp i (kx - \omega t) \quad ...(6.17)$$

حيث أن A سعة الموجة

K المتجه العددي للموجة

w التردد الزاوي

t الزمن

X بعد موقع اتزان الذرة المهتزة عن نقطة الرجع

يمكن التعبير عن ازاحة الذرة n عن موقع اتزانها بالعلاقة الرياضية التالية على اساس أن بعد موقع اتزانها عن نقطة المرجع بـ

$$X = na \quad ...(6.18)$$

فبتعويض معادلة (6.18) في معادلة (6.17) نحصل على :

$$u_n = A \exp i (kna - \omega t) \quad ...(6.19)$$

الممسوحة ضوئيا بـ CamScanner

الممسوحة ضوئيا بـ CamScanner

$$= 2 \frac{\mu}{m} [\, 1 - \cos ka \,]$$

$$= 4 \frac{\mu}{m} \sin^2 \frac{ka}{2} \qquad ...(6.28)$$

أو يمكن اعادة كتابتها بهذه الصيغة

$$\omega = \pm \omega_m \sin \frac{ka}{2} \qquad ...(6.29)$$

حيث أن

$$\omega_m = 2 \left(\frac{\mu}{m} \right)^{1/2} \qquad ...(6.30)$$

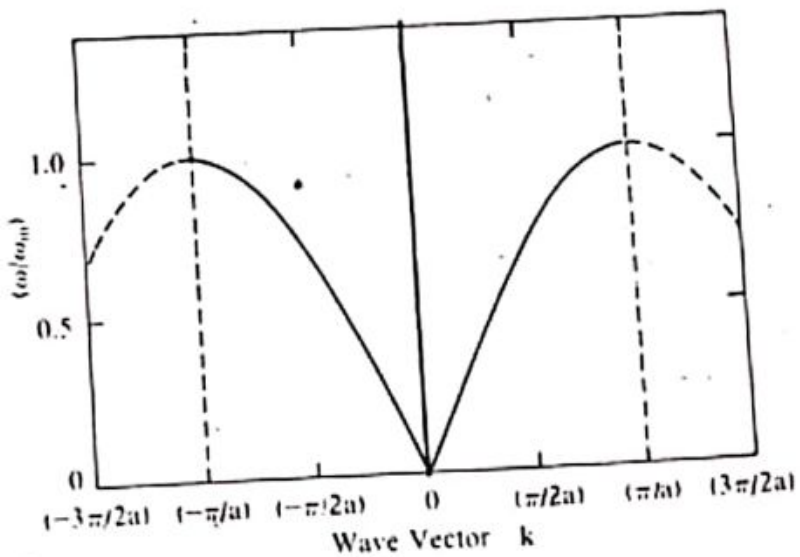
يطلق على معادلة (6.29) بعلاقة التفريق dispersion relation بين التردد الزاوي ω ومتجه الموجة K في شبيكة ذات نوع واحد من الذرات وفي بعد واحد. إن الاشارة الموجبة والسالبة تعني أن الموجة يمكن ان تنتقل نحو اليمين أو نحو اليسار، حيث أن الحركة عند أية نقطة تكون دورية مع الزمن.

يبين الشكل (6.3) العلاقة بين التردد الزاوي ومتجه الموجة. ويبدو من الشكل أن منحني التفريق يكون على شكل جيبي وبدورية مقدارها $\frac{2\pi}{a}$. ويلاحظ أن هناك حداً اقصى للتردد الزاوي ω عندما يكون قيمة متجه الموجة $\frac{\pi}{a}$ أي أن

$$\omega_m = 2 \left(\frac{\mu}{m} \right)^{1/2}$$

عندما يكون $k = \frac{\pi}{a}$.

نستنتج من المعادلة (29.6) الخواص التالية :



الشكل (6.3) علاقة التفريق بين ω و K لسلسلة خطية احادية.

الممسوحة ضوئيا بـ CamScanner

1- بالنسبة للموجات ذات الاطوال الموجية الكبيرة ($\lambda > a$) أي عندما تكون K صغيرة) تنتقل ترددات هذه الموجات خلال الشبيكة، بينما الترددات الاخرى سوف تتلاشى بسرعة وبذلك تعمل الشبيكة عمل مرشح ميكانيكي للتخلص من الترددات الواطئة. وبما ان قيمة K صغيرة جداً فعليه يمكن اعتبار جيب الزاوية مساوياً للزاوية أي أن

$$\sin \frac{ka}{2} = \frac{ka}{2} \qquad \ldots(6.31)$$

وبهذا تصبح المعادلة (6.29)

