



## مقدمة

تتشكل هذه المطبوعة لفيزياء الجسم الصلب الموجهة لطلبة السنة الرابعة جامعي تخصص فيزياء عموماً, وطلاب المدارس العليا خصوصاً, من دروس ومفاهيم مبسطة وشاملة للمقرر إلى جانب تمارين تدعيمية في سياق البرنامج المسطر من قبل وزارة التعليم العالي.

وبما أن فيزياء الجسم الصلب يعتبر علماً دقيقاً تسييره قوانين و مبادئ تستعمل صيغ رياضية ضرورية لمفهومه الفيزيائي و الكيميائي للظواهر المدروسة, فقد تناولنا في هذا المقرر المبادئ الأساسية في علم البلورات من تركيب بلوري وشبكات معكوسة الي حيود الاشعة السينية في البلورات, كما نتطرق الى تذكير بالروابط البلورية والتي تحكمها طاقة التماسك بالإضافة إلى الخواص المرورية من قوى خارجية تؤثر على الجسم و تفسيرها ، والخواص الحرارية التي تحكمها نظريات الميكانيك الكلاسيكي والكم .كذلك الحال بالنسبة للخواص الكهربائية والمغناطيسية.

وتم تعزيز هذه الدروس بأمثلة واضحة ومفصلة حتى يتمكن الطالب من استيعاب هذه الوحدة بشكل كامل, إلى جانب تمارين ومسائل محلولة تساعده على الفهم العميق للدرس.

و في الأخير نرجو أن نكون قد وفقنا إلى إيصال محتوى تدعيمي يحتاجه كل الطالب في دراسته العلمية ، بحيث يساعدهم في فهم الظواهر الفيزيائية المحيطة بنا و التي تؤثر على الجسم الصلب خصوصاً.

بالتوفيق

## الفهرس

### المحور الأول: مبادئ أساسية في علم البلورات

- 1 I - مقدمة في علم البلورات
- 1 1-I: مفاهيم في علم البلورات
- 1 1-1-I: تمهيد
- 1 2-1-I: التركيب الداخلي للبلورة
- 2 3-1-I: الكثافة العقدية السطحية
- 4 1-1-I: 4: خواص الشبكة المكعبة
- 5 1-1-I: 5: الأنظمة البلورية السبعة
- 9 1-1-I: 6: العبوة المتراسة المكعبة والسداسية
- 12 1-1-I: 7: التركيبات البلورية لبعض البلورات البسيطة
- 14 2-I: الاتجاهات البلورية والشبكة المعكوسة
- 14 1-2-I: 1: الاتجاهات البلورية: طريقة فيس WEISS
- 23 2-2-I: 2: الاتجاهات البلورية وقرائن ميلر
- 30 3-2-I: 3: الشبكة المعكوسة وعمليات التناظر
- 35 3-I: 3: انعراج الأشعة السينية في البلورات
- 35 1-3-I: 1: الأشعة المستخدمة في دراسة البلورات
- 40 2-3-I: 2: الطرق التجريبية لحيود الأشعة (الأمواج) على البلورات

### المحور الثاني: الترابط البلوري

- 42 II- طاقة الترابط
- 44 II - 1 أنواع الترابط
- أ. الرابطة الأيونية
- ب. الرابطة التساهمية
- ت. الرابطة المعدنية
- ث. البلورات الجزيئية
- 50 د. الرابطة الهيدروجينية (Hydrogen Bonding)

### المحور الثالث: الخواص المرونية

- 52 1-III: تمهيد
- 52 III - 2: ممتد الإجهاد (Tenseurs de contrainte)

55	III-3: ممتد التشوه
55	III-3-1: دراسة التشوه المرن
57	III-3-2: الممتد ضد المتناظر
59	III-4: طاقة المرونة
61	III-5: موجات المرونة في البلورات
65	III-6: نذبذبة (اهتزازات) الشبكة البلورية:
65	III-6-1: مقدمة
65	III-6-2: نذبذبة الشبكة في سلسلة خطية من ذرة واحدة
73	III-6-3: نذبذبة الشبكة في سلسلة خطية من ذرتين مختلفتين
75	III-6-4: تكميم اهتزازات الشبكة البلورية – الفونونات (phonons)

### المحور الرابع: الخواص الحرارية البلورية

77	IV-1: مقدمة عن السعة الحرارية
77	IV-2: السعة الحرارية وفق النموذج الكلاسيكي
78	IV-3: نظرية اينشتاين للسعة الحرارية (نموذج اينشتاين)
81	IV-4: نموذج ديبي للسعة الحرارية (Debye Specific Heat)
81	IV-4-1: كثافة الحالات (Density of State (DOS))
83	IV-4-2: نموذج ديبي للسعة الحرارية

### المحور الخامس: الخواص الكهربائية للأجسام الصلبة

74	V-1: التوصيل الكهربائي في المعادن
74	V-1-1: دوال توزيع الطاقة
75	V-1-2: نموذج درود ( <i>Drude Model</i> ) الإلكترون الحر كلاسيكيا ( <i>Electron Model Classical Free</i> )
76	V-1-3: الموصلية الكهربائية في المعادن وفقا لنموذج درود
78	V-1-4: النظرية الكمية للإلكترونات الحرة
82	V-1-5: الحرارة النوعية الإلكترونية في المعادن
85	V-1-6: نظرية سويات الطاقة
86	V-1-7: أطياف الطاقة
87	V-1-8: دالة بلوخ
89	V-1-9: شرائط الطاقة وفق تصور بلوخ
90	V-1-10: تصنيف المواد الصلبة وفقا لنظرية الشرائط

90	2-V: أشباه النواقل
90	1-2-V: مقدمة
92	2-2-V: أشباه النواقل المشوبة أو اللاذاتية
94	3-2-V: تركيز حاملات التيار في شبه الناقل
97	4-2-V: ظاهرة هول
98	5-2-V: الناقلية الكهروضوئية
98	3-V: العوازل
98	1-3-V: الاستقطاب و الإستقطابية
99	2-3-V: القابلية الكهربائية
100	3-3-V: المجال الموضوعي:
	<b><u>المحور السادس: الخواص المغناطيسية للجسم الصلب</u></b>
101	1-VI: مقدمة
101	2-VI: الحقل المغناطيسي في المواد الصلبة
105	3-VI: الخواص المغناطيسية للذرة الحرة
106	1-3-VI: المغناطيسية العكسية - علاقة لانجفين
107	2-3-VI: المغناطيسية الطردية (البارامغناطيسية)
109	3-3-VI: المغنطة الحديدية (الفيرومغناطيسية)
111	تمرينات ومسائل محلولة

## -I مقدمة في علم البلورات

يمكن تصنيف المواد الصلبة إلى نوعين: مواد صلبة متبلورة كما هو الحال في المعادن وأغلب المركبات الكيميائية والسبائك ومواد صلبة غير متبلورة كالزجاج والشمع، كما أن بعض المواد السائلة والغازية تتحول إلى مواد متبلورة عند تجمدها مثل الثلج والغازات الخاملة.

تتركب المواد الصلبة من وحدات أساسية محددة هي الذرات أو المجموعات الذرية، تتوزع هذه الأخيرة في التركيب البنائي للمواد غير المتبلورة بشكل عشوائي، بينما تكون الذرات أو المجموعات الذرية في المواد المتبلورة موزعة بشكل منتظم ويسمى بالبلورة.

تتميز البلورات بأن لكل منها شكل هندسي منتظم وأسطح متشابهة ومتوازية وملساء.

بشكل عام تختلف المواد غير المتبلورة عن المواد المتبلورة في شكل انتظام الذرات في المادة، حيث يغيب الانتظام في النوع الأول (أي تتوزع الذرات بشكل عشوائي)، بينما يوجد هذا النظام في النوع الثاني من المواد الصلبة ويوجد في بعض المواد غير المتبلورة مزيج من العشوائية والانتظام للذرات، يوجد نوعان من الانتظام هما الانتظام من النوع المحدود (أي قصير المدى) والانتظام الممتد (أي طويل المدى) حيث في الانتظام المحدود تكون الذرات أو المجموعات الذرية موجودة على هيئة مرتبة ومتكررة على المدى القصير، أما على المدى الطويل فإن التركيب البنائي يظهر توزيعاً غير منتظم ويغيب الانتظام الشامل وتسمى المادة الصلبة في هذه الحالة بمادة غير متبلورة (*noncrystalline*) أو أمورفية (*amorphe*)، ويسمى التركيب البنائي في مثل هذه المواد تركيباً ذا انتظاماً قصير المدى أو محدود.

**1-I: مفاهيم في علم البلورات****1-1-I: تمهيد: المواد الصلبة صنفان:**

➤ **مواد بلورية:** تتميز بحالة مستقرة ناتجة عن الترتيب المنتظم والدوري لذرات وجزئيات البلورة على المدى الطويل مثل: الماس.

➤ **مواد لا بلورية أو زجاجية (*Glass et Amorphe*):** بنية شبيهة بالسائل إلا أن روابطه لا تتصدع وترتيب الذرات فوضوي بنيته شبه مستقرة ويمكن أن تتحول إلى بنية بلورية وفق آليات معينة يخضع لنظام المدى القصير مثل: الزجاج.

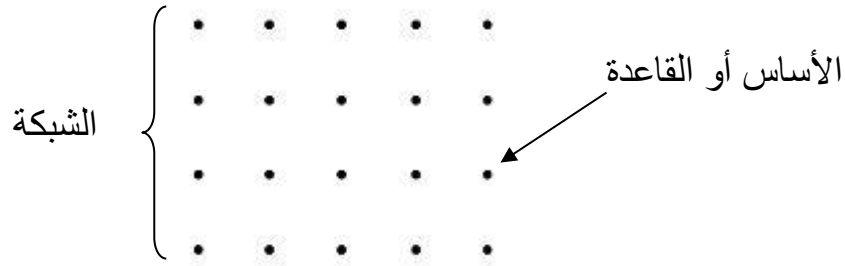
من الصعب الحصول على بلورة وحيدة لكل مركب لأن تنمية البلورة يحتاج إلى زمن طويل جداً وغالبا ما نحصل على مركب متعدد التبلور، ويمكن الكشف عن ذلك بواسطة حيود الأشعة السينية.

**2-1-I: التركيب الداخلي للبلورة:** هو توزيع منتظم في الفضاء الثلاثي للذرات أو الجزيئات أو

مجموعتهما.

**البلورة:** هو توزيع منتظم للذرات في الفضاء الثلاثي.

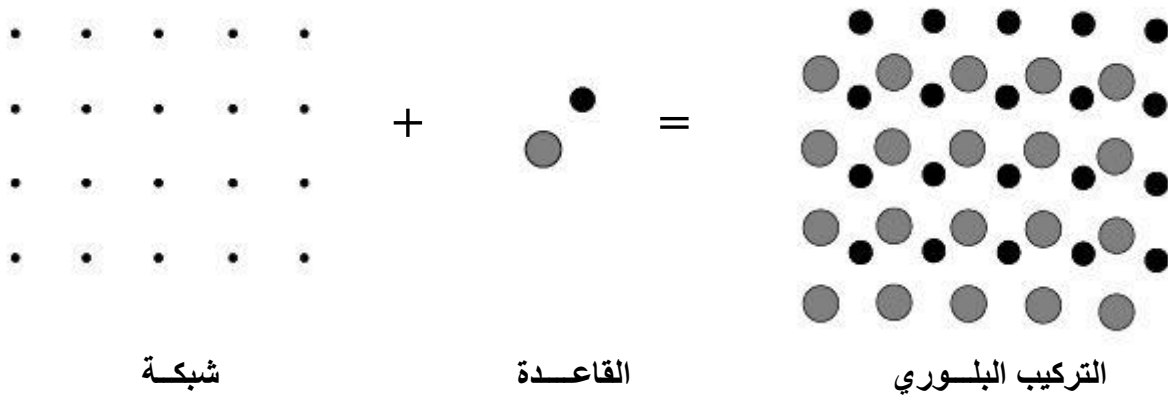
**الشبكة:** تمثل النموذج الرياضي وهي مشكلة من مجموعة من العقد موزعة بطريقة منتظمة في الفضاء الثلاثي.



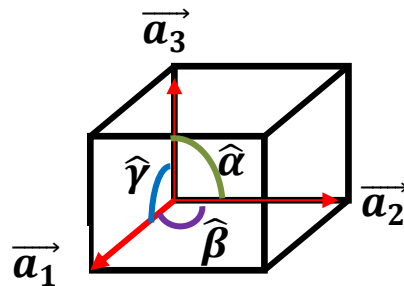
الشكل: شكل البلورة

التركيب البلوري = شبكة برافي + قاعدة

التكرار المنتظم للقاعدة في الفضاء الثلاثي يتم وفق قوانين تناظر البلورات وأهمها قانون التناظر الإنسحابي تتبع به كل شبكات برافي.



**3-1-I: الكثافة العقدية السطحية:** تعرف الكثافة العقدية السطحية بعدد العقد لوحدة.



\* الخلية الأساسية:

$$v = |\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)| \text{، حجمها ، } c = |\vec{a}_3| \text{ ، } b = |\vec{a}_2| \text{ ، } a = |\vec{a}_1|$$

شكله متوازي سطوح ، أبعاده  $a, b, c$  ، أشعته  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  حيث :

$$\beta \in \vec{a}_1, \vec{a}_2 \gamma \in \vec{a}_3, \vec{a}_1 \alpha \in \vec{a}_2, \vec{a}_3$$

يحتوي على عقدة واحدة تسمى **الخلية الأساسية**، كل خلية تحتوي على 8 زوايا ركنية  $1 = \frac{1}{8} \cdot 8$ ، كي

تكون الخلية أساسية، يجب أن تتوفر على الشروط:

\* تحقق التناظر الإنسحابي.

\* تنتمي إليها عقدة واحدة.

\* حجمها أصغر ما يمكن اختياره.

إذا كانت الخلايا الأساسية لا تتمتع بتناظر كل الشبكة فنتعامل مع خلايا أولية غير أساسية تحتوي على

أكثر من عقدة، أحرفها غير منطبقة على الأشعة الأساسية  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  وأبعادها  $a, b, c$ .

**\* أمثلة عن الخلية الأولية:**

1- خلية ممرزة الجسم (I):

عدد العقد: 02

$$\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) (0,0,0)$$

2- خلية ممرزة الوجوه:

$$\text{عدد العقد: } 1 + 6 \times \frac{1}{2} = 4$$

$$\left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right) (0,0,0) \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

**الشبكة البلورية المكعبة (SC):** توجد ثلاث أنواع

- شبكة مكعبة بسيطة: يرمز إليها بـ (P)

خصائصها:  $a = b = c$

$$\alpha = \beta = \gamma$$

$$\vec{a}_1 = \vec{a}_i \vec{a}_2 = \vec{a}_j$$

$$\vec{a}_3 = \vec{a}_k$$

A طول ضلع المكعب.

- الشبكة المكعبة الممرزة الجسم (bcc)

شبكة خليتها أولية تحوي عقدة في الوسط بالإضافة إلى الأحرف، يرمز إليها بـ (I)، أشعة الانسحاب

الأساسية غير منطبقة على الأحرف.

أشعة انسحاب غير أساسية  $\vec{a}_x, \vec{a}_y, \vec{a}_z$

أشعة انسحاب أساسية  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$

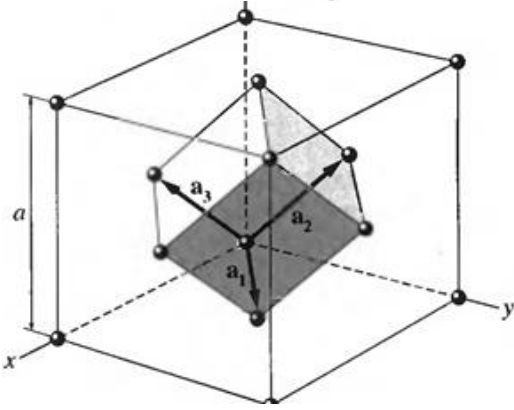
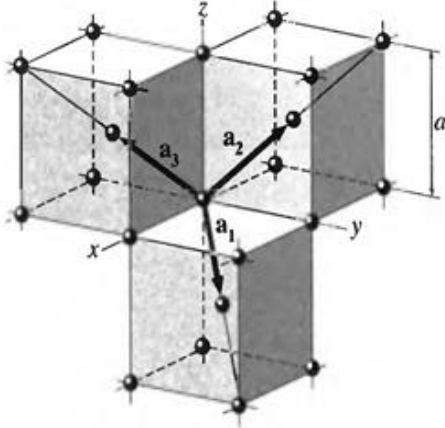
$$\vec{a}_1 = \frac{1}{2}(-\vec{a}_x + \vec{a}_y + \vec{a}_z) = \frac{a}{2}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k})$$

$$\vec{a}_2 = \frac{1}{2}(+\vec{a}_x - \vec{a}_y + \vec{a}_z);$$

$$\vec{a}_3 = \frac{1}{2}(\vec{a}_x + \vec{a}_y - \vec{a}_z)$$

حجم الخلية غير الأساسية  $v = a^3$  أم الأساسية

$$v = a^3/2 \text{ فتكون}$$



- الشبكة المكعبة الممركزة الوجوه (fcc)

$$\vec{a}_1 = \frac{1}{2}(\vec{a}_x + \vec{a}_y) = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j})$$

$$\vec{a}_2 = \frac{1}{2}(\vec{a}_k + \vec{a}_y) = \frac{a}{2}(\vec{k} + \vec{j})$$

$$\vec{a}_3 = \frac{1}{2}(\vec{a}_x + \vec{a}_k) = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{k})$$

FCC, BCC هي ضمن شبكات برافي يمكن تحديد كل عقدة

بواسطة انسحابات أساسية.

#### I-1-4: خواص الشبكة المكعبة:

الرقم	نوع الشبكة	Sc (P)	Bcc (I)	Fcc (F)
01	حجم الخلية الأولية	$a^3$	$a^3$	$a^3$
02	حجم الخلية الأساسية (حجم/عدد العقد)	$a^3$	$\frac{a^3}{2}$	$\frac{a^3}{4}$
03	عدد العقد التابعة للخلية أولية	1	2	4
04	الكثافة العقدية الحجمية (عدد العقد/وحدة الحجم)	$\frac{1}{a^3}$	$\frac{2}{a^3}$	$\frac{4}{a^3}$
05	العدد التناسقي Z عدد الحوار المباشر (z) من العقد بالنسبة للعقدة معينة	6	8	12
06	عدد العقد المجاورة الجوار	12	6	6
07	المسافة بين أقرب عقدتين	a	$\frac{a\sqrt{3}}{2}$	$\frac{a}{\sqrt{2}}$

الشبكة bcc = الشبكة sc + قاعدة عقدية

القاعدة العقدية مكونة من عقدتين:  $(0.0.0)$  و  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

\* نضع العقدة الممركزة مع عقدة أخرى فنحصل على شبكة بسيطة SC.

الشبكة Fcc = الشبكة sc + قاعدة عقدية



القاعدة العقدية مكونة من:  $(0.0.0)$ ،  $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ،  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ ،  $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$

### I-1-5: الأنظمة البلورية السبعة:

**مقدمة:** يتميز الشكل الخارجي لبلورات المواد بأسطحها المستوية والملساء والتي تسمى أوجه البلورة، ويختلف مظهر بلورات المواد باختلاف أشكال الأوجه أو الزوايا بين هذه الأوجه وبالتالي باختلاف تناظرها، ويعكس المظهر الخارجي للبلورة طبيعة التركيب الداخلي أو وحدات البناء الداخلية التي تكون هذه البلورة، سوف نتطرق بالتفصيل للتركيب البنائي لأنواع مختلفة للشبكات الفراغية لبلورات المواد الصلبة.

### أ/ شبكة برافى:

تمكن برافيه (Bravais) عام 1848 من إدخال مفهوم الشبكة حيث:  $n_1 n_2 n_3$  أعداد صحيحة إلى علم البلورات وذلك لتسهيل دراسة التركيب البلوري للمواد الصلبة، وعرفها على أنها تركيب دوري لا نهائي منتظم لعقد منفصلة موزعة في الفضاء الثلاثي بأسلوب منتظم، شبكة برافى تتمتع بإمكانية تحديد كل عقدة من عقدها باستخدام شعاع الانسحاب R.

### لتحديد الشعاع:

- نأخذ عقدة من عقد الشبكة كمركز المحاور.

- تعيين ثلاث أشعة انسحاب  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  غير واقعة كلها في مستو واحد فنكتب  $\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$

$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ : أشعة الانسحاب الأساسية إذا كان  $n_1 n_2 n_3$  أعداد صحيحة.

لاختيار هذه الأشعة يجب أن تؤلف فيما بينها أصغر متوازي سطوح يمكن تكراره لتوليد البلورة ويحمل نفس تناظر كل الشبكة، وقد تمكن برافى من تصميم أربع عشرة شبكة فقط تصف التراكيب البلورية جميع المواد الصلبة مصنفة في مجموعات رئيسية أو أنظمة، يأتي هذا العدد الصغير (14 شبكة) بسبب أن عدد حالات التناظر الانسحابي يكون محدودا، فمثلا يستحيل بناء شبكة ذات وحدة لها شكل

خماسي منتظم وذلك لأنه لا يمكن تغطية مساحة معينة تماما بتكرار هذا الشكل الخماسي المنتظم، وبالتالي نجد أن متطلبات التناظر الانسحابي في بعدين اثنين (على سبيل المثال) تحدد الشبكات الممكنة بنائها إلى خمسة فقط هم: متوازي الأضلاع المائل، المربع، السداسي، المستطيل البسيط والمستطيل المتمركز في الأبعاد الثلاثة.

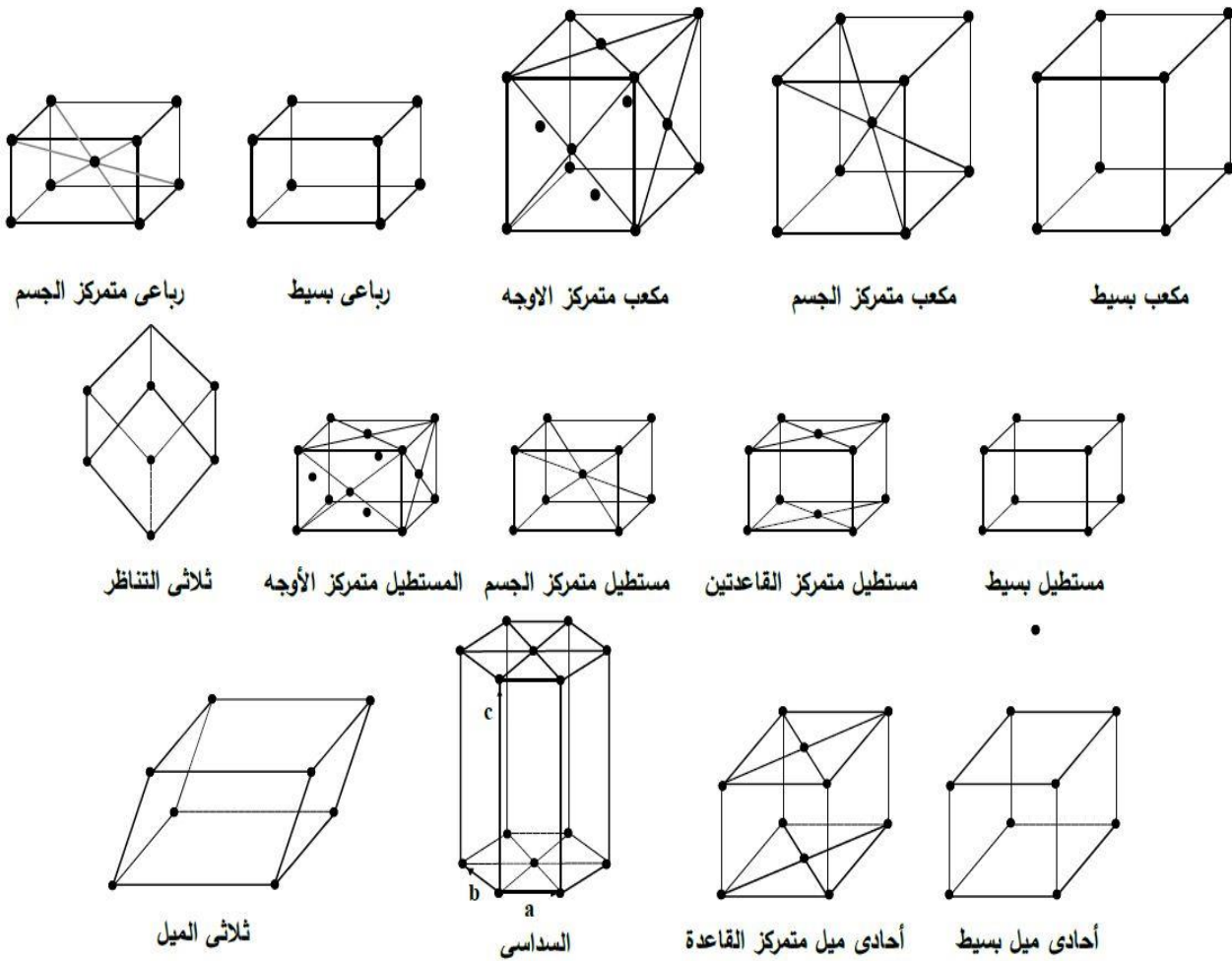
يبلغ عدد الشبكات البرافية أربع عشرة شبكة فقط بينما يبلغ عدد الشبكات غير البرافية 230 شبكة. تصنف الأربع عشرة شبكة البرافية إلى سبع أنظمة (مجموعات أو فئات) هي: المكعب، الرباعي القائم، المستطيل القائم، ثلاثي التناظر، أحادي الميل، ثلاثي الميل والسداسي، توجد أنواع مختلفة من الشبكات منها البسيط وغير البسيط.

في الشبكة البسيطة (simple) تكون النقاط عند رؤوس الشكل فقط، وبذلك تمثل الخلية وحدة أساسية، نذكر أنه في الشبكات غير البسيطة تكون خلية الوحدة أولية، يبين الجدول الوصف التفصيلي والخصائص الهندسية لكل نظام من الأنظمة السبعة:

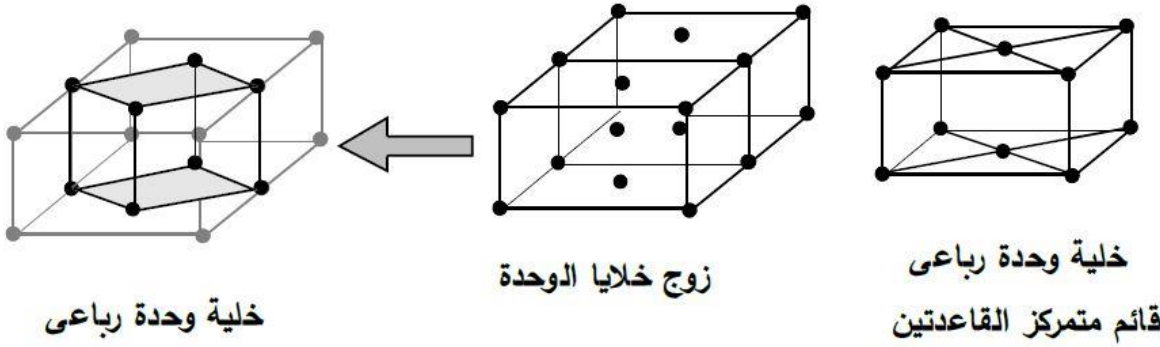
الفصيلة	الخصائص	عدد الأنواع	النوع	الرمز	خصائص التناظر	عناصر
فصيلة المكعب	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	ثلاثة أنواع	المكعب البسيط SC مكعب م الجسم BCC المكعب م الأوجه FCC	P I F	أربعة محاور دوران ثلاثية الرتبة	
فصيلة الرباعي القائم	$a=b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	نوعان	رباعي بسيط رباعي م الجسم	P I	محور دوران ثلاثي الرتبة	
فصيلة المستطيل القائم	$a \neq b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	أربعة أنواع	مستطيل قائم بسيط مستطيل قائم م الجسم مستطيل قائم م الأوجه مستطيل قائم م القاعدتين	P I F B	ثلاثة محاور دوران ثنائية الرتبة	
فصيلة الثلاثي	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$	نوع واحد	خلية أولية	-	محور دوران ثلاثي الرتبة	
فصيلة أحادي الميل	$a \neq b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$	نوعان	أحادي الميل البسيط أحادي الميل م	-	محور دوران ثنائي الرتبة	

		القاعدتين			
لا يوجد	-	ثلاثي الميل البسيط	نوع واحد	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	فصيلة ثلاثي الميل
محور دوران ثلاثي الرتبة	-	السداسي البسيط	نوع واحد	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta \neq 90^\circ$ & $\gamma = 120^\circ$	فصيلة السداسي

كما سوف نرى فيما بعد، يمكن تحويل بعض الأشكال إلى أشكال أخرى، فعلى سبيل المثال يمكن تحويل الرباعي القائم المتمركز القاعدتين إلى رباعي قائم بسيط عند اعتبار خلية وحدة جديدة، كما هو مبين في الشكل، ويمكن معالجة بعض الحالات الأخرى بالمثل.



الشكل I-1: أشكال برافى الأربعة عشرة



خلية وحدة رباعي

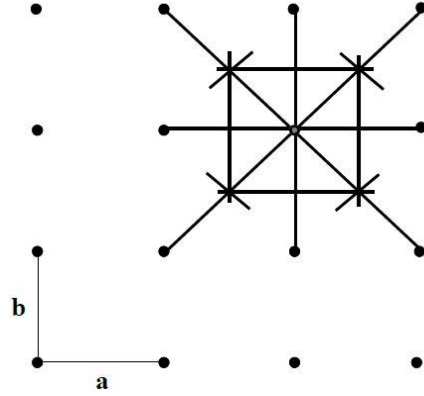
قائم بسيط

الشكل I-2: تحويل الرباعي القائم المتمركز القاعدتين إلى رباعي قائم بسيط وذلك باختيار خلية وحدة جديدة

ب/ خلية فينغر زائتس:

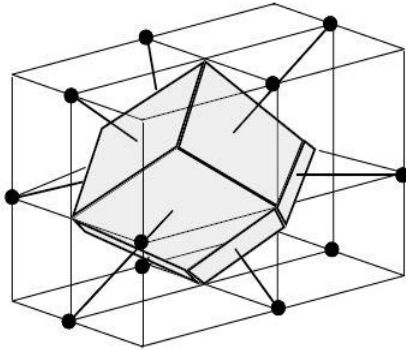
سبب دراستنا للخلايا الأولية من دون الخلايا الأساسية هو تفضيلنا للتعامل مع الخلايا التي لها تناظر يشابه تناظر الشبكة تحت الدراسة، فمثلا في حالة المكعب المتمركز الأوجه يتم التعامل مع خلية أولية وهي عبارة عن مكعب يحتوي على عقد في مراكز. اقترح العالم فينغر زائتس طريقة بسيطة يمكن بواسطتها اختيار وحدة الخلية ويتم ذلك بإتباع الخطوات الآتية:

- نرسم الشبكة النقطية التي تمثل الشبكة البرافية.
  - نعتبر نقطة معينة في الشبكة، ثم نرسم خطوطا تصل هذه النقطة بكل نقاط الشبكة المحيطة والأقرب إلى هذه النقطة، كما هو موضح بالشكل.
  - عند منتصف الخطوط المرسومة نرسم خطوط أو مستويات متعامدة.
  - نوصل بين تقاطعات المنصفات.
  - تكون أصغر مساحة (في حالة البعدين) أو أصغر حجم (في حالة الأبعاد الثلاثة).
- ينتج بهذه الطريقة وحدة خلية فينغر زائتس، وهي خلية تحتوي على نقطة شبكية (عقدة) واحدة بداخلها، وقد وجد أن شكل خلية فينغر زائتس هو دائما سداسي الشكل ما عدا في حالة الشبكة المستطيلة والمربعة تكون الخلية فيهما مربعة.

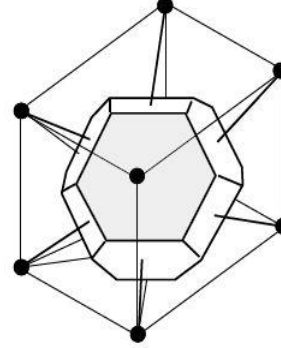
الشكل I-3: خلية فينغر زايتس في بعدين متعامدين و  $a=b$ 

تبدو خلية فينغر زايتس للشبكة المكعبة المتمركزة الجسم BCC، على هيئة جسم ثماني الأوجه على أشكال سداسية منتظمة.

أما البلورة المتمركز الأوجه FCC، فتكون على هيئة معين اثني عشري، أي له اثني عشر سطحاً على شكل معين، كما هو موضح بالشكل التالي:



ب- خلية فجنر-زايتس للمكعب متمركز الأوجه FCC



أ- خلية فجنر-زايتس للمكعب متمركز الجسم BCC

الشكل I-4: خلية فينغر زايتس للمكعب المتمركز الجسم وللمكعب المتمركز الأوجه

### I-1-6: العبوة المتراسة المكعبة والسداسية:

الذرة عبارة عن نواة محاطة بأغلفة إلكترونية، لهذا فإن الذرات لها حجم معين تملأ فضاء الشبكة،

لهذا يجب تحديد توزيع الكثافة الإلكترونية على حجم الشبكة ونعتمد في ذلك على ما يلي:

- نعتبر الذرات أنها كرات مصممة غير قابلة للانضغاط.

- نقوم بتعبئة الفجوات بين الكرات لتكون أصغر ما يمكن.

- كل كرة من طبقة B تلامس 3 كرات من الطبقة A.

شبكة مكعبة ممرزة الوجوه  $\longrightarrow$  ABCABCA

العبوة السداسية المتراسة  $\longrightarrow$  ABAB

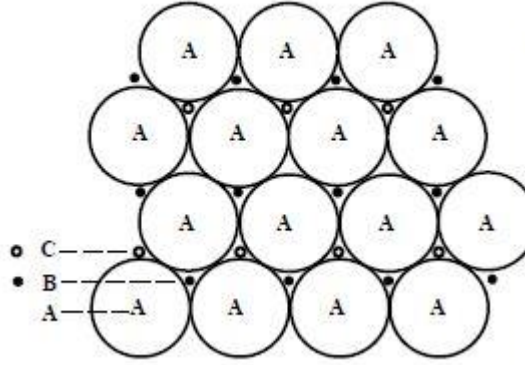
العبوة المكعبة المتراسة تعطي شبكة ممرزة الوجوه، حيث يتم اختيار كرات بحسب ترتيب

مجموعة الكرات المكونة منها الطبقة المتراسة، بحيث في كل طبقة كرة تلامس ستة 6 كرات مجاورة:

- الطبقة B: كل كرة من الطبقة B تتلامس مع ثلاث 3 كرات من الطبقة A، أي أن الكرة B تقع فوق فجوة من الطبقة A.

- الطبقة C: كل كرة من الطبقة C تقع فوق الفجوات بين كرات الطبقة A وفوق فجوة من الطبقة B.

- الطبقة الرابعة A: كل كرات الطبقة الرابعة تنطبق على كرات الطبقة الأولى، ولهذا تشكل عبوة متراسة مكعبة متمرزة الوجوه.

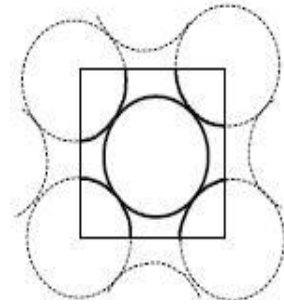


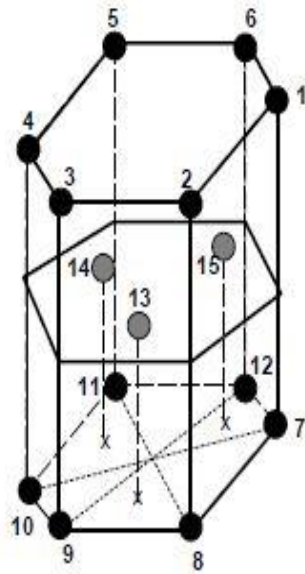
$$t = \frac{\text{حجم الكرات في الأولية الخلية}}{\text{حجم الخلية الأولية}} = \text{كثافة التعبئة}$$

كلما كان  $t$  كبير كلما كان التركيب متراسا والعكس صحيح،  $r_A$  نصف قطر الكرة:

$$2r_A = r = \frac{a}{\sqrt{2}}$$

$$r_A^3 = \frac{a^3}{2\sqrt{2}}$$





$$t = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0,74$$

العبوة المتراسة السداسية:

$$a=b \neq c$$

$$\gamma = 120^\circ$$

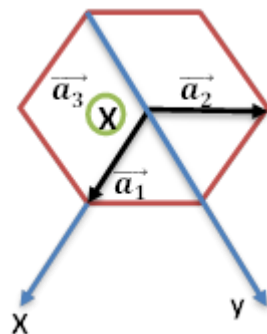
$$\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1,63$$

$$t = \frac{2 \frac{4\pi}{3} r_A^3}{v = a^3 \sqrt{2}} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0,74$$

$$\vec{a}_1 = a \vec{i}$$

$$\vec{a}_2 = -a \sin 30 \vec{i} + a \cos 30 \vec{j}$$

$$\vec{a}_3 = c \vec{k}$$

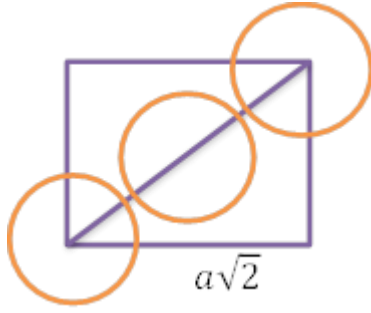


$$=v = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c = a^3 \sqrt{\frac{8}{3} \frac{\sqrt{3}}{2}} \begin{vmatrix} a & a & 0 \\ -\frac{a}{2} & \frac{a\sqrt{2}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & c \end{vmatrix}$$



يمكن إيجاد أيضا:

$$t_{sc} = \frac{4\pi r^3}{3 \times 8r^3} = \frac{\pi}{6} = 0,52$$



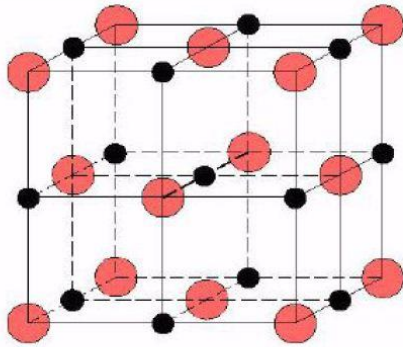
$$t_{bcc} = \frac{2 \times 4\pi r^3}{3(4r/\sqrt{3})^3} = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} = 0,68$$

$$t_{fcc} = \frac{4 \times 4\pi r^3}{3(2\sqrt{2}r)^3} = \frac{\pi\sqrt{3}}{6} = 0,74$$

### 7-1-I: التركيبات البلورية لبعض البلورات البسيطة:

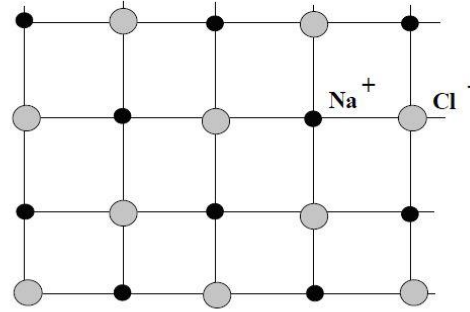
#### (أ) تركيب بلورة كلوريد الصوديوم NaCl

يتبلور كلوريد الصوديوم (ملح الطعام) على شكل شبكة مكعب، وفيها تتبادل أيونات الصوديوم والكلور الأماكن على امتداد الإتجاهات الأساسية، كما هو مبين بالشكل، حيث يبين الشكل خلية الوحدة في الأبعاد الثلاثة، نلاحظ أن الخلية تكون من الموع المتمركز الأوجه وتكون مواضع أيونات الصوديوم الأربعة هي:  $(0.0.0)$  و  $(\frac{1}{2}. \frac{1}{2}. 0)$  و  $(\frac{1}{2}. 0. \frac{1}{2})$  و  $(0. \frac{1}{2}. \frac{1}{2})$ ، بينما تتواجد أيونات الكلور الأربعة في المواضع:  $\frac{1}{2}. \frac{1}{2}. \frac{1}{2}$  و  $(0.0. \frac{1}{2})$  و  $(\frac{1}{2}. 0.0)$  و  $(0. \frac{1}{2}. 0)$ .



● Na<sup>+</sup>    ● Cl<sup>-</sup>

ب- بلورتين متمركزتين الأوجه متداخلتين



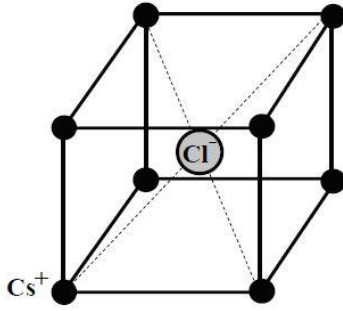
أ- البلورة مرسومة في بعدين

#### الشكل 5-I: تركيب بلورة كلوريد الصوديوم

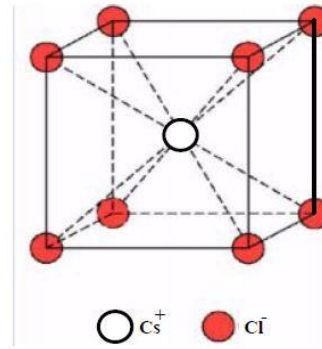
يمكن القول بأن بلورة كلوريد الصوديوم هي شبكة غير برافية تتكون من شبكتين جزئيتين متداخلتين من النوع fcc، تتكون الشبكة الأولى من أيونات الصوديوم وتتكون الشبكة الأخرى من أيونات الكلور، حيث تتراح أحد الشبكات عن الأخرى بمقدار  $\frac{a}{2}$ ، ينطبق نفس التركيب السابق على العديد من البلورات الأيونية.

**(ب) تركيب بلورة كلوريد السيزيوم CsCl:**

يتبلور كلوريد السيزيوم على شكل مكعب وفيها تتبادل أيونات الكلور مواضعها على خطوط مستقيمة على امتداد أقطار المكعب الأربعة، وهكذا تكون وحدة الخلية على هيئة مكعب متمركز الجسم كما هو مبين بالشكل:



ب- خلية الوحدة



أ- بلورة كلوريد السيزيوم

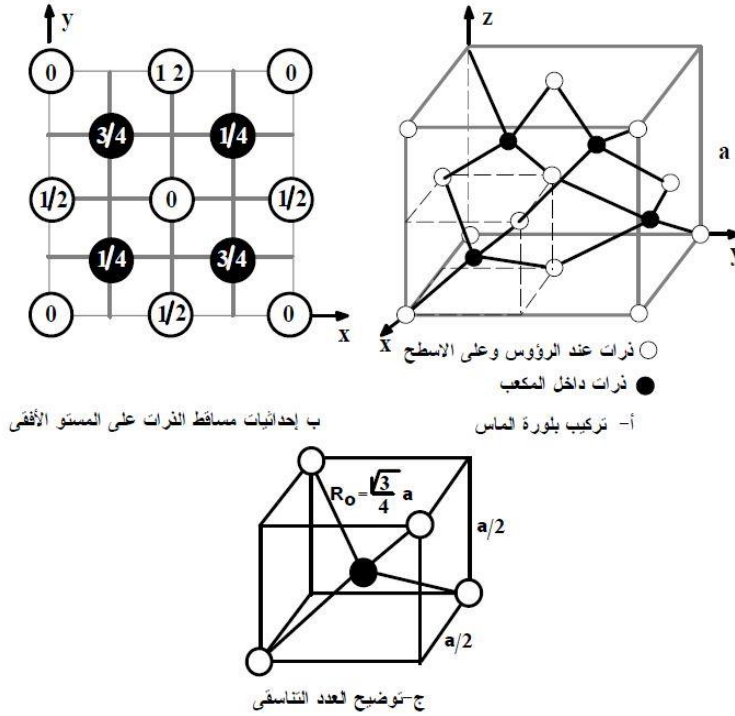
**الشكل I-6: بلورة كلوريد السيزيوم**

توجد في كل وحدة خلية أيون سيزيوم واحدة موضوعة عند النقطة: 000 وأيون كلور عند:  $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ ، ولهذا فإن بلورة كلوريد السيزيوم هي بلورة غير برفافية تتكون من بلورتين مكعب بسيط تبعد كل منهما عن الأخرى بمسافة تساوي نصف قطر المكعب.

**(ج) تركيب بلورة الماس:**

الماس هو كربون متبلور بسبب الضغط ودرجة الحرارة المرتفعتين لفترات زمنية كبيرة، تكون شبكة الماس على هيئة مكعب وهي شبكة ليست برفافية، كما هو موضح بالشكل الآتي، تحتوي الخلية الأولية على 8 ذرات وفيها يتكون الأساس من ذرتين من الكربون مصاحبتين لكل عقدة (نقطة) عند الإحداثيات: 000 و  $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ ، ويمكن تصور شبكة الماس المكعبة على أنها تتكون من شبكتين (fcc) متماثلتين ومتداخلتين ومزاحمتان عن بعضهما باتجاه ربع القطر الجسمي للشبكة المكعبة أي ربع قطر المكعب.

تكون كل ذرة محاطة بأربع ذرات في الجوار على مسافات متساوية وواقعة على رؤوس شكل رباعي السطوح منتظم، مع العلم أن عدد التناسق لذرة الكربون هو 4.



الشكل I-7: تركيب بلورة الماس

## I-2: الاتجاهات البلورية والشبكة المعكوسة

### I-2-1: الاتجاهات البلورية: طريقة فيس WEISS

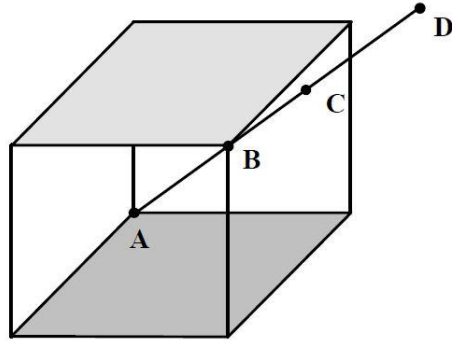
نظرا لعدم تجانس الخواص الفيزيائية للبلورات في الاتجاهات البلورية المختلفة، فإنه يتعين إيجاد طريقة لتعيين الاتجاهات في البلورة وتحديد مسميات لها.

#### قرائن فيس:

يمكن تحديد الاتجاه في البلورة كما يلي: نفترض أن خط مستقيم يمر عبر نقط الشبكة A و B و C، كما هو مبين بالشكل (I-8)، ولتحديد هذه النقط نختار نقطة من الشبكة ونعتبرها الأصل ولتكن النقطة A ثم نختار متجه الشبكة الذي يصل النقطة A بأي نقطة على الخط ولتكن B يمكن التعبير عن هذا المتجه بواسطة متجهات الأساس على الصورة.

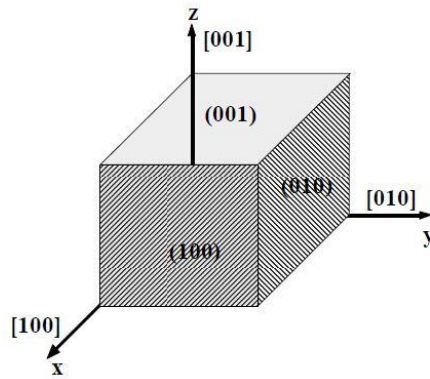
$$\vec{R} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c} \quad 1 - I$$

يتحدد الاتجاه الآن بمجموعة من الأعداد هي:  $[n_1, n_2, n_3]$  يجب حذف العامل المشترك بين هذه الأعداد إن وجد، أي أن تكون هذه المجموعة هي أصغر الأعداد التي لها نفس النسبة وهكذا يكون الاتجاه المبين في الشكل (I-8) حيث يرمز له  $[111]$ ، وتسمى قرائن ويس.



