وقبل أن نبدأ بمعالجة الاهتزازات الجماعية للذرات في الشبيكة، نود أن نلفت الانتباه إلى حقيقة تجريبية نشاهدها دائمًا، وهي أن الأمواج الصوتية تنتقل وتنتشر في الأجسام الصلبة وبسرعة أكبر من انتشارها في الأوساط الغازية. ونستدل من هذه الحقيقة أن هناك اهتزازات على هيئة أمواج تنتشر في البلورات، وبأطوال موجية أكبر كثيرًا من المسافة "a" بين الذرات المتجاورة. أي أن البناء الذري الدقيق للبلورة ليس عاملاً مهمًا لانتشار هذه الأمواج، بل هي تعتمد في انتشارها على مرونة الوسط الصلب بشكل عام وعلى كثافته. فالبلورة بالنسبة لهذه الأمواج هي وسط مادي متصل ومستمر كالسلك المشدود أو القضيب الممدود. وكما هو معروف فإن معادلة الحركة للأمواج في الأوساط المادية المتصلة هي

$$\frac{d^2u}{dt^2}=\left(\frac{C}{\rho}\right)\frac{d^2u}{dx^2} \quad \text{.................. (3.1)}$$

حيث u مقدار الإزاحة عن موضع الاتزان.

x الاتجاه الذي تنتشر فيه الأمواج.

C معامل ينج للمرونة، ρ كثافة الوسط

ويمثل المقدار $v=\left(\frac{C}{\rho}\right)^{1/2}$ سرعة انتشار هذه الأمواج.

ومن المعلوم أن سرعة الأمواج الصوتية في الأجسام الصلبة هي من رتبة $1000\frac{m}{sec}$ ويمكن لهذه الاهتزازات الميكانيكية (الأمواج الصوتية) أن تنتشر في الاتجاهات الثلاثة (x,y,z)، فإن كانت u في الاتجاه الذي تنتشر فيه الموجة (x) سميت الأمواج **بالأمواج الطولية** (longitudinal)، وإن كانت u في اتجاه معامد (أي y أو z) سميت **بالأمواج المستعرضة**. وتختلف السرعة باختلاف النوع لأن معامل المرونة C يختلف من اتجاه إلى آخر. ولكن جميع السرع تكون من نفس الرتبة.

ومن الواضح أن السرعة لا تعتمد على الطول الموجي، بل هي مقدار ثابت يعتمد على الوسط المادي فقط، أي

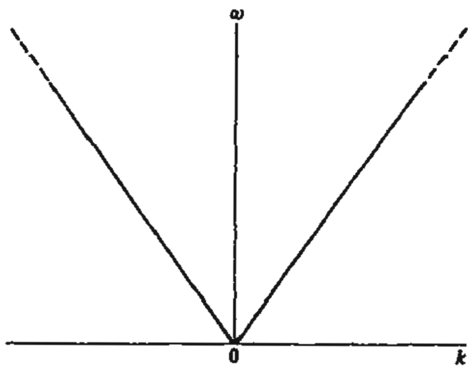
$$v = f\lambda = \frac{\omega}{2\pi}\lambda = \frac{\omega}{2\pi/\lambda} = \frac{\omega}{|k|} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (3.2)$$

حيث f التردد، ω التردد الزاوي، k المتجه الموجي (wave vector).

كما نرى بأن السرعة الطورية والسرعة الجماعية متساويتان ولا يوجد تفرق للأمواج (dispersion) أثناء انتشارها (انظر الشكل 3.1)

$$v_p\,(phase\ velocity) = \frac{\omega}{k}$$

$$v_g\,(group\ velocity) = \frac{d\omega}{dk} = v_p$$



شكل (3.1): انتشار الأمواج بسرعة ثابتة في الوسط المادي المتصل.

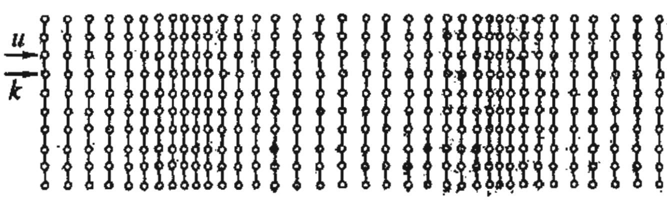
ولا تنطبق هذه النتائج على الأمواج الاهتزازية في البلورة أذا كان الطول الموجي لها قصيرًا ومن نفس رتبة المسافة بين الذرات (a)، أي عندما:

$\lambda \sim a\,(few\ A^{\circ})$

وسوف ننتقل الآن إلى دراسة الاهتزازات البلورية في الشبيكة التي تحتوي على عدد من النقاط المادية (الذرات) المرتبة بشكل منتظم بحيث تفصل الذرة عن جارتها مسافةً مقدارها "a". أي أن البلورة ليست وسطًا ماديًا متصلاً بل هي مؤلفة من نقاط مادية تفصلها عن بعضها البعض مسافات متساوية في كل اتجاه من الاتجاهات الثلاثة.

