الفصل الثالث

ديناميكا البلورات

Crystal Dynamics

الفصل الثالث

ديناميكا البلورات *Crystal Dynamics*

لقد رأينا في الفصل السابق بأن الذرات تتواجد في نقاط الشبيكة البلورية لكل نوع من أنواع البناء البلوري، أي أن هذه الذرات مرتبة بشكل دوري منتظم في الفضاء الثلاثي. ولكن هذا الترتيب المنتظم لا يكون مثاليًا إلا عندما تكون هذه الذرات ساكنةً في أماكنها ولا تتحرك، ولا يحصل ذلك إلا عندما تقترب درجة حرارة البلورة من الصفر المطلق حسب النظرية الكلاسيكية. أما في نظرية الكم فإن هذه الذرات تمتلك طاقة تسمى الطاقة الصفرية حتى عندما تكون درجة الحرارة تساوي صفرًا وذلك انسجامًا مع مبدأ عدم التحديد. أي أن النموذج الساكن للبلورات (الذرات جامدة في مواضعها) هو نموذج غير صحيح، وقد ظهر فشله عند التطبيق على كثير من الخواص الفيزيائية للمواد، إذ هو يهمل حركة الذرات حول مواضع سكونها عند حساب الطاقة الداخلية للجسم الصلب، ويأخذ الطاقة الحركية للإلكترونات فقط بعين الاعتبار. ولذا فقد فشل في تفسير نتائج قياس الحرارة النوعية للأجسام الصلبة عند درجات الحرارة المختلفة، وفي تفسير تمدد الأجسام الصلبة عند تسخينها، وفي تفسير انصهارها (تحولها إلى سائل) عند الوصول إلى درجة الذوبان. كما أن هذا النموذج لا يصلح لتفسير كثير من الظواهر المتعلقة بتوصيل الكهرباء والتوصيل الحراري، ولا لتفسير ظاهرة المواد فائقة التوصيل (super conductors). إضافة إلى ذلك فإن هناك عددًا كبيرًا من الظواهر الضوئية الناتجة عن تفاعل الإشعاعات الضوئية مع الأجسام الصلبة تحت ظروف تجريبية مختلفة (انعكاس، امتصاص، تشتت ...) لا يمكن تفسيرها إذا اعتمدنا على هذا النموذج الساكن للبلورات.

وسوف نحاول في ما يلي من تحليل أن ندرس العديد من الخصائص الفيزيائية للأجسام الصلبة والتي تعتمد على الطاقة الداخلية لبلورات هذه الأجسام.

3-1 الطاقة الداخلية

وهي تمثل الطاقة الكلية لنظام مغلق. وتتألف الطاقة الداخلية لجسم صلب من طاقة الحركة وطاقة الوضع للوحدات البنائية داخله (ذرات، أيونات، جزيئات) وطاقة الإلكترونات، والطاقة الناتجة عن التشوهات البنائية.

ويمكن تقسيم هذه الطاقة الكلية إلى المساهمات التالية:

أ- طاقة الربط بين الذرات أو الجزيئات اللازمة لتكوين البلورة:

وهي طاقة سالبة، وتسمى أيضًا طاقة الشبيكة البلورية (E_l). وتعتمد هذه الطاقة على حجم الجسم الصلب وعلى البناء البلوري له، وهي لا تعتمد على درجة الحرارة إلا بطريقة غير مباشرة من خلال الاعتماد الضعيف للحجم على درجة الحرارة. وكما مر معنا في الفصل الأول فإن هناك أنواعًا من طاقة الربط بين الذرات، وجميعها تعتمد على قوى الجذب والتنافر الكهربائية (طاقة فان درفال، الطاقة الأيونية، الطاقة التشاركية...) والتي تعتمد بدورها على المسافة بين الذرات أو الأيونات. ويمكن لهذه المسافات أن تتغير تغيرًا طفيفًا تحت تأثير التغير في الحجم (بسبب تغير درجة الحرارة أو الضغط)، وذلك لأن مسافة الاتزان بين الذرات المتجاورة r_o تتناسب تقريبًا مع الحجم على النحو $r_o \sim V^{1/3}$. وبشكل عام نستطيع أن نكتب بأن طاقة الربط

$$E_l = E_l(V)$$

ونظرًا لاعتمادها الضعيف على درجة الحرارة، فلا تدخل في حساب الحرارة النوعية للأجسام الصلبة.

ب- طاقة الاهتزازات البلورية (Lattice Vibrations)

وهي الطاقة الإضافية التي تكتسبها البلورة عند تسخينها من درجة الصفر إلى درجة حرارة T؛ وهي تمثل الطاقة الاهتزازية للذرات حول مواضع سكونها وتتألف من الطاقة الحركية للذرات عند اهتزازها وطاقة الوضع لها عند إزاحتها عن موضع السكون. وتعتمد الطاقة الاهتزازية بمجموعها على كل من الحجم ودرجة الحرارة، أي أن

$$E_v = E_v(V,T)$$

ج- مساهمات أخرى مثل طاقة الغاز الإلكتروني، والطاقة المغناطيسية (إن وجدت)، وطاقة الأمواج الأسبينية وغيرها.

2-3 اهتزازات الشبيكة البلورية (*Lattice Vibrations*)

عند تسخين البلورة تزداد حركة الذرات المرتبة بانتظام في نقاط الشبيكة، وهي حركة اهتزازية حول موضع السكون (الاتزان)، وتهتز هذه الذرات في الفضاء الثلاثي وفي الاتجاهات الثلاثة (x,y,z). وتنشأ هذه الحركة الاهتزازية نتيجة اكتساب الذرات طاقة حرارية عند التسخين. وسوف نقتصر في معالجة هذه الاهتزازات على الاهتزازات ذات السعة الاهتزازية الصغيرة (small amplitude) وتسمى هذه المعالجة بالتوافقية البسيطة (simple harmonic). ويحكم هذه الاهتزازات القوى المتبادلة بين الذرات المتجاورة عند إزاحتها عن موضع الاتزان. ولحساب هذه القوى بالتفصيل يجب معالجة حركة الذرات والإلكترونات وإيجاد الدوال الموجية للنظام، ولكننا نستطيع الحصول على كثير من الخواص الهامة لهذه الحركة وللخواص الفيزيائية المتعلقة بها دون إجراء هذه الحسابات المطولة. ونكتفي بأن نجعل هذه القوى بين الذرات أثناء حركتها تتناسب طرديًا مع مقدار إزاحة الذرة عن موضع الاتزان (أي اعتماد التقريب الهارموني harmonic).