الشكل I-8: المتجه البلوري

عندما يتوفر لخلية الوحدة بعض التناظر الدوراني فربما يوجد العديد من الاتجاهات غير المتوازية والتي تكون متكافئة من وجهة نظر التناظر، وبالتالي نجد أن الاتجاهات  $[100]$  و  $[010]$  و  $[001]$  في البلورة المكعبة متكافئة، يشار جميع الاتجاهات المتكافئة مع الاتجاه  $[n_1, n_2, n_3]$  بالرمز  $\langle n_1 n_2 n_3 \rangle$  ذي الأقواس الزاوية، فمثلا الرمز  $\langle 100 \rangle$  في نظام المكعب يشير إلى الاتجاهات الستة التالية:  $[100]$ ،  $[010]$ ،  $[001]$ ،  $[100\bar{1}]$ ،  $[0\bar{1}0]$ ،  $[00\bar{1}]$  تدل الإشارة السالبة فوق العدد إلى القيمة السالبة للعدد وهكذا، وبالمثل الرمز  $\langle 111 \rangle$  يشير إلى أقطار المكعب الذي لا يكافئ الاتجاه  $\langle 100 \rangle$  بالطبع.



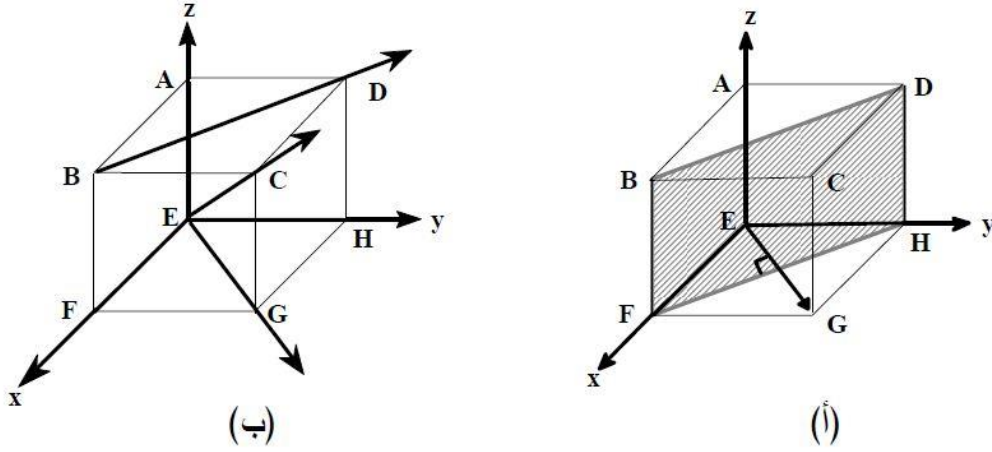
الشكل I-9: الاتجاهات الأساسية في المكعب

نستنتج من هذا بأن:

- اتجاه شعاع ما متعامد على محور بلوري يكون معامل Weiss المرافق له معدوما.
- معامل Weiss لشعاع موازي له هو نفسه.
- إذا كان مسقط الشعاع البلوري على محور معين في جهته السالبة فإن معامل Weiss المرافق له يكون سالبا.

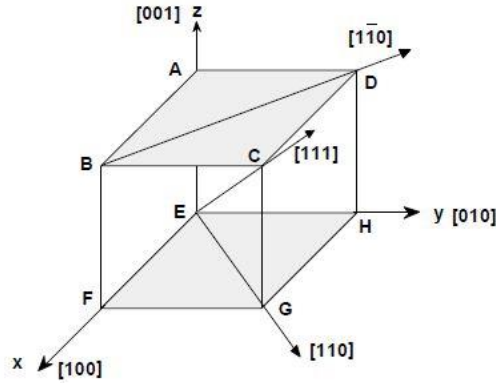
• مثال 1

- عين قرائن فيس في الشكل (3-3) ب؟



الشكل 10-I

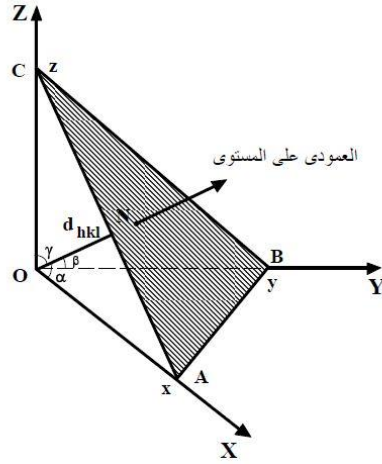
- تكون قرائن فيس للمتجهات المبينة بالشكل (10-I) ب كما هو مبين بالشكل (11-I):



الشكل 11-I

أ/المسافة الفاصلة بين المستويات المتوازية:

في تشتت الأشعة السينية بواسطة البلورة نحتاج لمعرفة المسافة بين المستويات المتوازية أي التي يكون لها نفس قرائن ميلر  $(hkl)$ ، ونرمز لهذه المسافة بين المستوى  $(hkl)$  ونقطة الأصل بالرمز  $d_{hkl}$ ، حيث سنعتبر فيما يلي فقط الحالة التي تكون فيها المحاور متعامدة.



الشكل I-12: إيجاد المسافة بين المستويات

ينتمي المستوى المائل و المستوي الذي يمر من نقطة الأصل إلى مجموعة المستويات  $\{hkl\}$ ، وهكذا فإن طول العمود  $ON$  المرسوم من نقطة الأصل على هذا المستوى يمثل المسافة  $d_{hkl}$  التي تفصل بين هذه المجموعة من المستويات المتوازية، نفترض أن هذا العمودي يصنع زوايا:  $\alpha$  و  $\beta$  و  $\gamma$  مع المحاور:  $X$  و  $Y$  و  $Z$  وأن المستوى يقطع هذه المحاور في النقاط:  $x$  و  $y$  و  $z$  على الترتيب، وبفرض أن المعلم متعامد يتضح لدينا:

$$d_{hkl} = x \cos \alpha = y \cos \beta = z \cos \gamma \quad 2 - I$$

وحيث أنه طبقاً لقانون جيب تمام الزاوية يكون:

$$\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1 \quad 3 - I$$

من المعادلتين السابقتين وبعد التعويض عن جيوب التمام للزوايا نحصل على تعبير للمسافة  $d_{hkl}$  التي تفصل بين المستويات المتوازية  $\{hkl\}$  على الصورة الآتية:

$$\therefore d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{x^2} + \frac{1}{y^2} + \frac{1}{z^2}}} \quad 4 - I$$

حيث أن المسافات المقطوعة  $x$  و  $y$  و  $z$  ترتبط بقرائن فيس  $h$  و  $k$  و  $l$  بالعلاقة:

$$h = n \frac{a}{x}, \quad k = n \frac{b}{y}, \quad l = n \frac{c}{z} \quad 5 - I$$

حيث  $n$  هو عامل مشترك يستخدم لاختزال الأدلة إلى أصغر أعداد ممكنة و  $a$  و  $b$  و  $c$  هي أبعاد

الخلية.

بالتعويض بهذه المعادلة في المعادلة (4) وبحذف x و y و z نحصل على العلاقة:

$$\therefore d_{hkl} = \frac{n}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}} \quad 6 - I$$

ومن هذه المعادلة يمكن حساب المسافة بين المستويات بمعرفة قرائن فيس وفواصل البلورة (أبعادها).

ب/ العلاقة بين المسافة الفاصلة بين المستويات المتوازية وثابت الشبكة المكعبية:

يمثل العمود ON المرسوم من نقطة الأصل على هذا المستوى المسافة d التي تفصل بين هذه المجموعة من المستويات المتوازية، نفترض أن هذا العمودي يصنع زوايا  $\alpha$  و  $\beta$  و  $\gamma$  مع المحاور x و y و z على الترتيب، حيث أن نقاط تقاطع هذا المستوى مع المحاور هي:  $OA = \frac{a}{h}$  و  $OB = \frac{a}{k}$  و  $OC = \frac{a}{l}$ ، وحيث أن  $ON = d$ ، إذن يتضح من الشكل الموالي أن:

$$\cos \alpha = \frac{d}{OA} = \frac{dh}{a}$$

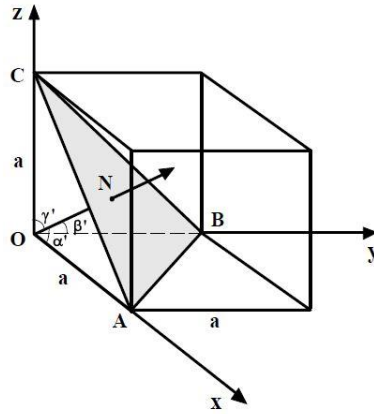
$$\cos \beta = \frac{d}{OB} = \frac{dk}{a}$$

$$\cos \gamma = \frac{d}{OC} = \frac{dl}{a}$$

وحيث أنه طبقاً لقانون جيب تمام الزاوية يكون:  $\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1$

$$\therefore \left(\frac{dh}{a}\right)^2 + \left(\frac{dk}{a}\right)^2 + \left(\frac{dl}{a}\right)^2 = 1$$

$$\therefore \frac{d^2}{a^2} (h^2 + k^2 + l^2) = 1$$



الشكل 13-I

أو:

$$\therefore d^2 = \frac{a^2}{h^2 + k^2 + l^2}$$

$$\therefore d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad 7 - I$$

وهكذا، نجد أن المسافة بين المستويات (111) في بلورة المكعب البسيط هي:  $d = \frac{a}{\sqrt{3}}$ ، حيث  $a$  هو طول ضلع المكعب.

**مثال 2**

إذا كان التركيب البلوري للرصاص هو FCC ونصف القطر الذري للرصاص هو 1.746 وحدة ذرية (au)، أوجد المسافة بين مجموعة المستويات (200)؟

**الحل**

بما أن العلاقة بين نصف قطر الذرة وطول ضلع المكعب المتمركز الأوجه FCC،  $a = \frac{4r}{\sqrt{2}}$  فإنه في حالة بلورة الرصاص نحصل على:

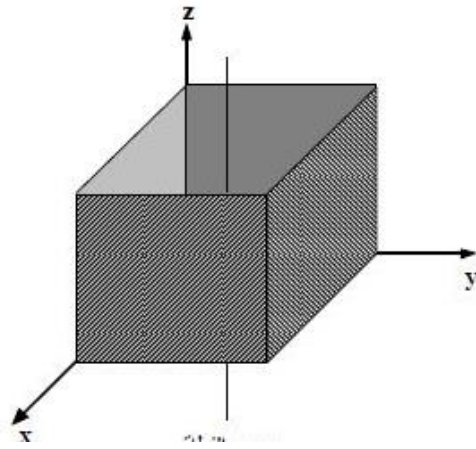
$$a = \frac{4r}{\sqrt{2}} = \frac{4 \times 1.746}{\sqrt{2}} = 4.93 \text{ au}$$

وحيث أن مجموعات المستويات (200) يكون لها قيم المعاملات:  $h=2$  و  $k=0$  و  $l=0$ ، فإن المسافة بين هذه المستويات تكون:

$$\therefore d_{200} = \frac{4.93 \text{ au}}{\sqrt{2^2 + 0^2 + 0^2}} = 2.456 \text{ au}$$

ج/ المنطقة ومحور المنطقة:

تقع بعض أوجه البلورة غالبا في مجموعة ويقال أن هذه المجموعة من الأوجه موجودة في منطقة واحدة والاتجاه الموازي لهذه المجموعة يسمى محور المنطقة ويمر بمركز البلورة، فمثلا المستويات الرأسية الأربعة في المكعب (جوانب المكعب) تقع في منطقة واحدة (رأسي) كما هو بالشكل (I-14). وعندما يتلاقى مستويان يقعان في منطقة واحدة ويكونان غير متوازيين فإن اتجاه تقاطعهما يكون موازيا لمحور المنطقة [uvw]، ومنه يمكن تعيين اتجاه المحور باستخدام قانون فيس (Weiss). ينص القانون على أنه إذا كان [uvw] هو اتجاه محور المنطقة وكانت (hkl) هي قرائن ميلر لمستوى في المنطقة فإن:  $hu + kv + lw = 0$ .



الشكل I-14: محور النطاق

مثال 1

بفرض أن الشعاع [uvw] يقع في كل من المستوى  $(h_1 k_1 l_1)$  والمستوى  $(h_2 k_2 l_2)$  والمطلوب إيجاد قرائن هذا الشعاع بدلالة قرائن ميلر للمستويين؟

الحل

طبقا لقانون فيس وحيث أن الشعاع [uvw] يقع في المستوى  $(h_1 k_1 l_1)$  فإن:

$$h_1 u + k_1 v + l_1 w = 0 \quad 8 - I$$

وبالمثل، بما أن الشعاع [uvw] يقع في المستوى  $(h_2 k_2 l_2)$  نحصل على:

$$h_2 u + k_2 v + l_2 w = 0 \quad 9 - I$$

بحل المعادلتين السابقتين، يمكن الحصول على قرائن الاتجاه [uvw]، كما يمكن تعيين الحل بطريقة مبسطة، وذلك بكتابة معاملات ميلر للمستوى الأول مرتين في صف واحد والمستوى الثاني مرتين في صف ثاني، وبإجراء عملية الضرب تبعا للأسهم الموضحة في المعادلة التالية، ويمكن إيجاد [uvw].

$$\frac{\begin{array}{c|ccc|c} h_1 & k_1 & l_1 & h_1 & k_1 & l_1 \\ \hline h_2 & k_2 & l_2 & h_2 & k_2 & l_2 \end{array}}{(k_1 l_2 - k_2 l_1)(h_2 l_1 - h_1 l_2)(h_1 k_2 - h_2 k_1)} \quad 10 - I$$

$$\begin{array}{ccc} u & v & w \end{array}$$

لاحظ أن قيمة معاملات الاتجاه لا تعتمد على أي من المستويين كتب أولاً فإن ذلك لا يغير سوى إشارة قرائن الاتجاه من  $[uvw]$  لتصبح  $[\bar{u}\bar{v}\bar{w}]$  وهي نفسها أدلة تحقق (تصف) الاتجاه ذاته. يمكن استخدام قانون فيس أيضاً إيجاد قرائن ميلر لمستوى بمعلومية اتجاهين لمحورين منطقة يجمعهما ذلك المستوى، كما يتضح من المثال التالي:

### مثال 2

إذا كان لدينا اتجاهين لمحوري منطقتين لهما قرائن ميلر  $[u_1 v_1 w_1]$  و  $[u_2 v_2 w_2]$  أوجد قرائن ميلر للمستوى الذي يجمعهما  $(hkl)$  ؟

### الحل

نفترض أن قرائن ميلر للمستوى المذكور هي  $(hkl)$ ، طبقاً لقانون فيس يكون:

$$hu_1 + kv_1 + lw_1 = 0$$

$$hu_2 + kv_2 + lw_2 = 0$$

وبحل المعادلتين نحصل على قرائن ميلر للمستوى المذكور كما يلي:

$$\frac{\begin{array}{c|cc|cc|c} u_1 & v_1 & w_1 & u_1 & v_1 & w_1 \\ \hline u_2 & v_2 & w_2 & u_2 & v_2 & w_2 \end{array}}{(v_1 w_2 - v_2 w_1)(w_1 u_2 - w_2 u_1)(u_1 v_2 - u_2 v_1)}$$

$$\begin{array}{ccc} h & k & l \end{array}$$

### مثال 3

أوجد قرائن ميلر للوجه المشترك مع المنطقتين  $[134,100]$  و  $[010,323]$  ؟

### الحل

نعين اتجاه محور المنطقة الأول كما يلي:

$$\begin{array}{c|ccc|c} 1 & 3 & 4 & 1 & 3 & 4 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{array}$$

$$[0 \ 4 \ \bar{3}]$$

وبالتالي تكون قرائن ميلر لاتجاه محور المنطقة الأولى هي:  $[0 \ 4 \ \bar{3}]$

بالمثل نعين اتجاه محور المنطقة الثانية، كما يلي:

$$\begin{array}{c|ccc|c} 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 3 & 2 & 3 & 3 & 2 & 3 \end{array}$$

$$[3 \ 0 \ \bar{3}]$$

وبالتالي يكون اتجاه محور المنطقة الثانية هو:  $[3\ 0\ \bar{3}]$ ، ثم نعين قرائن ميلر للوجه المشترك مع المنطقتين كما يلي:

$$\begin{array}{c|ccc|c} 0 & 4 & \bar{3} & 0 & 4 & \bar{3} \\ 3 & 0 & \bar{3} & 3 & 0 & \bar{3} \\ \hline & & & & & \end{array}$$

$$[12\bar{9}12]$$

وعلى ذلك تكون قرائن ميلر للوجه المشترك مع المنطقتين هي  $[12\bar{9}12]$ ، وهذه القرائن تكافئ  $[434]$ .

#### مثال 4

إذا علمت أن قرائن الشكل السداسي هي  $(hkil)$ ، أوجد قرائن الوجه المشترك بين المنطقتين  $[12\bar{3}3, 20\bar{2}1]$  و  $[01\bar{1}0, 32\bar{5}3]$ ؟

#### الحل

بإهمال المعامل  $i$  (مؤقتاً) في السداسي يمكن إيجاد اتجاه محور المنطقة الأولى، كما يلي:

$$\begin{array}{c|ccc|c} 1 & 2 & 3 & 1 & 2 & 3 \\ 2 & 0 & 1 & 2 & 0 & 1 \\ \hline & & & & & \end{array}$$

$$[25\bar{4}]$$

وبالتالي تكون قرائن اتجاه محور المنطقة الأولى هي:  $[25\bar{4}]$ ، وبنفس الطريقة يمكن إيجاد اتجاه محور المنطقة الثانية كما يلي:

$$\begin{array}{c|ccc|c} 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 3 & 2 & 3 & 3 & 2 & 3 \\ \hline & & & & & \end{array}$$

$$[30\bar{3}]$$

وبالتالي تكون قرائن اتجاه محور المنطقة الثانية هي:  $[30\bar{3}]$ ، ثم نعين القرائن  $hkl$  للوجه المشترك بين الاتجاهين كالآتي:

$$\begin{array}{c|ccc|c} 2 & 5 & \bar{4} & 2 & 5 & \bar{4} \\ 3 & 0 & \bar{3} & 3 & 0 & \bar{3} \\ \hline & & & & & \end{array}$$

$$[15\ \bar{6}\ \bar{15}]$$

فتكون القرائن  $hkl$  للوجه المشترك في حالة السداسي هي:  $[15\ \bar{6}\ \bar{15}]$  التي هي:  $\bar{5}\ 2\ 5$  أو  $5\ \bar{2}\ \bar{5}$ .

ولإيجاد المعامل  $i$  الذي أعلناه في بداية الحل، نعلم أنه في حالة السداسي يكون  $h+k+i=0$  وبالتالي فإن  $i = -(h+k) = -(5+2) = -7$  ويكون  $i = -7$ ، وعلى ذلك تكون قرائن ميلر للوجه المشترك بين النطاقين المذكورين في هذا المثال هي  $(52\bar{7}5)$ .

د/ الزوايا بين النطاقات:

يمكن إيجاد الزاوية  $\theta$  بين الاتجاهين  $[u_1 v_1 w_1]$ ،  $[u_2 v_2 w_2]$  بواسطة العلاقة الآتية:

$$\cos \theta = \frac{u_1 u_2 + v_1 v_2 + w_1 w_2}{\sqrt{u_1^2 + v_1^2 + w_1^2} \sqrt{u_2^2 + v_2^2 + w_2^2}} \quad 11 - I$$

وحيث أن قرائن الاتجاه العمودي على المستوى الذي له قرائن العددية  $(hkl)$  تكون  $[hkl]$ ، فإنه يمكن إيجاد الزاوية بين المستويين  $(u_1 v_1 w_1)$  و  $(u_2 v_2 w_2)$  بالعلاقة السابقة.

**مثال 5**

في وحدة خلية المكعب البسيط SC، أوجد الزاوية بين العمودين على الوجهين الذين لهما قرائن ميلر للوجهين هي  $(100)$  و  $(010)$ .

**الحل**

$$\cos \theta = \frac{1 \times 0 + 0 \times 1 + 0 \times 0}{\sqrt{1^2 + 0^2 + 0^2} \sqrt{0^2 + 1^2 + 0^2}} = 0$$

$$\theta = \cos^{-1} 0 = 90^\circ$$

**I-2-2: الاتجاهات البلورية وقرائن ميلر****أ/ قرائن ميلر للمستويات البلورية**

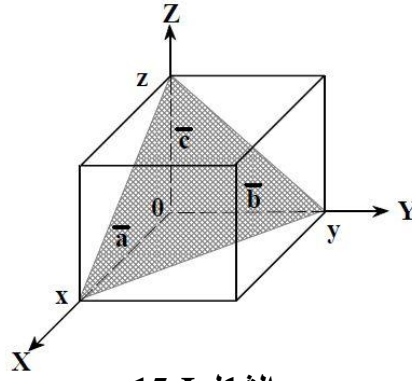
يمكن وصف المستويات البلورية بواسطة مجموعة من المعاملات العددية وضعها العالم الانجليزي ميلر عام 1800، يمكن تعريف قرائن ميلر للمستوى بأنها مجموعة مكونة من ثلاثة أرقام تصف مكان واتجاه المستوى في البلورة، كما يمكن تعيينها بإتباع الخطوات التالية وبالإشارة إلى الشكل (I-15):

1. نفترض أن المحاور تتطابق مع اتجاهات الأساس للبلورة (أحرف البلورة) ويكون رأس البلورة هو بمثابة نقطة الأصل للمحاور كما بالشكل.

2. نفترض أن نقاط تقاطع المستوى مع المحاور على امتداد اتجاهات الأساس  $\vec{a}$ ،  $\vec{b}$ ،  $\vec{c}$  هي  $x$  و  $y$  و  $z$ ، تكون  $x$  عبارة عن مضاعف كسري من  $a$ ، كذلك  $y$  و  $z$  لـ  $\vec{c}$  و  $\vec{b}$  عبارة عن مضاعف كسري من  $c$ .

3. نكون مجموعة الأعداد الكسرية على النحو التالي:  $\left(\frac{x}{a}, \frac{y}{b}, \frac{z}{c}\right)$ .

4. نأخذ مقلوب مجموعة الأعداد السابقة ونضربها في أصغر عامل مشترك للمقام.



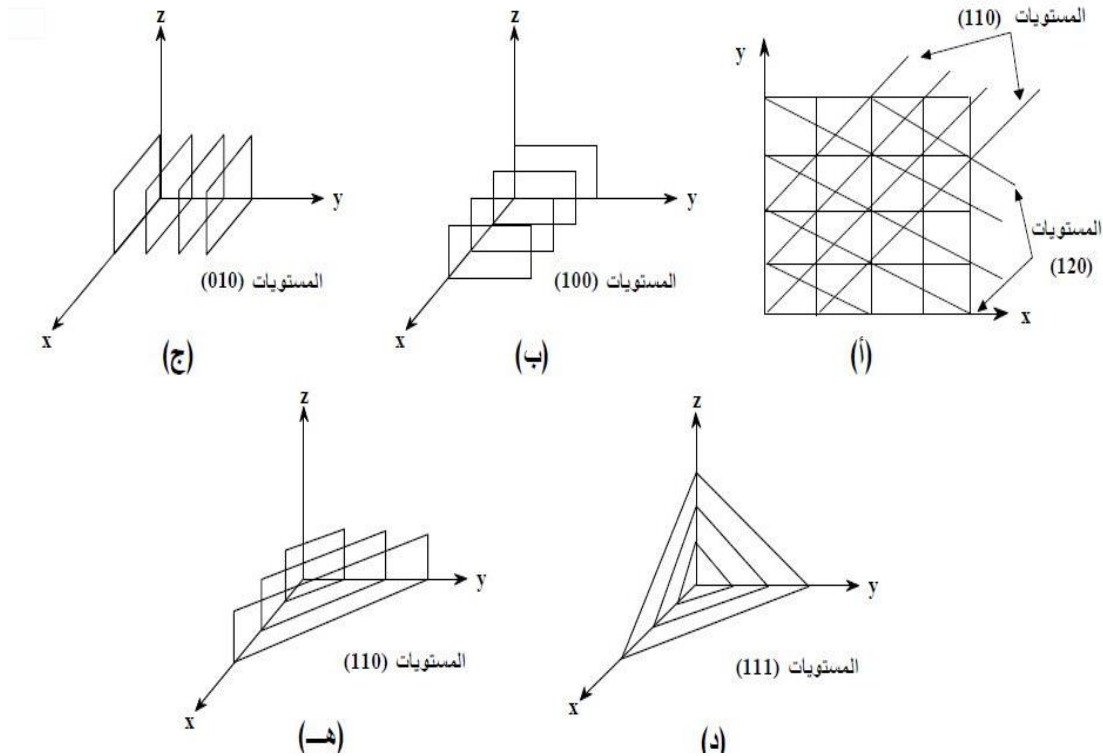
الشكل 15-I

5. تسمى المجموعة الأخيرة التي نحصل عليها بقرائن ميلر للمستوى وتكتب على الصورة  $(hkl)$ ، يبين الشكل (16-I) العديد من الأمثلة لتعيين قرائن ميلر للمستويات البلورية الموضحة بالشكل.

**مثال 1**

المستوى يقطع المحور x في 1  
 المستوى يقطع المحور y في 1  
 المستوى يقطع المحور z في 1

المقلوب ← (111) ←  $\left(\frac{1}{1} \frac{1}{1} \frac{1}{1}\right)$



الشكل 16-I: أمثلة عن قرائن ميلر لمستويات بلورية

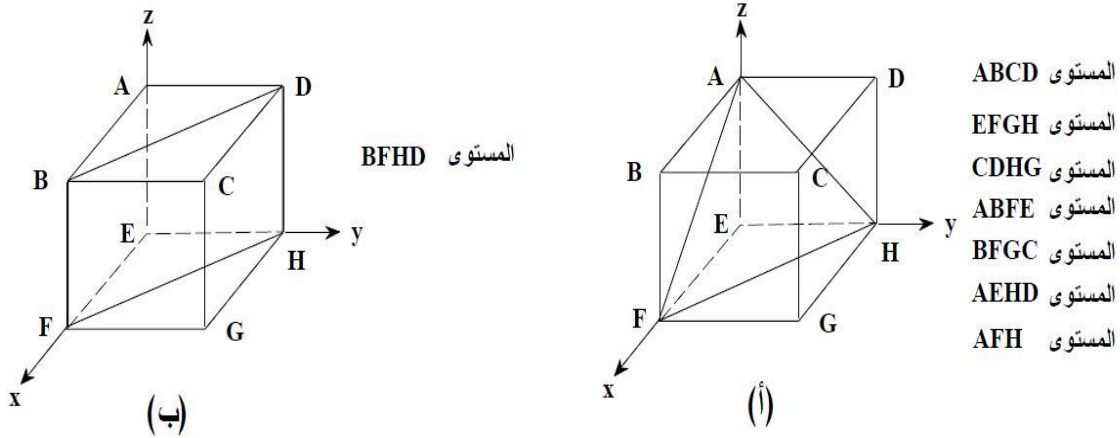
عند وصف المستويات البلورية بواسطة قرائن ميلر يجب أخذ الملاحظات الآتية:

1- جميع الخواص تكون متساوية بين المستويات المتوازية ذات اتجاه معين، ويكون لها نفس قرائن ميلر.

- 2- لا تحدد قرائن ميلر مستوى معين فقط بل تصف أيضا مجموعة المستويات الموازية له.
- 3- المستوى الموازي لأي محور تكون فاصلة تقاطعه تساوي  $\infty$  ومعامل ميلر له صفر.
- 4- النسبة بين القرائن هي العامل المهم وليس قيمة القرينة نفسه، فالمستوى (622) هو نفسه المستوى (311).
- 5- تقطع المستويات المتوازية والموازية لمستوى معين المحاور الثلاثة في مضاعفات صحيحة، وبالتالي يكون لها نفس قرائن ميلر للمستوى الأول وتكتب على الصورة  $(hkl)$ .
- 6- تدل الإشارة السالبة على أن الأجزاء المقطوعة من المحاور تكون في الاتجاه السالب من نقطة الأصل.

### مثال 2

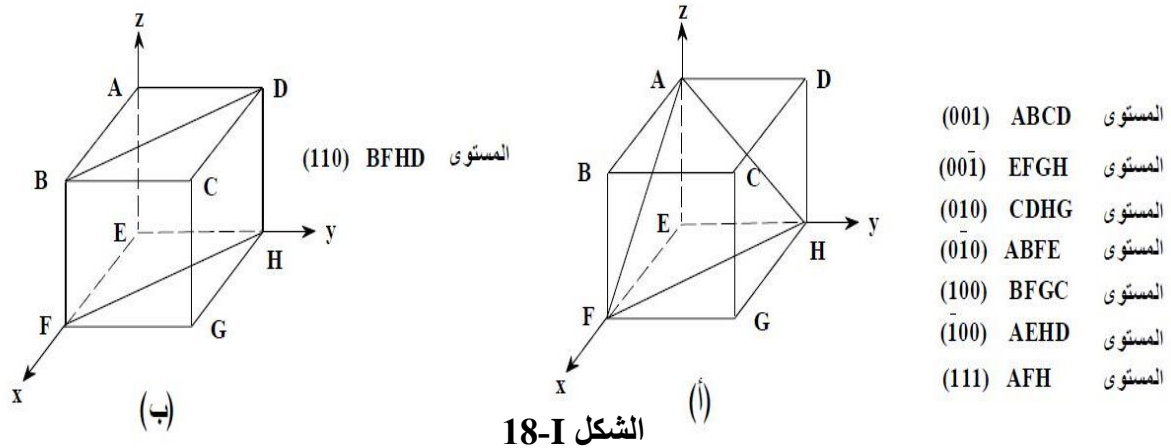
عين قرائن ميلر للمستويات المبينة في الشكل (17-I)؟



الشكل 17-I

### الحل

بإتباع نفس الخطوات المذكورة في السابق يمكن تعيين قرائن ميلر على النحو المبين في الشكل (18-I).



الشكل 18-I

### مثال 3

عين قرائن ميلر للمستوى المبين بالشكل (19-I)؟

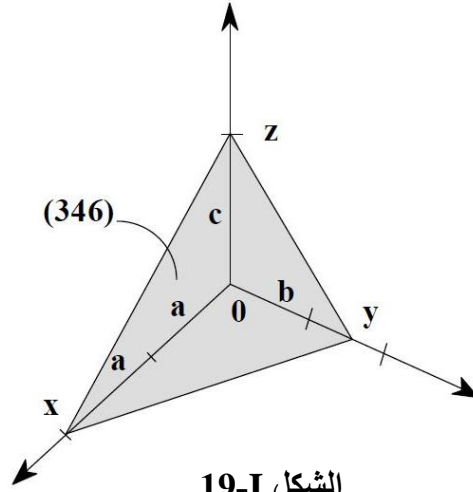
الحل

بالرجوع إلى الشكل (19-I) نجد أن:  $x = 2a$  و  $y = \frac{3}{2}b$  و  $z = c$ ، لتعيين قرائن ميلر

للمستوى المبيّن، نكون أولا مجموعة الأعداد  $(hkl) = (2, \frac{3}{2}, 1)$ ، ثم نعكسها فنحصل على

$(\frac{1}{2}, \frac{2}{3}, 1)$ ، وأخيرا نضربها في أصغر عامل مشترك للمقام وهو (6) نحصل على قرائن ميلر للمستوى

على النحو التالي:  $(hkl) = (346)$ .

مثال 4

إذا كان مستوى يقطع المحاور الثلاثة عند القيم  $\frac{a}{2}$ ،  $\frac{b}{2}$ ،  $\frac{3c}{4}$ ، أوجد قرائن ميلر لهذا المستوى؟

الحل

تكون النسب العددية هي:  $\frac{1}{2}$ ،  $\frac{1}{2}$ ،  $\frac{3}{4}$  وتكون مقلوبات هذه النسب هي:  $2$ ،  $2$ ،  $\frac{4}{3}$  أو (664) وهي

تكافئ (332)، وتكتب قرائن ميلر لهذا المستوى على الصورة (332).

مثال 5

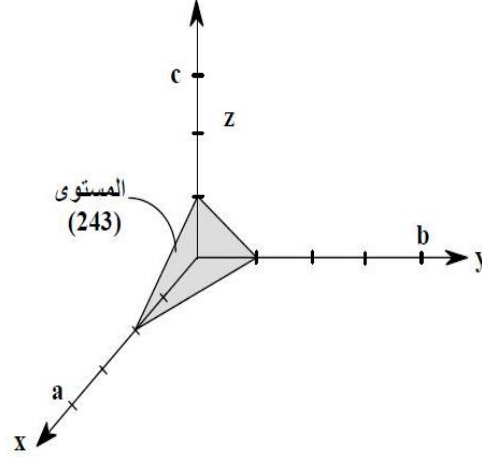
إذا قطع مستوى ما في البلورة نصف وحدة خلية في اتجاه محور الأساس  $a$  وربع وحدة خلية في

اتجاه محور الأساس  $b$  وثلث وحدة خلية في اتجاه محور الأساس  $c$ ، أرسم هذا المستوى ثم أوجد قرائن

ميلر له؟

الحل

تكون الأجزاء المقطوعة من المحاور الثلاثة هي:  $\frac{1}{2}a, \frac{1}{4}b, \frac{1}{3}c$ ، ويتبع نفس الخطوات المذكورة في المثال السابق، تكون القرائن العددية هي: (2,4,3) وبذلك تكون قرائن ميلر هي: (243)، حيث يبين الشكل (20-I) رسماً للمستوى المطلوب.



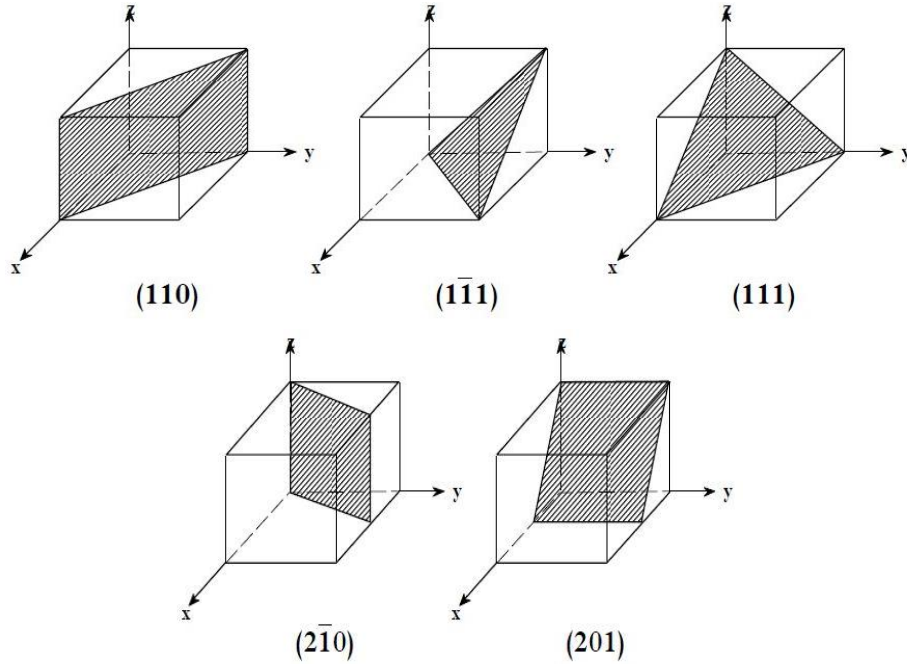
الشكل 20-I: رسم للمستوى (243)

**مثال 6**

أرسم المستويات: (110), (111), (111), (210) و (201) في خلية المكعب البسيط؟

**الحل**

تكون المستويات المطلوبة كما هي مبينة في الشكل (21-I).



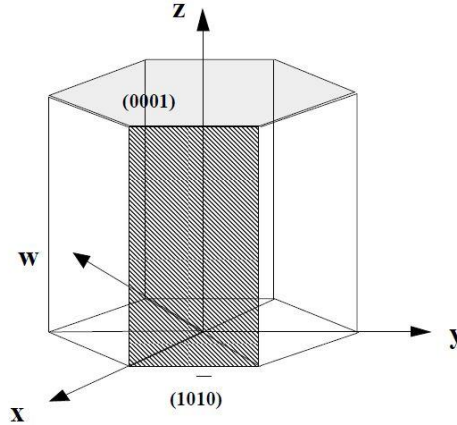
الشكل 21-I: رسم للمستويات المطلوبة في المثال 6-2

ب/ قرائن ميلر في فصيلة السداسي

لفصيلة السداسي أربعة محاور بلورية: ثلاث منها في مستوى واحد (مستوى السطح العلوي أو مستوى القاعدة) والمحور الرابع عمودي على هذا المستوى، وبالتالي بدلالة أربعة محاور هي:  $x$  و  $y$  و  $w$  و  $z$  وتكتب قرائن ميلر على الصورة  $(hkil)$ .

القرائن  $h$  و  $k$  و  $i$  و  $l$  تمثل المحاور  $x$  و  $y$  و  $w$  و  $z$  على وجه الترتيب، وحيث أنه يمكن إثبات العلاقة  $h + k + i = 0$ ، وأن السطح العلوي للشكل السداسي يقطع المحاور  $w$ ،  $y$ ،  $x$  في ما لا نهاية ويقطع محور  $z$  بمقدار وحدة الخلية، فإن قرائن ميلر لهذا السطح تكون  $(0001)$ ، وعلى سبيل المثال تكون قرائن ميلر لهذا السطح السفلي (القاعدة) هي  $(000\bar{1})$  كما هو مبين بالشكل (22-I).

الوجه الجانبي المظلل في الشكل يقطع المحاور  $z$ ،  $w$ ،  $y$ ،  $x$  في  $1, \infty, -1, \infty$  على وجه الترتيب، ولهذا فإن قرائن ميلر لهذا الوجه تكون  $(10\bar{1}0)$ .



الشكل 22-I: أدلة ميلر لفصيلة السداسي

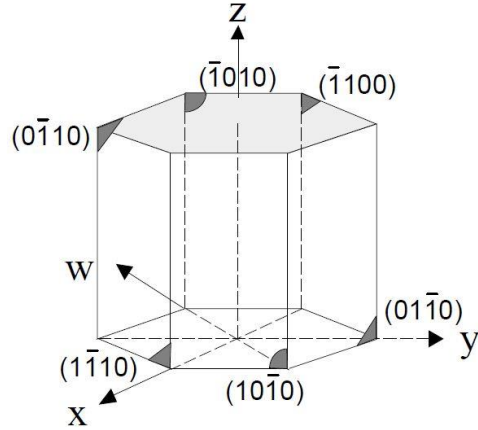
مثال 7

عين قرائن ميلر للأوجه الستة الرأسية للشكل السداسي؟

الحل

بإتباع نفس الطريقة السابقة تكون قرائن ميلر للأوجه الرأسية في الشكل السداسي كما هي مبينة

في الشكل (23-I).



الشكل 23-I

**مثال 8**

أثبت أنه عند استخدام قرائن ميلر لفصيلة السداسي  $(hki)$  يكون  $h + k + i = 0$  ؟

**الحل**

بالرجوع إلى الشكل (24-I) يتضح أن مساحة المثلث OAC + مساحة المثلث OBC = مساحة المثلث OAB (باستخدام حساب المتجهات، حيث أن مساحة المثلث المتكون من متجهين  $\vec{A}$  و  $\vec{B}$  بينها زاوية

$$\theta \text{ تساوي } \frac{1}{2} |\vec{A} \wedge \vec{B}| = \frac{1}{2} |\vec{A}| |\vec{B}| \sin \theta \text{ فإننا نحصل على:}$$

$$\therefore \frac{1}{2} \left(-\frac{a}{i}\right) \left(\frac{a}{h}\right) \sin 60^\circ + \frac{1}{2} \left(-\frac{a}{i}\right) \left(\frac{a}{k}\right) \sin 60^\circ = \frac{1}{2} \left(\frac{a}{k}\right) \left(\frac{a}{h}\right) \sin 120^\circ$$

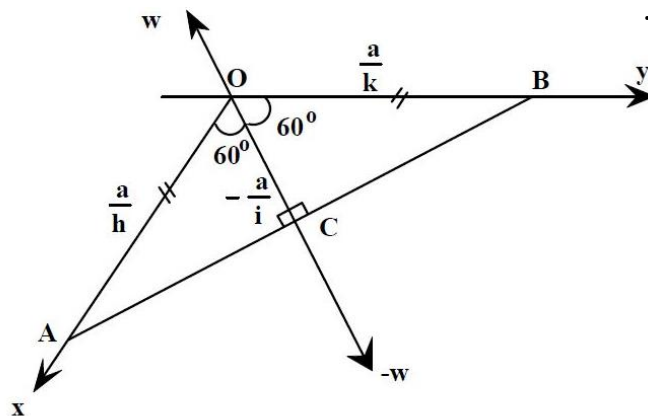
$$\therefore -\frac{1}{i} \left[\frac{1}{h} + \frac{1}{k}\right] = \frac{1}{hk}$$

بالضرب في  $ihk$  نحصل على:

$$\therefore h + k + i = 0$$

ويمكن الحصول على نفس النتيجة عند تصور أن طول الضلع OC يساوي  $-\frac{a}{i}$  لأنه على امتداد

المحور w في الاتجاه السالب.



الشكل 24-I

I-2-3: الشبكة المعكوسة وعمليات التناظر

1: الشبكة المعكوسة:

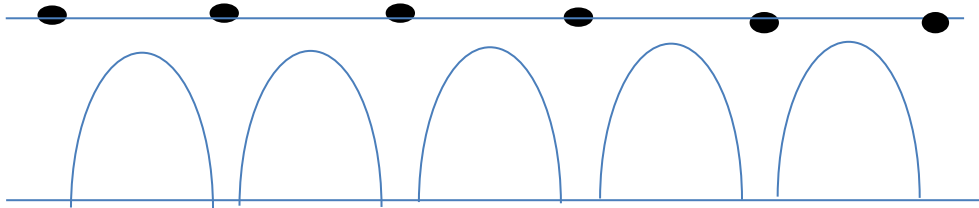
عندما تسقط الأشعة السينية على شبكة بلورية، فإن هذه الأشعة تتصادم مما يؤدي إلى انعراجها، فنضع لوحة فوتوغرافية نلاحظ عليها بقع بشكل منتظم ما يوحي بأن هذه الصورة موجودة في البلورة الحقيقية، هذه البقع نحددها بشعاع الموجة  $\vec{k}$  (فضاء أو فضاء فورية لا ينتمي إلى الفضاء الحقيقي أو الاعتيادي)، ويسمى الشبكة المعكوسة حيث تمكننا من فهم:

- نظرية التوصيل الكهربائي.

- نظرية الانعراج في البلورات.

- التوزيع الإلكتروني في البلورات.

تبنى نظرية الشبكة المعكوسة على أساس التناظر الانسحابي، وهذه الخاصية تتمتع بها شبكة برافي، تعبر عن دورانية الشبكة بشعاع الانسحاب  $\vec{R}$ ، وإذا رسمنا الجهد الكهروستاتيكي على شبكة خطية لها بعد واحد يكون على الشكل التالي:



خاصية التناظر الانسحابي نعبر عنها (الظاهرة) بالدورية في الفضاء، هذه الدورية تشمل التوزيع الذري، التوزيع الإلكتروني وتوزيع الجهد الكهروستاتيكي داخل البلورة.

لإعطاء النموذج الفيزيائي للتركيب البلوري يجب اختيار دالة فضائية  $f(\vec{r})$  موقع نقطة داخل الجسم البلوري [تتغير دوريا داخل البلورة، هذه الدالة يمكن أن تمثل أية خاصية فيزيائية دورية داخل البلورة، مثلا: التوزيع الذري.

خاصية التناظر الانسحابي توصف بشعاع الانسحاب  $\vec{R}$  الذي يحدد كل عقد الشبكة البلورية المدروسة.

- يجب أن يكون دور  $f(\vec{r})$  ينطبق مع دورية الشبكة:  $f(\vec{r} + \vec{R}) = f(\vec{r})$  (\*)

هذه المعادلة تصح لجميع النقاط  $\vec{r}$  داخل الشبكة ولجميع أشعة الانسحاب  $\vec{R}$ .

- طبقا لنظرية فورييه، هذه الدالة يمكن كتابتها على الشكل:  $f(\vec{r}) = \sum_k f_k e^{i\vec{k}\vec{r}}$

$e^{i\vec{k}\vec{r}}$  موجة مستوية شعاعها  $\vec{k}$ .

دور شبكة برافي يختلف عن دور موجة مستوية، لكي ينطبق الدور يجب أن تساوي شعاع الموجة  $\vec{k}$  إلى القيمة  $\vec{G}$ .

$$(**) f(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} f_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\vec{r}}$$

يجب كذلك أن تتحقق معادلة الشرط (\*):

$$\sum_{\vec{G}} f_{\vec{G}} e^{i\vec{G}(\vec{r}+\vec{R})} = \sum_{\vec{G}} f_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\vec{r}}$$

$$\forall \vec{G} = e^{i\vec{G}(\vec{r}+\vec{R})} = e^{i\vec{G}\vec{r}}$$

$$e^{i\vec{G}\vec{R}} = 1$$

هذه الدالة تصح لكل الأشعة  $\vec{G}$  ولكل النقاط  $\vec{r}$  لكي تساوي دورية الموجة المستوية في مفكوك فورييه مع دور شبكة برافي للبلورة المدروسة.

$\vec{G}$  شعاع انسحاب في فضاء غير اعتيادي، وينتمي إلى فضاء فورييه.

- عمدة الدالة الأسية يكون دوما بدون أبعاد فإذا كان  $\vec{R}$  بعد الطول فإن  $\vec{G}$  يجب أن يكون  $\frac{1}{\text{طول}}$  وهو فضاء فورييه:

$$G \in \mathcal{F}, R \in \mathbb{R}$$

$$\vec{G} \cdot \vec{R} = 2\pi m \text{ عدد صحيح } m$$

$\vec{R}$  يحدد كل عقد شبكة برافي ويعتمد على الأشعة:  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ .

$\vec{G}$  كذلك يمكن تصوره يعتمد على أشعة انسحاب أساسية في فضاء فورييه هي:  $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$  المبنية على أساس الأشعة  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ .

- هذه الأشعة  $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$  تُؤلف فيما بينها خلية أساسية في فضاء فورييه (فضاء معكوس) وبالتالي يمكن بعملية انسحاب تولد شبكة تسمى الشبكة المعكوسة.

فالشعاع  $\vec{R}$  يعين كل عقد الشبكة المباشرة (أو الحقيقية) في الفضاء الاعتيادي بينما  $\vec{G}$  يعين عقد الشبكة المعكوسة لشبكة حقيقية المذكورة.

- الفضاء الحقيقي للبلورة يبين بواسطة  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$

- الفضاء المعكوس للبلورة يبين بواسطة  $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$

- علاقات الأساس  $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)$  بأساس الفضاء المعكوس  $(\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3)$  هي كما يلي:

$$V = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3) \text{ ، حجم الخلية الأساسية لشبكة مباشرة ،}$$

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V} (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V} (\vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1)$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V} (\vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2)$$

حجم الخلية الأساسية للشبكة المباشرة:

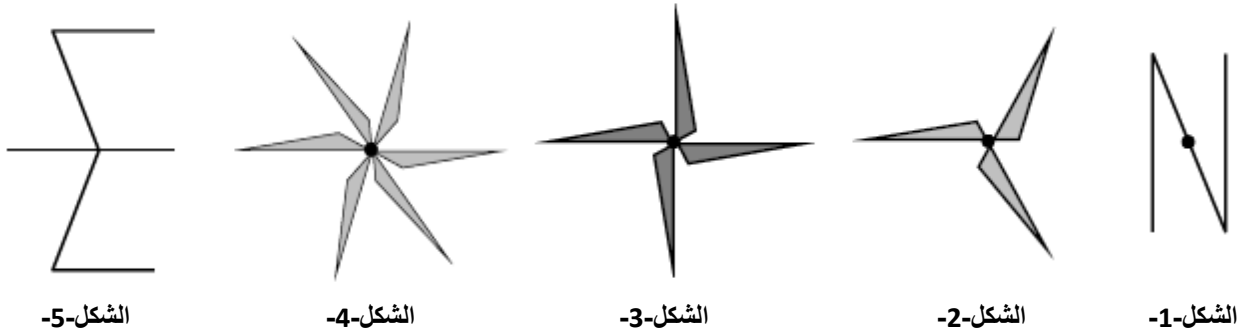
$$V_R = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

حجم الخلية الأساسية المعكوسة يتناسب عكسيا مع حجم الخلية الأساسية للشبكة المباشرة.

## 2: التناظر في شبكة برافي

**تمهيد:** شبكات برافي للبلورات المختلفة تتغير فيما بينها ويرجع إلى اختلاف الأبعاد والزوايا للخلية الأولية، لتصنيف مختلف شبكات برافي نستخدم مبدأ التناظر أو التماثل. **تعريف عمليات التناظر:** هو تحول الشيء لكي يتطابق مع نفسه ثانية.