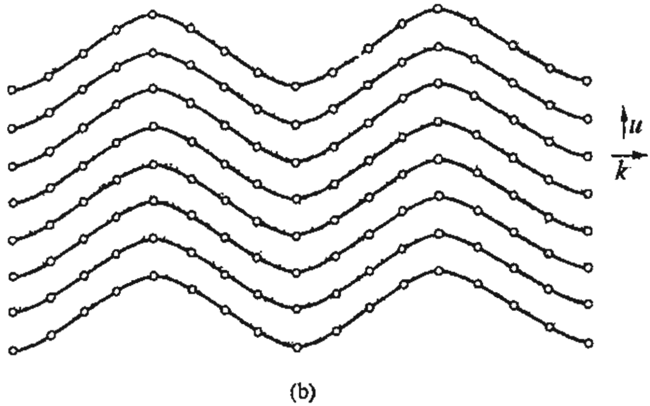
3–3 الاهتزازات في شبيكة أحادية الذرة (*Monatomic*)

وفي البداية نأخذ شبيكة تشتمل الخلية الأولية فيها على ذرة واحدة، ثم نحاول أن نجد تردد الموجة الاهتزازية (بسبب إزاحة الذرات عن موضع الاتزان) بدلالة المتجه الموجي $\vec{k}$ الذي يصف هذه الموجة. وعندما تنتشر الموجة في الاتجاه [100] مثلاً فإن مجموعة كبيرةً من المستويات البلورية التي تحتوي على أعداد كبيرة من الذرات تتحرك باتفاق في الطور (in phase) وبإزاحات إما موازية للمتجه الموجي أو معامدة له. أي أن هذه الاهتزازات هي حركة جماعية (collective) وليست حركة ذرة واحدة. ولكل قيمة من قيم $\vec{k}$ يمكن لهذه المستويات البلورية أن تهتز في ثلاثة اتجاهات، أي في ثلاثة أنماط اهتزازية (modes) أحدها طولي (عندما تكون الإزاحة موازية لاتجاه k) واثنان مستعرضان (عندما تكون الإزاحة معامدة لاتجاه k). (أنظر الشكل 3.2).



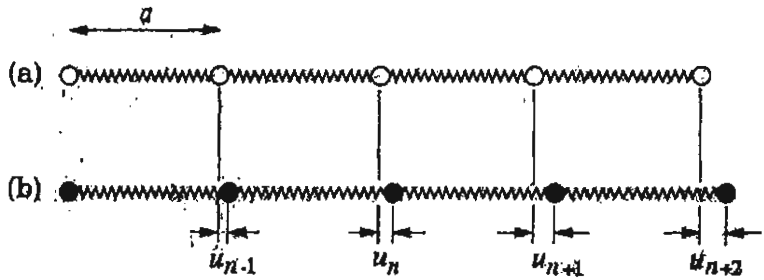
(a)

الشكل (3.2): (b) موجة صوتية مستعرضة (الإزاحة معامدة للمتجه الموجي)



الشكل (3.2): (a) موجة صوتية طولية (الإزاحة موازية للمتجه الموجي)

ونفترض الآن بأن القوة التي تؤثر على الذرة في المستوى p مثلاً تتناسب طرديًا مع مقدار التغير في المسافة بينها وبين الذرات المجاورة في المستويات المجاورة نتيجة الحركة الاهتزازية. ولو أخذنا خطًا واحدًا من الذرات في اتجاه واحد فقط (انظر الشكل 3.3)



الشكل (3.3): سلسلة خطية من ذرات متشابهة عند اهتزازها

فإن القوة المؤثرة على الذرة n مثلاً تساوي

$$F=\sum_{p} c_p\left(u_{n+p}-u_n\right)$$

حيث تأخذ p قيمًا صحيحة سالبة وموجبة، أي أن الذرة n تتأثر بحركة كل الذرات القريبة منها. ولو اقتصرنا في المجموع على أقرب الذرات فقط فإن p تأخذ قيمتين فقط $1,-1$، أي أن

$$F = c_1(u_{n+1} - u_n) + c_1(u_{n-1} - u_n)$$
$$F = c_1(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) \qquad (3.3)$$

حيث u هي مقدار الإزاحة عن وضع الاتزان، c ثابت الزنبرك الذي يمكن تخيله موجودًا بين الذرات المتجاورة (علمًا بأن $c_1 = c_{-1}$). وعليه فإن معادلة الحركة للذرة n (وكتلتها M) هي:

$$M\frac{d^2u_n}{dt^2} = c_1(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) \qquad (3.4)$$

ومن معرفتنا بالحركة التوافقية البسيطة، فإننا نتطلع إلى حلول على النحو.