$$\omega = \omega_m \frac{ka}{2}$$

$$= \frac{\omega_m a}{2} k \qquad \ldots(6.32)$$

وبما أن

$$\omega = v_0 k \qquad \ldots(6.33)$$

فعند مقارنة المعادلتين (6.32) و (6.33) نحصل على

$$v_0 = \frac{\omega_m a}{2} \qquad \ldots(6.34)$$

$$v_0 = a\left(\frac{\mu}{m}\right)^{1/2} \qquad \ldots(6.35)$$

2. بالنسبة للموجات ذات الاطوال الموجية الصغيرة (أي عندما تكون K كبيرة). فعندها تكون قيم الاطوال الموجية صغيرة جداً ($\lambda < < a$) فهذا يعني أن متجه الموجة كبيراً مما يدل على أن سرعة انتشار الموجة لاتكون ثابتة بل تتناقص كلما ازداد متجه الموجة. وعندما تصبح قيمة K مساوية الى $\pm \frac{\pi}{a}$ فهذا يعني أن طول الموجة سيساوي

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\pi}{a}$$

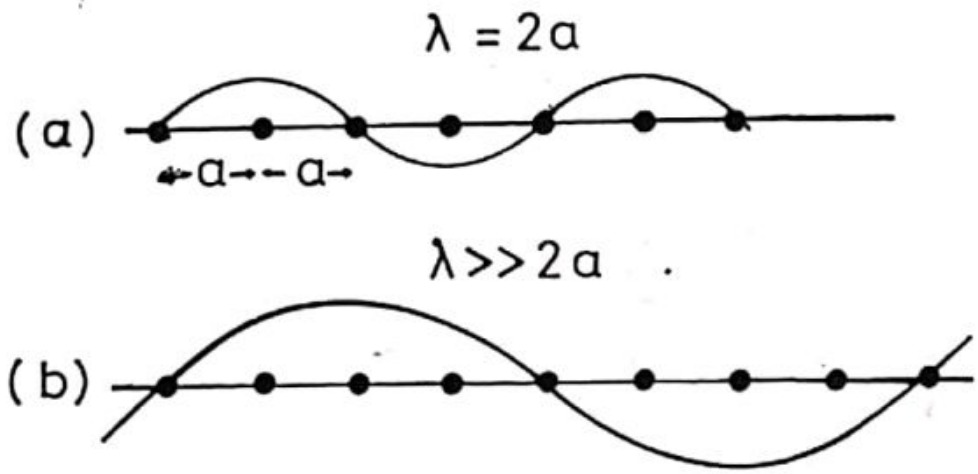
$$\lambda = 2a$$

فعندما تكون $\lambda = 2a$ فمن الممكن أن نلاحظ الذرات المتجاورة تتحرك وكما هو مبين في الشكل (6.4a). ونتيجة لذلك تكون القوة المعيدة والتردد أعلى مايمكن في هذه الحالة. ولكن عندما تكون $\lambda > > 2a$ نلاحظ أن ذرات الشبيكة تتحرك بأتجاه واحد وبنفس الطور

الممسوحة ضوئيا بـ CamScanner

الممسوحة ضوئيا بـ CamScanner

وكما هو مبين في الشكل (6.4b). في هذه الحالة تكون قوة الاستعادة المؤثرة على الذرات صغيرة جداً ما يؤثر على التردد الزاوي ω وعندما يقترب اطول الموجي من اللانهاية فهذا يعني أن الشبيكة الذرية تتحرك كلها كجسم مرن والتي تؤدي الى تلاشي القوة المعيدة وهذا يفسر كون $\omega = 0$ عندما $K = 0$.



الشكل (4.6)a - الازاحات الذرية في حدود الموجات $\lambda >> 2a$

b - الازاحات الذرية في حدود الموجات $\lambda = 2a$

6.5 السرع في الحركة الموجية Velocities in wave motion

وكما هو معلوم أن الوسط الناقل للموجة في المواد الصلبة ليس متصلاً بل متقطعاً ويتألف من عدد هائل من الذرات منفصلة عن بعضها تماماً. ولكن مصادر الصوت تكون عادة كبيرة جداً بالمقارنة مع المسافة الفاصلة بين الذرات وان هذه الذرات المنفردة التي تتألف منها المادة الصلبة لاتنقل الموجة بل تهتز موضعياً حول نقاط توازنها. وعلى هذا الاساس يمكن اعتبار الذرات عبارة عن مهتز يهتز بحركات توافقية بسيطة اهتزازاً طولياً حول مواقع اتزانها. وطبيعي ان جميع هذه المهتزات لاتهتز بنفس الطور بل بأطوار مختلفة تتغير دورياً. وان اختلاف طور حركة هذه المهتزات هو الذي نلاحظه كموجات.

الممسوحة ضوئيا بـ CamScanner