### • التناظر الدوراني:



الشكل-1

الشكل-2

الشكل-3

الشكل-4

الشكل-5

الشكل 1: يتمتع بعملية تناظر دوراني من الدرجة  $2 = \frac{2\pi}{\theta}$ ، وله محور تناظر  $C_2$ .

الشكل 2: يتطابق مع نفسه عندما نجري له عملية دوران حول محور يمر من مركزه بزاوية  $\theta$

$120^\circ$  وأن له تناظر دوراني من الدرجة الثالثة حيث الدرجة 3،  $n = \frac{2\pi}{\theta}$  ويرمز لمحور التناظر من

الدرجة 3 بالرمز  $C_3$ .

الشكل 3: محور تناظر دوراني من الدرجة 4 حول المحور  $C_4$ .

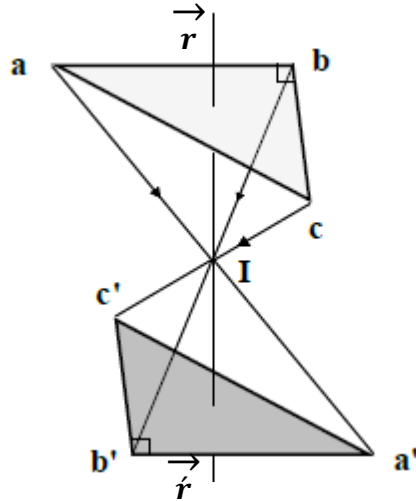
الشكل 4: تناظر دوراني من الدرجة 6 حول المحور  $C_6$ .

• التناظر الانعكاسي:

الشكل 5: هذا الشكل يتطابق مع نفسه ثانياً بعملية انعكاس بالنسبة لمستوي مرآتي، فنقول أنه تناظر مرآتي أو انعكاسي عبر مستوي التناظر الذي يرمز إليه بالحرف  $m$ .

• التناظر الانقلابي:

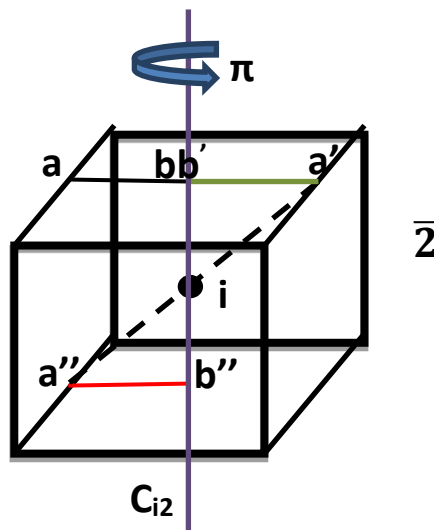
هو تحول الشيء  $abc$  باتجاه موقعه  $\vec{r}$  بالنسبة للنقطة  $(i)$  تسمى مركز الانقلاب، تنزاح إلى



الموقع  $\vec{r}$  فهي إذا عملية انعكاس عبر نقطة.

• عمليات تناظر أخرى:

هي تراكم عمليات التناظر السابقة الذكر، نجري على المستقيم  $ab$  عملية تناظر من الدرجة 2 متبوعة بعملية انقلاب عبر المركز  $(i)$ ، فنحصل على عملية تناظر دوراني انقلابي عبر المركز  $(i)$  ونرمز لمحور التناظر الدوراني الانقلابي برمز  $C_{in}$ ، أما العملية المركبة يرمز إليها بالرمز  $\bar{n}$ .

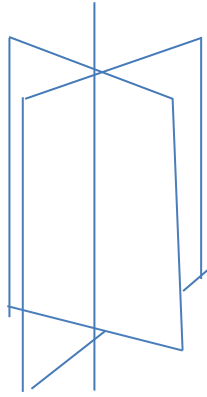


يوجد كذلك عملية التناظر الدوراني الانعكاسي التي تستخدم الرموز التالية:









$nm$ : عملية تناظر دوراني من الدرجة  $n$  مصحوبة بعملية انعكاس للمستوي  $m$  الذي يوازي محور الدوران.

$nmm$ : عملية تناظر دوراني من الدرجة  $n$  مصحوبة بعملية انعكاس لمستويين متعامدين ولكن يوازيان محور الدوران.

$n/m$ : عملية تناظر دوراني من الدرجة  $n$  مصحوبة بعملية انعكاس عبر مستوي عمودي على محور الدوران.



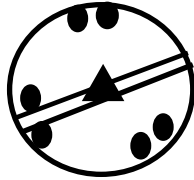
نرمز إلى المحاور الدورانية بما يلي:

 : $C_6$	 : $C_4$	 : $C_3$	 : $C_2$
 : $C_{i6}$	 : $C_{i4}$	 : $C_{i3}$	 : $C_{i2}$



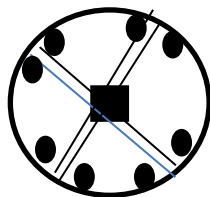
نمثل المستوي  $m$  بمستقيمين متوازيين: =

- نقوم بإجراء عملية التناظر في الفضاء ذو بعدين على عنصر بصورة قرص بعد التأثير على نقطة هذا العنصر بعملية ما، نتحصل على عنصر آخر تقع فيه النقطة بموقع آخر، عندئذ نجتمع الموقعين الأصلي والجديد (بعد إجراء العملية) لنقطة العنصر في رسم واحد لنحصل على شكل لعنصر متناظر بالنسبة لتلك العملية المجرأة.



- يمثل عملية التناظر المجرأة وهو من الدرجة 3 ويدور بـ  $\frac{2\pi}{3}$ .

$4mm$ : لدينا عملية دوران من الدرجة 4 متبوعة بعملية انعكاس لمستوي ما يوازي محور الدوران، ويضاف إليها عملية انعكاس أخرى توازي كذلك محور الدوران ولكنه متعامد على المستوي الأول.

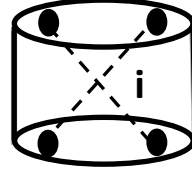
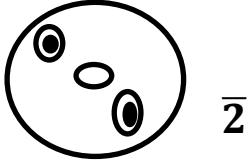


هذا الشكل تناظر بالنسبة للعملية المجرأة  $4mm$

❖ عمليات التناظر الانقلابي والانعكاسي

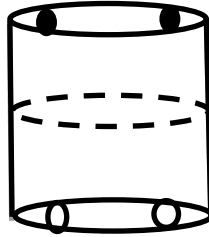
- عند التعامل مع عمليات الانقلاب والانعكاس في مستوي عمودي على محور الدوران نأخذ ثلاث أبعاد مثل الأسطوانة.

- النقاط التي تظهر على القاعدة السفلى للأسطوانة نتيجة عمليات التناظر المجراة، ونرمز إليها بحلقة 0



❖ عمليات التناظر الانعكاسي بمستوي عمودي على محور الدوران

نجري عملية دوران ل 1 ● فنحصل على 2 ● والمستوي العمودي على محور الدوران هو صورة مستوى الانعكاس و يرمز له بدائرة ثانية محيطة بالقرص , اما عملية الانعكاس العمودية فيرمز لها بحلقة مفرغة تنطبق على النقطة



3-I: انعراج الأشعة السينية في البلورات

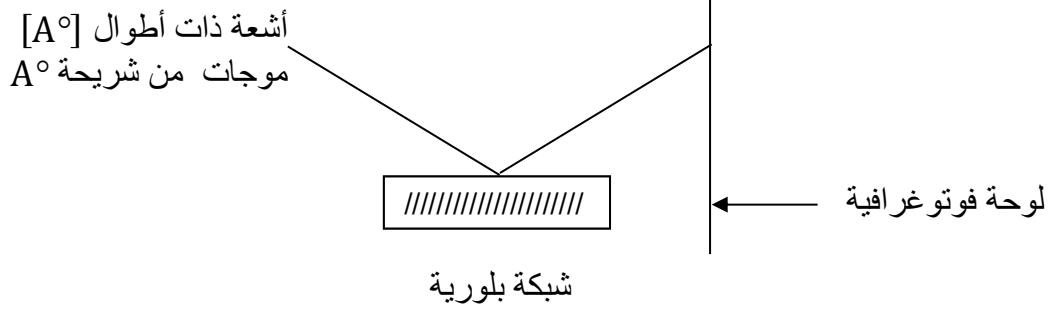
مجال الضوء المرئيبكون من  $4000 \sim 8000 \text{ \AA}$ ، أما الأشعة ما تحت الحمراء لا تستطيع تحليلها بالمشور و تكون من رتبة  $\mu\text{m}$ .

$$(\mu)1 \text{ micron} = \text{micromètre}$$

إذن نستعمل شبكة انعراج بالنسبة للأشعة السينية.

1-3-I: الأشعة المستخدمة في دراسة البلورات

معدل المسافة بين الذرات في المواد البلورية هي من رتبة  $\text{Å}$ ، لهذا ولدراسة البلورات وسير أنماطها نحتاج إلى إشعاعات ذات أطوال موجات من نفس مرتبة المسافة بين المستويات البلورية، وعندما نسقط سربا من هذه الإشعاعات على مادة بلورية ما ، فإنها تنعرج وتتداخل مع بعضها مكونة صورة انعراج والذي يعتمد وضعه على التركيب الداخلي للمادة البلورية، يمكن إذا استخدام البلورات كشبكة انعراج، وانطلاقا من صورة الانعراج نستطيع تحديد حجم الخلية الأولية ومعرفة مواقع الذرات وتحديد توزيع الالكترونات في الخلية الأولية.



الأشعة المستخدمة في دراسة البلورات:

- الأشعة السينية.

- الأشعة الإلكترونية.

- الأشعة النيوترونية.

ما هي الطاقة لهذه الأشعة حتى يكون لها أطوال موجات من رتبة  $A^\circ$ ؟

❖ الأشعة السينية:

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,054 \cdot 10^{-34} \text{ js}$$

h: ثابت بلانك,  $\omega$ : تواتر الزاوي

$$\omega = 2\pi\nu = 2\pi \frac{C}{\lambda} \Rightarrow E = \hbar 2\pi \frac{C}{\lambda}$$

$$; 1\text{ev} = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ j} \lambda = \frac{2\pi\hbar}{E}$$

$$\lambda[A^\circ] = \frac{12.4}{E[\text{kev}]}$$

لكي نحصل على طول موجة بين 0.4 و  $1.2A^\circ$  ، يجب أن تكون من 10 إلى 30 كيلو  $\text{kev} = \text{ev}$

❖ الأشعة الإلكترونية:

عندما يتحرك  $e$  بسرعة  $v$  فإنه تواجبه موجة بحيث أن الإندفاع  $P$  يرتبط بطول الموجة بالعلاقة:

$$P = \frac{h}{\lambda}$$

$$E_c = \frac{1}{2} m_e v^2 = \frac{P^2}{2m_e} \text{ : الطاقة الحركية للإلكترون}$$

$$P = \sqrt{2m_e E_c}$$

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e E_c}}$$

$$\lambda [A^\circ] = \frac{12,26}{\sqrt{E_c [ev]}}$$

لكي تكون  $\lambda = 1A^\circ$  فإن  $E_c = 150ev$ ، وتكون سرعة الإلكترون حوالي  
 $v = 7 \times 10^6 m/s$

نستخدم عادة في دراسة البلورات الرقيقة نظرا لأن الـ  $e$  تمتلك شحنة كهربائية، فإنها تتفاعل بشدة مع ذرات المادة مما يضعف قابلية اختراقها للمواد البلورية مقارنة بما يحدث إلى الأشعة السينية، لذلك نستخدم الأشعة الإلكترونية لدراسة المواد البلورية على شكل أفلام رقيقة وسطوح البلورات السميكة.

❖ الأشعة النيترونية (النيترونات):

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_n E_c}} \Rightarrow \lambda [A^\circ] = \frac{0,28}{\sqrt{E_c [ev]}}$$

الحصول على  $\lambda = 1A^\circ$  يجب استخدام طاقة  $E_c = 0,28ev$  وهي تساوي الطاقة الحرارية في المختبر  
 $T = 300^\circ K$

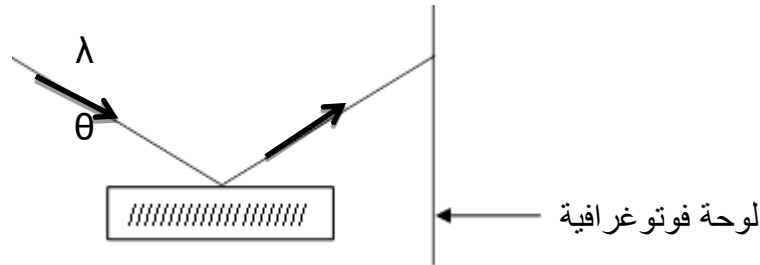
$$K_B T = \frac{1,38 \cdot 10^{-23} \times 300}{1,6 \cdot 10^{-19}} =$$

ثابت بولتزمان

تسمى أيضا النيترونات الحرارية

أ/ انعراج الأشعة السينية (شرط براغ 1913)

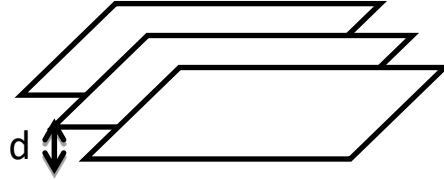
لقد إكتشف العالم براغ أن  $Rx$  عندما تسقط على شبكة بلورية بزاوية معينة عادة تسمى  $\theta$  (هذه الأشعة وحيدة اللون) تنعرج وتظهر لوحة الانعراج نهايات عظمى لشدة  $Rx$ .



ولا تحدث إلا في اتجاهات معينة، وذلك عند تحقق شرط يسمى شرط براغ أو الانعكاسات براغ.  
 - و السؤال المطروح هو لماذا  $Rx$  تنعكس من البلورة؟ (سؤال براغ)

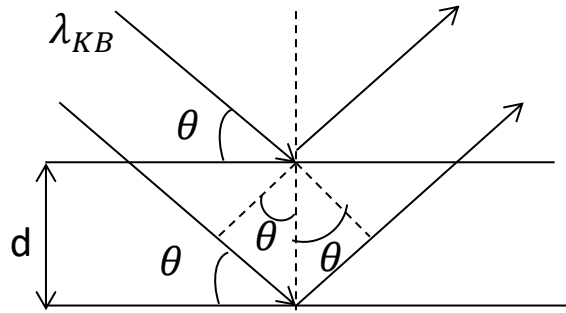
هناك في البلورة مرآيا لأن زاوية الخروج تساوي زاوية الدخول وهذا راجع لوجود مجموعة من المستويات المتوازية التي تعمل عمل المرايا وتفصل بينهما مسافة  $d$ ، ولحدوث الانعراج يتوجب ما يلي:

1- تنعكس الأشعة من المستويات الذرية المتوازية حسب قوانين الانعكاس في المرايا بحيث أن زاوية السقوط تساوي زاوية الانعكاس.



2- الحزمة الساقطة لا تنعكس فقط عن أول مستوي انعكاس نري بل ينعكس جزء منه والجزء المتبقي يتوغل أكثر داخل البلورة فينعكس جزء منه عن مستوى الانعكاس المتوازي وهكذا، إذن فإن الحزمة السينية تخترق البلورة حتى مسافات بحيث تنعكس عن آلاف من المستويات المتوازية.

3-  $RX$  المنعكسة من المستويات الذرية المتوازية تتداخل فيما بينها تداخلا بناء (يحدث انعكاس)، وتداخل هدام (لا يلاحظ انعكاس). ولكي يحدث تداخلا بناء حسب براغ: المستويات البلورية المتوازية تسقط عليها أشعة وحيدة اللون بزاوية سقوط مقداره  $\theta$  هذه المستويات تعمل كمرايا أي زاوية السقوط تساوي زاوية الانعكاس أي  $\theta$ ، ثم اعتبر الانعكاس عن المستوي الثاني (أشعة متوازية) وقام بدرس فرق المسيرين للأشعة المتساقطة وتسمى  $\Delta$ .



لا يحدث التداخل البناء بين شعاعين إذا كان  $\Delta$  يساوي أعداد صحيحة من طول الموجة الساقطة

$$\Delta = n\lambda$$

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

$n$  عدد صحيح يسمى مرتبة الانعكاس من المستوي البلوري، هذه العلاقة تدعى شرط انعكاس براغ و  $\theta$  تسمى زاوية براغ.

اعتبر لاي البلورة مكونة من عناصر ذرية متماثلة (تحتوي ذرة أو مجموعة من الذرات) موزعة على عقد شبكة برافي للبلورة، هذه العناصر هي القواعد التي تتبع في توزيعها أشعة الانسحاب  $\vec{R}$ ، وكل عنصر يمكن أن يشتت  $R\chi$  في جميع الاتجاهات، ثم درس ما هو الشرط اللازم لكي تتداخل الأشعة  $R\chi$  المشتتة تداخلا بناءا.

نعتبر مركزيين 0 و g:

$\vec{d}$  المسافة بين العقدتين

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{u}_k$$

$\vec{u}_k$  وحدة الشعاع للموجة  $\vec{k}$

$\vec{k}$  شعاع موجي

$\vec{k}$  شعاع موجي للأشعة المشتتة المستطارة

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{u}_k$$

$\vec{u}_k$  وحدة شعاع الموجة  $\vec{k}$

الإستطارة تحدث تغيير في الطاقة وطول الإستطارة مرنة

$$\Delta = |\delta - \delta'| = |\vec{d}\vec{u}_k - \vec{d}\vec{u}_k'| = d|\vec{u}_k - \vec{u}_k'|$$

حيث  $\Delta$  فرق المسير و  $\rho = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta$  فرق الطور

$$\rho = d \left| \frac{2\pi}{\lambda} \vec{u}_k - \frac{2\pi}{\lambda} \vec{u}_k' \right|$$

$$\rho = d |\vec{k} - \vec{k}'| = d \Delta \vec{k}$$

وشرط التداخل البناء

$$\vec{d} \Delta \vec{k} = 2\pi m$$

M عدد صحيح

وطالما أن عقد الشبكة مزاحة عن بعضها بأشعة الانسحاب  $\vec{R}$  فتعمم العلاقة حدوث التداخل:

$$\vec{R} \Delta \vec{k} = 2\pi m$$

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

$$m = n_1 h + n_2 k + n_3 l \text{ لانعراج } \begin{cases} a_1 \Delta \vec{k} = 2\pi h & \text{عدد صحيح } h \\ a_2 \Delta \vec{k} = 2\pi k & \text{عدد صحيح } k \\ a_3 \Delta \vec{k} = 2\pi l & \text{عدد صحيح } l \end{cases}$$

$$\vec{R} \Delta \vec{K} = 2\pi m$$

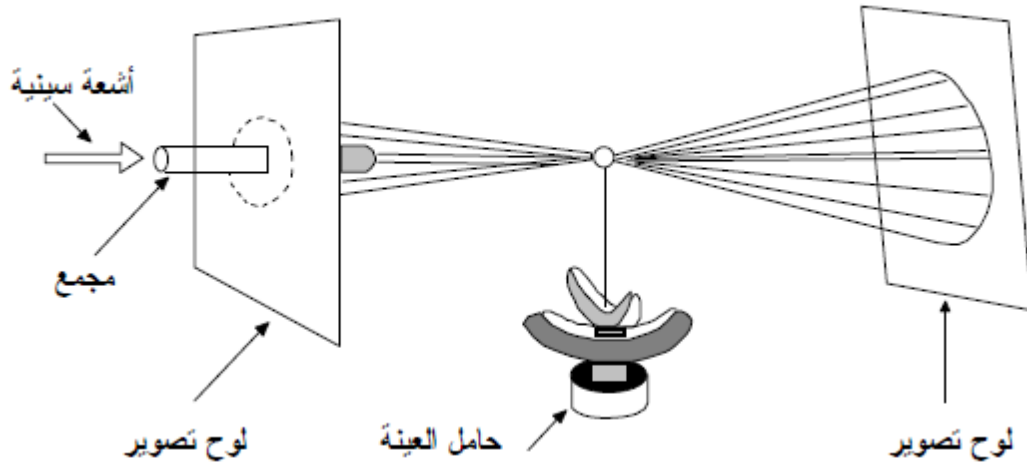
$$\begin{cases} e^{i\vec{R}\Delta\vec{K}} = 1 \\ e^{i\vec{R}\vec{G}} = 1 \end{cases} \Rightarrow \Delta\vec{k} = \vec{G}$$

هذه العلاقة تحكم حدوث النهايات العظمى لشدة الأشعة السينية المستطارة من كل عقد شبكة برافي.

### I-3-2: الطرق التجريبية لحيود الأشعة (الأمواج) على البلورات

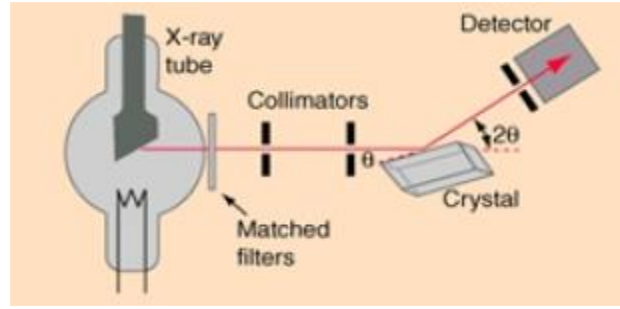
#### \* طريقة فون لاوي:

وهي طريقة سريعة ومجدية لكشف توجهات البلورة وكشف العيوب البلورية، حيث تتعرض البلورة إلى حزمة من أشعة اكس البيضاء وبطيف مستمر يتراوح ما بين 0.2-3 أنجستروم، وذلك لتغطية كافة الاحتمالات الممكنة للأبعاد بين ذرية وهنا كل مستوي انعكاس بلوري يختار الطول الموجي المناسب مع الأبعاد بين ذرية، وبحيث يتحقق قانون براغ.

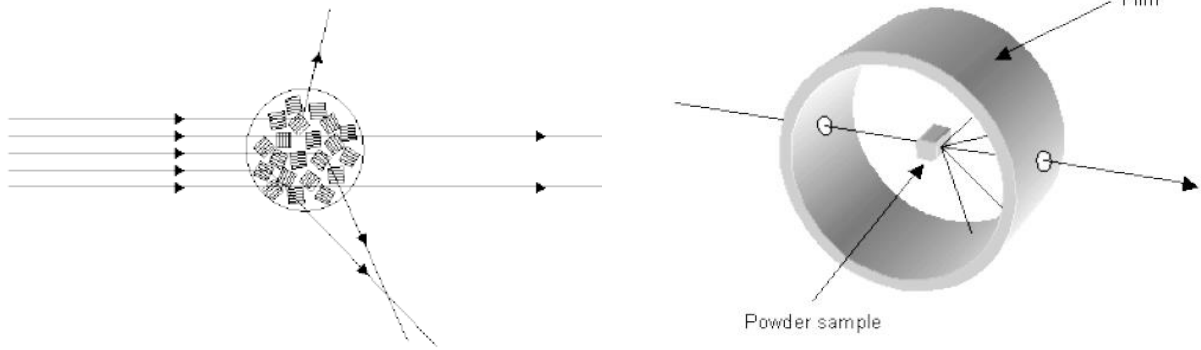


#### \* طريقة البلورة الدوارة (طريقة براغ):

يتم فيها تعريض البلورة إلى حزمة من أشعة اكس الوحيدة، ثم يدرس الانعكاس على جملة معينة من سطوح متوازية وذلك عند تدوير البلورة، ووفق قانون براغ يلاحظ الانعكاس من أجل زوايا سقوط معينة تحقق شرط الحيود ويتم من خلالها التعرف على  $d$  لجملة السطوح المتوازية، وغالبا يستعاض عن تدوير البلورة بتغيير زوايا سقوط الأشعة الواردة على البلورة ونحصل على نفس النتائج.



### \* طريقة المسحوق (طريقة ديبيي-شرر)



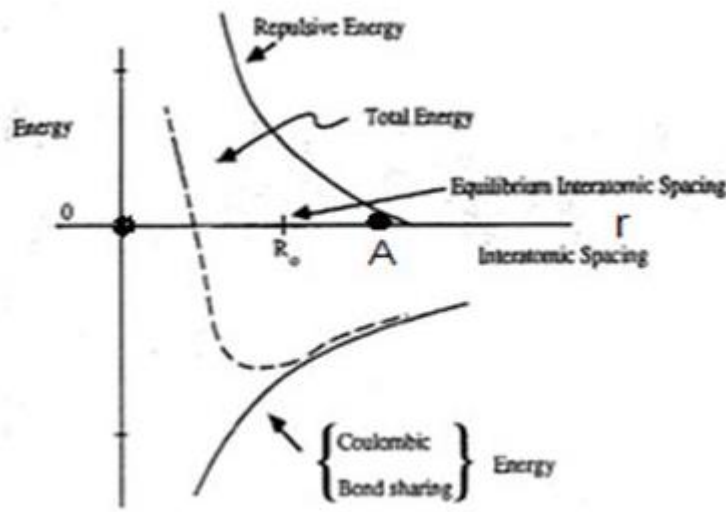
تستخدم هذه الطريقة للحصول على أكبر عدد من البلورات وتصبح كل بلورة عرضة لتحقيق قانون براغ بالحصول على العديد من الانعكاسات وبالتالي الحصول على العديد من الأبعاد البلورية، ويستخدم في هذه الطريقة تقنية الأفلام التي تصور كافة الحالات التي يتحقق فيها شرط الحيود ومن ثم الحصول على نتائج رائعة حول الأبعاد البلورية

**II- طاقة الترابط:**

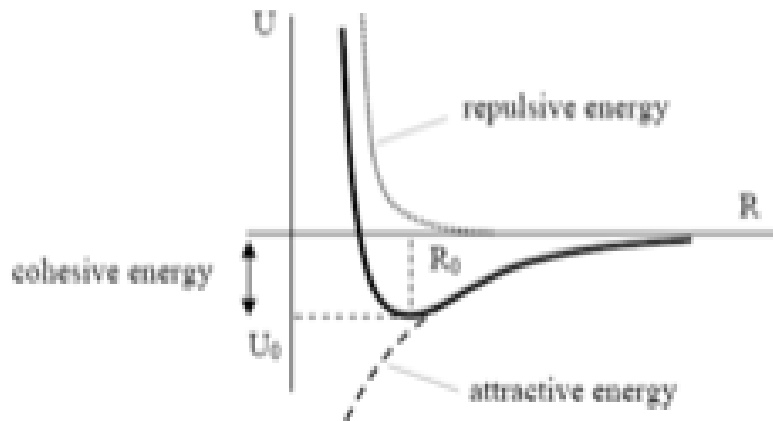
هي الطاقة اللازمة لتفكيك البلورة إلى مجموعة من الذرات الحرة (أو مجموعة من الجزيئات الحرة إذا كان التركيب البلوري جزيئي).

تتشكل البلورة المستقرة بالاعتماد على عدة شروط أهمها وجود قوى تجاذب بين الذرات تكافئ قوى التندافع.

والشكلين (1) و (2) أدناه يبينان الحالات الممكنة للتأثير المتبادل بين ذرتين وضعت الأولى في مبدأ الإحداثيات O والثانية A يمكنها الحركة على المحور r، وبالتالي فإن الطاقة الكامنة (الجهد، الوضع) (Potential Energy) للجملة تساوي إلى الشغل المبذول بفعل قوة كولوم F بين الذرتين وبشكل رياضي:



الشكل II-1: الشكل العام لطاقة الترابط



الشكل II-2

$$du = -F dr \quad 1 - II$$

وبشكل آخر:

$$F = -\frac{du}{dr} \quad 2 - II$$

تكمّن أهمية العلاقة (2) في إعطاء تصور مبدئي للوضع بين الذرتين وذلك عندما  $\frac{du}{dr} > 0$  (موجب) فإن اتجاه القوة  $F$  سيكون بعكس الاتجاه  $r$  أي أن هناك تجاذب بين الذرتين ، وعندما  $\frac{du}{dr} < 0$  فإن اتجاه القوة  $F$  سيكون باتجاه  $r$  أي أن هناك قوى تدافع (تنافر)، لاحظ في الشكل الأول أن المنحني العلوي يبين حلة التدافع مهما كانت قيمة  $r$  والأسفل حالة قوى التجاذب، والمنقط يمثل الحالتين معاً، فمن أجل  $r > r_0$  فإن الذرات تتجاذب لأن  $\frac{du}{dr} > 0$  (طاقة ربط)، ومن أجل  $r < r_0$  هناك تدافع بين الذرات  $\frac{du}{dr} < 0$  وفي حال  $r = r_0$  فإن  $\frac{du}{dr} = 0$  أي أن  $F = 0$  وهذه الحالة تسمى حالة الاستقرار لأن طاقة الوضع تكون في حالة النهاية الصغرى (أنظر الأشكال أعلاه).

يمكننا كتابة طاقة التأثير المتبادل بين ذرتين والتي يمثلها المنحني المنقط في الشكل الأول والمنحني الغامق في الشكل الثاني بالمعادلة العامة التالية:

$$U(r) = \frac{\beta}{r^m} - \frac{\alpha}{r^n} \quad 3 - II$$

حيث الرموز في البسط معاملات موجبة يطلب تعيينها، وكذلك الأس في المقام قيمة موجبة حيث يمثل الحد الأول قوى التدافع والحد الثاني قوى التجاذب.

في العلاقة (3) شرط النهاية الصغرى يحدد لنا قيمة  $r_0$  أصغر مسافة بين الذرتين لتكون الجملة في حالة الاستقرار (أنظر الأشكال أعلاه) ووفقاً للمعادلة الرياضية التالية:

$$F(r_0) = -\left.\frac{du}{dr}\right|_{r=r_0} = 0 \quad 4 - II$$

ولذلك نفاضل العلاقة (3 - II) وفقاً للمعادلة (4 - II) عند  $r = r_0$  فنجد:

$$-\left(\frac{\alpha n r_0^{n-1}}{r_0^{2n}} - \frac{\beta m r_0^{m-1}}{r_0^{2m}}\right) = 0 \quad 5 - II$$

وبإعادة ترتيب العلاقة 5 - II نوجد العلاقة بين بيتا وألفا وفقاً للعلاقة التالية:

$$\beta = \frac{\alpha n}{m} r_0^{m-n} \quad 6 - II$$

نعوض العلاقة 6 - II في 3 - II (شرط  $r = r_0$ ) فنجد:

$$\begin{aligned} U(r_0) &= \frac{\alpha n r_0^{m-n}}{m r_0^m} - \frac{\alpha}{r_0^n} = \frac{\alpha n}{m} r_0^{-n} - \frac{\alpha}{r_0^n} = \alpha r_0^{-n} \left(\frac{n}{m} - 1\right) \quad 7 - II \\ &= -\alpha r_0^{-n} \left(1 - \frac{n}{m}\right) \end{aligned}$$

في العلاقة II - 7 عندما تكون  $n > m$  يصبح ما بين القوسين سالب، وبالتالي  $U(r_0)$  تكون موجبة ومنه تكون القوة بإشارة سالبة ونكون أمام قوى تجاذب  $(F = -kx)$ ، والعكس عندما تكون  $n < m$  تكون القوى قوى تنافر.

يتبين عموماً أن القوى بين الذرات تتكون من قوى تجاذب تسود عند المسافات أكبر من  $r_0$  وقوى تنافر تسود عند المسافات أصغر من  $r_0$ ، وتتعاذل هذه القوى عند  $r = r_0$  وضع الاستقرار، ودراسة الربط بين الذرات لتشكيل البلورات ستعتمد على هذا المبدأ.

## II - 1 أنواع الترابط:

تصنف الروابط في الأجسام الصلبة إلى أهم الروابط التالية:

أ. الروابط الأيونية.

ب. الروابط التساهمية

ت. الروابط المعدنية.

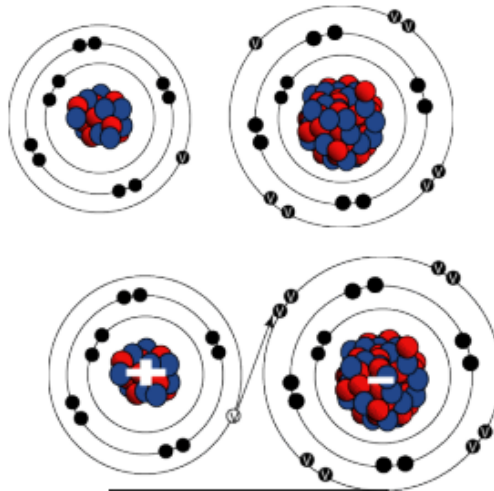
ث. الرابطة الجزيئية

رابطة فاندر فالس.

وهذا وصف موجز لكل منها:

### أ. الرابطة الأيونية:

تنشأ الرابطة الأيونية عن التفاعل الكهربائي الساكن بين أيونات متعاكسة الشحنة (تجاذب كولومي)، وتظهر بشكل واضح في أملاح  $(NaCl, KI, CsCl)$ ، فمثلاً في جزيء كلور الصوديوم المؤلف من أيون الصوديوم الموجب الشحنة وأيون الكلور السالب الشحنة تنشأ قوة جذب بين الأيونين هي المسؤولة عن طاقة الربط (Cohesive Energy) الشكل (II - 3).



الشكل II - 3 : الرابطة الأيونية

أما في البلورة فإن عملية الربط لا تتوقف على أيونيين بل تمتد إلى الأيونات الأخرى، حيث أن كل أيون صوديوم سيحاط بستة أيونات كلور، وكذلك أيون كلور سيحاط بستة أيونات صوديوم وتستمر هذه العملية لتشكيل البلورة (أنظر الشكل)، ولا ننسى في الوقت نفسه التفاعلات بين الأيونات المتشابهة:  $Na^+ - Na^+$  و  $Ca^{2+} - Ca^{2+}$  وهي تفاعلات قوى تنافر وتكون على امتداد البلورة، ولكنها أضعف من قوى التجاذب المباشرة وبالتالي فإن عمليات تجمع الأيونات لتشكيل البلورة تستمر.

ولنعالج مسألة بلورة أيونية مؤلفة من الأيونات عددها  $N$  أيون، فتكون الطاقة الكامنة الكلية للبلورة:

$$U_{total}(r) = NU(r) \quad 8 - II$$

حيث  $U(r)$  تمثل العلاقة (3) وأن طاقة التجاذب الآن بين أيونين تعطى من خلال قانون كولوم:

$$U(r) = \frac{q^2}{r} \quad 9 - II$$

ومنه تصبح العلاقة (3) حيث  $n = 1$ :

$$U(r) = \frac{\beta}{r^m} - \frac{q^2}{r} \quad 10 - II$$

وعندما  $r = r_0$  و  $n = 1$  و  $\alpha = q^2$  من العلاقة (6 - II) نجد أن:

$$\beta = \frac{q^2}{m} r^{m-1} \quad 11 - II$$

نعوض I - 11 في II - 10 عند  $r = r_0$  فنجد:

$$U(r_0) = \frac{q^2 r^{m-1}}{m r_0^m} - \frac{q^2}{r_0} = \frac{q^2}{r_0} \left(1 - \frac{1}{m}\right) \quad 12 - II$$

وهي العلاقة II - 7 باستبدال  $n = 1$  و  $\alpha = q^2$ ، وعندما  $m < 1$  تكون الطاقة طاقة تجاذب والعكس طاقة تنافر.

وبالعودة للعلاقة II - 8 ولعدد  $N$  من الأيونات الموجبة والسالبة وعند  $r = r_0$  نجد:

$$U_{total} = NU(r_0) = -N \frac{q^2}{r_0} \left(1 - \frac{1}{m}\right) \quad 13 - II$$

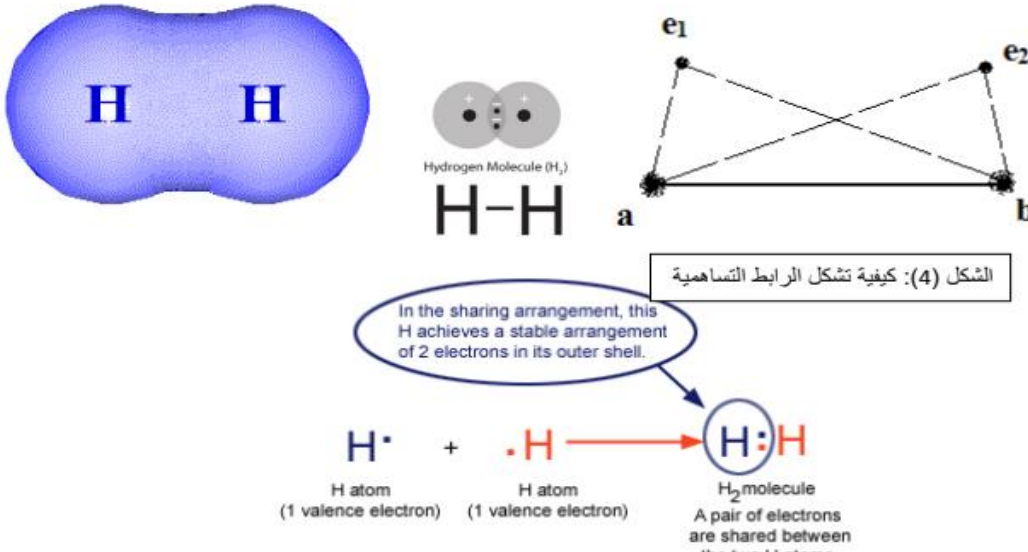
وقد وجد أن العلاقة II - 13 لا تتوافق مع القيم التجريبية وقد تم تصحيحها، وذلك بضربها بثابت سمي ثابت مدلونج (Madelung) وهو يختلف من بلورة لأخرى وقيمه من أجل الحجار الملحية 1.7475 (NaCl)، ولذلك تصبح العلاقة II - 13:

$$U_{total} = NU(r_0) = -N\alpha \frac{q^2}{r_0} \left(1 - \frac{1}{m}\right) \quad 14 - II$$

حيث  $\alpha$  يشير هنا إلى ثابت مدلونج، والطاقة  $U_{total}(r_0)/N$  تسمى بطاقة الارتباط (طاقة الالتحام Cohesive Energy)، والمقدار  $-N\alpha q^2/r_0$  يسمى بطاقة مدلونج (Madelung Energy).

ب. الرابطة التساهمية:

تتمتع هذه الرابطة بأهمية خاصة في الكيمياء وعلم البلورات، وتنشأ من التشارك بالإلكترونات بين الذرات المتجاورة، حيث أن كل ذرة تساهم بإلكترون أو أكثر في عملية الربط، بحيث تكون الإلكترونات مشتركة بين الذرتين، ويشكل الهيدروجين والكربون والسيلكون والجرمانيوم أمثلة عن هذا النوع من الروابط ولا يمكن فهم هذا الربط إلا عن طريق ميكانيكا الكم ونظرية الاضطراب. وبشكل مبسط إذا اعتبرنا جزيء الهيدروجين (الشكل 4) المكون من ذرتين الأولى  $a$  والثانية  $b$  ولإلكترون الذرة الأولى بالرقم 1 ولإلكترون الذرة الثانية بالرقم 2، فعندما تصبح المسافة بينهما من مرتبة  $2A^\circ$  يصبح التفاعل بينهما حقيقة واقعة وفي حال المسافة أكبر من ذلك يهمل التأثير المتبادل بينهما، و في حال وجود التفاعل فإن سبين الإلكترون يلعب دورا مهما في عملية الربط وذلك فيما إذا كان سبين الإلكترونين متوازيين أم متعاكسين، حيث يتم التفاعل وفقا لمبدأ باولي وقاعدة هوند، وذلك بتكوين مستويات طاقة رابطة وضد رابطة.

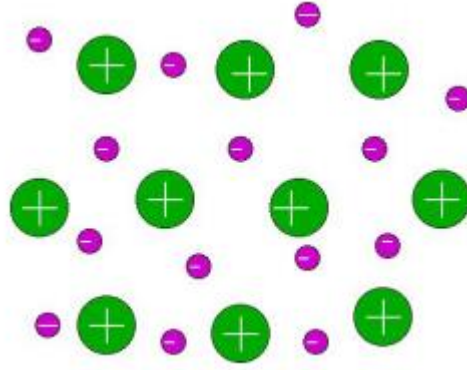


إذا تشكلت الرابطة التساهمية عندما يتحقق ما يلي:

- 1- يجب أن تحتوي الذرات على إلكترونات تستطيع أن تشكل عند اقتراب هذه الذرات من بعضها البعض أزواجا من الإلكترونات ذات سبينات متعاكسة.
- 2- البعد بين الذرات صغير نسبيا بحيث تظهر الخواص الكمية المشتركة.

ت. الرابطة المعدنية:

تشير النظريات الحديثة إلى أن الإلكترونات التكافئية للذرات المكونة للمعادن تكون مشتركة بين جميع ذراته، حيث ينتج ما يسمى بالغاز الإلكتروني الحر حيث يؤدي التفاعل بين غاز الإلكترونات الحر والأيونات الموجبة إلى قوة تماسك قوية في البلورة، هذا وإن وجود الإلكترونات الحرة يفسر



الشكل II - 5

بصورة جيدة قابلية التوصيل الكهربائي والحراري للمعادن وعدم شفافيتها ولمعان سطوحها والعديد من الصفات الهامة الأخرى.

**ث. البلورات الجزيئية:**

تطلق على كل الأجسام الصلبة التي تتبلور عند درجة حرارة منخفضة  $X_e = 116K$   $Ne = 24K$  بالأخص الغازات الخاملة، حيث تتبلور لتشكل تركيب بلوري FCC .

**الطاقة الكلية للتكوين:**

$$U_{tot} = 2N\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{R} \right)^{12} A_{12} - \left( \frac{\sigma}{R} \right)^6 A_6 \right] \quad 15 - II$$

$$A_6 = \sum_{j \neq i} P_{ij}^{-6} \quad , \quad A_{12} = \sum_{j \neq i} P_{ij}^{-12}$$

**حسب معادلة لينارد جونز:**

بسبب مبدأ باولي حيث لا يمكن لسبينين أن يكونا في نفس الحالة الكوانتية أو الكمية، ففي هذه

الحالة توجد قوى تنافر وتكون على هيئة  $\frac{1}{r^{12}}$  بالإضافة إلى طاقة تجاذب  $-\frac{1}{r_j^6}$

الطاقة الكلية لزوج من الذرات  $i$  أو  $j$

$$U_{ij}(r) = \frac{B}{r^{12}} - \frac{C}{r_j^6} \quad 16 - II$$

$$C = 4\varepsilon\sigma^6 \quad ; \quad B = 4\varepsilon\sigma^{12}$$

$\sigma$  نصف قطر السحابة الإلكترونية.

$\varepsilon$  شدة القوة.

- الطاقة الكلية لبلورة أقل من الطاقة الكلية لجزيئاتها.

- الطاقة الكلية لذرة  $i$  لحقل جميع الذرات الأخرى  $U_i = \sum_{j \neq i} U_{ij}$

$$U_i = \frac{N}{2} \sum_{j \neq i} U_{ij} \quad \text{عدد الذرات } N$$

$$U_{tot} = 2N\varepsilon \left[ \sum_{j \neq i} \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 - \sum_{j \neq i} \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad 17 - II$$

$$r_{ij} = P_{ij} \quad R \text{ فاصلة الجوار الأقرب}$$

ومنه معادلة لينارد جونز:

$A_n$  يتعلق بالتركيب البلوري

العدد التناسقي  $Z \rightarrow \text{lin } A_n$

$$n \rightarrow \infty$$

(1) الانضغاطية ومعامل المرونة:

$$\kappa = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial v}{\partial p} \right)_T \quad \bullet \text{ الانضغاطية:}$$

$$\beta = \frac{1}{k} = -V \left( \frac{\partial p}{\partial v} \right)_T \quad \bullet \text{ معامل المرونة:}$$

من قوانين الترموديناميك

$$dU = TdS - PdV \quad 18 - II$$

$$k^0 0 = T \Leftarrow 0 = Sd \Leftarrow VdP = Ud \quad \text{عند } \infty$$

$$\left( \frac{\partial p}{\partial v} \right)_T = - \left( \frac{d^2 U}{dV^2} \right), \quad P = - \frac{dU}{dV}$$

$$\beta = -v \left[ - \frac{d^2 U}{dV^2} \right]_T = 0^{\circ} k \quad 19 - II$$

$\beta$  مقدار قساوة البلورة.

• طاقة تجاذب مادلونك:

الطاقة الكولومية بين أيونين شحنتاهما  $i$  و  $j$

$$U_{ij} = - \frac{\pm q^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{ij}} \quad 20 - II$$

تحدث في الرابطة الأيونية:

(+) تنافر بين أيونين.

(-) تجاذب بين أيونين

الطاقة المتبادلة بين  $i$  وكل الأيونات البلورية  $j$

$$U_i = - \sum_{j \neq i} \frac{\pm q^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}$$

$$U_i = \frac{-q^2}{4\pi\epsilon_0 R} \sum_{i \neq j} \frac{(\pm)}{P_{ij}} \quad r_{ij} = R P_{ij} \quad 21 - II$$

$$|\alpha| = \sum_{i \neq j} \frac{(\pm)}{P_{ij}} \quad 22 - II$$

بلورة مكونة من  $2N$

الطاقة الكولومية الكلية:

$$U_{tot} = \frac{-N |\alpha| q^2}{4\pi\epsilon_0 R} \quad 23 - II$$

بالإضافة إلى القوى الكولومية هناك طاقة أخرى تعمل على منع المزيد من التقارب بين الأيونات تعتمد على مبدأ باولي، وتفسر على عدم تراكم السحب الإلكترونية الأيونية المتجاورة تماما، وتأخذ الصيغة التالية كطاقة:

$$U_{ij} = \lambda e^{-r_{ij}/\rho} \quad 24 - II$$

$\lambda, \rho$  ثوابت تحسب من قياس تجارب ثابت الشبكة ومعامل المرونة  $\beta$

$$r_{ij} = r_{i2} \cdot r_{i3} \dots \dots \dots = R \quad U_i = \sum_{j=1}^Z \lambda e^{-r_{ij}/\rho} \quad \text{المسافة بين أيونين}$$

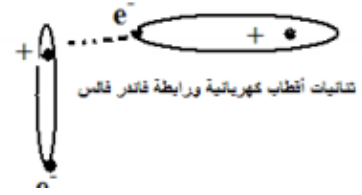
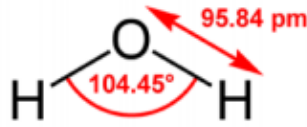
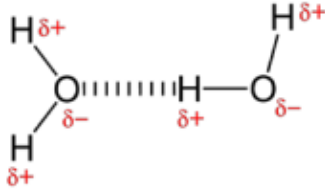
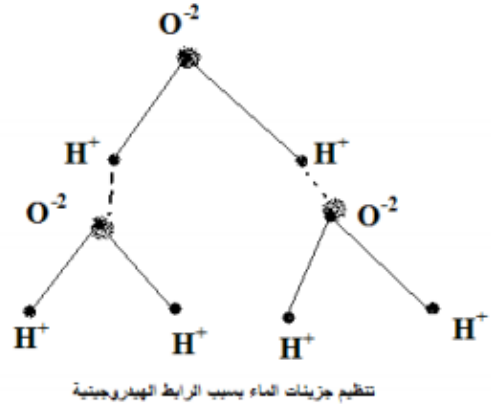
$$U_i = Z \lambda e^{-R/\rho} \quad Z \text{ العدد التناسقي}$$

$$\rho R^{-e} \lambda Z N = U_{tot} \quad \text{طاقة التنافر الكلية}$$

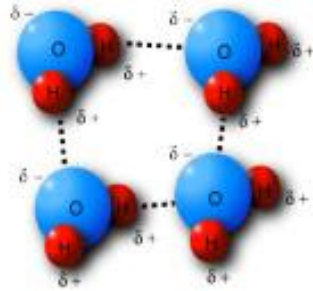
### رابطة فاندرفالس:

وهي نوع من أنواع الربط الضعيف والتي من الممكن أن توجد بين جزيئات الغاز الخامل كيميائيا، وقد بين العالم لندن عام 1930 أن للذرات المعتدلة كهربائيا بصورة عامة عزم ثنائي قطب كهربائي معدوم، إلا أن الاهتزازات تحول الذرات المعتدلة كهربائيا إلى ثنائيات أقطاب كهربائية تتغير عزومها بسرعة بالقيمة والاتجاه (عندما يكون مركز ثقل الغمامة الإلكترونية للذرة لا ينطبق على مركز ثقل النواة يتشكل ما يسمى ثنائي قطب كهربائي)، وجزء الماء يشكل ثنائي قطب كهربائي مما يؤدي إلى أن الثنائيات تجذب بعضها البعض بروابط تسمى الروابط الهيدروجينية، الأشكال (6).