$$u_n = ue^{i(kna-\omega t)}$$

حيث أن مواضع الذرات هي

$$x_{n-1} = (n-1)a\ ,\ x_n = na,\ x_{n+1} = (n+1)a\ ,\ \ldots\ldots$$

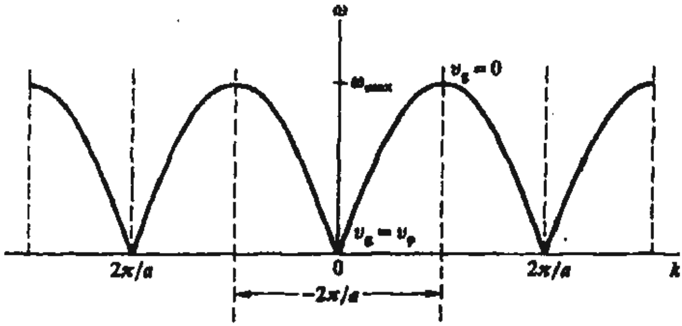
وبالتعويض في المعادلة السابقة نحصل على:

$$-M\omega^2 = c_1(e^{ika} - 2 + e^{-ika})$$
$$-M\omega^2 = 2c_1(\cos ka - 1)$$

أو

$$\left.\begin{aligned} M\omega^2 &= 4c_1 \sin^2\frac{ka}{2} \\ \omega &= \left(\frac{4c_1}{M}\right)^{1/2}\left|\sin\frac{ka}{2}\right| \end{aligned}\right\} \qquad (3.5)$$

ويمثل الشكل (3.4) رسمًا بيانيًا لهذه العلاقة الهامة



شكل (3.4): علاقة التفرق ($\omega = \omega(k)$) لاهتزازات السلسلة الخطية.

وبالمقارنة مع السلوك للخيط المادي المتصل (الشكل 3.1) نلاحظ ما يلي:

- هناك قيمة عظمى للتردد $\omega_{max} = \left(\frac{4c_1}{M}\right)^{1/2}$ ، وتسمى أيضًا بالقيمة القاطعة (cut–off) ، أي لا يمكن حصول اهتزازات بلورية ترددها أعلى من ω_{max}
- تتغير قيمة ω بشكل دوري منتظم مع المتجه الموجي k وعلى فترات متساوية مقدارها $\frac{2\pi}{a}$.

إن هذا التكرار الدوري المنتظم لقيم ω لا يعطي أي معلومات إضافية فوق ما هو موجود في الفترة الأولى. ونبدأ بنقطة الأصل التي تكون عندها $\omega = 0$ مع $k = 0$ ، وتمتد الفترة الأولى الهامة ما بين $\frac{-\pi}{a} \le k \le \frac{\pi}{a}$. أما قيم k التي تقع خارج هذه الفترة، أي $|k| > \frac{\pi}{a}$ ، فلا تؤدي إلى قيم جديدة للتردد ω ، وتكون القمم والقيعان في الشكل الموجي غير منطبقة مع مواضع الذرات (انظر الشكل 3.5) ولا تمثل هذه القيم خارج الفترة الأولى حلولاً مقبولة فيزيائيًا. ونلاحظ أيضًا أن مدى

الفترة الأولى يساوي $\frac{2\pi}{a}$ ، وليس هذا المدى إلا المتجه الأولي (primitive vector) في الشبيكة المقلوبة. أي أن فضاء المتجه $\vec{k}$ ليس إلا فضاء الشبيكة المقلوبة.

الشكل (3.5): شكل الموجة عندما $\omega = 0$, $k = \frac{4\pi}{a}$ حيث لا تتطابق القمم والقيعان مع مواضع الذرات.

وبذلك نرى بأن الأمواج تنتشر في الفضاء الحقيقي للشبيكة العادية، ولكن هذا الانتشار يوصف بواسطة المتجهات في فضاء الشبيكة المقلوبة (فضاء $\vec{k}$). وكما أن جميع الخلايا الأولية في الشبيكة الحقيقية متشابهة ومتكافئة، كذلك فإن الخلايا الأولية في الشبيكة المقلوبة كلها متشابهة ومتكافئة، وتشتمل كل منها على نفس المعلومات.

ونلاحظ أيضًا أن الخلية الأولية في الشبيكة المقلوبة هي منطقة برلوان الأولى، أي أن جميع قيم k المهمة فيزيائيًا ($\frac{-\pi}{a} \le k \le \frac{\pi}{a}$) تقع ضمن منطقة برلوان الأولى لهذه الشبيكة الخطية.

ولو أخذنا النسبة بين إزاحتي ذرتين متجاورتين.

$$\frac{u_{n+1}}{u_n} = \frac{e^{ika(n+1)}}{e^{ika(n)}} = e^{ika} \quad \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (3.6)$$

لرأينا أن المدى $-\pi \le ka \le \pi$ يغطي جميع القيم الممكنة، ولا معنى للقول بأن فرق الطور بين ذرتين متجاورتين أكبر من π ، وذلك لأن فرق الطور 1.2π مثلاً