الأشكال(6): أنواع مختلفة لتشكيل رابطة فاندر فالس



إن قوى فاندر فالس هي القوى التي توجد بين جزيئات من نفس المادة، فهي مختلفة تماما عن القوى التي تشكل الجزيء، على سبيل المثال يتألف جزيء الماء من الهيدروجين والأكسجين، وهما مربوطتان بواسطة التشارك بالإلكترونات بما يسمى روابط تساهمية لكنها ليست قوى فاندر فالس، وقوى فاندر فالس هي القوى التي توجد بين الملايين من ثنائيات قطب جزيئات الماء منفصلة، وليست بين ذرات الهيدروجين والأكسجين في حالة من المياه.



الشكل II - 7

### - الرابطة الهيدروجينية (Hydrogen Bonding):

اسم خاص يحمل اسم النوع الثالث من قوى فاندر فالس وهي بالضبط عبارة عن تفاعل ثنائي القطب-ثنائي القطب الكهربائي، يظهر هذا التفاعل بين ذرة الهيدروجين مع أية ذرة مثل الأكسجين (الماء H<sub>2</sub>O)، والفلور (فلور الهيدروجين HF)، والنيتروجين (الأمونيا NH<sub>3</sub>)، تعتبر الرابطة الهيدروجينية قوية بالمقارنة مع قوى التبدد لأن الفلور والأكسجين والنيتروجين أكثر جذبا لإلكترون ذرة الهيدروجين، فيظهر ثنائي القطب بشكل دائم ويظهر الهيدروجين باستقطاب موجب جزئيا، وهذا ما يجعل الجزيئات

تتجاذب فيما بينها عبر روابط سميت بالروابط الهيدروجينية، قوى فاندرفالس ضعيفة جدا ولكن الرابطة الهيدروجينية أقوى التبدد أضعفها والتي تجعل من المواد أخذ صفة الحالة الغازية.

وعند تبخر المياه نحتاج إلى تحويله من سائل إلى غاز، للقيام بذلك نحتاج إلى التغلب على القوى بين الجزيئات والسماح لهم بحرية الحركة، ولذلك يلزمنا توفير الطاقة على شكل حرارة، فالحرارة تجعل الجزيئات تهتز اهتزازات قوية بما فيه الكفاية لتتحرر من قوى فاندرفالس فيما بينها. في حالة المياه، وهذه القوى هي الرابطة الهيدروجينية بحيث يمكنك توفير ما يكفي من الطاقة القادرة على التغلب على القوى بين الجزيئات، وهذا يفسر حقيقة أن الماء يحتوي على نقطة الغليان مرتفعة بشكل غير عادي، لأن الروابط الهيدروجينية أقوى من أية قوى لروابط فاندرفالس وهكذا المياه تحتاج المزيد من الطاقة للتغلب على هذه القوى، حمض الهيدروكلوريك كسائل يحتاج طاقة أقل من الماء لأن الرابطة بين الجزيئات فيها أضعف من الروابط بين الجزيئات في الماء.

**III-1: تمهيد**

تشوه لين (Déformation Plastique)

تشوه مرن (Déformation Elastique)

- التشوه المرن: يحدث إذا كانت موجات المرنة طويلة بحيث أن طول موجتها لأكبر من  $\lambda >$ 

$$100A^\circ \Leftarrow 100A^\circ$$

- في دراسة خواص المرنة سوف نعتمد على النموذج التالي:

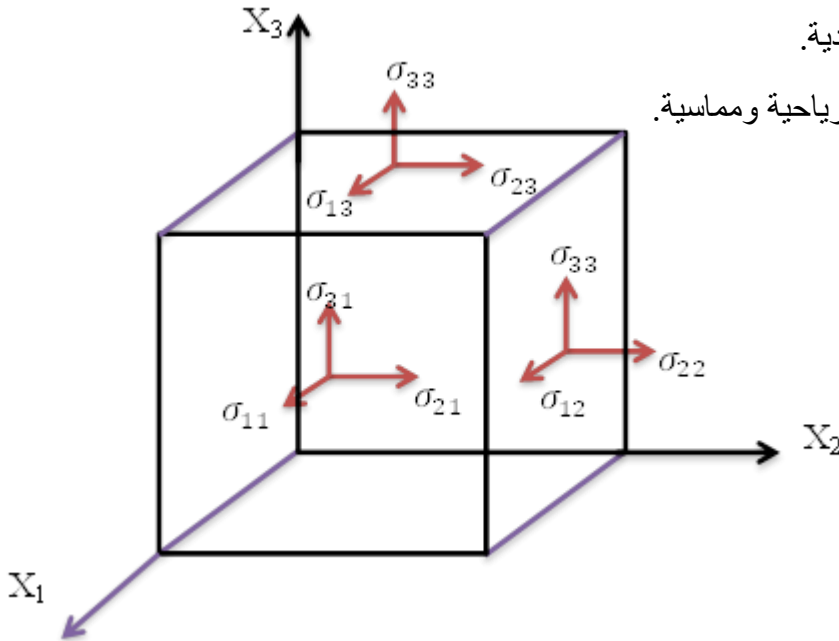
أ/ الجسم البلوري.

ب/ وسط مستمر ومتجانس.

ج/ الخواص الفيزيائية للجسم غير متماثلة المناحي.

**III-2: ممتد الإجهاد (Tenseurs de contrainte)**

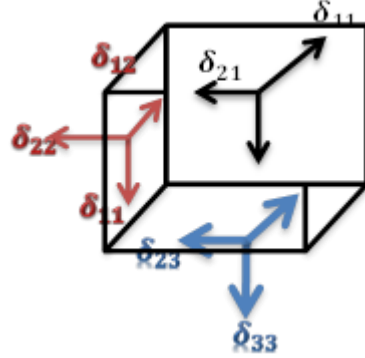
تنتقل القوى الخارجية من السطح إلى باقي الجسم، وتسمى القوى لوحدة المساحات بالإجهاد.

نرمز للإجهادات بالرمز  $\sigma_{ij}$  مركبة الإجهاد التي تصنعها القوى الخارجية في الاتجاه  $ox_i$  على سطحالمكعب العمودي على  $ox_j$ .- نعتبر مكعباً أحادياً طول ضلعه  $a$ ، وأطرافه هي المركبات الكارتيزية.- نعتبر الإجهاد المطبق على هذا المكعب منتظماً في كل الجسم، نرمز للإجهاد بالرمز  $\sigma_{ij}$  وهو مركبةالإجهاد التي توصفها القوة في الاتجاه  $ox_i$  على الوجه العمودي على المحور  $ox_j$ ، فمثلاً  $\sigma_{23}$  مركبةالإجهاد التي تصنعها القوة في الاتجاه  $ox_2$  على الوجه العمودي على المحور  $ox_3$ . $\sigma_{ij}$  تسمى مركبات الإجهاد العمودية. $\sigma_{ij}$  ( $i \neq j$ ) تسمى مركبات إنزياحية ومماسية.

الشكل III-1

على الوجوه الخلفية للمكعب الأحادي فإن الاتجاهات الموجبة للإجهادات هي الاتجاهات المعاكسة لاتجاه المحاور.

- نعتبر الآن مستويا يمر من مركز المكعب الأحادي ويوازي المستوي  $(x_2x_3)$ ، لنعين الإجهادات على هذا المستوي.



الشكل III-2

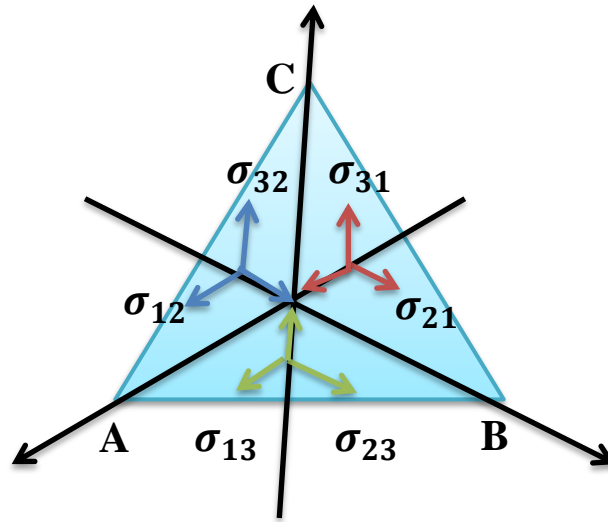
شروط التوازن الستاتيكي للجسم يفرض:  $\sigma_{32} = \sigma_{23}$  بصفة عامة  $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ .

- لكي نبين أن مركبات الإجهاد تشكل ممعداً، نأخذ من الجسم حجماً صغيراً بهيئة رباعي الوجوه.

- نحدد على الوجوه  $OBC, OAB, OAC$  مختلف الاتجاهات.

لتكن  $F_S$  القوة الكلية لوحدة المساحات المؤثرة على الوجه  $ABC$ ، نعتبر  $\vec{n}$  هو العمود على

الوجه  $ABC$  حيث أن:  $\alpha, \beta, \gamma$  هي زوايا توجيهه  $\vec{n}$ .



الشكل III-3

$S_{ABC}$  هي مساحة الوجه  $ABC$ .

$$\vec{n} = \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix} = \begin{cases} \cos \alpha \\ \cos \beta \\ \cos \delta \end{cases} \quad 1 - III$$

$$\vec{n} = n_1x_1 + n_2x_2 + n_3x_3 = n_1\vec{i} + n_2\vec{j} + n_3\vec{k} \quad 2 - III$$

لنكتب المجموع الجبري للقوى الموازية للمحور  $ox$  المؤثرة على كل وجوه رباعي الوجوه:

$$\vec{F} S_{ABC} = \begin{pmatrix} F_1 S_{ABC} \\ F_2 S_{ABC} \\ F_3 S_{ABC} \end{pmatrix} \quad 3 - III$$

$$(*)F_1 S_{ABC} = \sigma_{11}S_{OBC} + \sigma_{12}S_{OAC} + \sigma_{13}S_{OAB}$$

$$S_{ABC} \vec{n} = S_{OBC}\vec{i} + S_{OAC}\vec{j} + S_{OAB}\vec{k} \quad 4 - III$$

$$S_{ABC}\vec{n}\vec{i} = S_{OBC} \Rightarrow \begin{cases} S_{ABC}n_1 = S_{OBC} \\ S_{ABC}n_2 = S_{OAC} \\ S_{ABC}n_3 = S_{OAB} \end{cases} \quad 5 - III$$

$$F_1 S_{ABC} = \sigma_{11}S_{ABC}n_1 + \sigma_{12}S_{ABC}n_2 + \sigma_{13}S_{ABC}n_3: (*) \text{ بالتعويض في}$$

$$\begin{cases} F_1 = \sigma_{11}n_1 + \sigma_{12}n_2 + \sigma_{13}n_3 \\ F_2 = \sigma_{21}n_1 + \sigma_{22}n_2 + \sigma_{23}n_3 \\ F_3 = \sigma_{31}n_1 + \sigma_{32}n_2 + \sigma_{33}n_3 \end{cases} \vec{F}_3 = \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \end{pmatrix} \cdot \vec{n} \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix}$$

$$\vec{F}_S = \vec{\sigma}\vec{n} \quad 6 - III$$

$$\vec{\sigma} = \sigma_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{13} & \sigma_{23} & \sigma_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} \end{pmatrix}$$

يسمى ممتد الإجهاد

قيم مركبات الإجهاد تعتمد على نظام الإحداثيات المختارة، نفرض أن لدينا نظام إحداثيات  $x_1, x_2, x_3$  حيث أن مركبات الإجهاد  $\sigma_{ij}$ ، عندما تتحول إلى نظام إحداثيات جديد  $\acute{x}_1, \acute{x}_2, \acute{x}_3$  تصبح:  $\sigma_{ij} =$

$$\sum_{kl} C_{ik} C_{jl} C_{ij}$$

$$C_{ik}: C_{jl} \text{ جميعها تمام توجيه المحاور الجديدة } \sum \acute{x}_1 \acute{x}_2 \acute{x}_3 \text{ بالنسبة للمحاور القديمة } \sum x_1 x_2 x_3$$

باختيار معين لنظام الإحداثيات  $\sum \acute{x}_1 \acute{x}_2 \acute{x}_3$  يمكن تحويل ممتد الإجهاد إلى مصفوفة قطرية.

$$de t(\vec{\sigma} - \lambda II) = \sigma^{(3)}, \sigma^{(2)}, \sigma^{(1)}$$

$$0 \begin{pmatrix} \sigma^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma^{(2)} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma^{(3)} \end{pmatrix} \quad 7 - III$$

**III-3: ممتد التشوه**

عند تأثير الإجهاد الخارجي على الجسم البلوري، فإن ذراته سوف تنحرف عن مواقعها الأصلية ويحدث ما يسمى بالتشوه عند حصول الانحراف النسبي لذراته بالنسبة لبعضها البعض، عندما يكون الإجهاد الخارجي قليلا فإن التشوه يكون أيضا قليلا وعكوسيا بمعنى بإزالة التأثير الخارجي فإن ذرات الجسم البلوري تعود إلى مواضعها الأصلية قبل التشوه ويسمى هذا التشوه **مرنا**، أما إذا كان الإجهاد الخارجي كبيرا فإن التشوه الذي يحدثه يكون أيضا كبيرا بحيث يتجاوز حدود مرونة الجسم وهو غير عكوسي، هذا التشوه يسمى تشوه **لدن**.

**III-3-1: دراسة التشوه المرن**

ندرس التشوه الصغير المرن الذي يحدث عندما يكون التأثير الخارجي صغيرا نسبيا، لوصف الجسم المتشوه نربط معه نظام الإحداثيات  $\sum$  التي تتشوه معه.

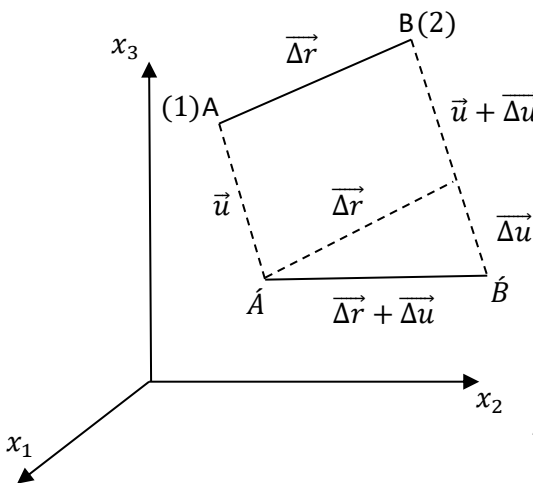
نعتبر النقطتين (1) و (2) من الجسم البلوري ثم حالتها قبل وبعد حدوث التشوه المرن.

- إذا كان  $\Delta u = 0$  لكل نقاط الجسم فإن هذا الجسم لا يتشوه ويعتبر منتقلا (أي كأننا قمنا بإنسحاب للجسم في الفضاء) ومنه شرط التشوه  $\Delta \vec{u} \neq 0$ .

نعرف التشوه المنتظم عندما يكون شعاع الانزياح  $\vec{u}$  الألية نقطة يتناسب طرديا مع إحداثيات تلك

النقطة  $\vec{u} \propto \vec{r}(x_1 x_2 x_3)$

	بعد التشوه	قبل التشوه
موقع النقطة (1)	$\vec{A}$	$A$
موقع النقطة (2)	$\vec{B}$	$B$
متجه الموقع النسبي	$\vec{\Delta r} + \vec{\Delta u}$	$\vec{\Delta r}$
إنزياح النقطة (1)	$\vec{u}$	$\vec{0}$
إنزياح النقطة (2)	$\vec{u} + \vec{\Delta u}$	$\vec{0}$
الإزاحة النسبية	$\vec{\Delta u}$	$\vec{0}$



$$\vec{r} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}, \vec{u} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix}, \begin{aligned} u_1 &= \epsilon_{11}x_1 + \epsilon_{12}x_2 + \epsilon_{13}x_3 \\ u_2 &= \epsilon_{21}x_1 + \epsilon_{22}x_2 + \epsilon_{23}x_3 \\ u_3 &= \epsilon_{31}x_1 + \epsilon_{32}x_2 + \epsilon_{33}x_3 \end{aligned}$$

$$\Delta u_i = \sum_{j=1}^3 \epsilon_{ij} \Delta x_j \quad u_i = \sum_{j=1}^3 \epsilon_{ij} x_j \quad 8 - III$$

الشكل 4-III

$$u = \vec{\epsilon} \vec{r}$$

9 - III

$\vec{\epsilon}$  ممتد الإنزياحات الصغيرة أو ممتد التشوه المرن، لمعرفة ماهية العوامل  $\epsilon_{ij}$  لهذا الغرض نعتبر نمو مركبات شعاع الإنزياح.

$$\Delta u_1 = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial u_1}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial u_1}{\partial x_3} \Delta x_3$$

$$\Delta u_2 = \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial u_2}{\partial x_3} \Delta x_3$$

$$\Delta u_3 = \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \Delta x_3$$

$$\epsilon_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$$

10 - III

$\epsilon_{ij}$  يصف التمدد النوعي بموازاة  $ox_i$ .

$\epsilon_{ij}$  ( $i \neq j$ ) يصف عملية دوران حول  $k$  نحو جهة  $o_i$  لمستقيم يوازي  $ox_j$ .

- يمكن كتابة الممتد  $\vec{\epsilon}$  بصورة  $\vec{\epsilon} = (e_{ij}) + (w_{ij})$

حيث:  $e_{ij}$  عناصر ممتد متناظر التي تحقق:  $e_{ji} = e_{ij}$

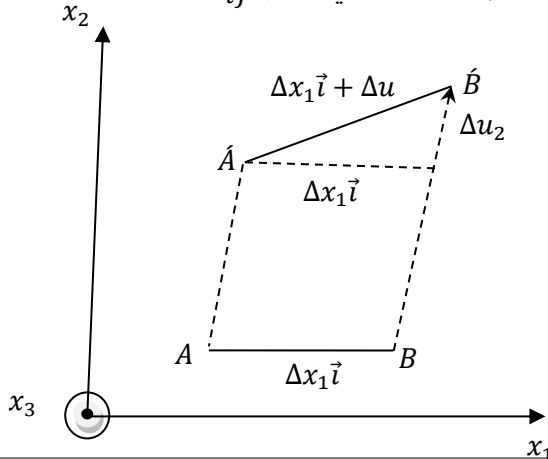
$w_{ij}$  عناصر ممتد ضد متناظر التي تحقق:  $w_{ji} = -w_{ij}$

$$w_{ji} = \frac{1}{2} (\epsilon_{ij} - \epsilon_{ji}); \quad e_{ij} = \frac{1}{2} (\epsilon_{ij} + \epsilon_{ji})$$

11 - III

- ممتد التشوه يربط بين شعاعين، شعاع  $\Delta \vec{u}$  وهو الإزاحة النسبية لنقاط الجسم بعد التشوه والشعاع  $\Delta \vec{r}$

وهو متجه الموقع النسبي قبل التشوه، وللإمعان أكثر في معنى  $\epsilon_{ij}$ ، نعتبر الحالة المبسطة:  $\Delta \vec{r} = \Delta x_1 \vec{i}$



الشكل 5-III

$$\Delta x_2 = 0 = \Delta x_3$$

$$\begin{cases} \Delta u_1 = \epsilon_{11} \Delta x_1 \\ \Delta u_2 = \epsilon_{21} \Delta x_1 \\ \Delta u_3 = \epsilon_{31} \Delta x_1 \end{cases} \quad \epsilon_{11} = \frac{\Delta u_1}{\Delta x_1} = \frac{\epsilon_{11} \Delta x_1 + \Delta x_1 - \Delta x_1}{\Delta x_1}$$

$$\epsilon_{11} = \frac{\Delta x_1 (\epsilon_{11} + 1) - \Delta x_1}{\Delta x_1} \quad 12 - III$$

- هذه العلاقة تصف التمدد النوعي بالموازاة  $ox_1$

- المركبات القطرية لتمدد التشوه:  $\epsilon_{ii}$  تصف التمدد النوعي بموازاة  $ox_i$

$\epsilon_{ii} > 0$  في حالة التمدد،  $\epsilon_{ii} < 0$  في حالة الكبس.

$$\sin \theta \simeq \theta \simeq \frac{\Delta u_2}{\Delta x_1} = \frac{\epsilon_{21} \Delta x_1}{\Delta x_1} = \epsilon_{21}$$

$\epsilon_{21}$  زاوية دوران حول المحور 3 نحو جهة  $ox_2$  لمستقيم يوازي  $ox_1$ .

### III-3-2: الممتد ضد المتناظر

لـ  $w_{ij}$  الخصائص التالية:  $w_{ii} = 0$

$$w_{ij} + w_{ji} = 0 \quad (i \neq j)$$

$$\vec{du}_i = \sum_{j=1}^3 w_{ij} \vec{dx}_j$$

$$\sum_i \vec{dx}_i \vec{du}_i = \sum_{ij} w_{ij} dx_j dx_i$$

- معناه أن شعاع موقع نقطة من نقاط الجسم  $\vec{u}$  وشعاع الإنزياح على نقطة  $\vec{du}$  هي كمية معدومة، هذا

يدل على أن  $\vec{du}$  عمودي على  $\vec{dr}$  المحسوبان بالنسبة لنقطة مثبتة 0 من الجسم، وهذا يعني أن الممتد

( $w_{ij}$ ) متناسب مع عملية دوران لنقاط الجسم حول محور يمر من نقطة الجسم "0"، وبالتالي فإن الممتد

المتناظر ( $e_{ij}$ ) هو الذي يصف عملية التشوه حقيقة في الجسم.

$$(e_{ij}) = \begin{pmatrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} \\ e_{21} & e_{22} & e_{23} \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \epsilon_{11} & \frac{1}{2} (\epsilon_{12} + \epsilon_{21}) & \frac{1}{2} (\epsilon_{13} + \epsilon_{31}) \\ \frac{1}{2} (\epsilon_{21} + \epsilon_{12}) & 2 \epsilon_{22} & \frac{1}{2} (\epsilon_{23} + \epsilon_{32}) \\ \frac{1}{2} (\epsilon_{31} + \epsilon_{13}) & \frac{1}{2} (\epsilon_{32} + \epsilon_{23}) & 2 \epsilon_{33} \end{pmatrix} \quad 13 - III$$

$e_{ii}$  تصف التمدد أو الكبس الطولي،  $e_{ij} (i \neq j)$  نصف الإنزياح الزاوي.

- إن التشوه هو عملية تغيير أطوال وأبعاد الزوايا العينية البلورية، وبالتالي يحدث تغيير في الحجم، لندرس التغيير النسبي للحجم تحت تأثير الكبس الهيدروستاتيكي لوصف التمدد التالي:  $\sigma_{ij} =$

$$\begin{pmatrix} -\Delta P & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta P & 0 \\ 0 & 0 & -\Delta P \end{pmatrix} \sigma_{ij} = -\Delta P \delta_{ij}$$

تحت تأثير هذا الكبس فإن الحجم  $V = \Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3$  يتغير إلى الحجم  $\dot{V} = \Delta x'_1 \Delta x'_2 \Delta x'_3$ .

$\Delta x_j$  هو الطول الممتد لـ  $\Delta x_i$  نتيجة حدوث التشوه، بما أن  $e_{ii}$  هو التشوه النسبي الطولي على إمتداد

$$e_{ii} = \frac{\Delta x'_i - \Delta x_i}{\Delta x_i} \cdot x_i$$

$$\Delta x'_i = (1 + \epsilon_{ii}) \Delta x_i$$

$$\dot{V} = (1 + \epsilon_{11})(1 + \epsilon_{22})(1 + \epsilon_{33}) \Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3$$

$$\dot{V} = (1 + \epsilon_{11})(1 + \epsilon_{22})(1 + \epsilon_{33}) V \quad 14 - III$$

التغيير النسبي للحجم:

$$\frac{\dot{V}}{V} = (1 + \epsilon_{11})(1 + \epsilon_{22})(1 + \epsilon_{33})$$

$$\delta = \frac{\dot{V} - V}{V} = \sum_{i=1}^3 e_{ii} \quad 15 - III$$

يتغير حجم العينة من:  $V = \Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3$

$$\dot{V} = \Delta x'_1 \Delta x'_2 \Delta x'_3$$

$$\dot{V} = V(1 + e_{11})(1 + e_{22})(1 + e_{33}) \text{ وبالتقريب.}$$

$$\delta = \frac{\dot{V} - V}{V} = \sum_{i=1}^3 e_{ii}$$

S ممتد متناظر، S, C معاملات المرورية

$$S_{ijlm} = S_{imlj} \quad j \leftrightarrow m$$

$$S_{ijlm} = S_{ljim} \quad i \leftrightarrow l$$

وبذلك يصبح عدد معاملات المرورية المستقلة 36، باستعمال الديناميك الحرارية وطاقة المرورية يصبح

العدد 21.

\* معامل يونغ  $Y$  في الاتجاه الاختياري  $x_3$  من العلاقة  $Y = S_{3333}$  حيث ترتبط  $S$  مع  $S$  وفقا:

$$\hat{S}_{ijlm} = \sum_{Knop=1} C_{ik} C_{jm} C_{lo} C_{mP} S_{Knop}$$

$C_{ik}$  جيوب تمام توجيه المحور  $x_i$  بالنسبة للمحور  $x_k$ .

\* معامل الانضغاط الحجمي يحسب من  $\delta$ :

$$\delta = \sum_{i=1}^3 e_{ii} = -\Delta P \sum_{i;k=1}^3 S_{iikk}$$

$$\beta = \frac{-\Delta P}{\delta} = \left( \sum_{i;k=1}^3 S_{iikk} \right)^{-1} \quad 16 - III$$

#### 4-III: طاقة المرورية:

إن العمل المنجز من أجل تشوه وحدة حجم بلوري تشوها بسيطاً بعكس بالعلاقة:

$$dw = \sum_{p=1}^6 \sigma_p de_p \quad 17 - III$$

- إذا كان التشوه يتم ببساطة بحيث يمكن اعتبار الجملة عكوسة، فإن تغير الطاقة الداخلية للتشوه:  $du =$

$$.dw + dQ$$

حيث:  $dQ$ : كمية التبادل الحراري  $dQ = T ds$

$T$ : درجة الحرارة المطلقة،  $S$ : الإنتروبي.

$$du = \sum_{p=1}^6 \sigma_p de_p + TdS \quad 18 - III$$

- التغير بالطاقة الحرة لوحدة الحجم:  $dF = du - TdS - SdT$

$$dF = \sum_{p=1}^6 \sigma_p de_p - SdT \quad 19 - III$$

ونميز هنا حالتين:

أ/ إذا كانت عملية التشوه كظومة:  $dQ = 0 \Leftrightarrow$

$$ds = 0 \quad du = \sum_{p=1}^6 \sigma_p de_p$$

$$\sigma_p = \left( \frac{du}{de_p} \right)_s ; \sigma_{ij} = \left( \frac{\partial u}{\partial e_j} \right)_s \quad 20 - III$$

ب/ إذا كانت عملية التشوه تتم بثبوت درجة الحرارة:  $dT = 0 \Leftrightarrow$

$$dF = \sum_{p=1}^6 \sigma_p de_p$$

$$\Rightarrow \sigma_p = \left( \frac{\partial F}{\partial e_p} \right)_T ; \sigma_{ij} = \left( \frac{\partial F}{\partial e_{ij}} \right)_T \quad 21 - III$$

$$dF = \sum_{p=1}^6 \sum_{g=1}^6 C_{pg} e_g de_{pg}$$

$$\left( \frac{\partial F}{\partial e_p} \right)_T = \sum_{g=1}^6 C_{pg} e_g \Rightarrow$$

$$\left( \frac{\partial^2 F}{\partial e_p \partial e_g} \right)_T = \left( \frac{\partial^2 F}{\partial e_g \partial e_p} \right)_T = C_{pg} \quad 22 - III$$

$$\left( \frac{\partial^2 F}{\partial e_g \partial e_p} \right)_T = \left( \frac{\partial^2 F}{\partial e_p \partial e_g} \right)_T \text{ وبالتالي}$$

$$C_{pg} = C_{gp}$$

$$23 - III$$

وبنفس الطريقة نحصل على:  $S_{pg} = S_{gp}$

إن مصفوفة معاملات وثوابت المرورية متناظرة، أي أن عدد العناصر المستقلة تنقلص من 36 إلى 21.

$$dw = \sum_{p=1}^6 \sigma_p de_p \text{ طاقة المرورية:}$$

$$= \sum_{pg} C_{pg} e_g de_p$$

$$w = \int \sum_{pg} C_{pg} e_g de_p = \sum_{pg} \int C_{pg} e_g de_p$$

$$w = \frac{1}{2} \sum_{gp} \int (C_{pg} e_g de_p + C_{gp} e_p de_g)$$

بما أن:  $C_{pg} = C_{gp}$

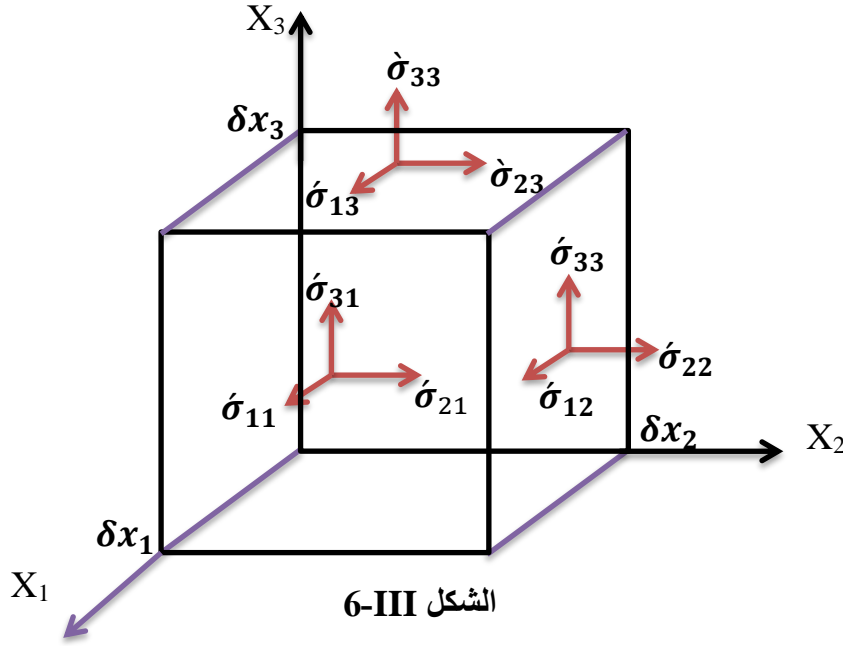
$$w = \frac{1}{2} \sum_{gp} \int C_{pg} [e_g de_p + e_p de_g]$$

$$w = \frac{1}{2} \sum_{pg}^6 C_{pg} e_g e_p \quad 24 - III$$

كثافة طاقة التشوه لوحدة الحجم وهي العمل المنجز لصنع تشوه  $(e_{ij})$  في البلورة.

### 5-III: موجات المرورية في البلورات

ندرس حركة عنصر حجمي بلوري بهيئة متوازي مستطيلات يقع مركزه على مبدأ الإحداثيات المتجهة باتجاه أحرفه ذات الأطوال:  $\delta x_1, \delta x_2, \delta x_3$ .



نعتبر أن الإجهاد بمركز الحجم العنصر هو:  $\sigma_{ij}$

نرمز بالإجهادات على السطوح الأمامية:  $\acute{\sigma}_{ij}$

نرمز بالإجهادات على السطوح الخلفية:  $\grave{\sigma}_{ij}$

$$\acute{\sigma}_{ij} = \sigma_{ij} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \frac{1}{2} \delta x_j \quad 25 - III$$

$$\grave{\sigma}_{ij} = \sigma_{ij} - \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \frac{1}{2} \delta x_j \quad 26 - III$$

- لنحسب القوة لوحدة الحجم في الاتجاه  $ox_1$  ونرمز إليها بالرمز  $F_n$  المؤثرة على كل وجوه متوازي

$$\delta V = \delta x_1 \delta x_2 \delta x_3 \text{ السطوح بالحجم}$$

$$\acute{\sigma}_{11} = \sigma_{11} + \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x_1} \delta x_1 \text{ (القوة دائما في اتجاه } ox_1 \text{)}$$

$$\acute{\acute{\sigma}}_{11} = \sigma_{11} - \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x_1} \delta x_1$$

\* محصلة القوة المؤثرة على الوجوه العمودية على  $1$

$$\acute{\sigma}_{11} \delta x_2 \delta x_3 - \acute{\acute{\sigma}}_{11} \delta x_2 \delta x_3$$

$$(\acute{\sigma}_{11} - \acute{\acute{\sigma}}_{11}) \delta x_2 \delta x_3 = \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x_1} (\delta x_1 \delta x_2 \delta x_3)$$

$$= \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x_1} \delta v$$

\* بالنسبة للوجهين العموديين على  $2$  :

$$(\acute{\sigma}_{12} - \acute{\acute{\sigma}}_{12}) \delta x_1 \delta x_3 = \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial x_2} \delta v$$

\* وكذا بالنسبة للوجهين العموديين على  $3$  .

- محصلة القوة لوحدة الحجم في الاتجاه  $ox_1$  المؤثرة على كل وجوه متوازي السطوح:

$$F_1 = \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x_1} + \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial x_2} + \frac{\partial \sigma_{13}}{\partial x_3}$$

وعلى العموم فإن القوة لوحدة الحجم في الاتجاه  $ox_i$ ،  $i = 1, 2, 3$  المؤثرة على كل وجوه متوازي السطوح.

$$F_i = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \quad 27 - III$$

- لدراسة حركة العنصر الحجمي نطبق قانون نيوتن:

$$F_i = \rho \ddot{u}_i \quad 28 - III$$

$\rho$ : كثافة العنصر الحجمي،  $u_i$  الإزاحة النسبية في الاتجاه  $ox_i$ :

$$\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \rho \ddot{u}_i$$

$$\sigma_{ij} = \sum_{lm} C_{ijkl} e_{lm}, e_{lm} = \frac{1}{2} (\varepsilon_{lm} + \varepsilon_{ml}) \quad 29 - III$$

$$e_{lm} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_l}{\partial x_m} + \frac{\partial u_m}{\partial x_l} \right)$$

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \sum_{lm} C_{ijkl} \frac{\partial e_{lm}}{\partial x_j}, \frac{\partial e_{lm}}{\partial x_j} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_m} + \frac{\partial^2 u_m}{\partial x_j \partial x_l} \right) \rightarrow \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_m}$$

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \sum_{l,m=1}^3 C_{ijkl} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_m} \quad 30 - III$$

$$u_i = \sum_{l=1}^3 u_l \delta_{il}$$

معادلة موجات المرورية:

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \sum_{lm=1}^3 C_{ijkl} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_m} = \rho \ddot{u}_i \quad (i = 1,2,3) \quad 31 - III$$

ويكون الحل على شكل موجات مستوية

$$u_i = u_{0i} e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} \quad 32 - III$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_m} = -i k_m u_i \ddot{u} = -x^2 u_i$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x_j \partial x_m} = (-i k_m)(-i k_j) u_l = -k_m k_j u_l$$

$$\sum_{l=1}^3 \left\{ \sum_{j,m=1}^3 C_{ijml} k_m k_j - \rho \omega^2 \delta_{il} \right\} u_l = 0$$

نضع:

$$L_{il} = \sum_{j,m=1}^3 C_{ijml} k_m k_j \quad 33 - III$$

معادلة موجات المرورية تأخذ الصورة التالية:

$$\sum_{l=1}^3 (L_{il} - \rho w^2 \delta_{il}) u_l = 0 \quad 34 - III$$

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

طول موجة المرئية

$$C_{ijklm} = C_{lmij} \quad \Rightarrow \quad L_{il} = L_{li}$$

لنكتب جملة معادلات الحركة :

$$(L_{11} - \rho w^2)u_1 + L_{12}u_2 + L_{13}u_3 = 0$$

$$L_{21}u_1 + (L_{22} - \rho w^2)u_2 + L_{23}u_3 = 0$$

$$L_{31}u_1 + L_{32}u_2 + (L_{33} - \rho w^2)u_3 = 0$$

لهذه المعادلات حل غير معدوم إذا كان المحدد ليس صفر:

$$\begin{pmatrix} L_{11} - \rho w^2 & L_{12} & L_{13} \\ L_{21} & L_{22} - \rho w^2 & L_{23} \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} - \rho w^2 \end{pmatrix} = 0 \quad 35 - III$$

محدد كريستوفر

نشر هذا المحدد يؤدي إلى معادلة من الدرجة الثالثة بالنسبة للكمية ( $w$ )

$$w = \begin{cases} w^1 \rightarrow u^1 \begin{pmatrix} u^{11} \\ u^{12} \\ u^{13} \end{pmatrix} \\ w^2 \rightarrow u^2 \begin{pmatrix} u^{21} \\ u^{22} \\ u^{23} \end{pmatrix} \\ w^3 \rightarrow u^3 \begin{pmatrix} u^{31} \\ u^{32} \\ u^{33} \end{pmatrix} \end{cases} \quad 36 - III$$

لكل شعاع موجة  $\vec{k}$  نحصل على ثلاث ترددات موجبة  $w^1, w^2, w^3$  تقابل 3 موجات مرئية مستقلة بسرعات طولية متساوية:

$$v^1 = \frac{\omega^1}{k}, \quad v^2 = \frac{\omega^2}{k}, \quad v^3 = \frac{\omega^3}{k} \quad 37 - III$$

على العموم نحصل على موجة طولية وموجتان عرضيتان بالنسبة للبلورة المكعبة

- في الاتجاه [100] لدينا  $v_L = \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}}$  ,  $v_{T1,2} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}}$
- في الاتجاه [110] لدينا  $v_L = \sqrt{\frac{C_{11}+C_{12}+2C_{44}}{\rho}}$  ,  $v_{T1} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}}$  ,  $v_{T2} = \sqrt{\frac{C_{11}-C_{12}}{\rho}}$
- في الاتجاه [111] لدينا  $v_L = \sqrt{\frac{C_{11}-2C_{12}+4C_{44}}{\rho}}$  ,  $v_{T1,2} = \sqrt{\frac{C_{11}C_{12}+2C_{44}}{\rho}}$

### III-6: نذببة (اهتزازات) الشبكة البلورية:

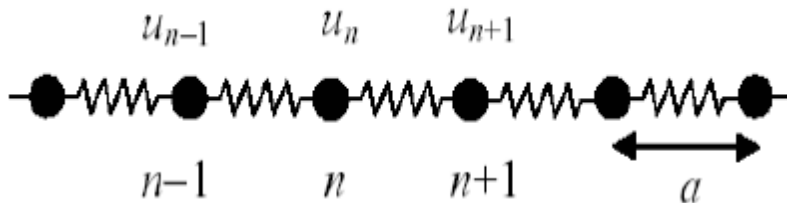
#### III-6-1: مقدمة:

عند دراستنا لطاقة الترابط بين البلورات استعرضنا حالة الشبكة في وضع التوازن حيث تكون كل ذرة متموضعة على موضعها الشبكي تمام، ولكن الحقيقة أن الذرة (أيون الذرة) في الشبكة ليست ساكنة في مكانها حتى في الصفر المطلق كما تشير دراسات ميكانيكا الكم، فالذرات (أيونات الذرات) تهتز حول وضع توازنها تحت تأثير قوى مرونة (قانون هوك) تحاول أن تعيدها إلى وضع التوازن، مما يؤدي إلى اهتزازات الشبكة البلورية بسبب التفاعل بين الذرات، والنتيجة حركة جماعية متزامنة (simultaneously) للذرات (أيونات الذرات)، تفرض دراسة حركة الشبكة بالكامل.

وللتبسيط سندرس الظاهرة من خلال النظرية الكلاسيكية في الاهتزاز المترابط ونحاول أن نلقي الضوء بشكل مبسط على وجهة نظر ميكانيكا الكم حول تكميم نذببة الشبكة البلورية من خلال مفهوم الفوتون والذي يعرف بأنه كم طاقة اهتزاز الشبكة البلورية (photon).

#### III-6-2: نذببة الشبكة في سلسلة خطية من ذرة واحدة :

تتم الدراسة من خلال سلسلة خطية مؤلفة من ذرة واحدة في الخلية البدائية وتمثل هذه الحالة كلاسيكيا بكتل متماثلة تحتل عقد الشبكة البلورية، ويبين الشكل III-7 كما لو كانت تلك الكتل متصلة مع بعضها البعض اهتزازات مهمة الكتلة ثابت مرونتها  $C$ ، وللتبسيط يؤخذ تفاعل الجوار المباشر فقط بين الذرات ويفرض أن الذرة الثانية والثالثة والرابعة ... تأثيرها مهم على الذرة الأصل (n).



الشكل III-7

ومن أجل الإزاحات الصغيرة حول وضع التوازن يؤخذ ما يسمى الاهتزازات، وبالتالي فإن القوة المؤثرة على الذرة ( $n$ ) في الشكل III-7 هي عبارة عن محصلة قوتين: الأولى في الاتجاه الموجب من خلال تطبيق قانون هوك حيث الأحرف:  $u_{n-1} \cdot u_{n+1} \cdot u_n$  تمثل الانزياح الموافق لموضع الذرة:  $n-1$ .  $n$ .  $n+1$  وتعطى بالعلاقة:

$$F_1 = C(u_n - u_{n+1}) \quad 38 - III$$

والقوة الثانية المؤثرة على الذرة  $n$  من قبل الذرة  $n-1$  في الاتجاه السالب تعطى بالعلاقة:

$$F_2 = C(u_n - u_{n-1}) \quad 39 - III$$

ومحصلة القوى المؤثرة على الذرة  $n$  هي مجموع العلاقتين السابقتين:

$$F_n = F_1 - F_2 = -C(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) \quad 40 - III$$

وبتطبيق قانون نيوتن الثاني للحركة نجد من العلاقة (3):

$$F_n = m_n \frac{d^2 u_n}{dt^2} = m_n u_n = -C(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1})$$

$$m_n u_n + C(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) = 0 \quad 41 - III$$

تمثل المعادلة III - 41 معادلة تفاضلية من المرتبة الثانية، ويجب الانتباه إلى أن كل ذرة من ذرات الشبكة لها المعادلة (III - 45) فإذا كان عدد الذرات  $N$  ذرة فيكون لدينا  $N$  معادلة تفاضلية مرتبطة من المرتبة الثانية بحاجة إلى حل متزامن مع تطبيق الشروط الحدية والتي يجب أن تؤخذ بالحسبان وخصوصا الذرة الأخيرة.

ولحل هذا العدد اللانهائي (البلورة المثالية) من المعادلات نأخذ بالحسبان أن معادلة الحل يجب أن لا تتبدل عند الموضع  $x_n = na$  حيث  $a$  ثابتة الشبكة البلورية (شروط الدورية) ولهذا الغرض نبحث عن حل من الشكل:

$$u_n = A e^{i(qx_n - \omega t)} = A e^{i(qan - \omega t)} \quad 42 - III$$

المعادلة (III - 42) تمثل معادلة موجية مستوية جارية (مستعرضة) (traveling) حيث كل الذرات تهتز بنفس التردد  $\omega$  وببنفس السعة  $A$  ولها العدد الموجي  $q$  وذلك لأن شرط متجهة الانسحاب محقق.

نعوض المعادلة (III - 42) في المعادلة (III - 41) مع الانتباه أثناء الاشتقاق مرتين ووضع

$$x_{n+1} = a(n+1) \text{ وكذلك } x_{n-1} = a(n-1) \text{ ونحصل على المعادلة التالية:}$$

$$m\omega^2 = C(2 - e^{iqa} - e^{-iqa}) \quad 43 - III$$

وبالاستفادة من العلاقة المثلثية (إذا اعتبرنا أن  $\theta = qa$ ) التالية:

$$\cos \theta = \frac{1}{2}(e^{i\theta} + e^{-i\theta}) \quad 44 - III$$

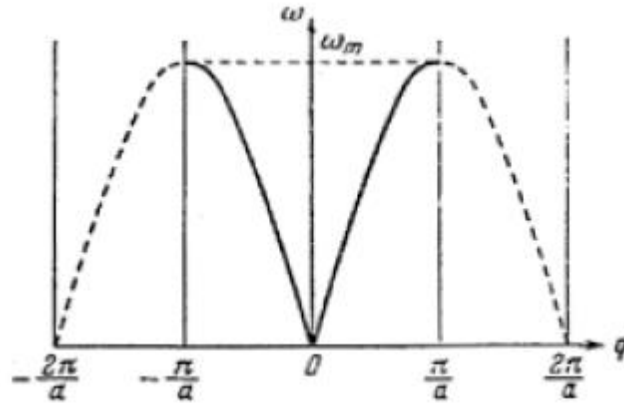
نعوض (III - 44) في (III - 43) فنجد:  $\omega^2 = \frac{2C}{m} (1 - \cos qa) = \frac{4C}{m} \sin^2 \frac{qa}{2}$

$$\omega = \pm 2 \sqrt{\frac{C}{m}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right| \quad \text{III - 45}$$

تسمى العلاقة (III - 45) علاقة التبدد أو التشتت (*loi de Dispersion*) وهي تربط بين تردد الاهتزازة  $\omega$  والعدد الموجي  $q$  وتوافق الإشارتان الموجبة والسالبة انتشار الأمواج من اليسار إلى اليمين أو العكس. تتمتع علاقة التبدد (III - 45) بالميزات التالية:

أ/ تتوفر فيها أغلب المعلومات من خلال دراستها في منطقة بريلوان الأولى:

يبين الشكل III-8 تمثيل للعلاقة (III - 45)  $\omega = f(q)$  ويلاحظ أن التردد  $\omega$  يتبع لقيم  $(\sin \theta = \sin qa)$  ويكرر نفسه كلما انتقلنا بزواوية  $(\pi)$  أي  $(\frac{qa}{2} = \pi \Rightarrow q = \frac{2\pi}{a})$  وهذا يعني أننا إذا استبدلنا  $q$  بـ  $q + 2\pi/a$  في العلاقة (III - 42) و (III - 45) فلن تتبدلا والحلول تكون متطابقة فيزيائياً، وبالتالي فإن الحلول جميعها متطابقة في المناطق التي تحقق الشرط  $q + 2\pi n/a$ ، ولذلك تتم الدراسة في المجال من  $-\pi/a$  إلى  $\pi/a$  والتي تمثل منطقة بريلوان الأولى وهذا ما يوضحه الشكل III-8.



الشكل III-8: اهتزازات الشبكة الخطية ضمن منطقة بريلوان الأولى

ويلاحظ من العلاقة (III - 45) أن أكبر قيمة لجيب الزاوية هو الواحد وعند هذه القيمة يكون التردد الزاوي أكبر ما يمكن أي:

$$\omega_{\max} = 2 \sqrt{\frac{C}{m}} \quad \text{III - 46}$$

بسبب المعنى الفيزيائي للتردد  $w$  (طاقة الفوتون موجبة في الحالة المستقرة) فإننا نأخذ القيم الموجبة، وهو متناظر بالنسبة لمبدأ الإحداثيات ويتبع قيم  $q$  الموجبة والسالبة أي  $[w(q) = w(-q)]$  أنظر الشكل (III-8)، وهذا يعني أنه عندما تكون  $q$  موجبة فإن الموجة تجري في الشبكة في الاتجاه الموجب، وعندما تكون  $q$  سالبة فإن الموجة تجري في الاتجاه السالب للمحور المفروض.

لاحظ أن أكبر تردد  $w_{max}$  يتوافق مع أكبر قيمة للعدد الموجي  $q_{max} = \pi n/a \rightarrow$  مع أصغر طول موجي  $n = 1 \rightarrow q_{max} = \pi/a$  ومع أصغر  $\lambda_{min} = 2\pi/q_{max} = 2a$  أي لا يوجد أطوال موجية أصغر من حيث  $a$  البعد الشبكي.

وهذا يتوافق مع معادلة براغ للحيود  $2d \sin \theta = n\lambda$ ، فعندما  $\theta = \pi/2$  و  $d = a$  و  $n = 1$  نجد أن  $\lambda = 2a$ .

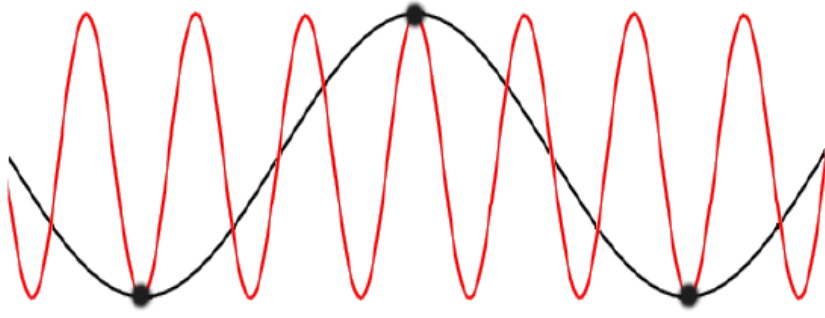
وعلى حدود منطقة بريلمان ( $q_{mix} \neq \pi/a$ ) فإن المعادلة (III-42) لا تمثل موجة جارية (مستعرضة) ولكن الحل يمثل موجة موقوفة (standing wave) لها الشكل التالي:

$$u_n = A(-1)^n e^{-i\omega t} \quad 47 - III$$

وتشير هذه العلاقة إلى أن الذرات المتجاورة تهتز على التعاكس في الاتجاه وذلك حسب قيم  $n$  الزوجية والفردية مما يؤدي إلى نشوء الموجة الموقوفة، والسبب في ذلك أن الأمواج على حدود منطقة بريلمان تخضع لشروط براغ في الحيود أي يحصل انعكاس للموجة الواردة (الساقطة) مما يؤدي إلى تداخل الأمواج الواردة مع الأمواج المنعكسة ولتشكل أمواج موقوفة (مستقرة) وبمعنى آخر عندما لا تستطيع الموجة الجارية من الانتشار في الشبكة إلا من خلال الانعكاسات المتتالية ذهاباً وإياباً على حدود منطقة بريلمان عندئذ تنشأ الموجة الموقوفة (الأمواج لا تتحرك لا نحو اليمين ولا نحو اليسار، كتشكل المغازل - البطون - والعقد في وتر مشدود يخضع لاضطراب).



الشكل III-9: حركة الذرات المتجاورة على التعاكس (Transverse)



الشكل III-10: حركة الذرات المتجاورة على التعاكس وخارج حدود منطقة بريلوان الممتدة

### ب/ سرعة الطور وسرعة المجموعة (phase and group velocity):

تعطى علاقة سرعة الطور والتي تمثل سرعة انتشار الموجة المستوية بالعلاقة التالية:

$$V_p = \frac{\omega}{q} \quad 48 - III$$

وتعطى سرعة المجموعة والتي تمثل سرعة حزمة الموجة وهي سرعة انتشار الطاقة في الوسط

بالعلاقة التالية:

$$V_g = \frac{\partial \omega}{\partial q} \quad 49 - III$$

بتعويض العلاقة (III - 45) في (III - 48) وضرب البسط والمقام بـ  $a$  وقسمة البسط والمقام

على 2، نجد سرعة الطور:

$$V_p = \frac{\omega}{q} = \frac{\sqrt{\frac{c}{m}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right|}{q} = \sqrt{\frac{Ca^2}{m}} \left| \frac{\sin \frac{qa}{2}}{\frac{qa}{2}} \right| \quad 50 - III$$

وباشتقاق العلاقة (III - 45) بالنسبة لـ  $q$  نجد سرعة المجموعة:

$$V_g = \frac{\partial \omega}{\partial q} = \sqrt{\frac{Ca^2}{m}} \left| \cos \frac{qa}{2} \right| \quad 51 - III$$

تشير العلاقة (III - 51) أنه على حدود منطقة بريلوان  $q \neq \frac{\pi}{a}$  فإن سرعة المجموعة تساوي

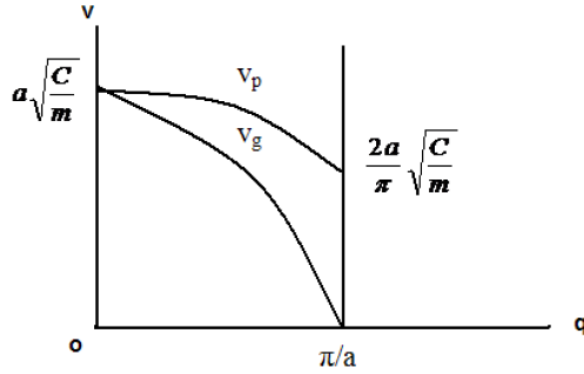
الصفري ولا يتم انتشار للطاقة، في حين أن العلاقة (III - 50) تنتهي إلى القيمة  $\left( \frac{2a}{\pi} \sqrt{\frac{c}{m}} \right)$ .

وتشير العلاقة (III - 50) و (III - 51) أنه من أجل الأمواج الطويلة جدا فإن العدد الموجي ينتهي إلى الصفر ( $q = 2\pi/\lambda \rightarrow 0$ ) وعندئذ فإن سرعة الطور  $v_p$  وسرعة المجموعة  $v_g$  يكون لهما نفس القيمة إلى الصفر وهذا ما يعادل سرعة الصوت، أنظر الشكل III-11.

ت/ حدود الطول الموجي الطويل:

في حال الأمواج الطويلة والتي تكون فيها ( $a \gg \lambda$ ) أو ( $qa \ll 1$ ) فإننا ننشر الجيب في العلاقة (III - 45) وفق ما يلي:

$$\sin \frac{qa}{2} = \frac{qa}{2} - \frac{(qa)^3}{3!} + \frac{(qa)^5}{5!} - \dots \approx \frac{qa}{2} \quad \text{III - 52}$$



الشكل III-11 : العلاقة بين سرعة الطور وسرعة المجموعة والعدد الموجي

نعوض العلاقة (III - 52) في (III - 45) فنجد:

$$\omega = 2 \sqrt{\frac{C}{m}} \sin \frac{qa}{2} \approx 2 \sqrt{\frac{C}{m}} \frac{qa}{2} = \sqrt{\frac{Ca^2}{m}} q \quad \text{III - 53}$$

تشير العلاقة (III - 53) أن التردد يتناسب طرذا مع العدد الموجي في حال الأمواج طويلة الموجة وثابت التناسب يكافئ سرعة الصوت المستقلة عن التردد عند تلك الحدود:

$$v_p = \frac{\omega}{q} = \sqrt{\frac{Ca^2}{m}} = v_s \quad \text{III - 54}$$

تشير العلاقة (III - 54) أن سرعة الطور تساوي سرعة الصوت في حال الثابتة الشبكية تنتهي إلى الصفر ( $a \rightarrow 0$ ) وهذا يعني أن الوسط أصبح مستمرا (الأوتار كوسط مستمر) وتتحرك الذرات التي أصبحت متلاصقة كما لو أنها وتر مهتز ويعرف هذا النوع من الاهتزازات بالاهتزازات الصوتية ذات الطول الموجي الطويل، أنظر الشكل III-12.



الشكل III-12: شكل الاهتزازة عندما ثابتة الشبكة تنهي إلى الصفر

**ث/ الشروط الحدية الدورية لبورن-فون كاومن (condition de Born-vonKarmann):**

إن الحالة المثالية غير محققة لأننا نتعامل مع بلورة ذات حدود وللتغلب على هذه الحالة نأخذ عدد حقيقي ضخمة  $L$  من المواقع يوضع على دائرة ذات قطر ضخمة، بحيث لا يختلف فيزيائياً عن سلسلة طويلة جداً، ومن خلال أن الذرة الأولى والذرة ذات الرقم  $L$  تقعان في نفس حالة الاستقرار يتحقق الشرط:

$$u_{n \neq L} = u_n \quad 55 - III$$

وفي هذه الحالة فإن العدد الموجي سيأخذ قيم متقطعة أو منفصلة (*discrete*)، وبتعويض العلاقة (55 - III) في العلاقة (III - 42) نجد أن:

$$\exp(\pm iqaL) = 1, qaL = 2\pi g \quad 56 - III$$

حيث  $g$  عدد صحيح، ينتج من (III - 55):

$$q = \frac{2\pi g}{aL}, \quad -\frac{L}{2} < g < \frac{L}{2} \quad 57 - III$$

تشير العلاقة (III - 57) إلى أن العد الموجي يأخذ  $L$  قيمة منفصلة في الفاصل ( $\neq \pi/a$ ) في سلسلة خطية ثابتتها الشبكية  $a$  وهذا الفاصل القيم هو القيم الموافقة لخلية ويظهر - زائتس في الشبكة المقلوبة لحالة البعد الواحد، ويتحقق هنا شرط براغ:

$$\vec{q} = \vec{q} + \vec{G} \quad 58 - III$$

وإذا تم تعويض العلاقة (III - 58) بالعلاقة (III - 42) سنحصل على الشرط (III - 55)، والذي يشير إلى تكافؤ الحالات وتكفي الدراسة في منطقة بريلووان الأولى.

**ج/ كثافة الحالات (DOS):**

بما أن الحالات منفصلة يمكننا حساب عدد أنماط الاهتزاز  $Z$  في المجال  $(w, w+dw)$  من العلاقة (III - 45) نجد أن:

$$d\omega = a \sqrt{\frac{C}{m}} \left| \cos \frac{qa}{2} \right| dq$$

$$dq = \frac{2\pi}{aL} dg$$

$$d\omega = a \sqrt{\frac{C}{m}} \left| \cos \frac{qa}{2} \right| \frac{2\pi}{aL} dg \quad 59 - III$$

فيكون عدد الاهتزازات  $dz$  في المجال  $d\omega$  وفي المجال  $(q \neq \pi/a)$  يساوي إلى:

$$dz = 2dg$$

وبما أن  $\omega_{max} = 2\sqrt{\frac{C}{m}}$  ومن (59 - III) والسابقة و(45 - III) نجد العلاقة (60 - III) مع

ملاحظة التحويلات التالية من العلاقة (45 - III) والتي كتبت مباشرة في العلاقة:

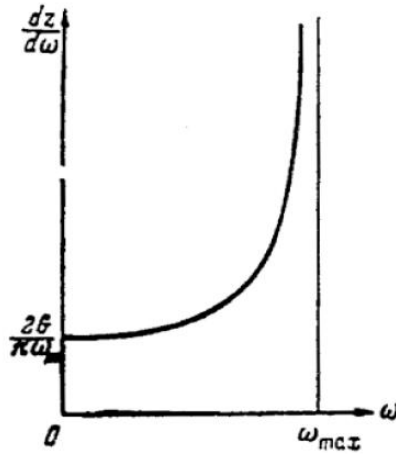
$$\begin{aligned} \omega^2 &= \frac{2C}{m} (1 - \cos qa) = \frac{4C}{m} \sin^2 \frac{qa}{2} = \frac{4C}{m} \left(1 - \cos^2 \frac{qa}{2}\right) = \omega_{max}^2 \left(1 - \cos^2 \frac{qa}{2}\right) \\ &= \omega_{max}^2 - \omega^2 = \omega_{max}^2 \cos^2 \frac{qa}{2} \Rightarrow \frac{1}{\cos \frac{qa}{2}} = \frac{\omega_{max}}{\sqrt{\omega_{max}^2 - \omega^2}} \end{aligned}$$

$$dz = 2dg = 2 \frac{d\omega}{a \sqrt{\frac{C}{m}} \left| \cos \frac{qa}{2} \right| \frac{2\pi}{aL}} \Rightarrow \frac{L}{\pi} \sqrt{\frac{m}{C}} \frac{d\omega}{\left| \cos \frac{qa}{2} \right|} \Rightarrow \frac{L}{\pi} \sqrt{\frac{m}{C}} \frac{\omega_{max} d\omega}{\sqrt{\omega_{max}^2 - \omega^2}}$$

$$dz = 2 \frac{L}{\pi} \frac{d\omega}{\sqrt{\omega_{max}^2 - \omega^2}} \Rightarrow$$

$$\frac{dz}{d\omega} = \frac{2L}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\omega_{max}^2 - \omega^2}} \quad 60 - III$$

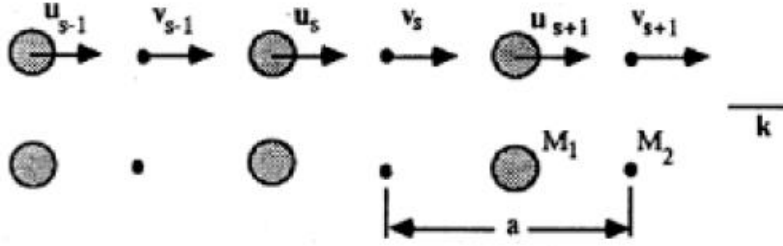
تسمى العلاقة (60 - III) بعلاقة كثافة الحالات ويبين الشكل III-13 هذه العلاقة.



الشكل III-13: كثافة الحالات لسلسلة خطية من ذرة واحدة.

III-6-3: ذبذبة الشبكة في سلسلة خطية من ذرتين مختلفتين:

نعتبر السلسلة التالية:



الشكل III-14: سلسلة خطية مكونة من ذرتين

نستطيع ان نميز ان الخلية الأساسية مكونة من ذرتين, إذا اعتبرنا ثابت المرورة  $C_{1,2}$  تأتي الى معادلتين الحركة التاليتين:

$$\begin{aligned} m_1 \ddot{u}_n &= -C_1(u_n - v_n) - C_2(u_n - v_{n-1}) \\ m_2 \ddot{v}_n &= -C_1(v_n - u_n) - C_2(v_n - u_{n-1}) \end{aligned} \quad 61 - III$$

ولحل المعادلتين نلجئ مرة أخرى إلى شرط التناظر الإنسحابي لنجد:

$$u_n = A_u e^{i(qan - \omega t)}, \quad v_n = A_v e^{i(qan - \omega t)} \quad 62 - III$$

بعد التعويض في المعادلة (III - 61) نحصل على معادلة الثوابت  $A_i$ , و التي نعبر عنها بمصفوفة وذلك بإدخال الشعاع  $A \equiv (A_u A_v)$  و ما تسمى المصفوفة الديناميكية:

$$\hat{D} = \begin{bmatrix} \frac{C_1 + C_2}{m_1} & -\frac{C_1 + C_2 e^{-iaq}}{m_1} \\ -\frac{C_1 + C_2 e^{iaq}}{m_2} & \frac{C_1 + C_2}{m_1} \end{bmatrix} \quad 63 - III$$

ومنه معادلة  $A$  تكون من الشكل:

$$\omega^2 A - \hat{D}A = \hat{0} \quad 64 - III$$

معادلة متجانسة تقبل حل إذا كان:

$$\det(\omega^2 \hat{I} - \hat{D}) = 0 \quad 65 - III$$

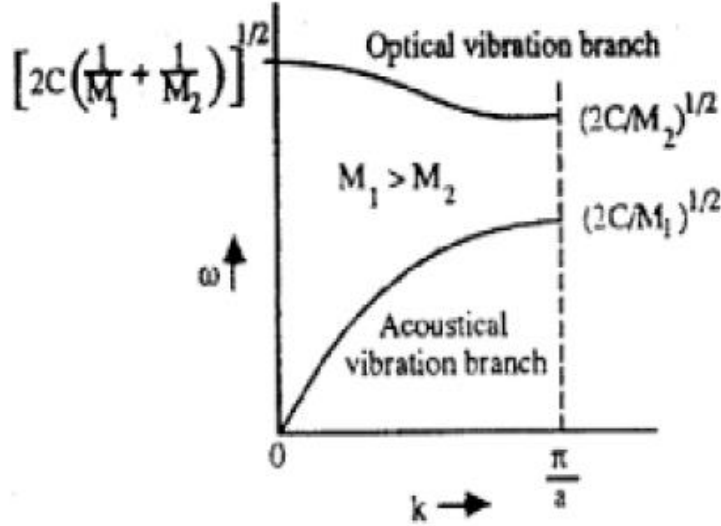
هذه المعادلة تستخدم فقط لتعيين الإهتزازات الحرة, لنحصل على:

$$\omega_{1,2}^2 = \frac{\omega_0^2}{2} \left[ 1 \mp \sqrt{1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{aq}{2}} \right] \quad 66 - III$$

$$\omega^2 = \frac{(C_1 + C_2)(m_1 + m_2)}{m_1 m_2}, \quad \gamma^2 = 16 \left[ \frac{C_1 C_2}{(C_1 + C_2)^2} \right] \left[ \frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \right]$$

الإهتزازات  $\omega_{1,2}$  حقيقية لأن  $|\gamma| \leq 1$

- نلاحظ في هذه الحالة بالمقارنة مع سلسلة الذرة الواحدة وجود فرعين ل  $\omega_{1,2}$  لكل قيمة من  $q$  , وهذا مبين في الشكل التالي:



الشكل III-15: الفرع الصوتي (acoustic) والفرع الضوئي (optic)

الفرع السفلي يسمى الفرع الصوتي (acoustic) , بينما الفرع العلوي يسمى ضوئي (optic) . لفهم الناحية الفيزيائية للتسمية نعتبر النهايات ل الصفر  $\leftarrow 0$  والعظمى ل  $q$  , فنحصل على:

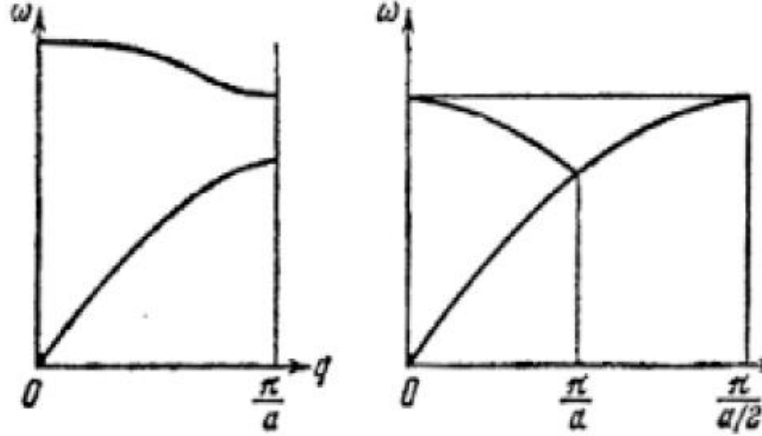
$$\omega_{ac}(0) = 0 \quad , \quad \omega_{ac}(\pi/a) = \frac{\omega_0}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \sqrt{1 - \gamma^2}} ,$$

$$\omega_{opt}(0) = \omega_0 \quad , \quad \omega_{opt}(\pi/a) = \frac{\omega_0}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \sqrt{1 - \gamma^2}} \quad 67 - III$$

ومنه نجد .

$$\omega_{opt}(0) = \omega_0 > \omega_{opt}(\pi/a) > \omega_{ac}(\pi/a) > \omega_{ac}(0) = 0$$

في حالة  $C_1 = C_2$  ,  $m_1 = m_2$  يوضحها في الشكل التالي :



الشكل III-16

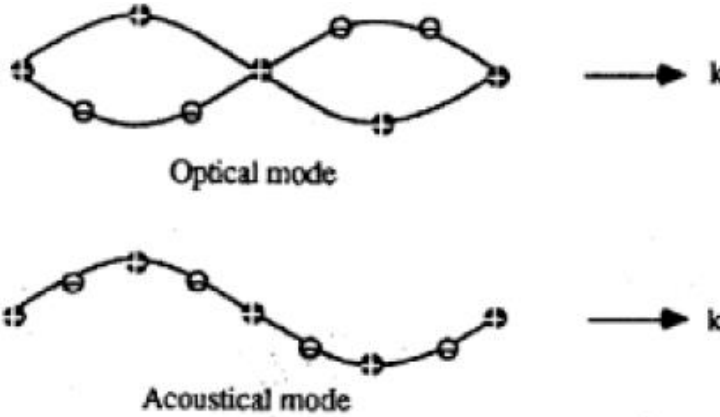
من معادلة التبدد (III - 64) نستطيع ايجاد شكل الاهتزازات في النمطين ( الضوئي و الصوتي )،  
نحصل على:

$$P_{ac,opt} = \frac{u_n}{v_{n,ac,opt}} = \frac{A_u}{A_v} = \frac{C_1 + C_2 e^{-iqa}}{(C_1 + C_2) - m_1 \omega_{ac,opt}^2} \quad 68 - III$$

في حالة الامواج الطويلة  $q \rightarrow 0$  نجد:

$$P_{ac} = 1, \quad P_{opt} = -\frac{m_1}{m_2} \quad 69 - III$$

ومنه نجد أن كل الذرات في النمط الصوتي تهتز بتسلسل زمني كما في الموجة الصوتية المتجانسة،  
بعكس النمط الضوئي حيث أن مركز الثقل للذرات لا يهتز، وهذا مبين في الشكل التالي:



الشكل III-17: موجة عمودية في النمط الصوتي (acoustic) والضوئي (optic).

### III-6-4: تكيم اهتزازات الشبكة البلورية - الفونونات (phonons):

حتى الآن ناقشنا التقريب الكلاسيكي لذبذبات الشبكة، ولكن كما نعلم من ميكانيكا الكم فإن مستويات  
الطاقة للمذبذب التوافقي مكتمة، والتقريب الذي وضع للشبكة يفرض أن تكون مستويات الطاقة لذبذبات

الشبكة مكتمة، يدعى كم طاقة الذبذبة (الاهتزاز) بالفونون، بالمقارنة مع الفوتون (photon) والذي يمثل كم طاقة الموجة الكهرومغناطيسية.

تعطى حلول معادلة شرودينجر مستويات الطاقة المسموحة للمذبذب التوافقي بالعلاقة:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\omega \quad 70 - III$$

حيث أن  $n$  العدد الكمي (عدد الانشغال) ويساوي عدد صحيح أو صفر وفي حال مساواته للصفر فإن الطاقة الناتجة تسمى الطاقة الصفرية أي أن الشبكة تتذبذب حتى في نقطة الصفر المطلق، والطاقة الكلية للطرز البلوري المدروس يساوي إلى مجموع طاقات ذبذبة كافة المذبذبات في البلورة أي:

$$E_{tot} = \sum_i E_i^n \quad 71 - III$$

تتفاعل الفونونات مع الجسيمات مثل الفوتونات، النيوترونات، الالكترونات ... إلخ وتسمى عادة بأشباه الجسيمات (quasi-particles) لأنها لا تحمل كمية حركة فيزيائية حقيقية وسبب ذلك أن مركز كتلة البلورة لا يغير موضعه أثناء الذبذبة، وهذا يتوافق فقط مع:  $q = 0$  وبالتالي كمية حركة البلورة تساوي الصفر وضمن هذا الطراز الذي يمثل انسحاب دوري لكامل البلورة فإن الناتج لا يعطى تغير في كمية الحركة.

وفي البلورات توجد قواعد الاختيار من أجل الانتقالات المسموحة بين الحالات المكتمة، وقد وجدنا أن حيود (تبعثر scattering) أشعة أكس بواسطة البلورة محكوم بقانون اختيار متجهة الموجة:

$$\vec{K} = \vec{K} + \vec{G} \quad 72 - III$$

تعني هذه العلاقة أنه أثناء عملية الحيود فإن كامل البلورة سوف يرتد بكمية حركة  $(-\hbar\vec{G})$  وهو شرط حفظ (conservation) كمية الحركة للجملة ككل، وإن متجهة الموجة الكلية للأمواج المتفاعلة محفوظة في شبكة دورية.

عندما يكون تبعثر (انتشار) الفوتونات عن البلورة ليس مرنا فإن ذلك سيؤدي إلى إحداث (creation) أو امتصاص (absorption) فونون ويصبح قانون اصطفاء متجهة الموجة بالشكل:

$$\vec{K} = \vec{K} + \vec{G} \pm \vec{q} \quad 73 - III$$

تعني إشارة الموجب امتصاص فونون، وإشارة السالب إحداث فونون، وفي حالة الحيود اللامرنة نحتاج أيضا إلى قانون حفظ الطاقة ويلزم هذا استخدام النيوترونات للحصول على نتائج أدق.

**1-IV: مقدمة عن السعة الحرارية:**

عموما هي كمية الحرارة اللازمة لرفع درجة حرارة جسم ما درجة مئوية واحدة وتحسب من خلال علاقة الطاقة الحرارية (كمية الحرارة) التالية:

$$\Delta Q = C_s m (T_f - T_i) \quad 1 - IV$$

المقدار ( $C_s$ ) في العلاقة (1 - IV) يمثل السعة الحرارية  $C$  العلاقة (2)، والمقدار ( $C_s$ ) يسمى الحرارة النوعية (*specific heat*) وهي كمية الحرارة اللازمة لرفع درجة واحد غرام من المادة درجة مئوية واحدة.

تدرس عادة السعة الحرارية تحت حجم ثابت  $C_p$ ، وتحت ضغط ثابت  $C_p$  وتشير التجارب أن الفارق بينهما صغير جدا في حال الأجسام الجامدة (راجع الديناميكا الحرارية) لأن الشغل المنجز أثناء التمدد الحراري ضئيل، تدرس عادة السعة الحرارية تحت حجم ثابت وتسمى اختصارا السعة الحرارية، ولذلك ستتم الدراسة وفق القانون الأول في الديناميكا الحرارية واعتبار الشغل يساوي الصفر (أنظر الشكل 1-IV) لتحويلات الطاقة الحرارية، أي تصبح الطاقة الداخلية للمادة الجامدة مساوية إلى كمية الحرارة ومنه علاقة السعة الحرارية وفق العلاقة:

$$\Delta Q = \Delta U - W \Rightarrow \because W = 0 \Rightarrow \Delta Q = \Delta U$$

$$C = \frac{\Delta Q}{\Delta T} = \frac{\Delta U}{\Delta T} \quad 2 - IV$$

**2-IV: السعة الحرارية وفق النموذج الكلاسيكي:**

يعتمد هذا النموذج على توزيع بولتزمان- ماكسويل الكلاسيكي (أنظر الشكل 2-IV)، ويعتبر كما وجدنا في ذبذبة الشبكة الخطية أن الذرات تتذبذب حول مواقعها بحيث أن كل ذرة تمثل مذبذب توافقي طاقته الوسطى الكلية (راجع الفيزياء العامة 1) تساوي إلى ضعف الطاقة الحركية، ولكن الطاقة الحركية وفق هذا النموذج تساوي إلى ( $KT/2$ ) وبالتالي فالطاقة الكلية تساوي إلى ( $KT$ ) وإذا كان في الشبكة ( $N$ ) ذرة، لكل منها ثلاثة درجات حرارية (الأبعاد الثلاثة) فإن الطاقة الوسطية الكلية للجملة تعطى بالعلاقة:

$$\bar{E} = 3 NKT \quad 3 - IV$$

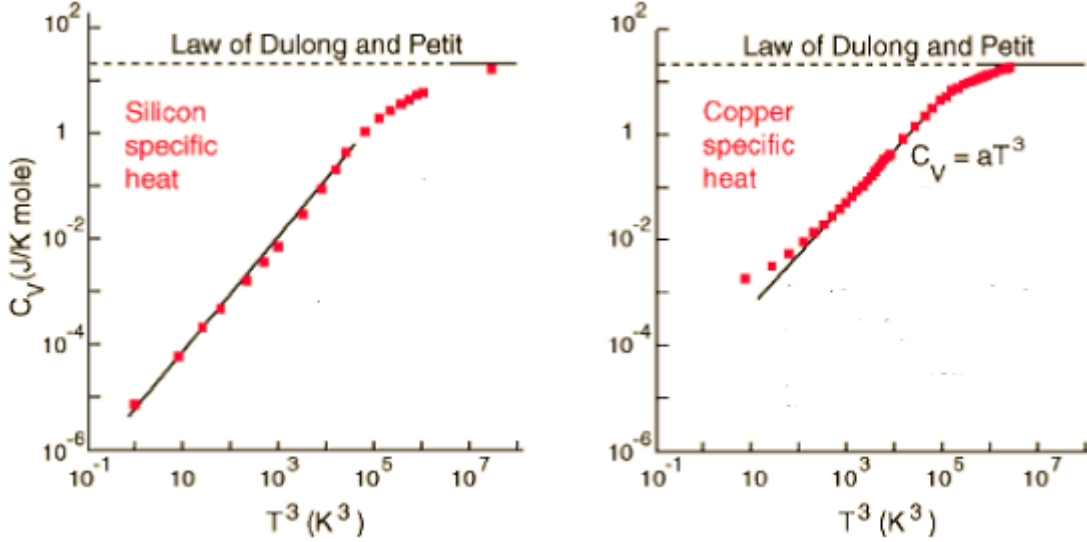
وفي حال احتواء البلورة على مول من الذرات فإن  $N$  تصبح عدد أفوكادرو (افوجادرو)  $N_A = 6,022 \times 10^{23}$ ، ومنه:

$$\bar{E} = 3 N_A KT = 3 RT \quad 4 - IV$$

حيث  $R$  ثابت الغازات العام  $R = 1,98 \text{ cal/mol} \cdot k$  ومنه السعة الحرارية وفق العلاقة (2 - IV):

$$C = \frac{d\bar{E}}{dT} = 3R \approx 6 \text{ cal/mol} \cdot k \quad 5 - IV$$

تشير العلاقة (5 - IV) إلى أن السعة الحرارية مستقلة عن درجة الحرارة في الدرجات العالية، ولكن في الدرجات المنخفضة تفشل هذه العلاقة.



الشكل 1-IV: الخط الأفقي المنقط حدود قانون دولونغ - بيتي لكل من النحاس و السيلكون

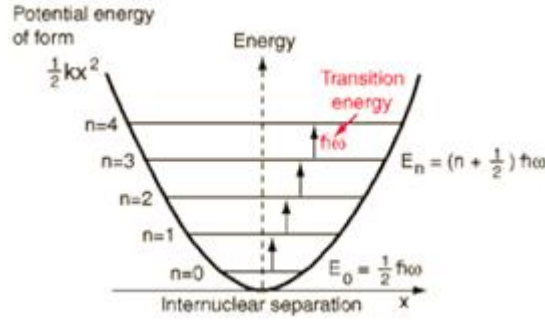
### 3-IV: نظرية اينشتاين للسعة الحرارية (نموذج اينشتاين):

في هذا النموذج تعتبر كل ذرة في الشبكة عبارة عن مذبذب توافقي مستقل عن المذبذبات الأخرى، وبالتالي هناك نمط واحد من المذبذبات (تردد واحد)، طاقة كل مذبذب وفقا لنظرية بلانك المكتملة (راجع فيزياء حديثة 1) عبارة عن كمات متقطعة لها العلاقة التالية:

$$E_i = n\hbar\omega_n = 0,1,2,3, \dots \dots \quad 6 - IV$$

ولكن مستويات الطاقة للمذبذب التوافقي (الشكل 4) وفقا لحلول معادلة شرودينجرز (Quantum Harmonic Oscillator) بينت أن الطاقة في الصفر المطلق لا تساوي الصفر وأعطت المعادلة التالية:

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_n = 0,1,2,3, \dots \dots \quad 7 - IV$$



الشكل IV-2: طاقة الوضع المكممة كدالة للموضع

وللتوفيق بين الحلين فإن الحالة  $n = 0$  لا تتعلق بدرجة الحرارة، وكوننا بصدد تأثير درجة الحرارة على الشبكة البلورية فإننا نهمل  $n = 0$  في المناقشة. تحسب الطاقة الوسطية  $\langle E \rangle$  لكل مذبذب وفق هذه النظرية بجمع طاقات كل المذبذبات التوافقية  $E$  ثم التقسيم على عددها  $N$  أي:

$$N = \sum_i^m N(E_i)$$

$$E = \sum_i^m N(E_i)E_i \Rightarrow$$

$$\langle E \rangle = \frac{E}{N} = \frac{\sum_i^m N(E_i)E_i}{\sum_i^m N(E_i)} \quad 8 - IV$$

وفي حال الطاقات المستمرة تأخذ العلاقة شكل تكامل من الشكل:

$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^\infty N(E)E dE}{\int_0^\infty N(E) dE} \quad 9 - IV$$

يحدد عدد أنماط المذبذبات وفقاً لعامل بولتزمان (الشكل 3)  $\left(e^{\frac{-E}{KT}}\right)$  والذي يعطي احتمالية كون مستوي الطاقة  $E_n$  مشغولاً أم لا، ومنه تصبح العلاقة (8 - IV):

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n \hbar \omega e^{\frac{-n \hbar \omega}{KT}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{\frac{-n \hbar \omega}{KT}}}$$

$$\langle E \rangle = \frac{0 + \hbar \omega e^{\frac{-\hbar \omega}{KT}} + 2 \hbar \omega e^{\frac{-2 \hbar \omega}{KT}} + \dots}{1 + e^{\frac{-\hbar \omega}{KT}} + e^{\frac{-2 \hbar \omega}{KT}} + \dots}$$

$$\text{ومنه } x = \frac{-\hbar\omega}{KT} \text{ لو}$$

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar\omega e^x (1 + 2e^x + 3e^{2x} + \dots)}{1 + e^x + e^{2x} + \dots} \quad 10 - IV$$

يمثل ما بداخل القوس في البسط منشور لسلسلة هندسية من الشكل  $\left(\frac{1}{(1-e^x)^2}\right)$  والمقام منشور لسلسلة هندسية من  $\left(\frac{1}{1-e^x}\right)$ ، ومنه تصبح العلاقة (10 - IV):

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar\omega e^x}{1 - e^x} = \frac{\hbar\omega}{e^{-x} - 1} = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{KT}} - 1} = n\hbar\omega \quad 11 - IV$$

يتبين من العلاقة (11) أن عدد الفونونات  $n$  يساوي إلى:

$$\langle n \rangle = \frac{1}{\frac{\hbar\omega}{e^{KT} - 1}} \quad 12 - IV$$

ومنه نحصل على العلاقة (6 - IV) التي استخدمها بلانك في إشعاع الجسم الأسود مستخدماً إحصاء بوز اينشتاين (أنظر الشكل 5 - IV):

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar\omega}{\frac{\hbar\omega}{e^{KT} - 1}} = n\hbar\omega \quad 13 - IV$$

وبما أن كل ذرة لها ثلاثة درجات حرارية، فإن الطاقة الكلية لمول من المادة الجامدة تضرب بـ  $3N_A$  أي:

$$\langle E \rangle_{tot} = 3N \frac{\hbar\omega}{e^{KT} - 1} = 3N_A \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\theta_E}{T}} - 1}$$

$$\text{اين } \theta_E = \frac{\hbar\omega}{K} \quad 14 - IV$$

يسمى المقدار  $\theta_E$  بدرجة حرارة اينشتاين، ومنه نشق الطاقة الكلية بالنسبة لدرجة الحرارة فنحصل على العلاقة العامة للسعة الحرارية وفق هذا النموذج:

$$C_v = \frac{d\langle E \rangle_{tot}}{dT} = \frac{3N_A K \left(\frac{\hbar\omega}{KT}\right)^2 e^{\frac{\hbar\omega}{KT}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{KT}} - 1\right)^2} \quad 15 - IV$$

تدرس العلاقة (15 - IV) في مجالات الحرارة العالية والمنخفضة، وتكون النتيجة كما يلي:

أ/ الدراسة عند المجالات الحرارية العالية:

في هذه الحالة يكون  $(KT \gg \hbar\omega)$  ولذلك نفاك المقام وفق منشور سلسلة هندسية أي:

$$e^{\frac{\hbar\omega}{KT}} \quad 1 = 1 \left(\frac{\hbar\omega}{KT}\right) \left(\frac{\hbar\omega}{KT}\right)^2 \dots \quad 1 \approx \frac{\hbar\omega}{KT} \quad 16 - IV$$

نعوض العلاقة (16 - IV) في العلاقة (15 - IV) أو (14 - IV) فنجد:

$$C_v = 3N_A K \left(1 - \frac{\hbar\omega}{KT}\right) = 3N_A K + \frac{\hbar\omega}{T} \approx 3N_A K = 3R \quad 17 - IV$$

العلاقة (17) تتفق مع النظرية الكلاسيكية وتمثل قانون دولينغ - بتي.

ب/ الدراسة عند المجالات الحرارية المنخفضة:

في هذه الحالة يكون  $(KT \ll \hbar\omega)$  ومنه يهمل الواحد في المقام في العلاقة (15 - IV) و(14 - IV) ونجد:

$$C_v = \frac{d\langle E \rangle_{tot}}{dT} = \frac{3N_A K \left(\frac{\hbar\omega}{KT}\right)^2 e^{\frac{\hbar\omega}{KT}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{KT}}\right)^2} = 3N_A K \left(\frac{\hbar\omega}{KT}\right)^2 e^{-\frac{\hbar\omega}{KT}}$$

$$C_v = 3R \left(\frac{\hbar\omega}{KT}\right)^2 e^{-\frac{\hbar\omega}{KT}} \quad 18 - IV$$

تبين العلاقة (15 - IV) أن السعة الحرارية تقترب من الصفر بشكل أسي وتصبح صفرا عندما  $(T = 0)$ ، وإن الطريق التي تسلكه للوصول إلى الصفر لا يتفق مع النتائج التجريبية، ولذلك فهي تصلح للدراجات العالية، وقد تم تصحيحها من قبل ديبياي الذي أعطى نموذجا نظريا يتفق مع التجربة تماما

4-IV: نموذج ديبياي للسعة الحرارية (Debye Specific Heat):

1-4-IV: كثافة الحالات (DOS):

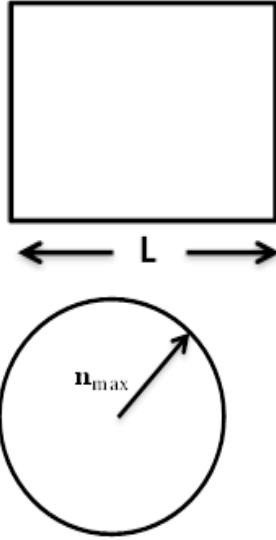
تستخدم عبارة كثافة الحالات للتعرف على عدد الحالات في مجال وحدة الطاقة (عدد مستويات الطاقة في المجال  $dE$ )، أو من يرتبط معها بعلاقات رياضية، فمثلا في فضاء متجهة الموجة يمكننا اعتبار كرة نصف قطرها  $K$  فيكون حجمها  $4/3\pi K^3$ ، وبما أن كل عقدة من عقد الشبكة البلورية محتواة في حجم يساوي إلى حجم الخلية البدائية  $((2\pi/L)^3)$  فإننا نحصل على عدد الأنماط داخل الكرة بتقسيم حجم الكرة الكلي على حجم الخلية البدائية أي:

$$N(K) = \frac{\frac{4}{3}\pi K^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{L^3}{(2\pi)^3} \cdot \frac{4}{3}\pi K^3 = \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{4}{3}\pi K^3 \quad 19 - IV$$

أما عدد الأنماط ضمن قشرة كروية محصورة بين  $K$  و  $K + dK$  فهو بمفاضلة العلاقة (16 - IV) وينتج العلاقة التالية:

$$dN(K) = \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi K^2 dK \quad 20 - IV$$

وقد اعتبر ديبراي كرة في الفضاء  $n$  والتي تعطي نفس عدد الذرات، وأخذ  $n$  كمتجهة نصف قطر الكرة مع الأخذ بعين الاعتبار قيم  $n$  الموجبة فقط فالمطلوب هو ثمن حجم الكرة  $N = 1/8 \cdot 4/3 \pi n_{max}^3$ ، وفي حال مكعب ضلعه  $L$  فإن عدد الأنماط  $N = n_{max}^3$  (أنظر الشكل 3-IV).



نعتبر الجسم عبارة عن مكعب طول ضلعه  $L$  وممته اعلى نمط يكون

$$N = \text{عدد الذرات} : n_{max} = \sqrt[3]{N}$$

يعتبر قانون ديبراي كرية في "فضاء  $n$ " والذي يعطي نفس عدد الذرات  $N$  باعتبار  $n$  شعاع يسمح بأخذ القيم الموجبة فقط أي  $8/1$  من حجم الكرية

$$n_{max} = \sqrt[3]{\frac{6}{\pi} N} \Leftrightarrow N = \frac{14}{83} \pi n_{max}^3$$

الشكل 3-IV: وجهة نظر ديبراي حول عدد الأنماط

وعموماً يمكن الانتقال من فضاء إلى فضاء آخر بسهولة لأن عدد الحالات هو نفسه في كل الفضاءات ووفق وجهة نظر ديبراي فإن عدد الأنماط في قشرة كروية محصورة بين  $n$  و  $n + dn$  هو:

$$dN(n) = \frac{1}{2} \pi n^2 dn \quad 21 - IV$$

يمثل المقدار  $d/d$  ( ) من العلاقة (17 - IV) ما يسمى كثافة الحالات  $g(K)$  في الفضاء  $K$  وكذلك المقدار  $dN(n)/dn$  ما يسمى كثافة الحالات  $g(n)$  في الفضاء  $n$ ، والمقدار  $dN(\omega)/d\omega$  كثافة الحالات  $g(\omega)$  في الفضاء  $\omega$ ، وهكذا المقدار  $dN(E)/dE$  كثافة الحالات في الفضاء  $E$ ، أو  $dN(p)/dp$  كثافة الحالات في الفضاء  $P$ ، ... إلخ.

**مثال:** أوجد كثافة الحالات في الفضاء  $\omega$  (التردد الزاوي)؟

**الحل:** عدد الحالات التي يقع ترددها بين  $\omega$  و  $\omega + d\omega$ :

$$dN(\omega) = g(\omega)d\omega \quad 22 - IV$$

باستخدام علاقة سرعة الطور للموجة نجد:

$$\omega = Kv \rightarrow d\omega = v dK \rightarrow dK = d\omega/v \quad 23 - IV$$

باستبدال العلاقة (20 - IV) في العلاقة (17 - IV) نجد:

$$dN(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{4\pi\omega^2}{v^3} d\omega \quad 24 - IV$$

ومنه كثافة الحالات:

$$g(\omega) = \frac{dN(\omega)}{d\omega} = \frac{V}{2\pi^2} \cdot \frac{\omega^2}{v^3} \quad 25 - IV$$

تضرب العلاقة (25 - IV) بالعدد 3 حيث ترافق  $K$  موجة طولية وموجتان عرضيتان في الفضاء الثلاثي الأبعاد وبسرعات مختلفة (الفرع الصوتي والفرع الضوئي راجع المحاضرة السابقة الملاحق) وللتبسيط نجعل السرعات متساوية، ولذلك ظهرت السرعة  $v^3$  في العلاقة (21 - IV) و(22 - IV).

#### 2-4-IV: نموذج ديبي للسعة الحرارية:

افترض ديبي أن تردد الشبكة البلورية يغطي مجالا واسعا من القيم وليس قيمة وحيدة كما

افترضها اينشتاين.

وهذه الترددات تتراوح ما بين قيمة دنيا وقيمة عظمى  $\omega_{min} \leq \omega \leq \omega_{max}$ ، ولحساب القيمة الوسطى لطاقة جميع الهزات (المذبذبات) نستخدم نفس العبارة التي استخدمت في نموذج اينشتاين (راجع العلاقة 13 - IV)  $\langle E \rangle = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{KT}} - 1} = n\hbar\omega$  مع الفارق أننا أمام العديد من الترددات

نحصرها ما بين تردد أصغري  $\omega_{min} = 0$  وتردد أعظمي يسمى بتردد ديبي  $\omega_{max} = \omega_D$ ، واستخدام إحصاء بوز- اينشتاين (راجع دوال التوزيع الإحصائي)، يمكننا الآن كتابة علاقة الطاقة الاهتزازية الداخلية للجملة المدروسة بالعلاقة التالية:

$$\langle U \rangle = \int_0^{E_{max}} \langle E \rangle dN(E) = \int_0^{\omega_{max}} \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{KT}} - 1} g(\omega) d\omega \quad 26 - IV$$

نعوض العلاقة (25 - IV) في العلاقة (26 - IV) فنجد:

$$\langle U \rangle = \int_0^{\omega_{max}} \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{KT}} - 1} \cdot \frac{3V\omega^2}{2\pi^2v^3} d\omega = \frac{3V}{2\pi v^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{KT}} - 1} \cdot d\omega \quad 27 - IV$$

نفرض الفرضيات التالية:

$$x = \frac{\hbar\omega}{KT} \Rightarrow \omega = \frac{KT}{\hbar} x$$

$$d\omega = \frac{KT}{\hbar} dx$$

$$\omega^3 d\omega = \frac{K^3 T^3 x^3}{\hbar^3} \cdot \frac{KT}{\hbar} dx \Rightarrow \frac{K^4 T^4 x^3}{\hbar^4} dx$$

$$\text{when } x = 0 \Rightarrow \omega = 0$$

$$\text{when } \omega_{max} - \frac{KT}{\hbar} x_{max} = \omega_D \Rightarrow x_{max} = \frac{\hbar\omega_D}{KT} = \frac{\theta_D}{T} \quad 28 - IV$$

حيث  $\theta_D$  درجة حرارة ديبي أسوة بدرجة حرارة اينشتاين  $\theta_E$  وعندما تكون طاقة الاهتزاز أكبر ما يمكن، نعوض العلاقات (28 - IV) في (27 - IV) فنجد:

$$\langle U \rangle = \frac{3V\hbar}{2\pi^2 v^3} \cdot \left(\frac{KT}{\hbar}\right)^4 \int_0^{x_{max}} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} \quad 29 - IV$$

مع الأخذ بعين الاعتبار أن العدد الكلي للأنماط المتذبذبة يجب أن يساوي عدد درجات الحرية  $3N$ ، ومن هذا الاعتبار نحصل على تردد ديبي الأعظمي وفقاً للمعالجة التالية:

$$\int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega = 3N$$

$$\int_0^{\omega_D} \frac{3V\omega^2}{2\pi^2 v^3} d\omega = 3N$$

$$\frac{V\omega_D^3}{2\pi^2 v^3} d\omega = 3N$$

$$\omega_D^3 = \frac{6N\pi^2 v^3}{V} \quad 30 - IV$$

ومنه العلاقة العامة للطاقة بعد تعويض (30 - IV) في (29 - IV) تعطى بالشكل التالي:

$$\langle U \rangle = \frac{9NKT^4}{\theta_D^3} \int_0^{x_{max}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx \quad 31 - IV$$

وهذه العلاقة العامة للطاقة المتوسطة الكلية، أما السعة الحرارية فنحصل عليها بتفاضل العلاقة (31 - IV) بالنسبة إلى درجة الحرارة، فنحصل على العلاقة التالية:

$$C_v = 9NK \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\frac{\theta_D}{T}} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx \quad 32 - IV$$

تدرس العلاقات (29 - IV) أو (31 - IV) أو (32 - IV) عند درجات الحرارة العالية والمنخفضة وفقا لما يلي:

أ/ الدراسة عند الدرجات الحرارية العالية:

في هذه الحالة  $KT \gg \hbar\omega$  وينشر المقام وفق سلسلة نجد من (29 - IV) مثلا أن:

$$\frac{x^3}{e^x - 1} = \frac{x^3}{1 + x + x^2 + \dots} \approx \frac{x^3}{x} = x^2 \quad 33 - IV$$

نعوض (33 - IV) في إحدى العلاقات أعلاه فنجد:

$$\langle U \rangle = \frac{9NKT^4}{\theta_D^3} \int_0^{x_{max}} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{9NKT^4}{\theta_D^3} \int_0^{x_{max}} x^2 dx$$

$$\langle U \rangle = \frac{9NKT^4}{\theta_D^3} \cdot \frac{x_{max}^3}{3} = \frac{9NKT^4}{\theta_D^3} \cdot \frac{\theta_D^3}{3T^3} = 3NKT = 3RT$$

$$C_v = \frac{d\langle U \rangle}{dT} = 3R \quad 34 - IV$$

العلاقة (34 - IV) تلتقي مع النموذج الكلاسيكي ومع نموذج اينشتاين في الدرجات العالية.

ب/ الدراسة عند الدرجات الحرارية المنخفضة:

في هذه الحالة  $KT \ll \hbar\omega$  والتكامل يساوي إلى  $(x_{max} \rightarrow \infty)$ :

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$$

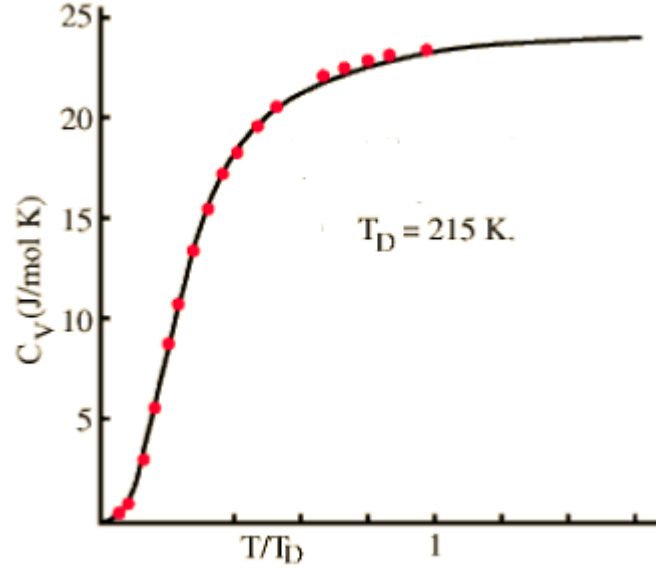
ومنه نعوض في إحدى العلاقات ذات العلاقة فنجد:

$$\langle U \rangle = \frac{9NKT^4}{\theta_D^3} \int_0^{x_{max} \rightarrow \infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{9NKT^4}{\theta_D^3} \cdot \frac{\pi^4}{15} = \frac{3\pi^4 NKT^4}{5\theta_D^3} \quad 35 - IV$$

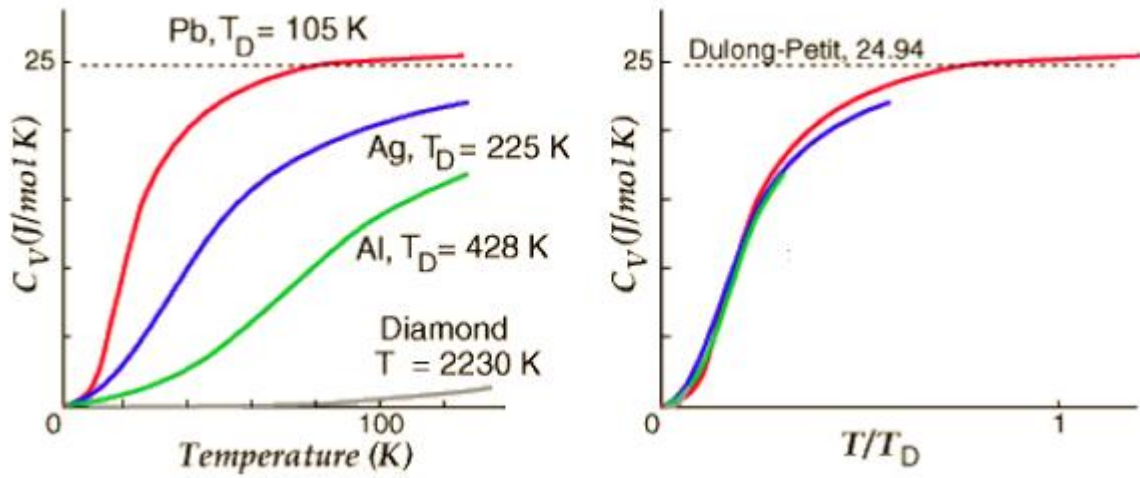
أما السعة الحرارية فتصبح:

$$C_v = \frac{d\langle U \rangle}{dT} = \frac{12\pi^4 NKT^3}{5\theta_D^3} = \frac{12\pi^4 R}{5} \cdot \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3 \quad 36 - IV$$

العلاقة (IV – 36) تبين أن السعة الحرارية في الدرجات المنخفضة تتناقص بانخفاض درجة الحرارة وتتناسب مع  $T^3$  وتدعى هذه العلاقة بقانون ديبياي  $T^3$  (الأس الثالث لديبياي) وتتوافق تماما مع النتائج التجريبية (أنظر الأشكال 4-IV و 5-IV).



الشكل 4-IV: الخط النظري و التجريبي للسعة الحرارية للفضة كدالة لدرجة الحرارة



الشكل 5-IV: أشكال أخرى للسعة الحرارية كدالة لدرجة الحرارة

**V-1: التوصيل الكهربائي في المعادن**

من هو المعدن؟ لا يوجد تعريف موحد للمعدن فمن وجهة نظر الفيزياء الحديثة يعرف المعدن من خلال مفهوم سطح فيرمي ونظرية شرائط الطاقة، وعموماً من خلال الموصلية الكهربائية والحرارية العالية في المعادن (*Wiedemann-Franz law*) وعمليات السحب والطرق ... إلخ، وكيميائياً من خلال عدد الإلكترونات التكافئية والأكسدة والإرجاع والكهروسلبية ... إلخ.  
يحاول الفيزيائيون فهم المنشأ الذري للمعادن ومن ثم دراسة السلوك الجماعي للإلكترونات.

**V-1-1: دوال توزيع الطاقة**

يتكون الجسم الجامد من عدد كبير من الجسيمات المجهرية (ذرات، نوى، إلكترونات)، ولا يمكن دراسة السلوك الفردي كل على حدى لهذه الجسيمات، ولذلك تدرس من خلال قوانين إحصائية خاصة وتأتي الخصوصية من خلال نوع الجسيمات التي نتعامل معها، وقد صنفت الجسيمات في ثلاثة أنواع والعامل الأساسي في تصنيف تلك الأنواع هو السبين والتصنيف حسب السبين يحدد طبيعة توزيع الطاقة لتجمع حشد من الجسيمات، نوجزها كما يلي:

أ/ جسيمات متماثلة، يكون لسبينها أي قيمة، متباعدة عن بعضها البعض، يمكن التمييز بينها (كجزيئات الغاز)، وتخضع لإحصاء ماكسويل-بولتزمان.

ب/ جسيمات متماثلة، سبين كل منها يساوي الصفر أو عدد صحيح من  $(h)$ ، غير قابلة للتمييز بينها، تسمى البوزونات (Bosons)، لا تخضع لمبدأ باولي (كالفوتونات، الفونونات)، وتخضع لإحصاء بوز-اينشتاين.

ج/ جسيمات متماثلة، سبين كل منها عدد فردي من أنصاف  $(h)$ ، غير قابلة للتمييز بينها، تسمى الفيرميونات (Fermions)، تخضع لمبدأ باولي (كالإلكترونات، البروتونات، النيوترونات)، وتتميز بسلوك فردي مميز، فإذا شغل الفيرميون حالة طاقة معينة لا يمكن لأي فيرميون آخر أن يشغل تلك الحالة وهو الفارق الأساسي بين البوزونات والفيرميونات، وتخضع لإحصاء فيرمي - ديراك.

تعطينا دالة توزيع الطاقة  $f(E)$  احتمال أن يكون الجسيم في الحالة الطاقية  $E$ ، ووفقاً لما سبق يكون لدينا ثلاثة دوال لتوزيع الطاقة، تصف حالات الطاقة لها الأشكال التالية:

❖ دالة توزيع ماكسويل-بولتزمان (Distribution de Maxwell-Boltzmann): وهو توزيع

كلاسيكي يصف حالات الطاقة للجسيمات التي يمكن التمييز بينها، وله الشكل الرياضي المبين أدناه مع شرح الرموز حيث  $A$  ثابت التنظيم،  $E$  الطاقة التي يمتلكها لجسيم،  $K$  ثابت بولتزمان،  $T$  درجة الحرارة، يسري مفعول هذا التوزيع في درجات الحرارة العالية.

$$f(E) = \frac{1}{Ae^{E/kT}} \quad 1 - V$$

لا يوجد أي قيود على عدد الجسيمات التي تشغل مستوى طاقة معين.

❖ دالة توزيع فيرمي-ديراك (Fermi-Dirac Distribution): تكمن أهمية التوزيع أنه عند الدرجة صفر مطلق تكون كل حالات الطاقة عند تسوية طاقة تسمى سوية طاقة فيرمي  $E_F$  مشغولة بالجسيمات وما فوق تلك السوية يكون فارغا، وتعتبر هذه السوية علامة مميزة حيث دالة التوزيع عندها تساوي الواحد، تخضع الجسيمات لمبدأ باولي، حيث كل مستوي طاقة يكون مشغولا بجسيم واحد فقط.

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1} \quad 2 - V$$

❖ دالة توزيع بوز اينشتاين (Distribution de Bose-Einstein): لا تخضع البوزونات إلى مبدأ باولي وعند الدرجات المنخفضة تسلك البوزونات سلوكا مختلفا عن الفيرميونات، حيث أن عدد غير محدد يمكن أن يتواجد بنفس حالة الطاقة، وهذا التجمع في نفس مستوي الطاقة يسمى بالتكاثف وهو المسؤول عن ظاهرة السيولة الفائقة (الهليوم السائل) والموصلية الفائقة.

$$f(E) = \frac{1}{Ae^{E/kT} - 1}$$

دوال الطاقة السابقة تعمل على المبدأ التالي:

بفرض أن عدد الجسيمات  $N$  وعدد الحالات المتوفرة  $G$ ، فعندما يكون عدد الجسيمات أصغر بكثير من عدد الحالات أي أن عدد الحالات الفارغة كبير جدا، هنا يكون احتمال انشغال الحالة أصغر بكثير من الواحد  $N/G \ll 1$ ، واحتمال التقاء الجسيمات لتشغل نفس الحالة صغير، مما يؤدي إلى عدم ظهور الصفة الجماعية، وصفات الجملة لا تعتمد على طبيعة الجسيمات المؤلفة للجملة، ومثل هذه الجملة تدعى غير منطبقة (*non degenerante*).

والعكس عندما  $N/G \gg 1$  (بوزونات وفيرميونات) عندها تكون عدد الحالات المتوفرة من مرتبة عدد الجسيمات للجملة أو أقل، وتكون المشكلة كيف ستشغل تلك الحالات فرديا أم جماعيا، وهي مشكلة تعكس طبيعة الجسيمات التي تدعى الجملة المنطبقة (*degenerate*)، يزول هذا الانطباق في الدرجات العالية من الحرارة وتصبح غير منطبقة ويطبق عليها توزيع ماكسويل-بولتزمان. نتعامل في هذه المحاضرة مع الفيرميونات ولذلك سنولي توزيع فيرمي-ديراك اهتماما أكثر فيما بعد.

### 2-1- V: نموذج درود (Drude Model) الإلكترون الحر كلاسيكيا ( Classical Free Electron Model)

#### (Model)

وهو نموذج بسيط لسلوك الإلكترون في البلورة وضع من قبل درود (*Drude*) وسمر فيلد (*Sommerfeld*)، يهمل هذا النموذج التفاعلات بين الإلكترونات وكذلك بين الإلكترونات والشبكة البلورية، وبالرغم أن هذا النموذج مكتمل إلا أن درود عالجه وفق النظرية الكلاسيكية للغازات، لذلك سمي

بالغاز الإلكتروني الحر (غاز فرمي) وطبق عليه إحصاء ماكسويل- بولتزمان، والإلكترون الحر في المعدن هو إلكترون التكافؤ في حين أن الإلكترونات الداخلية لا تساهم وتبقى مرتبطة بأيون الذرة التي تخلت عن إلكترونات التكافؤ لتعطي إلكترونات حرة تتجول بحرية في كامل أنحاء البلورة، هذه الإلكترونات هي المسؤولة عن عمليات التوصيل الإلكتروني والحراري التي تميز المعدن عن غيره.

ووفقا للنظرية الحركية للغازات فإن لكل إلكترون مسار حر وسطي  $\lambda$  محكوم بالتصادمات المرنة التي يعانها الإلكترون مع الأيونات الموجبة (أهمل التصادم بين الإلكترونات)، يقابل المسار زمن حر وسطي  $\tau_m$  وهو الزمن بين تصادمين متتاليين، ويرتبط المسار والزمن مع سرعة الإلكترون الحرارية وفق العلاقة التالية:

$$\tau_m = \frac{\lambda}{v_{th}} \quad 3 - V$$

علما أن سرعة الإلكترون بعد التصادم تتناسب مع درجة الحرارة عند منطقة التصادم، فارتفاع درجة الحرارة يؤدي إلى زيادة سرعة الإلكترون، ويكتسب الإلكترون سرعة وسطية تتناسب مع الجذر التربيعي لدرجة الحرارة وفق إحصاء ماكسويل- بولتزمان تعطى بالعلاقة التالية:

$$\text{Root - mean - square velocity} = v_{rms} = \sqrt{\frac{3KT}{m}} \quad 4 - V$$

وحسب هذا الافتراض تكون الطاقة الحركية الكلية للغاز الإلكتروني:

$$E = \frac{3}{2} nKT \quad 5 - V$$

والحرارة النوعية الإلكترونية:

$$C = \frac{dE}{dT} = \frac{3}{2} nK \quad 6 - V$$

وهذا يتعارض مع النتائج التجريبية حيث أن الحرارة النوعية تتناسب طرذا مع درجة الحرارة، وهذا يبين أن النظرية الكلاسيكية غير كافية ولا بد من تطويرها لتتناسب مع الواقع التجريبي بالرغم من أنها أعطت أفكارا أولية عامة، وخصوصا في عمليات التوصيل الكهربائي والحراري كما سنبينه في الفقرة التالية:

### 3-1-V: الموصلية الكهربائية في المعادن وفقا لنموذج درود

وضع هذا النموذج عام 1990م بواسطة باول درود (Paul Drude) ليفسر ظاهرة التوصيل الإلكتروني في المعادن، انطلاقا من النظرية الحركية للإلكترون في الجامد بافتراض أن الأيونات الموجبة

ثابتة والغاز الإلكتروني بدون تفاعلات بكثافة  $n$ ، تلك الحركة تخمد بواسطة قوة احتكاك تنجم عن تصادم الإلكترونات مع الأيونات وتتميز بزمن استرخاء  $\tau$ .

في حال وجود مجال كهربائي  $E$  فإن الشحنة ستخضع لقوة جر وفق المعادلة التفاضلية التالية:

$$m \frac{d}{dt} \langle \vec{v} \rangle = q\vec{E} - \gamma \langle \vec{v} \rangle \quad 7 - V$$

حيث  $\gamma$  معامل الانجرار،  $\langle \vec{v} \rangle$  السرعة الوسطية،  $m$  الكتلة الفعالة،  $q$  الشحنة الكهربائية.

وفي الحالة المستقرة فإن:  $\frac{d}{dt} \langle \vec{v} \rangle = 0$  ومنه تصبح المعادلة  $(7 - V)$  كما يلي:

$$q\vec{E} - \gamma \langle \vec{v} \rangle = 0$$

$$\langle \vec{v} \rangle = \frac{q\vec{E}}{\gamma} = \frac{q\tau}{m} \vec{E} = \mu \vec{E}$$

$$\text{متوسط الحرالوقت} = \tau = \frac{m}{\gamma} \quad 8 - V$$

حيث  $\mu$  الحركية، وبإدخال كثافة الشحنة يمكن كتابة كثافة التيار بالعلاقة التالية:

$$\vec{J} = nq \langle \vec{v} \rangle \quad 9 - V$$

بتعويض  $8 - V$  في  $9 - V$  نجد:

$$\vec{J} = \frac{nq^2 \tau}{m} \vec{E} = \sigma_0 \vec{E} \quad 10 - V$$

حيث  $\sigma_0$  الموصلية الكهربائية في حال التيار المستمر، وفي حال التيار المتردد تأخذ الشكل التالي:

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 + i\omega\tau} \quad 11 - V$$

حيث  $\omega$  تردد التيار، ويفترض هنا أن المجال الكهربائي وكثافة التيار يأخذ العلاقة التالية:

$$E(t) = R(E_0 e^{i\omega t})$$

$$J(t) = R(\sigma(\omega) E_0 e^{i\omega t}) \quad 12 - V$$

يبقى هذا النموذج نفسه في النماذج الأخرى مع الفارق في كيفية تعريف  $n, m, \tau$  في علاقة

الموصلية، حيث أن معكوسها يسمى المقاومة ( $\rho$ ) أي ( $\sigma_0 = \frac{1}{\rho}$ )، وعندما ندخل المسار الحر الوسطي

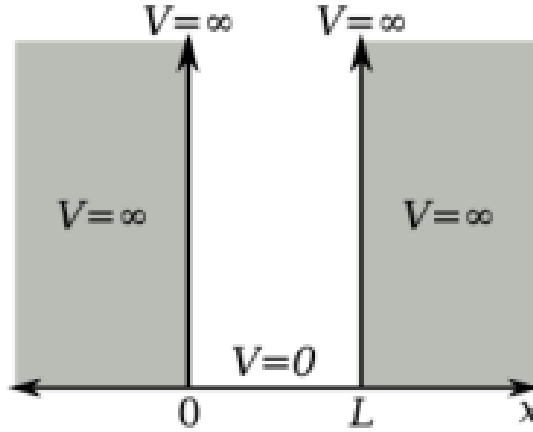
( $\lambda = v_{th} \tau$ ) ومن العلاقة ( $3 - V$ ) و( $4 - V$ ) نجد أن:

$$\sigma_0 = \frac{ne^2 \lambda}{\sqrt{3mKT}} T^{-\frac{1}{2}} \frac{1}{\rho} \quad 13 - V$$

أي أن المقاومة ( $\rho$ ) تتناسب مع الجذر التربيعي لدرجة الحرارة في حين أن النتائج التجريبية تبين أن المقاومة تتناسب طردياً مع درجة الحرارة العالية ومع الأس الخامس لدرجة الحرارة في الدرجات المنخفضة، وبالتالي تفشل نظرية درود في تفسير هذه التبعيات لدرجة الحرارة ولا بد من التفتيش عن حلول جديدة.

#### 4-1-V: النظرية الكمية للإلكترونات الحرة

تعالج هذه النظرية وضع إلكترون موجود في بئر جهد لا نهائي (الشكل V - 1)، طاقة الوضع للإلكترونات داخل المعدن ثابتة أو تساوي الصفر، والطاقة الكلية تعود إلى الطاقة الحركية. يعتبر المعدن هنا كصندوق جهد يتحرك داخله الغاز الإلكتروني الحر، وبما أن الإلكترونات مجبرة على البقاء داخل المعدن فإن طاقتها وفق حلول معادلة شرودينجر ستكون مكممة وذلك وفق التحليل الكمي البسيط التالي في حالة البعد الواحد:



الشكل V - 1: جسيم في بئر جهد في حالة البعد الواحد

معادلة شرودينجر المستقلة عن الزمن في حالة البعد الواحد تعطى بالعلاقة التالية:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

$$\left( \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \right) \Psi = E\Psi$$

$$\nabla^2 \Psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \Psi = 0 \quad 14 - V$$

الشروط الحدية من (الشكل 5)  $U = V = 0$  في المجال  $0 < x < L$ ، وهذا يعني أن الدالة الموجية يجب أن تحقق الشرط التالي:

$$\Psi(0) = \Psi(L) = 0 \quad 15 - V$$

وبإعادة صياغة العلاقة  $V - 14$  وفق الشروط الحدية نجد العلاقة التالية:

$$\nabla^2 \Psi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi(x) = 0$$

$$\text{if } \alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \text{ then}$$

$$\nabla^2 \Psi(x) + \alpha^2(x) = 0 \quad 16 - V$$

المعادلة (16 - V) معادلة تفاضلية من المرتبة الثانية تقبل حلا من الشكل:

$$\Psi(x) = A \sin \alpha x \quad 17 - V$$

نطبق الشروط الحدية على المعادلة (17 - V) فنجد:

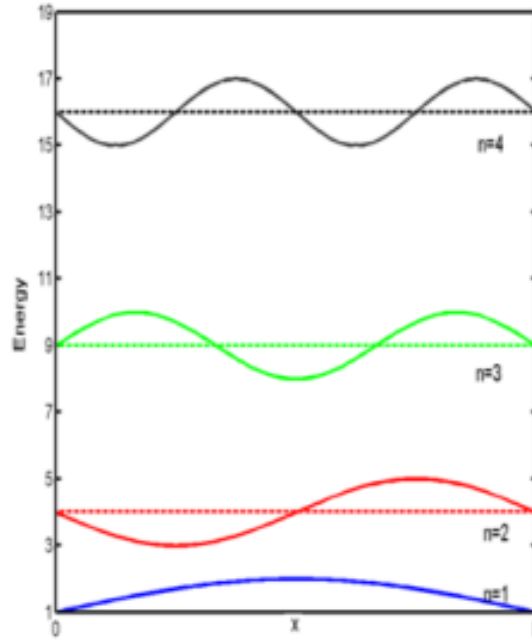
$$\Psi(0) = \Psi(L) = 0$$

$$\Psi(0) = A \sin \alpha \cdot 0 = 0$$

$$\Psi(L) = A \sin \alpha \cdot L = 0 \Rightarrow \alpha \cdot L = \pi n$$

$$\alpha = \frac{\pi n}{L} \Rightarrow \Psi(x) = A \sin \frac{\pi n}{L} x \quad 18 - V$$

والشكل (2 - V) يبين شكل الدالة حسب قيم  $n$  و  $x$ :



الشكل 2 - V: شكل الدالة الموجية عند مستوى الطاقة المسموح

وبمعالجة مشابهة لما سبق للبعدين الآخرين  $y$  و  $z$  نجد:

$$\Psi(y) = \hat{A} \sin \alpha y$$

$$\Psi(z) = \hat{A} \sin \alpha z \quad 19 - V$$

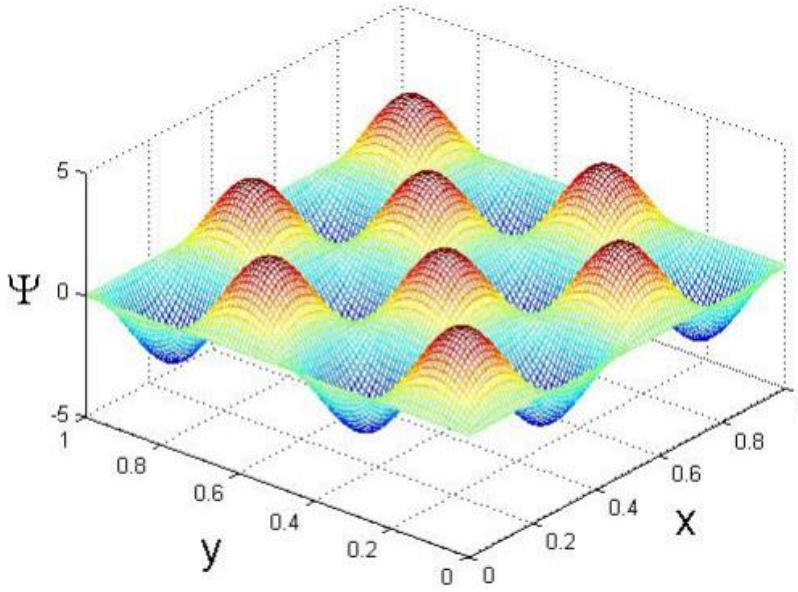
وتكون الدالة الموجية للإلكترون في الأبعاد الثلاثة باعتبار الصندوق يأخذ شكل مكعب طول ضلعه  $L$ :

$$\Psi(r) = A \sin \alpha x \cdot \hat{A} \sin \alpha y \cdot \hat{\hat{A}} \sin \alpha z$$

$$\Psi(r) = B \sin \alpha x \cdot \sin \alpha y \cdot \sin \alpha z \quad 20 - V$$

$$\Psi(r) = B \sin \frac{\pi n}{L} x \cdot \sin \frac{\pi n}{L} y \cdot \sin \frac{\pi n}{L} z$$

الشكل (3 - V) يبين شكل الدالة (18):



الشكل 3 - V: شكل الدالة الموجية الفضائي

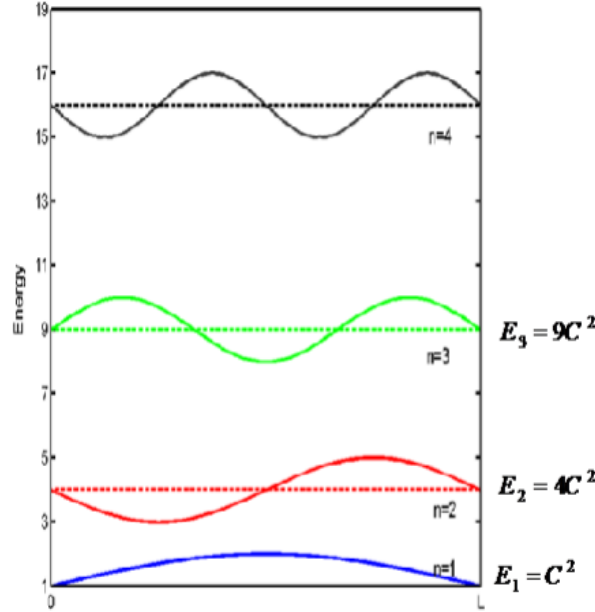
أما مسألة الطاقة فيمكن استنتاجها من العلاقة (16 - V) و(18 - V):

$$\alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{\pi^2 n^2}{L^2}$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL} n^2 = C^2 n^2 \quad 21 - V$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

أي أن قيم الطاقة تتناسب مع مربع  $n$  وأن هناك مستويات طاقة تفصل بينها مناطق محظورة لا يمكن للإلكترون أن يتواجد بها (الشكل 4 - V).



الشكل V - 4: مستويات الطاقة حسب العلاقة (V - 21) وفي البعد الواحد

ولنعالج الآن مسألة العدد الكمي  $n^2$  ؟:

حسب الشروط الحدية تكون قيمة الطاقة الكلية مساوية إلى الطاقة الحركية أي:

$$E_n = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2mL^2} \Rightarrow$$

$$K^2 = \frac{\pi^2 n^2}{L^2} = \alpha^2 \Rightarrow K^2 = K_x^2 + K_y^2 + K_z^2$$

أين:

$$K_x = \frac{\pi}{L} n_x$$

$$K_y = \frac{\pi}{L} n_y$$

$$K_z = \frac{\pi}{L} n_z$$

$$K^2 = \frac{\pi^2}{L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \Rightarrow$$

$$n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \quad 22 - V$$

تشير العلاقة V - 22 أن العدد الكمي  $n$  يرتبط بمسقطه المكمم على المحاور الثلاثة، والتي مجموع مربعاتها يساوي مربع العدد الكلي، وهي علاقة حساسة جدا لاختيار الأعداد الكمية التي تحقق العلاقة V - 22، أضف إلى ذلك أن سوية طاقة معينة يمكن أن تقابل عددا من الدوال الموجية وعندما

يحدث ذلك يقال أن هناك انطباق في الحالات، أما رتبة الانطباق فتساوي إلى عدد الدوال الموجية المختلفة لهذه الطاقة، وتعطى رتبة الانطباق بالعلاقة  $g = 2(2l + 1)$ ، حيث اللام الصغيرة تمثل العدد الكمي المداري، والضرب بـ 2 لأن الإلكترون يأخذ توجهين (سبينين)، وفي حال وجود مجال مغناطيسي خارجي يزول الانطباق كلياً أو جزئياً أو ما يسمى انشطار السوية إلى عدة سويات، فعندما  $n = 3$  فهذا يقابل  $l = 2$  وبالتالي عدد الحالات يكون 10 حالات منطبقة تنشطر هذه الحالات المنطبقة إلى عشرة مستويات طاقة مستقلة تمثل كل منها بدلتها الموجية الخاصة بها وبمستوي طاقتها الخاص بها أيضاً (كل مستوي طاقة يقابله دالة موجية توافقه)، والملاحظة الهامة جداً أن:  $n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 9$  فما هي القيم الصحيحة التي تأخذها الأعداد الكمية على المحاور الثلاثة ليكون الناتج تسعة؟

أنظر إلى التشكيلات التالية التي مجموع مربعاتها موافق للعدد تسعة  $(1,2,2), (2,1,2), (2,2,1)$  وهذه توافق ثلاثة حالات منطبقة وهي فعلاً الحالات المنطبقة للعدد الكمي  $n = 3$  لأنه لدينا الحالات  $l = 2, l = 1, l = 0$  وتمثل الحالات المنطبقة في حال عدم وجود المجال المغناطيسي الخارجي.

**والخلاصة:** طاقة الإلكترون الحر داخل المعدن لا تأخذ أي قيمة كما تنص النظرية الكلاسيكية وبالعودة للعلاقة:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$$

نلاحظ عندما تكون  $L$  صغيرة تكون مستويات الطاقة متباعدة، أما عندما تكون  $L$  كبيرة فإن السويات تكون متقاربة جداً إلى درجة أنها تشكل طيف مستمر وهذا يحصل لجزيئات الغاز في وعاء أو الإلكترونات الحرة في المعدن وفق الفرضيات التي افترضناها في البداية، وجود الإلكترونات الحرة بهذا الشكل يشكل شريط طاقة (كل إلكترون يشكل مستوى طاقة ومجموع الإلكترونات يشكل شريط طاقة لأن مبدأ باولي مطبق على كل إلكترون) يسمى شريط التوصيل.

### 5-1-V: الحرارة النوعية الإلكترونية في المعادن

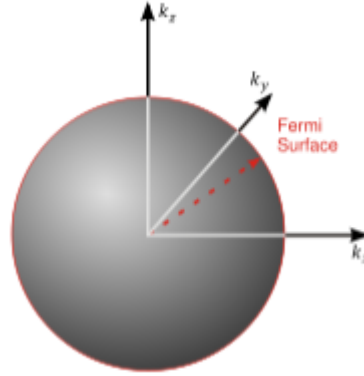
نتعامل هنا مع الإلكترونات الحرة أي غاز فيرمي أو الفيرميونات (*Fermions*) وهي النسخة الكمية للغاز المثالي، وسنلتزم هنا التعامل مع إحصاء فيرمي-ديراك:

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1} \quad 23 - V$$

ولكي نفهم هذه الدالة نجري المناقشة التالية:

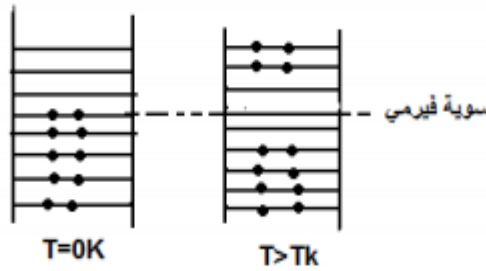
عند درجة الصفر المطلق  $T = 0K$  تدعى أعلى سوية طاقة مشغولة بالإلكترونات بسوية فيرمي  $E_F$  ففي العلاقة  $23 - V$  عندما  $E = E_F$  فإننا نجد  $f(E) = 1/2$  أي أن نصف الحالات مشغولة تماماً والنصف الآخر فارغ وعلى المستوى الفضائي نحصل على سطح فيرمي الممثل بكرة (الشكل 5 -

(V)، وبمعنى آخر احتمال انشغال الحالات تحت سوية فيرمي يساوي الواحد (100%) واحتمال الانشغال فوق سوية فيرمي يساوي الصفر.

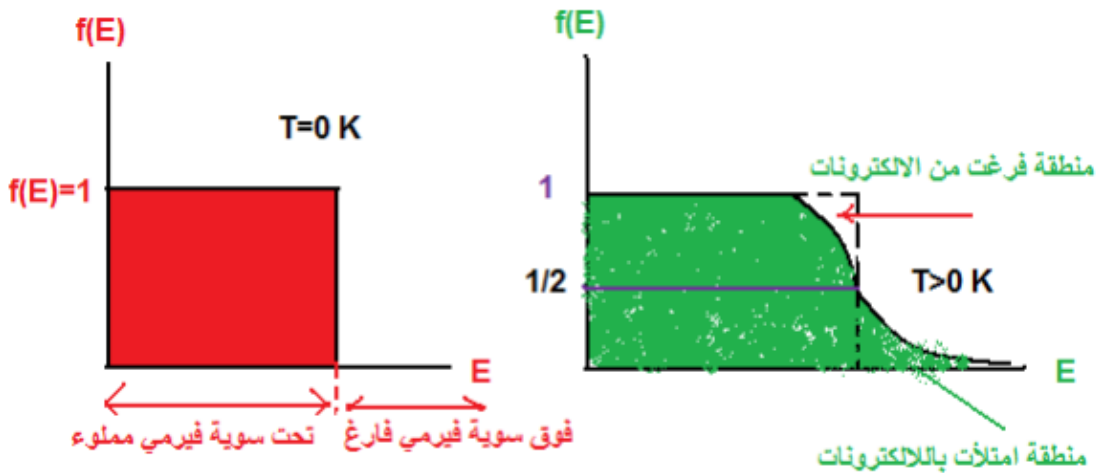


الشكل V - 5: سطح فيرمي الكروي

وعندما ترتفع درجات الحرارة فإن بعض الإلكترونات تنتقل إلى مستويات طاقة أعلى من سوية فيرمي تاركة وراءها مكانا فارغا وهذا ما يؤدي إلى تغير التوزيع، أنظر الشكلين (V - 6) و (V - 7).



الشكل V - 6: شكل تخطيطي لتوزيع الإلكترونات فوق وتحت الصفر المطلق



الشكل V - 7: شكل توزيع فيرمي عند و فوق الصفر المطلق

وبشكل رياضي يمكننا الآن وضع التصور التالي:

$$\text{when } T = 0K \Rightarrow f(E) = 1 \Leftrightarrow E \leq E_F$$

$$T = 0K \Rightarrow f(E) = 0 \Leftrightarrow E \geq E_F$$

$$T = 0K \Rightarrow f(E) = \frac{1}{2} \Leftrightarrow E = E_F \quad 24 - V$$

ولحساب الحرارة النوعية لابد من حساب الطاقة للإلكترونات الحرة كدالة لدرجة الحرارة، ولذلك ننطلق من المعطيات التالية:

من خلال كثافة الحالات الإلكترونية في وحدة الحجم (راجع كثافة الحالات) يمكن إيجاد عدد الإلكترونات الكلي في وحدة الحجم من العلاقة:

$$n = \int_0^{\infty} f(E)g(E)dE \quad 25 - V$$

وعندما  $T = 0$  فإن  $f(E) = 1$ ، فنحصل على طاقة فيرمي  $E_F$  من العلاقة (23) كالتالي:

$$n = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{E_F} E^{\frac{1}{2}} dE$$

$$n = \frac{1}{3\pi^2} \left( \frac{2mE_F}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}$$

$$E_F = (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{2m} \quad 26 - V$$

والطاقة (الكليّة) الحركية الوسطية للإلكترونات (طاقة الوضع تساوي الصفر) عند الدرجة صفر مطلق هي:

$$\langle E_0 \rangle = \frac{1}{n} \int_0^{E_F} E g(E) dE = \frac{3}{5} E_F \quad 27 - V$$

وأخيرا حساب الطاقة الكلية (الحركية) عند أي درجة حرارة من العلاقة العامة التالية:

$$E_{total} = \int_0^{\infty} E f(E)g(E)dE \quad 28 - V$$

والطاقة الوسطية لكل إلكترون:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{n} \int_0^{\infty} g(E) \frac{E dE}{e^{E-E_F+1}} \quad 29 - V$$

ومقدار هذا التكامل:

$$\langle E \rangle = \frac{3}{5} E_F \left[ 1 + \frac{5\pi^2}{12} \left( \frac{KT}{E_F} \right)^2 \right] \quad 30 - V$$

أي أن طاقة الإلكترون تزداد مع ازدياد الحرارة، ومنه الحرارة النوعية الإلكترونية:

$$C_e = \left( \frac{dE}{dT} \right)_v \quad 31 - V$$

بتطبيق العلاقة (31 - V) من أجل  $n$  إلكترون:

$$C_e = n \frac{d\langle E \rangle}{dT} = \frac{\pi^2 n K 2T}{2E_F} = \gamma T \quad 32 - V$$

وهي علاقة تتفق مع النتائج التجريبية بخلاف العلاقة الكلاسيكية التي تكون فيها الحرارة النوعية الإلكترونية مستقلة عن درجة الحرارة، وإذا اعتبرنا أن  $E = K T_F$  حيث  $T_F$  درجة حرارة فيرمي وهي عالية تقدر بعشرة آلاف كلفن تقريبا، فإن العلاقة 32 - V تصبح:

$$C_e = \frac{\pi^2 n K 2T}{2K T_F} = \frac{\pi^2 n K}{2} \frac{T}{T_F} \quad 33 - V$$

وتكون الحرارة النوعية الكلية هي مجموع المساهمات من شبكية وإلكترونية أي:

$$C = C_e = C_l = \gamma T + \alpha T^3 \quad 34 - V$$

وإذا كان المعدن من النوع الحديدي المغنطة (*Ferromagnetic*) فإن الحد  $\beta T^{\frac{3}{2}}$  يضاف إلى المساهمات السابقة، والحد  $\delta T^3$  إذا كان المعدن من النوع الحديدي المغنطة المعاكس (*Antiferromagnetique*)، وفي الدرجات المنخفضة جدا تضاف الحرارة النوعية النووية الخاصة بالنواة ويضاف الحد  $\Delta T^{-2}$ ، وهذه الحدود إذا كان المعدن نقيًا وإلا تصبح الأمور غاية في التعقيد إذا أضفنا موضوع الخلائط .

يتم حساب المعاملات  $\gamma$  و  $\alpha$  من الرسم البياني من خلال العلاقة:

$$\frac{C}{T} = \gamma + \alpha T \quad 35 - V$$

نرسم  $C/T$  مقابل  $T^2$  فنحصل على قيمة الميل  $\alpha$  ونقطة التقاطع مع المحور العمودي تعطينا قيمة  $\gamma$ ، ولا ننسى أن التحليل السابق كان ضمن نطاق غاز فيرمي الحر في المعادن.

### 6-1-V: نظرية سويات الطاقة

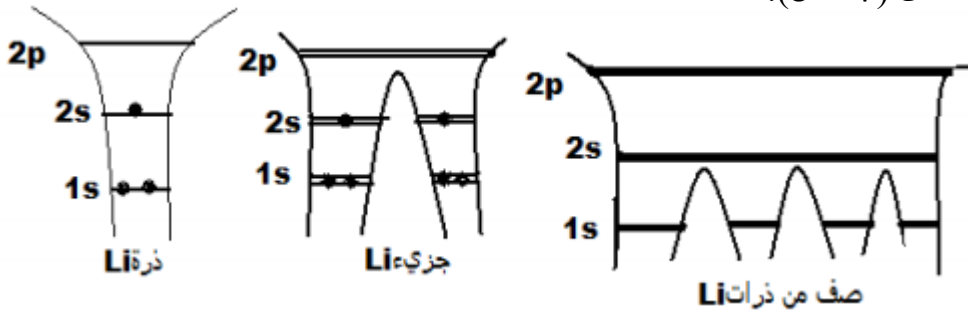
لقد تمت معالجة مستويات الطاقة في الذرة بواسطة معادلة شرودينجر وأعطت نتائج رائعة تتوافق مع الواقع التجريبي، ولكن عند الانتقال إلى بلورة تتألف من العديد من الذرات، فإن معالجة الحالة هذه يتطلب حل عدد من معادلة شرودينجر يساوي عدد ذرات البلورة وهي مهمة صعبة المنال، ولكن المسألة تبسط بالجوء إلى ما يسمى بتقريب الإلكترون الواحد الذي يسمح لنا بالحصول على حلول تقريبية تعطينا تصور مبدئي عن مستويات الطاقة، إن تقريب الإلكترون الواحد وضع ضمن الشروط التالية:

- إهمال التفاعل بين الإلكترون والفونون.
  - إهمال التفاعل بين الإلكترونات بحيث أن كل إلكترون يكون واقع تحت تأثير جهد ثابت ناتج عن النوى الموجبة وتوزع الشحنة الإلكترونية الأخرى والمحصلة هي ذلك الجهد.
- ضمن هذه الشروط يوصف الإلكترون بحل معادلة شرودينجر ومن ثم البحث عن مستويات الطاقة وكيف يتم تطويرها من مستوي مفرد إلى مستوي عريض (شريط).

**7-1-V: أطياف الطاقة:** لماذا تظهر شرائط الطاقة في جسم صلب؟

لنحاول أن ننقل من طيف الذرة إلى طيف ذرتين ثم إلى العديد من طيف الذرات (البلورة)، ففي حال الذرة الواحدة يعطي حل معادلة شرودينجر إلكترون يتحرك في بئر جهد مستويات طاقة منفصلة يرمز لها بالرموز  $1s, 2s, 2p \dots$  وكل مستوي يتحدد بالأعداد الكمية  $(n, l, m, s)$  وكل مستوي يمكن أن ينشطر في حال وجود مجال مغناطيسي خارجي إلى  $2(2l + 1)$  مستوي، ففي حال ذرة تحوي ثلاثة إلكترونات أو أربعة أو ... نجد أن المستوي الأول يستوعب إلكترونين  $1s^2$  والمستوي الثاني يستوعب الإلكترون الثالث  $2s^1$  والرابع  $2s^2$  وهكذا...، أما في حال الجزيء (ذرتين مثلاً) هنا الإلكترون يجد نفسه في بئر جهد مزدوج وطيف الطاقة الجديد يتشكل من مجموعة من المستويات المزدوجة المنفصلة، بحيث أن كل المستويات الذرية ينشطر كل منها إلى مستويين أو أن كل ذرة تقدم مستويات طاقتها لتشكل المستويات الجزيئية، وفي حال ثلاثة ذرات فإن المستوي الذري يصبح ثلاثة مستويات منفصلة قريبة جداً من بعضها البعض، وهكذا نجد أنفسنا أمام عدة مستويات لها عرض يتناسب مع عدد المستويات الطاقية، نسمي هذا العرض بشريط الطاقة (Bande Energy).

أي أنه كلما انضمت ذرة تضاف سوية طاقة مزدوجة لكل سوية من السويات  $1s, 2s, 2p \dots$  ففي حال  $N$  ذرة فإن كل سوية طاقة ذرية تنشطر إلى  $N$  سوية فرعية متقاربة لدرجة أنه يمكن اعتبارها مستمرة وتشكل الشريط الطاقى بدلاً من المستوي الطاقى في الذرة المعزولة وأن شريط الطاقة سيحوي سوية طاقة كل سوية طاقة في هذا الشريط جاهزة لاستيعاب إلكترون واحد حسب مبدأ باولي في الاستيعاب الإلكتروني، الشكل (8 - V).

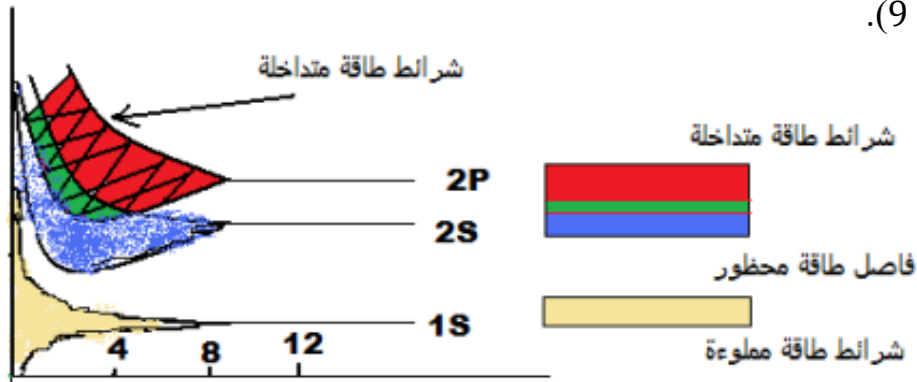


الشكل 8 - V : مستويات الطاقة لعنصر الليثيوم

إن أكبر أثر للبلورة على الإلكترونات يكون على الإلكترونات التكافؤ وتكون شرائط الطاقة لهذه الإلكترونات أعرض الشرائط، وذلك بعكس الإلكترونات الداخلية التي لا تتأثر كثيراً بوجود الذرات المجاورة وتبقى شرائط طاقتها ضيقة، ومن المهم جداً أن نلاحظ أن شرائط الطاقة هذه هي الشرائط المسموحة لتواجد الإلكترونات فيها أما الفاصل بين شريطين فإنه يمثل مجالات أو فواصل ممنوع على

الإلكترونات التواجد بها، وتسمى بالفواصل الممنوعة (*Bandes interdite*) أو فواصل الطاقة (*Energie de Gap*).

وهكذا فإن طيف الطاقة في الأجسام الصلبة يتألف من مجموعة من شرائط الطاقة المسموح للإلكترونات التواجد بها، تفصل بينهما فواصل طاقة لا يمكن أن تشغلها الإلكترونات تسمى فواصل الطاقة إن مقدار الانشطار يعتمد على المسافات بين نوى الذرات، حيث كلما كان الاقتراب كبيرا كان الانشطار شديدا ويكون التأثير أكبر على الإلكترونات الخارجية منه على الداخلية وهذا بسبب شدة ارتباط الإلكترونات الداخلية، أما الخارجية فيمكن أن تتداخل الشرائط مع بعضها البعض لتشكل شريط واحد، الشكل (V – 9).

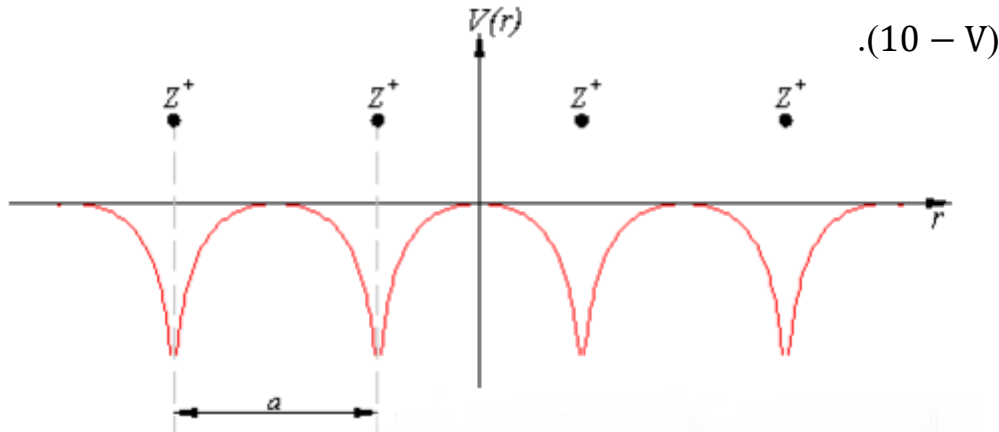


الشكل V – 9: تداخل مستويات الطاقة مع اقتراب الذرات

### 8-1-V: دالة بلوخ:

لمعالجة مسألة شرائط الطاقة لابد من العودة إلى معادلة شرودينجر بوجود طاقة جهد  $U(r)$  دورية في بلورة مثالية تنجم عن محصلة جهدين:

- جهدا ساكنا ينتج عن صفوف الأيونات ( $Z^+$ ) الموجبة المرتبة بشكل مثالي.
- جهد ناجم عن كل الإلكترونات الخارجية الأخرى (الإلكترونات التوصيل)، ويعتبر بلوخ أن كثافة الشحنة الوسطية لتلك الإلكترونات ثابتة وهي نفسها في كل خلية من خلايا البلورة، الشكل



الشكل V – 10: وصف بلوخ لسلوك الإلكترون في البلورة

وفقا لما سبق يعتبر الجهد دوري، ويتم حل معادلة شرودينجر لجسيم واقع في بئر جهد ذي ارتفاع محدود ومنه يمكن أن نكتب معادلة شرودينجر بعد الأخذ بالحسبان دورية الجهد وفقا لما يلي:

$$U(r) = U(r + T)$$

$$H \Psi = E \Psi$$

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} + U(r) \right) \Psi(r) = E \Psi(r)$$

$$\nabla^2 \Psi(r) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(r)) \Psi(r) = 0 \quad 36 - V$$

وكما نعلم من ميكانيكا الكم فإن المعادلة  $36 - V$  تخضع لحالتين، الأولى يكون  $E > U$  وتشمل في حالتنا هذه الإلكترونات الحرة الموجودة في الشريط الخارجي (شريط التوصيل في المعادن)، والثانية يكون  $E < U$  وتشمل شرائط الطاقة الداخلية والتي تخضع لنظرية النفوق (*Tunneling*) (من الضرورة مراجعة ميكانيكا الكم) ويهنا هنا الحالة الأولى، وبإجراء بعض إعادة الترتيب للمعادلة  $36 - V$  بعد التذكر أننا في حالة تقريب الإلكترون الواحد نجد:

$$\nabla^2 \Psi(r) + \alpha^2 \Psi(r) = 0 \quad 37 - V$$

$$\alpha^2 = \frac{2m(E-U)}{\hbar^2} = \frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{2mU}{\hbar^2} = \alpha^2 - \beta^2$$

$$\alpha = \sqrt{\alpha^2 - \beta^2}$$

المعادلة  $37 - V$  معادلة تفاضلية من المرتبة الثانية تقبل حلا جيبيا من الشكل:

$$\Psi(r) = Ae^{i\alpha r} = Ae^{i\sqrt{\alpha^2 - \beta^2} \cdot r} = Ae^{i\sqrt{k^2 - \beta^2} \cdot r} \quad 38 - V$$

$$\beta = 0 \Rightarrow \Psi(r) = Ae^{i\alpha \cdot r} = Ae^{ik \cdot r}$$

والدالة  $38 - V$  تختلف عن دالة الإلكترون الحر  $\beta = 0 \rightarrow 0 = \beta$ ، وبالتالي فإن الدالة  $\Psi(r)$  الجديدة فيها  $\beta \neq 0 \rightarrow 0 \neq \beta$ ، والدالة (4) بهذه الحالة يمكن كتابتها كجاء لدالتين كما يلي:

$$\Psi_k(r) = u_k(r) \cdot e^{ikr} \quad 39 - V$$

وهذا ما تنص عليه نظرية بلوخ صراحة بأن الدالة الموجية  $38 - V$  يمكن كتابتها كجاء دالتين، دالة الموجة ودالة أخرى دورية تخص دورية الجهد  $U(r)$  ولها الرمز  $u_k(r)$ ، حيث  $k$  متجهة الموجة المرتبطة بكمية حركة الجسيم:

$$\vec{P} = \hbar \vec{k} \quad 40 - V$$

للدالة  $39 - V$  المميزات التالية:

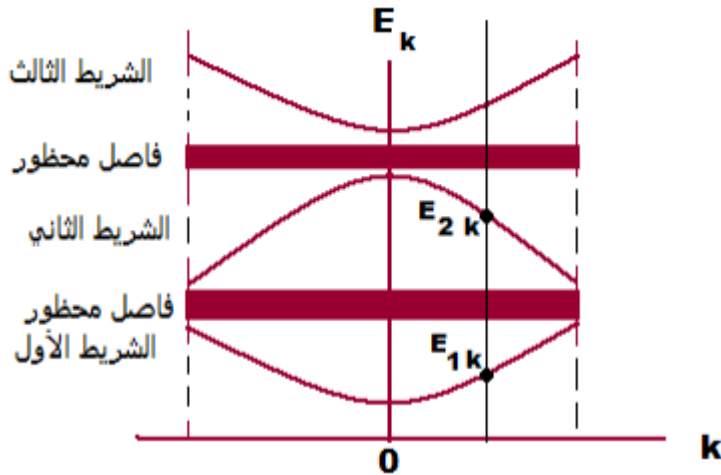
- لها شكل الموجة الجارية (Onde progressive) لأنها تحوي دالة الجسيم الحر  $e^{ikr}$  والتي تقضي بانتشار الجسيم في البلورة كجسيم حر، أما أثر الدالة  $U_k(r)$  فهو يكيف هذه الموجة بحيث أن سعتها تتراوح دوريا من خلية لأخرى.
  - بما أن البلورة مثالية فإن الدالة تنتشر في البلورة كلها ولا تتموضع حول أية ذرة أو عقدة من عقد الشبكة البلوري، بمعنى آخر الإلكترون يخص البلورة كلها.
- وصف إلكترونات دالة بلوخ يتصف بصفات جديدة مختلفة عن وصف الإلكترونات الحرة، وهذا ينجم من افتراض الجهد الدوري الناجم عن التأثير المتبادل بين الإلكترونات والشبكة.

### V-1-9: شروط الطاقة وفق تصور بلوخ

لإيجاد طيف الطاقة للإلكترون نعوض دالة بلوخ  $V - 39$  في معادلة شرودينجر (2) وبعد إجراء العمليات الرياضية المناسبة من تفاضل للدالة واختزال العوامل المشتركة، نحصل على المعادلة التفاضلية التالية:

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2m} (\nabla + i_k)^2 + U(r) \right] u_k(r) = E_k u_k(r) \quad 41 - V$$

وحلول هذه المعادلة  $V - 41$  يعطينا قيم الطاقة من أجل كل قيمة للمقدار  $k$ ، والطاقة مكممة وفقا للشروط الحدية، ولن نخوض في التفاصيل الرياضية ولكن الشكل التالي يعبر عن مكنون المعالجة الرياضية وهو يبين العلاقة بين الطاقة والمتجهة  $k$ ، يظهر الشكل ( $V - 11$ ) شروط الطاقة وتفصل بينها الشروط المحظورة وتوزع هذه الشروط يعطي نتائج هامة خصوصا في أشباه الموصلات .

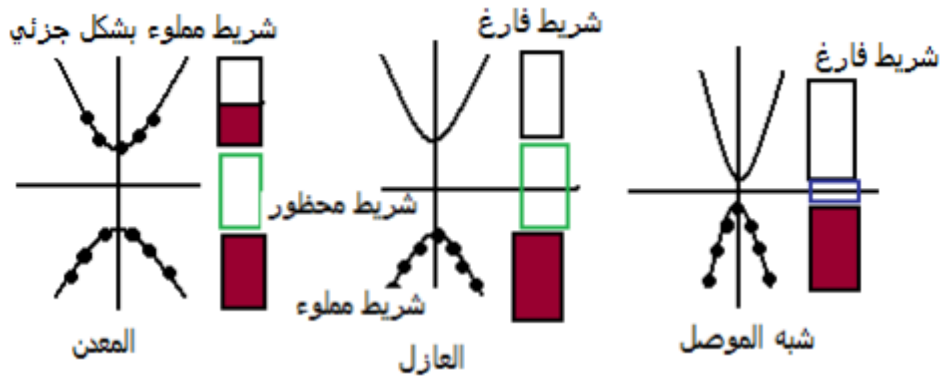


الشكل V - 11 : شروط الطاقة وفق التصور الجديد لبلوخ

لاحظ على الشكل أن بعض النقاط لها نفس متجهة الموجة ولكنها مختلفة الطاقة والعكس صحيح والسؤال أين يحصل شرط براغ في مثل هذه الظروف؟ وأين هي مناطق بريلوان التي أعطيناها جزءا كبيرا.

### 10-1-V: تصنيف المواد الصلبة وفقا لنظرية الشرائط

عرض الشرائط يكون مختلف من فلز لآخر، ومن الممكن لبعض الشرائط أن تتداخل فيما بينها، فالإلكترونات تبدأ بملء الشرائط السفلى حتى تصل إلى الشريط النهائي الذي يحدد تماما طبيعة الجسم الصلب فمن الممكن أن يكون الشريط مملوء تماما أو نصف مملوء أو مملوء بشكل جزئي، فالمعدن بعض شرائطه مملوءة جزئيا في حين أن العازل شرائطه مملوءة تماما وبالتالي لا يستطيع الإلكترون الحركة بحرية، ففي الصوديوم الشريط  $3s$  نصف مملوء وهو يتمتع بموصلية كهربائية عالية لأن الإلكترون عندما يكتسب طاقة يستطيع الحركة في الشريط نصف الفارغ بحرية على عكس المواد العازلة ومنها الماس. أما أشباه الموصلات فهي مواد فيها الشريط العلوي مملوء تماما ولكن الشريط المحظور ضيق إلى حد ما بحيث أن أي طاقة حرارية تستطيع أن تنقل بعض الإلكترونات إلى الشريط المسموح الفارغ فتصبح عندها المادة موصلة يسمى ذلك الشريط بشريط التوصيل (*Bande de Conduction*) لأن شبه الموصل يتحول من عازل إلى موصل، الشكل (V – 12).



الشكل V – 12: تصنيف الأجسام الصلبة وفقا لشرائط الطاقة

### 2-V: أشباه النواقل

#### 1-2-V: مقدمة

تعتمد الخواص الفيزيائية للبلورات على المخططات لطاقة إلكتروناتها، فدرجة امتلاء أعلى عصابة طاقيا (المسماة شرائط النقل: ش.ن) و احتمالية تراكبها مع العصابة الأدنى منها طاقيا (المسماة عصابة التكافؤ: ع.ت) تحدد كون البلورة معدنية، شبه معدنية، شبه ناقلة، وعازلة، فإذا كانت عصابة النقل في درجة الصفر المطلق فارغة تماما من الإلكترونات وكانت عصابة التكافؤ ممتلئة تماما كانت البلورة

عازلة، وتستمر هذه الخاصية في المواد العازلة حتى عند رفع درجة حرارتها، وذلك لأن الطاقة الحرارية  $k_B T$  غير كافية لنقل الإلكترون من ع.ت إلى ش.ن وجعله حراً، وهذا راجع إلى كبر فاصل الطاقة  $E_g$  (الفرق بين طاقة قعر ش.ن وقمة ع.ت) ولكن بسبب الصغر النسبي للفاصل الطاقي  $E_g \sim 2 \div 3 \text{ eV}$  في أشباه النواقل - تنهيج حرارياً بعض الإلكترونات من ع.ت إلى ش.ن الفارغة باحتمال يتناسب مع  $\exp(-E_g/2k_B T)$ ، وهذا يؤدي إلى حصول بعض التوصيل الكهربائي الناتج عن إلكترونات النقل (ش.ن) وثقوب (ع.ت) الحرة، واحتمال الانتقال (وبالتالي التوصيلية الكهربائية) يزداد بزيادة درجة الحرارة -عكس ما هو عليه في المعادن-.

مثال: للعوازل تكون أكبر من 3 eV فمثلاً للماس النقي 7 eV، بينما تكون بحدود 1 eV أو أقل لأشباه النواقل فمثلاً للجرمانيوم 0,75 eV وللسيلكون 1,1 eV. ومركبات أشباه النواقل متكونة من عناصر الزمرتين: III و V للجدول الدوري مثل:  $In Sb(0,16 \text{ eV})$ ،  $Ga Sb(0,69 \text{ eV})$ ،  $GaP(2,2 \text{ eV})$ ،  $In As(0,35 \text{ eV})$ ،  $GaAs(1,4 \text{ eV})$   $Al Sb(1,5 \text{ eV})$ ... إلخ ( $A^{III} B^V$ )، وهي تستعمل بكثرة في التقنية الحالية، وتوجد مركبات عضوية وكذلك بعض أكاسيد المعادن لها سلوك أشباه النواقل.

إن أسلوب التوصيل المذكور أعلاه ينطبق على أشباه النواقل النقية الخالية من الشوائب والعيوب البلورية، ويسمى عندئذ بالتوصيل الذاتي، يؤدي إلى ظهور مستويات طاقة إضافية مسموحة الانشغال وموجودة ضمن الفاصل الطاقي  $E_g$ ، وهذه المستويات يمكن أن تشغل بالإلكترونات المثارة من عصابة التكافؤ، كما يمكن لإلكترونات مستويات العيوب والشوائب أن تنتقل بفعل الإثارة الحرارية إلى ش.ن وتساهم في التوصيل، لذلك فوجود الشوائب والعيوب يغير من الصورة العامة لخاصية نقل شبه الناقل المشوب:

أ/النقل الذاتي: ويحدث بدرجات الحرارة المرتفعة اللازمة لنقل الإلكترونات من ع.ت إلى ش.ن (وهذه الإلكترونات تسمى بالحاملات الذاتية *Intrinsic Carriers*)، وتركيز الحاملات الذاتية في درجات الحرارة المرتفعة أكبر بكثير من تركيز الحاملات الناشئة عن الشوائب، واحتمالية الإثارة الذاتية خلال الفاصلة  $E_g$  تتناسب مع الحد  $\exp\left(\frac{-E_g}{2K_B T}\right)$  : فإذا كانت  $E_g = 4 \text{ eV}$  بدرجة حرارة الغرفة ( $K_B T = 0,025 \text{ eV}$ ) فإن جزء الإلكترونات المثارة يساوي تقريباً  $10^{-35} \simeq e^{-80}$  أي لا توجد إلكترونات مثارة إلى ش.ن أما إذا كانت  $E_g = 0,2 \text{ eV}$  فإن جزء الإلكترونات المثارة يساوي  $10^{-2} \simeq e^{-5}$  لذلك تلاحظ التوصيلية الكهربائية عند درجة حرارة الغرفة، وعدد الحاملات الذاتية (الإلكترونات في ش.ن والثقوب في ع.ت)، المتناسب أسياً مع  $(-1/T)$ ، تزداد بزيادة  $T$ .

**ب/النقل الشوائبي- اللاذاتي (Extrinsic)**

بدرجات الحرارة الأخفض من المذكورة في (أ) تقل وتختفي أهمية الحاملات الذاتية، والتوصيل في شبه الناقل الذاتي يتم عن طريق الحاملات الناشئة عن الشوائب الموجودة دائما في العينة. وبالمصاحبة مع عملية الإثارة الحرارية للإلكترونات من ع.ت إلى ع.ن توجد عملية معاكسة تسمى الإتحاد (*Recombination*) والتي فيها تنتقل الإلكترونات من ع.ن إلى ع.ت لتلغي أو تتحد مع الثقوب الحرة، وهذا يخفض من الناقلية.

واحتمالية الإتحاد تتناسب مع عدد الإلكترونات الحرة في ع.ن ومع الثقوب الحرة في ع.ت المتساويتان في حالة النقل الذاتي، ولكن توجد في درجة الحرارة  $T$  بين العمليتين أعلاه (الإثارة والإتحاد) حالة توازن للحصول على تركيز معين لحاملات التيار.

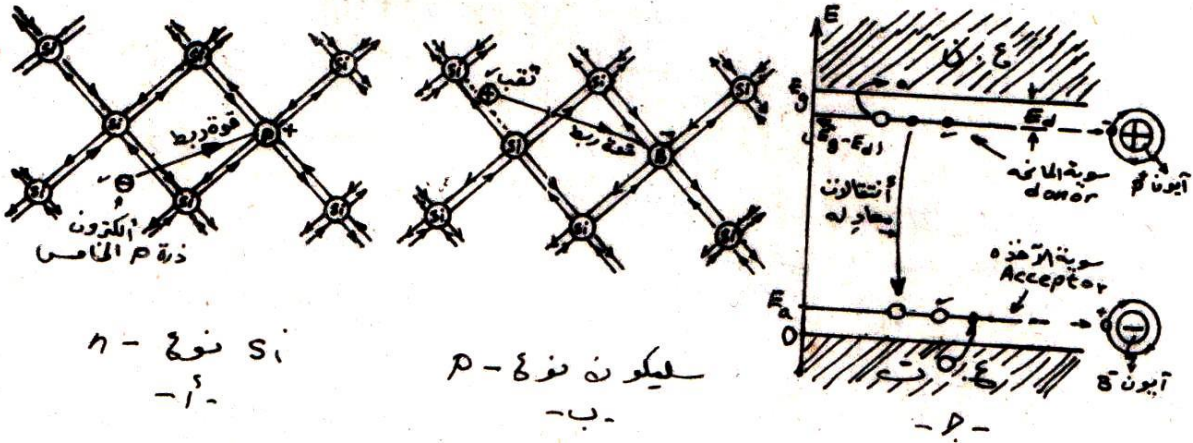
**V-2-2: أشباه النواقل المشوبة أو اللاذاتية**

لغرض الحصول على خواص كهربائية تختلف كثيرا عما هي عليه في شبه الناقل النقي، يطعم (*doping*) بكمية قليلة ومتحكم بها من الشوائب المناسبة، فمثلا عند تطعيم السليكون النقي بالبورون ( $B$ ) بنسبة ذرة إلى  $10^{15}$  ذرة سليكون تزداد التوصيلية بدرجة حرارة الغرفة ألف مرة، وعملية التطعيم هذه مفيدة جدا في تقنية أشباه النواقل.

وعملية التطعيم تعني كهربائيا الإخلال بعلاقة تركيز الحاملات الموجبة والسالبة (يتساوى التركيزان في شبه الناقل الذاتي) بحيث يكون تركيز الإلكترونات في ع.ن أكبر من تركيز الثقوب في ع.ت أو العكس:

نقوم بشرح آلية تطعيم السليكون النقي بشوائب خماسية التكافؤ، الزمرة V مثل الزرنيخ  $As$ ، والفسفور  $P$  والانتيمون  $Sb$ ، فمن المعلوم أن الكثرونات كل ذرة من ذرات السليكون في الحالة الصلبة (وعددها أربعة) مرتبطة مع البلورة، ضمن أواصر التكافؤ وتحتاج إلى  $E_g = 1,1ev$  في الظروف الاعتيادية لكي تساهم في التوصيل، وهذه الطاقة (طاقة الربط) كبيرة ولا تجهزها درجة حرارة الغرفة، وبتطعيم ذرة الفسفور في شبكة السليكون الماسية فإنها سترتبط بالشبكة بأربعة روابط تساهمية (تتحقق بأربعة الكثرونات من ذرة الفسفور) مع ذرات الجوار الأقرب الأربعة.

أما إلكترون ذرة الفسفور الخامس فلا يستطيع الدخول في الروابط المشبعة، ويبقى مرتبطا بشكل ضعيف مع ذرته التي تعتبر بدونه أيونا موجبا، كما في الشكل (الشكل V - 12 أ).



الشكل V - 12

وهذا الارتباط ضعيف جدا بسبب عزل الوسط، معنى هذا أن طاقة تأينه أو فصله عن ذرته  $P$  ونقله حرا إلى ع.ن قليلة جدا (بحدود  $E_d = 0,1ev$ )، لذلك فإن سوية طاقة الذرة الشائبة  $P$  موجودة في الفاصل الطاقى قريبة جدا من قعر ع.ن كما في الشكل (V - 12 ج)، وتكون سويات الشوائب  $P$  مشغولة بالإلكترونات عند  $0^{\circ}k$  حيث كل الذرات  $P$  غير متأينة، و برفع درجة الحرارة  $T > 0^{\circ}k$  (ولكنها تبقى منخفضة  $T \sim 77^{\circ}k$ ) تتأين الذرات  $P$  أي أن إلكترونها الخامس سينفصل عنها ويصبح حر في ع.ن والطاقة المجهزة له ( $\sim 0,1ev$ ) لا تكفي لإثارة الإلكترونات الذاتية من ع.ن إلى ع.ن لذلك يكون تركيز الإلكترونات الناتجة عن الشوائب في ع.ن أكبر بكثير من الإلكترونات الذاتية في درجات الحرارة المنخفضة، ونقل شبه الناقل المشوب يتحدد إذن بحاملات الشوائب (الإلكترونات) ويسمى بالنقل الشائبي مثل هذه الشوائب تسمى مانحة ( $donors$ )، وبما أن إلكترونات الشوائب تتواجد في ع.ن بدون ثقب مقابلة لها في ع.ن لذلك يتحدد النقل أساسا في العينة المشوبة بالإلكترونات، ويدعى شبه الناقل المطعم بعناصر الزمرة V بأنه من النوع:  $n$  (لأنه ناقلات التيار فيه أساسا هي الإلكترونات السالبة).

تقدير طاقة ربط الإلكترون الخامس مع أيونة  $P^+$ ، أو تقدير  $E_d$ : نستعين بنموذج "بور" ونتصور أن الإلكترون الخامس يدور حول الأيون  $P^+$  كنواة تؤثر عليه بكمون كولومي ضعيف بفعل الحجب ( $screening$ ) الذي تسببه مادة البلورة التي تعتبر وسطا (يقع فيه الإلكترون والأيون  $P^+$ ) ثابت عزاء  $E_r$ .

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_r r} : (\epsilon_{Si} = 11,7, \epsilon_{Ge} = 15,8)$$

نطبق علاقة طاقة ربط إلكترون ذرة الهيدروجين  $m_e/2(4\pi \epsilon_0 \hbar) = -13,6ev$  : بعد جعلها ملائمة للوضع الحالي بإبدال  $e^2/\epsilon_r$  بـ  $e^2$  و  $m_e$  بـ  $m$  طاقة تأين الذرة المانحة تساوي:

$$E_d = \frac{1}{\epsilon_r^2} \left( \frac{m_e^*}{m_e} \right) \left( \frac{e^4 m_e}{2(4\pi \epsilon_0 \hbar)^2} \right) = \frac{13,6}{\epsilon_r^2} \frac{m_e^*}{m_e} eV \quad 42 - V$$

نصف قطر مدار إلكترون ذرة الهيدروجين يساوي:  $4\pi \epsilon_0 \hbar^2 / m_e e^2 = 0,53A^\circ$  أما نصف قطر الإلكترون الخامس للذرة المانحة فيساوي:

$$a_d = \epsilon_r \left( \frac{m_e}{m_e^*} \right) \frac{4\pi \epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = 0,53 \epsilon_r \left( \frac{m_e}{m_e^*} \right) A^\circ \quad 43 - V$$

ولو اعتبرنا  $m_e^* = 0,1 m_e$  في المعدل (المعدل متأتي بسبب اختلاف مناحي الكتلة الفعالة لإلكترون التوصيل) لإلكترونات الجرمانيوم و  $m_e^* = 0,2 m_e$  للسليكون نجد  $E_d = 0,006 eV$  بالنسبة للجرمانيوم و  $0,02 eV$  بالنسبة للسليكون.

وبنفس الآلية تفهم عملية تطعيم السليكون أو الجرمانيوم النقي بشوائب ثلاثية التكافؤ (الزمرة III) والتي تسمى بالشوائب الآخذة، مثل البورون B والألمنيوم Al والكاليوم Ga والأنديوم In، والذرة الشائبة الآخذة لكي تدخل في شبكة  $S_i$  أو محل ذرة سليكون تحتاج إلى إلكترون واحد لكي يصبح لديها أربعة إلكترونات خارجية فتدخل في شبكة  $S_i$  أو  $G_e$  بأربعة أو اصر تساهمية مع الجوار الأقرب الأربعة، وهذا الإلكترون يستعار من رابطة أية ذرة سليكون مجاورة فيتولد ثقب في الرابطة التساهمية وتتحول ذرة B إلى أيون  $B^-$  (الشكل V - 12 ب)، ولكن هذا الثقب يكون مرتبطا مع  $B^-$  مشكلا مجموعة تحسب طاقتها كالسابق طبقا لنموذج ذرة الهيدروجين، فنستنتج أن طاقة الثقب "الدائر" حول  $B^-$  بحدود  $E_a \sim 10^{-2} eV$ .

وبارتفاع درجة الحرارة فوق الصفر  $T > 0^\circ K$  تتأين مجموعة ( $B^-$  وثقبها) أي يتحرر الثقب (ويصب ناقلا للكهرباء) ويبقى أيون  $B^-$ ، ومن وجهة نظر المخطط الطاقى: أن للمجموعة ( $B^-$  والثقب) سوي طاقي  $E_a$  يقع قريبا جدا فوق قمة ع.ت في الفاصل الطاقى كما في الشكل (V - 12 ج) وهو مملوء بالثقوب عند  $0^\circ K$ ، ويرفع درجة الحرارة  $T > 0^\circ K$  يتهيج إلكترون من ع.ت إلى السوي  $E_a$  فيتحرر ثقب ناقل في ع.ت أو بكلام آخر ينطلق الثقب من السوي  $E_a$  نحو ع.ت ليصبح حرا وهي تعتبر عملية تأين للذرة الشائبة: انكشاف شحنتها السالبة بعد تحرر الثقب منها، وتسمى هذه الشوائب الآخذة (Acceptor) بسبب أخذها لإلكترون أصرة السليكون، وبإدخال عدد كبير نسبيا من الذرات الآخذة نستطيع إيجاد تركيز معين من الثقوب الحرة في ع.ت ويصبح شبه الناقل من النوع: P لأن ناقلات التيار أساسا من الثقوب الحرة في ع.ت.

### 3-2-V: تركيز حاملات التيار في شبه الناقل الذاتي عند التوازن الحراري:

عند رفع درجة حرارة شبه الناقل الذاتي تثار الإلكترونات من قمة ع.ت إلى قعر ع.ن واحتمالية الإثارة أو احتمال أشغال الإلكترون لسوي طاقي معين (في ع.ن) تحدد بدالة فيرمي  $f_e(E) =$

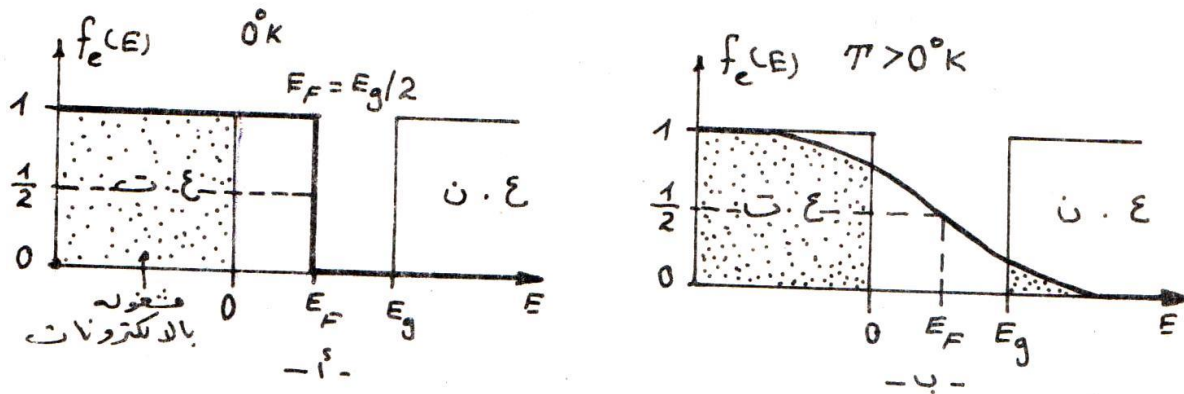
السوي  $E$  بالثقب يساوي:  $[e^{\beta(E-E_F)} + 1]^{-1}$  ، واحتمال كون السوي  $E$  (في ع.ت) غير مشغولا بالإلكترون وهو احتمال أشغال

$$f_h(E) = 1 - f_e(E) = [1 + e^{-\beta(E-E_F)}]^{-1} \quad 44 - V$$

والاحتمالية أعلاه تحدد بالفرق  $(E - E_F)$  لذلك لحسابها لا نحتاج إلى القيم المطلقة لـ  $(E$  و  $E_F)$  عندئذ يكون اختيار سوي الطاقة الصفرية اختياري وهو يؤخذ اعتبارا من قمة ع.ت وتركيز الإلكترونات الحرة  $(n_i)$  في شبه الناقل الذاتي أو التركيز الذاتي يساوي:

$$n_i = \int_{E_g}^{\infty} \left( \frac{D_e C E}{V} \right) f_e(E) dE \quad 45 - V$$

حيث تبدأ ع.ن من الطاقة  $E_g$  (كما في الشكل (13 - V))، ولقد وضعنا الحد العلوي للتكامل  $\infty$  بدلا من قيمة معينة  $E_1$  تمثل سقف ع.ن، وذلك لأن احتمال أشغال الإلكترونات للسويات العليا ع.ن معدوما تقريبا فالإلكترونات المثارة تشغل السويات السفلى عند قعر ع.ن والكمية  $\left( \frac{D_e C E}{V} \right)$  كثافة الحالات الإلكترونية (لوحة الحجم) عند منطقة قعر ع.ن.



الشكل (13 - V)

دالة فيرمي ديراك: وهي الدالة  $f_e(E)$  ، الطاقة  $E_F$  تسمى طاقة أو سوي فيرمي وهي للمعادن تمثل أعلى سوي طاقي مشغول عند  $0^\circ k$  ، أما بالنسبة لأشباه النواقل فتتمثل مقدار طاقة الحالة التي عندها تبلغ احتمالية الانشغال 0,5 عند  $0^\circ k$  كما في الشكل (13 - V) حيث يتبين وقوع سوي فيرمي في منتصف الفاصل الطاقي: عند  $0^\circ k$  تكون ع.ت ممتلئة تماما و ع.ن فارغة تماما والدالة  $f_e(E)$  قفزية من 1 إلى الصفر خلال الفاصل الطاقي، حيث نختار موقع القفزة في منتصف الفاصل بحكم التناظر (وسنثبت ذلك) و برفع درجة الحرارة كما في الشكل ((13 - V) ب) تتكون ثقب في قمة ع.ت بتركيز مساوي لتركيز الإلكترونات المثارة في ع.ن عندئذ يبقى  $E_F$  عند  $E_g/2$  ، وهكذا يكون صحيحا فقط عندما تتماثل

$D(E)$  عند قمة ع.ت وعند قعر ع.ن، فإذا اختلف هذا الشرط أعتمد موقع  $E_F$  على  $T$  ولكن في أغلب الحالات تؤخذ  $E_F$  وسط الفاصل الطاقى غير معتمدا على  $T$ .

الشكل (( 13 - V)) يبين أن الحالات المشغولة تقع عند الذنب البولتزمانى لتوزيع فيرمي-ديراك أي يمكن تطبيق توزيع ماكسويل بولتزمان على الإلكترونات في ع.ن وهذا يعني:

$$(E - E_F) \gg K_B T$$

$$f_e(E) = e^{\beta(E_F - E)} \quad 46 - V$$

نعتبر التوزيع الطاقى في قعر ع.ن بالصورة:

$$E_K = E_g + \frac{\hbar^2 K^2}{2m_e^*} \quad 47 - V$$

حيث  $m_e^*$  الكتلة الفعالة للإلكترون، عندئذ نستعين بالمعادلة التالية:

$$D_e(E)/V = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E - E_g)^{1/2} \quad 48 - V$$

وبالتعويض في 45 - V نجد:

$$n_i = 2(2\pi 2m_e^* K_B T)^{3/2} h^{-3} e^{-\beta(E_g - E_F)} \equiv N_c e^{-\beta(E_g - E_F)} \quad 49 - V$$

واعتماد  $n_i$  على  $T$  يتم أساسا من خلال الحد الأسى، وقد استخدمنا التكامل:

$$\int_0^\infty \sqrt{x} e^{-\beta x} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \beta^{3/2}$$

وبعد التبديل المناسب للمتحول، ولغرض حساب  $n_i$  تجب معرفة  $E_F$  المجهولة، لذلك نشق معادلة أخرى في حساب تركيز الثقوب  $P_i$ :

دالة توزيع الثقوب: يخضع توزيع الثقوب في قمة ع.ت طبقا للعلاقة 44 - V وبفرض أن

$(E - E_F) \gg K_B T$  (أي أن  $\frac{1}{2} E_g \gg K_B T$  في درجات الحرارة الاعتيادية)، نجد:

$$f_h(E) \simeq e^{\beta(E - E_F)} \quad 50 - V$$

وعلى اعتبار تصرف الثقوب كجسيمات كتلتها الفعالة  $m_h^*$  ، وبنفس الأسلوب السابق نكتب كثافة الحالات في قمة ع.ت وتركيز الثقوب  $P_i$  :

$$D_h(E)/V = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_h^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (-E)^{1/2} \quad 51 - V$$

$$P_i = \int_{-\infty}^0 (D_h(E)/V) f_h(E) dE = 2(2\pi m_h^* K_B T)^{3/2} h^{-3} e^{-\beta E_F} \equiv P_v e^{-\beta E_F} \quad 52 - V$$

حيث اعتبرت طاقة الثقب سالبة (أخفض من السوي الصفري الموجود عند قمة ع.ت)، وسبب وجود  $(-\infty)$  كسبب وجود  $(\infty)$  في المعادلة  $V - 45$  واعتماد  $P_i$  على  $T$  يتم أساسا من خلال الحد الأسي. نقدر  $n_i$  و  $P_i$  من المعادلتين  $(V - 49)$ :

$$N_c = 2,5 \left(\frac{m_e^*}{m}\right)^{3/2} \left(\frac{T}{300^\circ k}\right)^{3/2} \times 10^{19}; P_v = 2,5 \left(\frac{m_h^*}{m}\right)^{3/2} \left(\frac{T}{300^\circ k}\right)^{3/2} \times 10^{19}/cm^3 \quad 53 - V$$

حيث  $m$  كتلة سكون الإلكترون،  $T$  درجة مطلقة نجعل  $m_e^* = m_h^* = m$  ونستنتج الحد الأقصى لتركيز الحاملات من مرتبة  $10^{19}$  أو  $10^{19}$  حاملة/سم<sup>3</sup>، وهذه النتيجة معقولة لشبه الناقل الغير المنحط. ويمكن حساب المجهول  $F$  من حقيقة كون الثقب تنتج عن الإلكترونات الذاتية  $n_i = P_i$  في شبه الناقل الذاتي:

$$E_F = E_g/2 + (3/4) K_B T \ln m_h^*/m_e^* \quad 54 - V$$

وبما أن  $E_g \gg K_B T$  في الأحوال الاعتيادية، عندئذ يهمل الحد الثاني للمعادلة  $(V - 54)$  مما يجعل سوي فيرمي قريب جدا من منتصف الفاصل الطاقوي (مزاح قليلا عن هذا المنتصف نحو جهة ع.ن) ولا يعتمد على درجة الحرارة، وأخيرا نجد:

$$n_i = P_i = 2(2\pi K_B T)^{3/2} h^{-3} (m_e^* m_h^*)^{3/4} e^{-E_g/2K_B T} \equiv [N_c P_v]^{1/2} e^{-E_g/2K_B T} \quad 55 - V$$

#### 4-2-V: ظاهرة هول

تستخدم ظاهرة هول لتحديد إثارة وتركيز حاملات التيار، وتكون قيمة معامل هول  $e >$  للمعادن  $0, R_H = -1/ne$  (غاز إلكترونات منحط)، أما بالنسبة لشبه الناقل من نوع معين (حيث غاز الحاملات غير منحط) فإن معامل هول تساوي:

$$R_H = -\frac{3\pi}{8} \frac{1}{n e} < 0 \text{ (النوع } n\text{-)} \text{ و } R_H = +\frac{3\pi}{8} \frac{1}{p e} > 0 \text{ (النوع } P\text{-)}$$

وعند وجود النوعين من الحاملات في نفس العينة، فإن:

$$R_H = +\frac{3\pi}{8} \frac{p\mu_h^2 - n\mu_e^2}{(p\mu_h + n|\mu_e|)^2}, \left[ n = p: R_H = \frac{3\pi}{8e} \frac{\mu_h - |\mu_e|}{\mu_h + |\mu_e|} \right]$$

وبقياس  $R_H$  تجريبيا يمكن تحديد تركيز ونوع الحاملات الأساسية (أو الأكثرية Majority) في العينة، وبمعرفة التوصيلية  $\sigma$  يمكن تحديد حركية الحاملات:

$$\mu = \frac{8}{3\pi} R_H \sigma \quad 56 - V$$

**5-2-V: الناقلية الكهروضوئية**

لاحظنا أن امتصاص الفوتونات بطاقة  $h\nu \geq E_g$  (الامتصاص الأساسي) يؤدي إلى توليد ناقلات إضافية (بالإضافة إلى الناقلات المثارة حرارياً) مما يزيد توصيلية الناقل، وهذه الظاهرة تسمى بالناقلية الكهروضوئية.

فإذا كانت شدة الضوء الساقطة على العينة **I** فإن العينة تمتص في وحدة الحجم لوحدة أزواج الحاملات الإضافية (الناجمة عن الإضاءة) المتولدة في وحدة الحجم في وحدة الزمن أو معدل التوليد  $g$  يساوي:  $g = \alpha I \beta / h\nu$  حيث  $\beta$  معامل يبين عدد أزواج الحاملات الحرة المتولدة عند امتصاص فوتون واحد ( $\beta \sim 1$ ) والإضاءة الخارجية تولد حاملات بشكل مستمر ومضطرد، ولكن بسبب عملية الإتحاد (*Recombination*) التي تعني اتحاد الإلكترونات بالثقوب والتي يزداد معدلها بزيادة تركيز الحاملات الإضافية، يستحصل في شبه الناقل على حالة توازن.

(*Steady State*) معينة عندها يتساوى معدلا التوليد والإتحاد، معدل توليد الحاملات الإضافية  $g$

ومعدل الإتحاد  $R = \frac{\Delta n}{\tau_r}$  (حيث  $\Delta n = n - n_0$  الزيادة في عدد الحاملات بسبب الإضاءة،  $\tau_r$  - يدعى

زمن الإتحاد ويمثل عمر الحاملة) وسرعة تغير عدد الحاملات الإضافية  $g - R = \frac{dn}{dt}$  تساوي صفراً عند التوازن:

$$\frac{dn}{dt} = g - \frac{\Delta n}{\tau_r} = 0; \quad \Delta n = g\tau_r = \frac{\alpha I \beta \tau_r}{h\nu} h\nu \quad 57 - V$$

حيث:  $\Delta n = \Delta p$  (ندرس الامتصاص الأساسي)، ولو فرضنا أن  $\sigma_0 = e(n_0\mu_e + p_0\mu_h)$  توصيلية العينة في "العتمة" فإن توصيلية العينة تزداد عند الإضاءة بسبب زيادة عدد الحاملات  $\Delta n, \Delta p$  وتساوي:

$$\sigma = \sigma_0 + e \Delta n (\mu_e + \mu_h); \quad \sigma_{ph} = \Delta \sigma = \frac{e I \alpha \beta \tau_r}{h\nu} \mu_e (1 + b) \quad 58 - V$$

حيث:  $b = \frac{\mu_e}{\mu_h}$  ، ولقد أهملنا في الحسابات أعلاه إمكانية اصطيات النواقل بالمصائد التي إما أن تزيد من معدل الإتحاد أو تحد من حرية الناقلات.

**3-V: العوازل**

**1-3-V: الاستقطاب والاستقطابية**

إن عزم الجزيئ يتناسب مع شدة المجال الكهربائي، أي أن:

$$\mu = \alpha E \quad 59 - V$$

حيث يعرف ثابت التناسب  $\alpha$  بالإستقطابية الجزيئية، فإذا كان عدد الجزيئات في وحدة الحجم (التركيز) هو  $N$ ، وكان  $\mu$  هو عزم كل جزيء فإن الاستقطاب (محصلة عزوم ثنائيات القطب) لوحدة الحجم يكون على الصورة  $P = N\mu$  حيث أن:

$$\vec{P} = N\alpha\vec{E} \quad 60 - V$$

$$\vec{D} = \epsilon_0\vec{E} + \vec{P} \quad 61 - V$$

وبالتعويض عن  $P$  نحصل على

$$D = \epsilon_0 E + N\alpha E \quad 62 - V$$

$$\vec{D} = \epsilon\vec{E} = \epsilon_0\epsilon_r\vec{E} \quad 63 - V$$

أي أن:

$$\epsilon_r = \left(1 + \frac{N\alpha}{\epsilon_0}\right) \quad 64 - V$$

ومن هذه العلاقة، نستنتج:

- إمكانية الربط بين كمية قابلة للقياس  $\epsilon_r$ ، وكمية جزيئية غير قابلة للقياس أو الحساب المباشر وهي الإستقطابية الجزيئية  $\alpha$ .
- في حالة كون  $\alpha = 0$  فإن  $\epsilon_r = 1$  وهي قيمة النفاذية النسبية للفراغ وبالتالي لا يمكن أن يحدث استقطاب بدون وجود وسط عازل.

$$N = \frac{\rho N_A}{M} \quad 65 - V$$

$M$ : الكتلة الجزيئية.

$N_A$ : عدد أفوجادرو.

$\rho$ : كثافة المادة.

$$\epsilon_r = 1 + \left(\frac{\rho N_A}{M\epsilon_0}\right)\alpha \quad 66 - V$$

### 2-3-V: القابلية الكهربائية

مؤشر لمدى إمكانية استقطاب المادة كهربائياً عند تعرضها مجال كهربائي وهي كمية ليست لها وحدة قياس وتمثل رياضياً نسبة الاستقطاب إلى المجال الكهربائي.

$$\vec{P} = \epsilon_0\chi\vec{E} \quad 67 - V$$

بمقارنة هذه المعادلة مع  $\vec{P} = N\alpha\vec{E}$

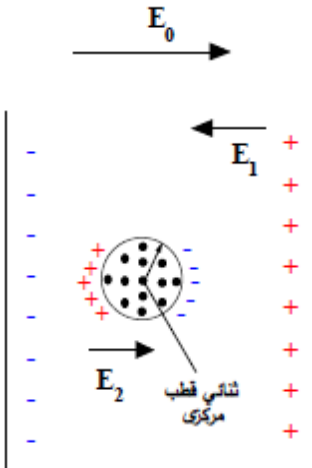
نجد أن القابلية الكهربائية ترتبط مع الاستقطابية على الصورة الآتية:

$$\chi = \frac{N\alpha}{\epsilon_0} \Rightarrow \epsilon_r = 1 + \chi \quad 68 - V$$

درجة قابلية المادة الكهربائية تؤثر على قدرة المادة على تخزين الطاقة ومدى نفاذية المادة.

### 3-3-V: المجال الموضعي:

$$E_{loc} = E_0 + E_1 + E_2 + E_3 \quad 69 - V$$



$E_0$ : المجال الخارجي.

$E_1$ : المجال العائد الى الشحنات الواقعة على السطح الخارجي للمعينة ويسمى مجال إزالة الاستقطاب.

$E_2$ : المجال الناتج عن شحنات الاستقطاب الواقعة على سطح فجوة لورنتز ويسمى مجال لورنتز.

$E_3$ : المجال الناتج عن ثنائيات القطب الأخرى ويسمى مجال ثنائيات القطب.

حيث يكون مجال لورنتز في نفس اتجاه المجال الخارجي ويعرف بالعلاقة:

$$E_2 = \frac{P}{2\epsilon_0} \quad 70 - V$$

أما مجال ثنائيات القطب فيمكن تقديره عن طريق مجموع ثنائيات القطب الأخرى باستخدام المعادلة:

$$E = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{3(P r) r - r^2 P}{r^5} \quad 71 - V$$

تعتمد النتيجة على شكل تركيب البلورة للمعينة، ولكن في حالة البناء التركيبي المكعب نجد أن المجموع يتلاشى، وبالتالي:

$$E_3 = 0$$

وبالتالي فإن المجال الموضعي يصبح:

$$E_{loc} = \left( E + \frac{P}{\epsilon_0} \right) - \frac{P}{\epsilon_0} + \frac{P}{3\epsilon_0} + 0 \quad 72 - V$$

$$E_{loc} = E + \frac{P}{3\epsilon_0} \quad 73 - V$$

حيث:

$$E = E_0 - \frac{P}{\epsilon_0} \quad 74 - V$$

**VI-1-مقدمة:**

إن مصدر العزم المغناطيسي للذرة الحرة ناتج عن ثلاث عوامل:

- 1- وجود سبين للإلكترون.
- 2- وجود اندفاع مداري (*Orbital Momentum*) للإلكترون.
- 3- تغير الاندفاع المداري عند وجود الذرة في حقل مغناطيسي خارجي.

وبسبب هذه العوامل فكل الذرات في الحقيقة مغناطيسية الخواص ولكنها تختلف عن بعضها بطابع مغناطيسيتها، فالعاملان الأول والثاني يجهزان ما يسمى بالمغناطيسية الطردية (البارامغناطيسية)، أما العامل الثالث فهو المسؤول عن المغناطيسية العكسية (الديامغناطيسية)، فمثلا لذرة الهيدروجين إلكترون واحد ( $1s$ ) معدوم العزم المداري لذلك ينشأ العزم المغناطيسي للذرة عن سبين (لف) الإلكترون، مغناطيسية هذه الذرة طردية وينعدم العزم المغناطيسي لذرة الهيليوم الحرة بسبب انعدام العزم المداري  $1s^2$  وانعدام محصلة السبين، ولكن يمكن في ذرة الهيليوم توليد عزم مغناطيسي محتث عند وضعها في حقل مغناطيسي خارجي - مغناطيسية عكسية.

بينما لا تنعدم محصلة العزوم المدارية السبينية للمدارات المملوءة جزئيا (غير مغلقة).

**VI-2-الحقل المغناطيسي في المواد الصلبة:**

تحت تأثير حقل خارجي حثه (*تحريضه*)  $\vec{B}$  وشدته  $\vec{H}$  (حيث  $\vec{B} = \mu_0 \vec{H}$  و  $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \frac{Hz}{m}$  نفوذية الفراغ) يتمغنط الجسم أي يصبح له عزم مغناطيسي، مجموع العزوم المغناطيسية لوحدة حجم الجسم الممغنط تسمى بالمغنة  $\vec{M}$  وهي كمية شعاعية ووحدة قياسها (الأمبير/متر)، وتعرف الحساسية المغناطيسية (*Susceptibility*) لوحدة حجم الجسم بالعلاقة التالية: (في الوحدات الدولية SI)

$$x = \frac{\mu_0 M}{B} = \frac{M}{H} \quad 1 - VI$$

والجسم الممغنط بفعل وجوده في حقل خارجي يولد حقله الخاص به الذي يتجه داخل الجسم المتماثل المناحي أما موازيا أو ضد الحقل الخارجي الممغنط، نرسم للحقل الخاص  $\vec{B}_i$  (لتمييزه عن الحقل الخارجي  $\vec{B}$ )، ومحصلة الحقل داخل المادة الممغنطة  $\vec{B}_{tot}$  تساوي:  $\vec{B}_{tot} = \vec{B} + \vec{B}_i$ ، والتجربة بينت العلاقة التالية للمواد اللاحديدية المغنطة.

$$\vec{B}_i = \mu_0 \vec{M} = x \vec{B}$$

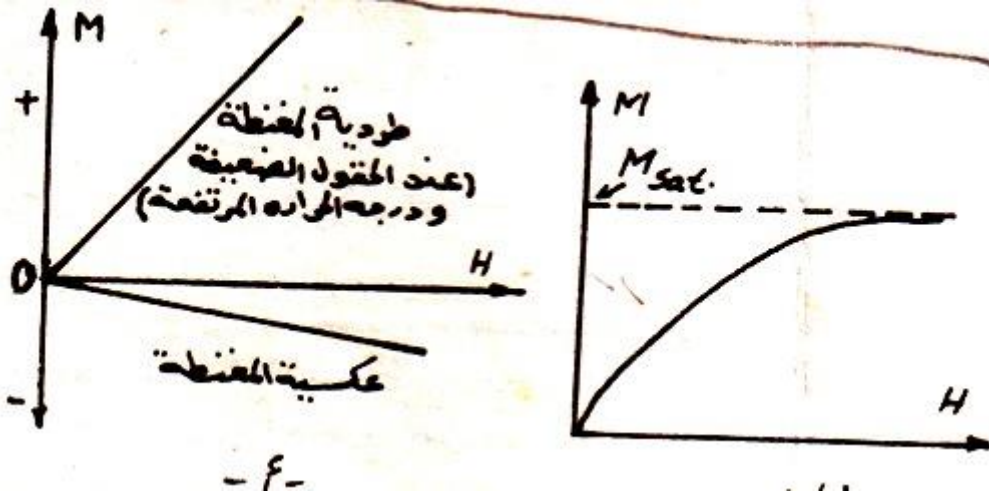
$$\vec{B}_{tot} = (1 + x) \vec{B} = \mu_r \vec{B} \quad 2 - VI \quad \text{إذن:}$$

حيث:  $\mu_r = (1 + \chi)$  تسمى بالنفاذية المغناطيسية (*Permeability*) ويسمى  $\vec{B}_{tot}$  (وهو الحقل داخل المادة  $\vec{B}_{in}$ ) بالحقل العياني (الماكروسكوبي) أو معدل الحقل. التصنيف المغناطيسي للمواد الصلبة: على أساس قيمة وإشارة الحساسية  $\chi$  تصنف المواد مغناطيسيا إلى ثلاثة مجاميع حسب الجدول التالي:

$\chi = \mu_r$  بالوحدات الدولية SI:

المغناطيسية الحديدية	المغناطيسية الطردية	المغناطيسية العكسية
1000 حديد <i>Fe</i>		$0,063 \times 10^{-6}$ هيدروجين $H_2$
150 نيكل <i>Ni</i>		$9,0 \times 10^{-6}$ ماء $H_2O$
240 كوبلت <i>Co</i>	$0,013 \times 10^{-6}$ نيتروجين $N_2$	$10,3 \times 10^{-6}$ نحاس $Cu$
	$1,9 \times 10^{-6}$ أكسجين $O_2$	$180 \times 10^{-6}$ برموت $Bi$
	$3400 \times 10^{-6}$ سائل $O_2$	$3,0 \times 10^{-6}$ سليكون $Si$
	$23 \times 10^{-6}$ المنيوم <i>Al</i>	$12,6 \times 10^{-6}$ ملح الطعام $NaCl$
	$260 \times 10^{-6}$ بلاتين <i>Pt</i>	$15,1 \times 10^{-6}$ كوارتز
	$3600 \times 10^{-6}$ $FeCl_2$	
	$1200 \times 10^{-6}$ $NiSO_4$	

- مواد عكسية المغنطة: وتتميز بكون حساسيتها سالبة ولكنها صغيرة القيمة  $1 \ll |x|$  ولا تعتمد على درجة الحرارة أو على قيمة الحقل الخارجي الممغنط (العلاقة بين  $M$  و  $H$  خطية كما في الشكل (1-أ-))، ومن هذه المواد: الغازات الخاملة وكذلك الغازات التي ليس لذراتها أو جزيئاتها عزوما مغناطيسية، بعض المركبات العضوية التي ليس لجزيئاتها أو جذورها عزوما مغناطيسية، بعض المعادن مثل:  $Hg, Au, Zn \dots$  إلخ في حالتها الصلبة أو السائلة، بعض المركبات مثل هالوجينات الأيونات ذات المغنطة العكسية مثل:  $Li^+, Be^{2+}, Al^{3+} \dots$  إلخ.
- مواد طردية المغنطة: حساسيتها موجبة وصغيرة القيمة ولا تعتمد على الحقل الممغنط عندما يكون قليلا وفي درجات الحرارة العالية كما في الشكل (IV-1-أ-))، أما في الحقول الخارجية القوية وبدرجات الحرارة المنخفضة فإن العلاقة  $\vec{M}(H)$  وبالتالي  $\chi(H)$  تتبع الشكل (IV-1ب)،



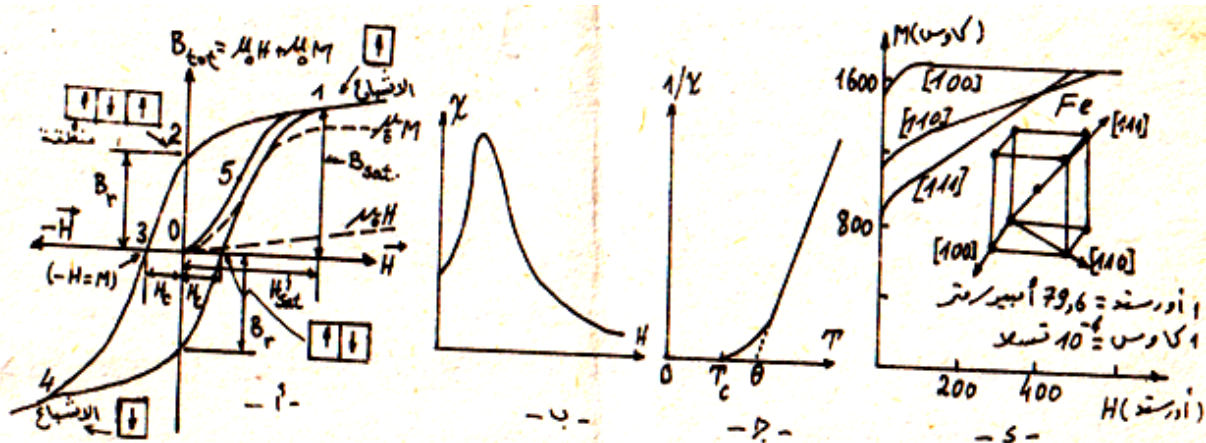
الشكل IV-1-

حيث تزداد المغنطة  $\vec{M}$  لتصل إلى حالة الإشباع  $\vec{M}_{sat}$  وتتجاذب مواد طردية المغنطة بضعف شديد مع الحقل الخارجي الممغنط، ومن هذه المواد: الذرات والأيونات والجزيئات الحرة التي لها عزم مغناطيسي خاص بها، غاز الأوكسجين و  $NO$ ، وتعتمد حساسية المواد الطردية المغنطة على درجة الحرارة طبقاً لقانون كيروري التجريبي:

$$x = C/T \quad , \quad (T - ^\circ K) \quad 3 - VI$$

وثابت كيروري  $C$  يعتمد على طبيعة المادة الممغنطة.

- مواد حديدية المغنطة: حساسيتها موجبة وكبيرة القيمة وتعتمد على الحقل الممغنط وعلى درجة الحرارة  $T$ ، ومن هذه المواد:  $Ni, Co, Fe$  ومركباتها وبعض العناصر الترابية النادرة مثل:  $Er, Dy, Tb, Gd$  ومركباتها، إن هذه المواد تفقد حديدية مغنطتها وتتحول إلى طردية المغنطة عند رفع درجة حرارتها فوق الدرجة  $T_c$  التي تسمى درجة حرارة كيروري.



الشكل IV-2-

الشكل (IV 2 أ-) يبين العلاقة بين الحقل  $B_{tot} = \mu_0 \mu_r H = \mu_0 (H + M)$  داخل مادة حديدية المغنطة، غير ممغنطة أصلاً عند النقطة "0" أي في الحالة البكر والحقل الخارجي الممغنط  $H$  وذلك بدرجة حرارة  $T < T_c$ ، حيث يتبين أن المنحني (0 ← 1) الذي يسمى بالمنحني البكر للعينه المدروسة، يبدأ بزيادة سريعة لا تلبث أن تتباطأ حتى بلوغ حالة الإشباع عند  $H_{sat}$  و  $B_{sat}$ ، ويمكن اعتباره حاصل جمع منحنيين  $\mu_0 H$  و  $\mu_0 M(H)$ ، وهذه العلاقة  $B_{tot}(H)$  ناتجة عن الطبيعة المعقدة لاعتماد الحساسية  $x = \mu_r - 1$  على  $H$  كما في الشكل (IV 2-ب)، حيث تقترب  $x$  من الصفر عند الإشباع وبنقصان الحقل الخارجي  $H$  اعتباراً من حالة الإشباع  $H_{sat}$  تتناقص قيمة الحقل داخل العينه  $B_{tot}$  حسب المنحني (1 ← 2) الذي لا ينطبق على منحني الزيادة (0 ← 1) ماراً بالنقطة 2 حيث  $B_{tot} = B_r$  والكمية  $B_r$  ناتجة عن المغنطة الذاتية  $B_r = \mu_0 M_r$  المتبقية (*Residual*) في العينه الحديدية بدون وجود حقل خارجي ممغنط، وإفناء المغنطة الذاتية في العينه يعكس اتجاه الحقل المغناطيسي ( $-\vec{H}$ ) فتتناقص المغنطة الذاتية حسب المنحني (2 ← 3) لتبلغ الصفر عند قيمة الحقل الخارجي  $H_c$  التي تسمى بالقوة القسرية أو القاهرة (*Coercive Force*) وبزيادة قيمة الحقل ( $-\vec{H}$ ) تزداد المغنطة و  $B_{tot}$  باتجاه معاكس لما هو عليه في الحالة الأولى حتى بلوغ الإشباع باتجاه ( $-\vec{H}$ ) وهكذا يتكون منحني مقفل يسمى منحني الهسترة وهو يحصر مساحة  $S$  تتناسب مع العمل المنجز لوحدة الحجم على مغنطة العينه وإزالتها.

وهذا التفاعل المتبادل "يقسم" العينه مغناطيسياً إلى مناطق ذات أبعاد مجهرية بحيث تتجه كل العزوم المغناطيسية لذرات أية منطقة بنفس الاتجاه، وبدون وجود الحقل الخارجي (في الحالة "0" للمنحني IV 2 أ-) تتبعثر العزوم المغناطيسية للمناطق بحيث لا تنتج عنها محصلة عزوم مغناطيسية، ولكن تسليط الحقل الخارجي  $\vec{H}$  يؤدي إلى "التحام" هذه المناطق عن طريق توجيه عزومها المغناطيسية بنفس اتجاه الحقل  $\vec{H}$ ، وهذه العملية تعرقل من قبل التذبذب الحراري لذلك فهي تنجز تدريجياً (المنحني 0 ← 1) وتكتمل عند بلوغ الإشباع حيث  $H = H_{sat}$ .

وعموماً عند إزالة الحقل الممغنط تبقى في العينه بعض المغنطة (وكأنها ذاكرة) ونذكر أن معدل قيمة  $\mu_r$  تحسب من انحدار الخط المستقيم (1 → 0).

اعتماداً على شكل منحني الهسترة وبالخصوص مساحتها  $S$  وقيم  $B_r$  و  $H_c$  تصنف المواد الحديدية المغنطة إلى نوعين: لينة (*Soft*) وقاسية (*Hard*) مغناطيسياً، فعندما يكون منحني الهسترة نحيفاً (قيم  $S$ ،  $B_r$ ،  $H_c$  قليلة نسبياً) تسمى المادة لينة وتصنع منها قلوب للمولدات والمحولات الكهربائية، مثل الفولاذ الحاوي على 30%، كوبلت ( $B_r \simeq 1$  تسلا،  $H_c \simeq 2,5$  أمبير/متر)، وسبيكة: 80% Ni، 5% Mo، والباقي حديد ( $\mu_r \sim 10^5$ ،  $H_c = 0,39$  A/m،  $B_{sat} = 0,8$  T).

وعندما تكون مساحة الهسترة وكذا قيم  $B_r$  و  $H_c$  كبيرة فإن المادة قاسية وتستعمل في صناعة المغناط الثابتة، وتتميز هذه المواد بكبر  $H_{sat}$  فتبلغ عدة آلاف أو عشرات الآلاف أمبير/ متر، أما  $H_c$  فتتراوح بين 60 أمبير/سم لسبيكة  $Fe - Cr - W$  إلى  $2,4 \times 10^4$  أمبير/سم لسبيكة  $Co_5Sm$ .  
ونؤكد بأن هذه الخواص المغناطيسية الحديدية تفقد بزيادة درجة الحرارة فوق درجة حرارة كيوري  $T_c$ :  $Ni(360^\circ c), Co(1150^\circ c), Fe(770^\circ c)$  لتحل محلها الخواص المغناطيسية الطردية حيث تخضع الحساسية لقانون كيوري- فيس:

$$X = \frac{C}{(T - \theta)} \quad 3 - VI$$

حيث:  $C$  ثابت كيوري- فيس،  $\theta$  درجة كيوري النظرية وهي اكبر بقليل من  $T_c$  درجة كيوري العملية (أنظر الشكل 2 -ج-).

وتتمتع عينة البلورة الأحادية ذات المغنطة الحديدية بخاصية تباين المناحي كما هو واضح للمنحنيات (2 - د-) المخصصة للحديد في الاتجاهات [111] و [110] و [100] ويسمى الاتجاه [100] للحديد و [111] للنكل باتجاه المغنطة السهلة لأن الإشباع يستحصل بقيمة  $H_{sat}$  قليلة نسبياً بالنسبة للاتجاهات [110] و [111] التي تسمى باتجاهات المغنطة الصعبة.

### VI-3- الخواص المغناطيسية للذرة الحرة:

ينشأ العزم المغناطيسي للذرة من عزوم كمية الحركة الإلكترونية:

- عزم كمية الحركة المدارية للذرة: نرسم له بالرمز  $\vec{L}$  (أو  $\vec{P}_L$ ) ويساوي  $\vec{L} = \sum_i \vec{l}_i$  حيث  $\vec{l}_i$  عزم كمية الحركة المدارية للإلكترون  $i$  في الذرة، وقيمة  $\vec{L}$  تساوي  $\hbar\sqrt{L(L+1)}$ ، والعدد الكمي  $L$  يأخذ أرقاماً صحيحة محصورة بين أعظم وأخفض حجم جبري  $\sum_i \vec{l}_i$ ، حيث:  $l_i$  العدد الكمي المداري للإلكترون  $i$  في الذرة.

- عزم كمية الحركة السبينية للذرة: نرسم له بالرمز  $\vec{S}$  (أو  $\vec{P}_S$ ) ويساوي  $\vec{S} = \sum_i \vec{s}_i$  حيث  $\vec{s}_i$  عزم كمية الحركة السبينية للإلكترون  $i$  في الذرة، وقيمة  $\vec{S}$  تساوي  $\hbar\sqrt{S(S+1)}$  والعدد الكمي  $S$  يأخذ قيماً تختلف عن بعضها بـ 1 ومحصورة بين أعظم وأخفض حجم جبري  $\sum_i \vec{s}_i$ ، حيث:  $s_i$  العدد الكمي السبيني للإلكترون  $i$  في الذرة.

- عزم كمية الحركة الكلي للذرة: نرسم له بالرمز  $\vec{J}$  (أو  $\vec{P}_J$ ) ويساوي  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$  وقيمة  $\vec{J}$  تساوي  $\hbar\sqrt{J(J+1)}$  والعدد الكمي  $J$  يأخذ القيم التالية:

$$L + S, L + S - 1, \dots, L - S \quad (L > S) \quad \text{أو} \quad S + L, S + L - 1, \dots, S - L \quad (S > L)$$

ويتم العزم  $\vec{J}$  بالنسبة للحقل المغناطيسي الخارجي  $\vec{H}$  بحيث أن مسقطه يحقق العلاقة:

$$(\vec{J})_H = m_J \hbar \quad \text{حيث } m_J \text{ هو العدد الكمي المغناطيسي وله } (2J + 1) \text{ قيمة هي: } (-J, \dots, 0, \dots, +J)$$

- ويحسب العزم المغناطيسي للذرة أو الأيون الحر طبقاً للعلاقة التالية:

$$\vec{\mu} = -\gamma \hbar \vec{J} = -g \mu_B \vec{J} \quad ; \quad \mu = -g \mu_B \sqrt{J(J+1)} = -p \mu_B \quad 4 - VI$$

المعامل  $\gamma$  هو النسبة بين العزم المغناطيسي والعزم الميكانيكي (عزم كمية الحركة)، لهذا يسمى بالنسبة المغناطيسية (أو الجيروسكوبية)، أما  $\mu_B$  فيسمى ماغنيون بور وقيمه تساوي العزم المغناطيسي السبيني للإلكترون الحر:

$$\mu_B = 5,788 \times 10^{-5} \frac{ev}{\text{تسلا}}$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m} = 9,274 \times 10^{-24} \frac{\text{جول}}{\text{تسلا}}$$

والمعامل  $p$  يدعى عدد ماغنيون بور الفعالة ويساوي  $g\sqrt{J(J+1)}$  والكمية  $g$  تسمى بالوسيط  $g$  أو وسيط الانفلاق الطيفي ويحدد بعلاقة لاندي التالية:

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad 5 - VI$$

وللحركة السبينية الصرفة  $L = 0$  يكون  $g = 2$  وللحركة المدارية الصرفة حيث  $S = 0$  يكون  $g = 1$  ومسقط  $\vec{\mu}$  على اتجاه الحقل الخارجي  $\vec{H}$  يساوي:

$$\mu_H = -m_J g \mu_B \quad 6 - VI$$

### VI-3-1- المغناطيسية العكسية - علاقة لانجفين:

تنشأ المغنطة الطردية كنتيجة لرد فعل الجسم الواقع تحت تأثير حقل مغناطيسي خارجي، فالجسم "يحاول" باستخدام شحناته أن يحجز أو يقي الأجزاء الداخلية له من تأثير الحقل الخارجي (وهي تشبه ظاهرة لينز)، لهذا تتغير الحركة المدارية للإلكترونات ذراته فتنشأ بها حركة إضافية مولدة حقلاً مغناطيسياً يعاكس الحقل الخارجي، وهذه الحركة الإضافية هي التي تولد ظاهرة المغنطة العكسية التي تزول بزوال الحقل الخارجي، وهذه الظاهرة موجودة في كل الأجسام ولكنها تغطي ولا تلاحظ عند وجود ظواهر مغناطيسية أخرى أقوى منها وهي المغنطة الطردية والحديدية، وهي تلاحظ بمفردها في المواد التي ليس لذراتها عزم مغناطيسي خاص بها  $\mu = 0$  مثل الغازات الخاملة وبعض الجزيئات العضوية كالبنزين والانتراسين وأيونات العناصر التي تكون طبقاتها الإلكترونية ممتلئة.. إلخ.

وتحسب الحركة الإضافية من نظرية لارمور ( $Larmor$ ): في حقل مغناطيسي خارجي  $\vec{B}$  تتحرك إلكترونات الذرة بمحصلة تراكب حركتين الحركة الطبيعية للإلكترون حول نواته المتراكبة مع حركة مبادرة المدار, حيث يتبين أن العزم المداري  $\vec{l}$  العمودي على مستوى مدار الإلكترون يبرم حول المحور  $\vec{B}$  بسرعة زاوية ترددها يدعى تردد لارمور:

$$w_L = 2\pi\gamma_L = \frac{eB}{2m} \quad 7 - VI$$

وهو نفسه لكل الإلكترونات بغض النظر عن أنصاف أقطار مداراتها أو سرعتها، أما اتجاه  $\vec{w}_L$  فينطبق مع اتجاه  $\vec{B}$ .

وبسبب تأثير الحقل الخارجي  $\vec{B}$  يحصل على عزم مغناطيسي محتث بعكس اتجاه الحقل  $\vec{B}$ ، إن ظهور هذا العزم يعني مغنطة الجسم بعكس اتجاه الحقل الخارجي  $\vec{B}$  وهذه هي خاصية المغنطة العكسية والمغنطة المحتثة تساوي:

$$M = -n Z e^2 \langle r^2 \rangle \frac{B}{6m} \quad 8 - VI$$

حيث:  $n$  تركيز الذرات،  $Z$  عدد إلكترونات الذرة، وقد اعتبر  $\langle r^2 \rangle$  بشكل تقريبي هو نفسه لكل إلكترونات الذرة، والذرات متماثلة، وحساسية تساوي:

$$X = -\frac{\mu_0 n Z e^2}{6m} \langle r^2 \rangle \quad \text{و} \quad X_m = -3,55 \times 10^{12} Z \langle r^2 \rangle$$

وهذه النتيجة التقليدية المشتقة من قبل لانجفين تتطابق مع الحسابات الكوانتية، ومن أجل

$$X_m = -10^{-7} \div 10^{-8} \quad \text{فإن:} \quad \sqrt{\langle r^2 \rangle} = 10^{-10} m$$

### VI-3-2-المغناطيسية الطردية (البارامغناطيسية):

ندرس جسما متكونا من  $n$  ذرة أو جزيئة لوحدة الحجم، ولكل ذرة أو جزيئة عزم مغناطيسي  $\mu$  والعزوم هذه غير متفاعلة مع بعضها مغناطيسيا، ويمكن مغنطة الجسم بتوجيه عزومه الذرية المغناطيسية بتأثير حقل مغناطيسي خارجي، وهذا التوجيه يعرقل من قبل الحركة الحرارية، لذلك تتكون في الجسم مغنطة  $M$  ملائمة لقيمة الحقل الممغنط ودرجة حرارته.

الطاقة الكامنة  $U$  للعزم المغناطيسي الذري  $\mu$  في الحقل الخارجي  $\vec{B}$  تساوي:

$$U = \vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_H B \quad , (\mu_H = \mu \cos \theta) \quad 9 - VI$$

حيث:  $\theta$  الزاوية بين  $\vec{\mu}$  و  $\vec{B}$ ،  $\mu_H$  هو مسقط  $\vec{\mu}$  على اتجاه الحقل الممغنط  $\vec{B}$ .

في العلاقة (9 - VI) تمثل  $\vec{B}$  قيمة الحقل الموضعي عند الذرة التي تختلف عموماً عن قيمة الحقل الخارجي الممغنط بسبب مغنطة الجسم، ولكن نظراً لضعف التمغنط الداخلي ( $\mu_0 M \ll \mu_0 H$ ) مقارنة مع الحقل الخارجي  $\vec{B}$ ، لذلك تعتبر قيمة  $\vec{B}$  في (9 - VI) نفس قيمة الحقل الخارجي الممغنط  $\mu_0 \vec{H}$ ، والمسقط  $\mu_H$  يساوي  $\mu_H = -m_j g \mu_B$  وله  $(2J + 1)$  قيمةً  $(m_j = -J, \dots, 0, \dots, +J)$  (لأن  $J$ ).

احتمال أخذ المسقط  $\mu_H$  لقيمة ما من قيمة يتناسب مع حد بولتزمان  $w = c e^{\mu_H B / k_B T}$  (وهو يمثل العدد النسبي للذرات ذات الطاقة الكامنة المغناطيسية  $\mu_H B$  حيث  $\mu_H$  هي قيمة معينة لمسقط  $\vec{\mu}$  على  $(\vec{B})$  والقيمة المتوسطة للمسقط  $\mu_H$  تساوي:

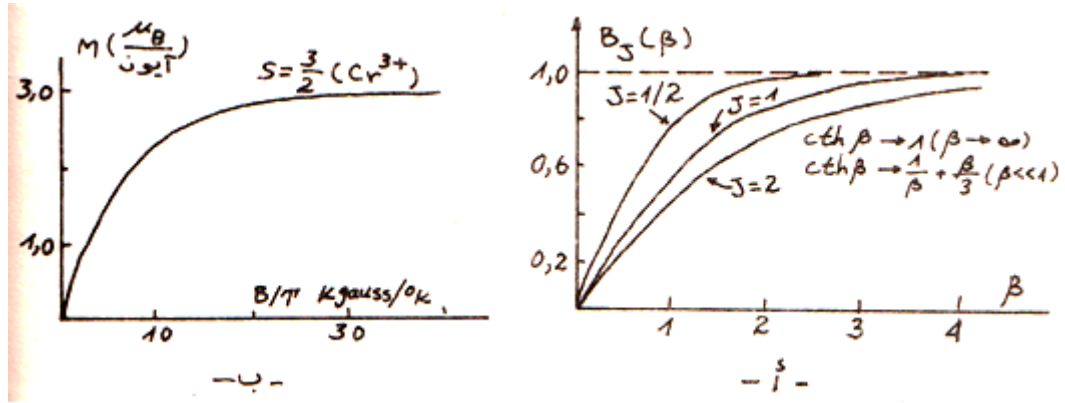
$$\langle \mu_H \rangle = \frac{\sum_{-J}^{+J} \mu_H e^{\mu_H B / k_B T}}{\sum_{-J}^{+J} e^{\mu_H B / k_B T}} \quad 10 - VI \quad (14-12)$$

والجمع يتم على كل قيم  $m_j$  (ولو أخذنا الموضوع للمفاهيم التقليدية حيث الطاقة مستمرة لاستبدلنا الجمع بالتكامل على الزاوية  $\theta$  بجميع الاتجاهات)، وبحساب الجمع في المعادلة (10 - VI) نجد النتيجة التالية:

$$\langle \mu_H \rangle = g J \mu_B B_J(B); \quad B_J(B) = \frac{2J+1}{2J} \text{cth} \left( \frac{2J+1}{2J} B \right) - \frac{1}{2J} \text{cth} \frac{B}{2J} \quad 11 -$$

VI

حيث:  $\beta = J g \mu_B B / k_B T = \mu_a B / k_B T$  والدالة  $B_J(B)$  تسمى دالة بريليون الشكل (أ-3-IV)



الشكل 3-IV

والمغنطة والحساسية تساوي:

$$M = \langle \mu_H \rangle n = n g J \mu_B B_J(B), \quad X = \frac{\mu_0 n g J B_J(B)}{B} \quad 12 - VI$$

حيث يلاحظ أن:

$$T \rightarrow 0, \beta \rightarrow \infty, B_J \rightarrow 1, M \rightarrow n g J \mu_B \quad 13 - VI$$

أي أن العزوم المغناطيسية لذرات الجسم (العينة) موجهة تماما بالحقل الخارجي، حيث تأخذ  $m_j$  القيمة العظمى لها  $J$  وهذه هي حالة الإشباع، حيث تصح هذه الحالة أيضا في درجات الحرارة المنخفضة والحقول  $\vec{B}$  الشديدة.

وظاهرة المغنطة الطردية تحدث للحالات التالية:

- 1- الذرات أو الجزيئات الحرة والتي عدد إلكتروناتها فرديا عندئذ لا يمكن أن يكون السبين الكلي معدوما، مثلا ذرة الصوديوم الحرة، غاز  $No$ ، الجذور الكيميائية العضوية الحرة.
- 2- بعض المعادن.
- 3- بعض المركبات المتضمنة للأوكسجين التي عدد إلكتروناتها زوجي.
- 4- الذرات والأيونات الحرة التي لها مدارا داخليا غير ممتلئا مثل ذرات العناصر الانتقالية ( $3d$ ) كالحديد والترابييات النادرة ( $4f$ ) مثل الكادولفيوم  $Gd$ .

### VI-3-3- المغنطة الحديدية (الفيرومغناطيسية):

تتمتع مواد المغنطة الحديدية بامتلاكها للمغنطة الذاتية (بدون وجود حقل خارجي ممغنط) التي تصمد حتى درجة حرارة معينة  $T_c$  تسمى درجة كيوري لتلك المادة، وبدرجة حرارة أعلى من  $T_c$  تتغلب الحركة الغوغاءية الحرارية ويفقد الفيرومغناطيس خواصه ليتحول إلى بارامغناطيس. أقترح فيس ( $Weiss 1907$ ) بأن المغنطة الذاتية للحديد كحصيلة لتوجه مغنطه الجزيئية ناتجة عن وجود حقل جزيئي موجه (يدعى حقل فيس) قيمته متناسبة مع المغنطة  $\vec{M}$ . ولقد اتضح طبقا للنظرية الكمية بأن المغنطة الذاتية ناتجة عن التفاعل بين سبينات ذرات أو جزيئات المادة الحديدية المغنطة، وهذا التفاعل ناتج عن مبدأ باولي في إدخال السبين بالدالة الموجية الإلكترونية.

ولغرض فهم هذا التفاعل تدرس بأسلوب كوانتي طاقة التفاعل الكهروستاتيكي بين إلكترونين فقط، دلت الحسابات الكوانتية أن طاقة التفاعل تعتمد على الاتجاهات النسبية لسبيناتها.

إذا انتسب الإلكترونان لنفس الذرة الحرة بحيث لا يشكلان مدارا مغلقا فإن الحسابات تبين  $E_s >$  أي  $E_t$  أن الحالة الثلاثية وفيها  $S = 1 \uparrow\uparrow$  وطاقتها  $E_t$  هي المفضلة طاقيا، وهذا يطابق قانون هند الأول، وتفضل طاقيا الحالة المفردة وفيها  $S = 0 \uparrow\downarrow$  وطاقتها  $E_s$  عندما ينتسب الإلكترونان لذرتين مختلفتين.

أما في حالة الجسم الصلب فتصور شبكته مكونة من أيونات ذات عزوم مغناطيسية متفاعلة طبقا لعلاقة هيزنبرغ التالية:

$$U_{ex} = \sum_i \sum_{j \neq i} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad 14 - VI$$

بحيث أن العزم المغناطيسي الكلي لكل أيون يساوي  $\vec{\mu}_i = -g\mu_B\vec{S}_i$  حيث  $\vec{S}_i$  السبين الكلي للأيون  $i$  و  $J_{ij}$  تكامل طاقة التبادل الذي يكون موجبا للمادة الفيرومغناطيسية وسالبا للفيرومغناطيسية المضادة.

ويمكن إعادة كتابة علاقة هيزنبرغ بدلالة العزم المغناطيسي  $\vec{\mu}_i$  :

$$U_{\text{ex}} = \sum_i \vec{\mu}_i \cdot \vec{B}_E^i ; \vec{B}_E^i = \frac{1}{g\mu_B} \sum_{j \neq i} -J_{ij} \vec{S}_j \quad 15 - VI$$

وهي تبين أن العزم المغناطيسي للأيون  $i$  واقع تحت تأثير "حقل" توجيهي  $B_E^i$  ناتج عن العزوم المغناطيسية لبقية الأيونات.

نعتبر الحقل السبيني مكافئ بتأثيره التوجيهي لحقل مغناطيسي  $\vec{B}_E$  (يطلق عليه حقل فيس):

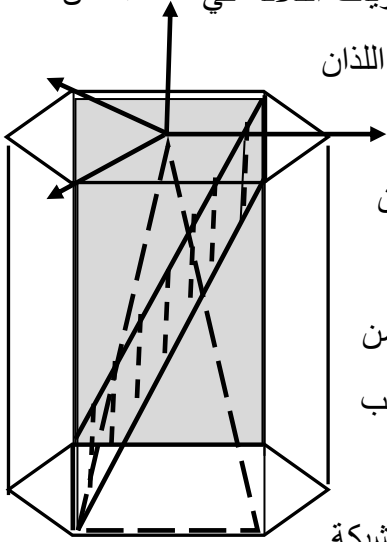
$$\vec{B}_{\text{eff}} = \vec{B} + \vec{B}_E = \vec{B} + \mu_0 \lambda \vec{M} \quad 16 - VI$$

وهكذا فطبقا لنظرية الحقل المتوسط يعوض عن التفاعل السبيني "بالحقل"  $\vec{B}_E$  الذي يؤثر على كل سبينات العينة.

• تمريبات المحور الأول:

التمرين 1

1- في الخلية الأولية للشبكة السداسية البسيطة أوجد قرائن ميلر لمستويات الثلاثة في الشكل؟



2- ما هي قرائن ميلر لمستوي يقع في تقاطع محور المنطقتين اللذان

يشملان المستويين (100),(134) و (323),(010) ومحور المنطقتين اللذان يشملان المستويين

(0110), (3253) و (1233), (2021)؟

3- تنعكس الأشعة السينية ذات الطول الموجي  $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$  من

المستويات (110) في بلورة مكعبة ذات خلية وحدة  $a = 6 \text{ \AA}$  , أحسب

زاوية براغ لكل رتب الانعكاس n ؟

4- أحسب طول ضلع خلية الوحدة لشبكة الفضة المتمركزة الجسم وشبكة

النحاس المتمركزة الأوجه إذا كان نصف قطر ذرتيها 1.441 و 1.276 انغستروم على التوالي؟

5- إذا علمت أن الكثافة الذرية للمستوي هي عدد الذرات مقسوم على المساحة، فأحسب الكثافة الذرية

للمستويات (100) و (110) لكل من شبكة الفضة وشبكة النحاس؟

الحل

(1)

المستوى (1):

$$-1 + 1 + \frac{1}{R} = 0$$

$$R = \infty \Rightarrow$$

$$(h k i l) \equiv (\bar{1}010)$$

-1	x
R	y
$\infty$	z
1	w

المستوى (2):

$$-1 - 1 + \frac{1}{R} = 0$$

$$R = \frac{1}{2} \Rightarrow$$

$$(h k i l) \equiv (\bar{1}2\bar{1}2) \equiv (1\bar{2}12)$$

-1	x
R	y
$-\frac{1}{2}$	z
-1	w

المستوى (3):

$$1 - 1 + \frac{1}{R} = 0$$

$$R = \infty \Rightarrow (h k i l) \equiv (10\bar{1}1)$$

w	z	y	x
-1	1	R	1

(2) تعيين محور المنطقة الأولى:

$$\begin{array}{r|rrrr} 1 & 3 & 4 & 1 & 3 & 4 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline & [04\bar{3}] & & & & \end{array}$$

تعيين محور النطاق الثاني:

$$\begin{array}{r|rrrr} 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 3 & 2 & 3 & 3 & 2 & 3 \\ \hline & [30\bar{3}] & & & & \end{array}$$

وبالتالي قرائن ميلر للمستوي المشترك مع المحورين:

$$\begin{array}{r|rrrr} 0 & 4 & \bar{3} & 0 & 4 & \bar{3} \\ 3 & 0 & \bar{3} & 3 & 0 & \bar{3} \\ \hline & (12\bar{9}12) & & & & \end{array}$$

أي أن:  $(434) \equiv (hkl)$

بالنسبة للمستوي الثاني نجد  $i$  بحساب المحورين، وذلك بإهمال مؤقت لـ  $i$ :

$$\begin{array}{r|rrrr} 1 & 2 & 3 & 1 & 2 & 1 \\ 2 & 0 & 1 & 2 & 0 & 3 \\ \hline & [25\bar{4}] & & & & \end{array}$$

الثاني:

$$\begin{array}{r|rrrr} 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 3 & 2 & 3 & 3 & 2 & 3 \\ \hline & [30\bar{3}] & & & & \end{array}$$

وبالتالي قرائن ميلر تكون:

$$\begin{array}{r|rrrr} 2 & 5 & \bar{4} & 2 & 5 & \bar{4} \\ 3 & 0 & \bar{3} & 3 & 0 & \bar{3} \\ \hline & [\bar{15}\bar{6}15] & \equiv & (525) & & \end{array}$$

## تمرينات ومسائل محلولة

أما لإيجاد  $i$  نستعمل العلاقة  $h + k + i = 0$  فنجد  $i = -7$  أي أن:  $(h k i l) \equiv (5 2 \bar{7} 5)$

(3) حساب زاوية براغ للرتب  $n$ :

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2l^2}} = \frac{6}{\sqrt{2}} = 4,24 \text{ \AA} \quad \text{إذن: } \lambda = 1,54 \text{ \AA} \text{ و } a = 6 \text{ \AA}$$

$$\sin \theta = \frac{n\lambda}{2d} = 0,36n$$

$$\theta = 21,10^\circ \leftarrow n = 1 \text{ الرتبة}$$

$$\theta = 46,05^\circ \leftarrow n = 2 \text{ الرتبة}$$

$$\theta \text{ لا يوجد انعكاس } \leftarrow n = 3 \text{ الرتبة}$$

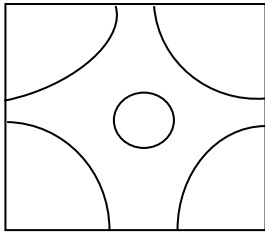
(4) طول ضلع خلية شبكة الفضة bcc:

$$a = \frac{4r}{\sqrt{3}} = 3,32 \text{ \AA}$$

والنحاس:

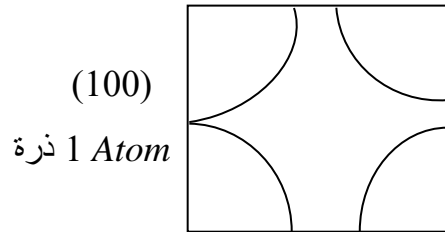
$$a = \frac{4r}{\sqrt{2}} = 3,08 \text{ \AA}$$

(5) الكثافة الذرية لشبكة الفضة:



2 Atom ذرة

(110)



(100)

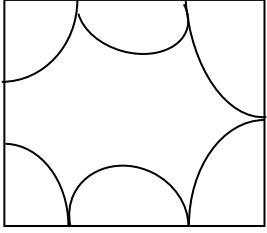
1 Atom ذرة

$$\rho = \frac{2 \text{ atom}}{a^2\sqrt{2}} = 0,0110 \text{ atom/\AA}^2$$

$$0,0907 \frac{\text{atom}}{\text{\AA}^2} = \rho_{(100)} = \frac{1 \text{ atom}}{a^2 \text{ mm}} = \frac{1}{11,02}$$

## تمرينات ومسائل محلولة

(110)

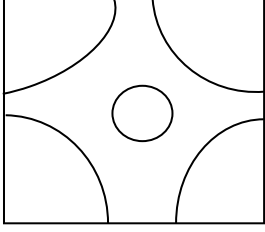


2 Atom ذرة

$$\rho = \frac{2}{a^2\sqrt{2}} = 0,1491 \text{ atom}/A^{\circ 2}$$

وكذلك النحاس:

(100)



2 Atom ذرة

$$0,2108 \text{ atom}/A^{\circ 2} = \rho = \frac{2}{a^2} = \frac{2}{9,48}$$

**التمرين 2:** برهن أن "معكوس" الشبكة المعكوسة هو شبكة مباشرة.

**الحل:**

نأخذ شبكة مباشرة أشعتها الأساسية  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  وشبكته المعكوسة تحدد بالأشعة التالية:

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3}{v}, \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1}{v}, \quad \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2}{v}$$

حيث:  $v = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)|$  حجم الخلية الأساسية للشبكة المباشرة.

والآن نعتبر شبكة مباشرة أشعتها هي  $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$  وشبكته المعكوسة سوف تحدد بالأشعة التالية:

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{b}_2 \wedge \vec{b}_3}{v_R}, \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{b}_3 \wedge \vec{b}_1}{v_R}, \quad \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{b}_1 \wedge \vec{b}_2}{v_R}$$

حيث:  $v_R = |\vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \wedge \vec{b}_3)| = \frac{(2\pi)^3}{v}$  حجم الخلية الأساسية للشبكة المعكوسة (التي اعتبرناها

مباشرة)، عندئذ نجد:

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{b}_2 \wedge \vec{b}_3}{v_R} = \frac{(2\pi)^3}{(2\pi)^3/v} \cdot \frac{(\vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1) \wedge (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)}{v^2}$$

$$\vec{b}_1 = \frac{[(\vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1) \cdot \vec{a}_3] \vec{a}_2 - [(\vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1) \cdot \vec{a}_2] \vec{a}_3}{v}$$

$$\vec{b}_1 = \frac{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)}{v} \vec{a}_3 = \vec{a}_3$$

حيث استعملنا العلاقات الشعاعية التالية:

$$\vec{A} \wedge (\vec{B} \wedge \vec{C}) = (\vec{A} \cdot \vec{C}) \vec{B} - (\vec{A} \cdot \vec{B}) \vec{C}$$

$$\vec{A} \cdot (\vec{B} \wedge \vec{C}) = \vec{C} \cdot (\vec{A} \wedge \vec{B}) = \vec{B} \cdot (\vec{C} \wedge \vec{A})$$

وبنفس الأسلوب نجد أن:  $\vec{b}_3 = \vec{a}_1$  و  $\vec{b}_2 = \vec{a}_2$  ، وهذا هو المطلوب إثباته، ومن الأمثلة على ذلك هو

الشبكة المكعبة  $fcc$  التي مقلوبها يكون شبكة مكعبة  $bcc$  التي مقلوبها يعود شبكة مكعبة  $fcc$ .

**التمرين 3:**

## تمرينات ومسائل محلولة

- نعتبر شبكة مكعبة متمركزة الجسم BCC و متمركزة الأوجه FCC .  
 - أعطي الأشعة الأساسية للشبكة المباشرة؟  
 - أعطي الأشعة الأساسية للشبكة المعكوسة؟  
 - اوجد حجم الخلية الأساسية لكل من الشبكتين وحجم الخلية للشبكة المعكوسة؟

الحل:

BCC

$$\vec{a} = \frac{1}{2}a(\vec{n} + \vec{y} - \vec{z}), \quad \vec{b} = a(\vec{y} + \vec{z} - \vec{n}), \quad \vec{c} = \frac{1}{2}a(\vec{n} + \vec{z} - \vec{y})$$

$$\vec{V}_c = \vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c} = \left(\frac{a}{2}\right)^3 \begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{vmatrix} = \frac{a^3}{2}$$

FCC

$$\vec{a} = \frac{1}{2}a(\vec{n} + \vec{y}), \quad \vec{b} = \frac{1}{2}a(\vec{y} + \vec{z}), \quad \vec{c} = \frac{1}{2}a(\vec{z} + \vec{n})$$

$$\vec{V}_c = \vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c} = \left(\frac{a}{2}\right)^3 \begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \frac{a^3}{4}$$

الأشعة الأساسية للشبكة المعكوسة:

BCC

$$\vec{A} = \frac{2\pi}{V_c} \cdot \vec{b} \times \vec{c} = \frac{2\pi}{a}(\vec{n} + \vec{y})$$

$$\vec{B} = \frac{2\pi}{V_c} \cdot \vec{c} \times \vec{a} = \frac{2\pi}{a}(\vec{y} + \vec{z})$$

$$\vec{C} = \frac{2\pi}{V_c} \cdot \vec{a} \times \vec{b} = \frac{2\pi}{a}(\vec{n} + \vec{z})$$

$$V_{BZ} = 16 \frac{\pi^3}{a^3}$$

FCC

$$\vec{A} = \frac{2\pi}{V_c} \cdot \vec{b} \times \vec{c} = \frac{2\pi}{a}(\vec{n} + \vec{y} - \vec{z})$$

$$\vec{B} = \frac{2\pi}{a}(-\vec{n} + \vec{y} + \vec{z})$$

## تمريبات ومسائل محلولة

$$\vec{C} = \frac{2\pi}{a} (\vec{n} - \vec{y} + \vec{z})$$

$$V_{BZ} = 32 \frac{\pi^3}{a^3}$$

### التمرين 4:

زاوية براغ للرتبة الأولى لانعكاسات عن المستويات (111) في بلورة هي  $30^\circ$  عندما يكون الطول الموجي لحزمة الأشعة السينية هو  $1,75 \text{ \AA}$ .  
أحسب المسافة بين الذرات (ثابت الشبكة).

### الحل

حسب قانون براغ ، لدينا:  $2d \sin \theta = n \lambda$

ومنه:  $\theta = 30^\circ$  ،  $\lambda = 1,75 \text{ \AA}$  ، الرتبة الأولى:  $n = 1$

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{1+1+1}} = \frac{a}{\sqrt{3}}$$

$$\frac{2a}{\sqrt{3}} \frac{1}{2} = 1,75 \Rightarrow a = \sqrt{3} \times 1,75 \text{ \AA}$$

$$a = 3,03 \text{ \AA}$$

### التمرين 5:

1- وحدة خلية أكسيد الزنك  $ZnO$  من النوع السداسي المغلق المركب  $HCP$  حيث أن  $a = 3,249 \text{ \AA}$  و  $c = 5,206 \text{ \AA}$ .

- أكتب معادلة الخلية الأساسية بدلالة ثابت الشبكة؟

- أحسب كثافة التعبئة؟

2- بلورة السيلكون لها التركيب المشابه لبلورة الماس، إذا كان قطر ذرة السيلكون مساوي لربع قطر الجسم (المكعب) ومقداره  $2,351 \text{ \AA}$  ، إستنتج ثابت الشبكة؟

3- ما هو عدد الجوار الأقرب والعقد المجاورة للجوار لشبكة  $bcc$ .

4- إذا كانت  $R$  هي المسافة بين أقرب ذرتين، فما هي  $R$  في المكعب  $bcc$  و  $fcc$ .

5- أوجد حجم خلية كلوريد الصوديوم  $NaCl$  بدلالة قطر الذرة  $d_{Cl}$  و  $d_{Na}$ .

6- ما هي مساحة المستوي (101) في وحدة خلية من النوع  $bcc$  بدلالة نصف القطر  $R$  ومساحة

المستوي (100) في وحدة خلية من النوع  $fcc$  بدلالة نصف القطر  $R$ ؟

الحل:

(1) الأشعة الأساسية للسداسي المغلق:

$$\begin{cases} \vec{a}_1 = 3,24 \vec{i} \\ \vec{a}_2 = 2,80 \vec{j} - 1,62 \vec{i} \\ \vec{a}_3 = 5,6 \vec{k} \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \vec{a}_1 = a \vec{i} \\ \vec{a}_2 = \frac{\sqrt{3}}{2} a \vec{j} - \frac{1}{2} a \vec{i} \\ \vec{a}_3 = c \vec{k} \end{cases}$$

كثافة التعبئة:

$$t = \frac{\text{حجم الكرات في خ. أ.}}{\text{حجم الخلية الأولية}} = \frac{2 \cdot \frac{4}{3} \pi r_A^3}{V}$$

$$V = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = a^2 \frac{\sqrt{3}}{2} c = a^3 \sqrt{2} \quad ; \quad r_A = \frac{a}{2} \quad \text{حيث:}$$

$$t = \frac{\pi \frac{a^3}{3}}{a^2 \frac{\sqrt{3}}{2} c} = \frac{2\pi}{3\sqrt{3}} \frac{a}{c} = 0,75 \quad \text{أي } 75\% \quad \text{ومنه:}$$

(2) بلورة السيليكون مشابه لبلورة الماس.

قطر الجسم للبلورة مكعبة:  $\sqrt{3}a$

نرمز لقطر الذرة بالرمز R أي:  $R = \frac{1}{4} \sqrt{3}a$

$$a = 5,42 A^\circ \quad \text{أي} \quad a = \frac{4R}{\sqrt{3}} = \frac{4(2,35)}{1,73} \quad \text{ومنه:}$$

(3) عدد الجوار الأقرب في شبكة bcc هو: 08

عدد العقد المجاورة للجوار الأقرب في bcc هو: 06

(4) بما أن R هي المسافة الأقرب بين ذرتين فيكون في شبكة bcc:

$$R = \frac{\sqrt{3}}{2} a$$

:Fcc

شبكة

في

$$R = \frac{\sqrt{2}}{2} a$$

(5) حجم خلية كلوريد الصوديوم NaCl بدلالة  $d_{Na}$  و  $d_{Cl}$ :

$$a = 2r_{Cl} + 2r_{Na} \quad \text{لدينا:}$$

$$d_{Cl} = 2r_{Cl} \quad ; \quad d_{Na} = 2r_{Na} \quad \text{و:}$$

$$V = a^3 = (d_{Cl} + d_{Na})^3 \quad \text{و:}$$

## تمريبات ومسائل محلولة

(6) مساحة المستوي (101) في خلية bcc بدلالة R :

- نعتبر المساحة هي: A

$$4R = \sqrt{3} \text{ لدينا}$$

$$a = \frac{4R}{\sqrt{3}} \text{ و } R = \frac{\sqrt{3}}{4} a$$

$$A = a \times a = \sqrt{2} a = \sqrt{2} \left( \frac{4R}{\sqrt{3}} \right)^2$$

$$A = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \times 16 R^2 = 7,54 R^2$$

- مساحة المستوي (100) في خلية bcc بدلالة R :

نعتبر المساحة هي:  $\dot{A}$

$$4R = \sqrt{2} a$$

$$a = \frac{4R}{\sqrt{2}} \text{ لدينا}$$

$$\dot{A} = a \times a = \frac{16}{2} R^2 = 8 R^2$$

### • تمريبات المحور الثاني:

$$U_{tot}(R) = -\frac{\alpha}{R} + \frac{\beta}{R^8} \text{ التمرين 1: طاقة ربط ذرتا جزيئة توصف بالعلاقة}$$

حيث  $R$  فاصلة ذرتا الجزيئة،  $(\beta, \alpha)$  ثوابت.

أ/ أحسب الفاصلة التوازن  $R_0$  عند بدلالة  $(\beta, \alpha)$

ب/ احسب النسبة طاقتي التجاذب والتنافر عند التوازن

ج/ اذا كانت  $R_0 = 2,8 \text{ \AA}$  وطاقة الربط  $U_{tot}(R) = 5 \text{ eV}$

فما هي قيمتا  $\beta, \alpha$  وما قيمة القوة اللازمة لإنقاص الفاصلة بين الذرات بمقدار 5%.

الحل:

$$\frac{dU_{tot}(R)}{dR} \Big|_{R_0} = 0 \Rightarrow R_0^7 = 8\beta/\alpha, \quad U_{tot}(R_0) = -\frac{7}{8} \frac{\alpha}{R_0} \quad \text{أ-}$$

$$\frac{E_{rep}}{E_{att}} = \frac{\alpha/R_0}{\beta/R_0^8} = \frac{\alpha}{\beta} R_0^7 = 8 \quad \text{ب-}$$

$$\alpha = 16 \text{ eV} \cdot \text{ \AA}^8 ; \quad \beta = 2698,58 \text{ eV} \cdot \text{ \AA}^8 \quad \text{ج-}$$

## تمرينات ومسائل محلولة

$$\frac{dF}{dR} = -\frac{d^2 U_{tot}}{dR^2} = \frac{2\alpha}{R^3} - \frac{72\beta}{R^{10}} ; \left. \frac{dF}{dR} \right|_{R_0} = 5,1 \frac{ev}{A^02} = 81,63 \frac{nt}{m}$$

$$\Delta F = F(R_0) + \left( \frac{dF}{dR} \right)_{R_0} 0,05 R_0 = 1,142 \times 10^{-9} nt$$

**التمرين 2:** بين بأن طاقة الربط لذرة واحدة في بلورة الغاز الخامل ذو التركيب  $fcc$  أقل مما هي عليه للتركيب  $Sc$  أو  $bcc$ .

**الحل:**

تستعمل معادلة طاقة الربط:

$$U_{tot} = \frac{1}{2} N 4 \in \left[ \left( \frac{\sigma}{R_0} \right) \sum_j P_{ij}^{-12} - \left( \frac{\sigma}{R_0} \right)^6 \sum_j P_{ij}^{-6} \right]$$

واستعمال القيمة النظرية  $R_0 = 1,09\sigma$  وقيم  $\sum_j P_{ij}^{-6}$  و  $\sum_j P_{ij}^{-12}$  للتركيبات البلورية المختلفة نجد:

$$\frac{U_{tot}}{N} = \begin{cases} -5,69 \in & (Sc) \\ -8,23 \in & (bcc) \\ -8,6 \in & (fcc) \end{cases}$$

حيث:

	<u>Sc</u>	<u>bcc</u>	<u>fcc</u>
$A_6$ :	8,40	12,25	14,45
$A_{12}$ :	6,20	9,11	12,13

**التمرين 3:** اعتبر طاقة التنافر لبلورة الغاز الخامل  $fcc$  من النوع  $\lambda_e^{-r/\rho}$  حيث  $\lambda, \rho$  ثوابت،  $r$  فاصلة الأيونات، اعتبر طاقة التنافر مع الجوار الأقرب.

أ- ما هي الطاقة الداخلية عند التوازن  $U_{tot}(R_0)$  ؟

ب- أحسب معامل المرونة الحجمية  $B$ .

ج- تطبيق عددي: خذ بلورة غاز  $Xe$ :

$$R_0 = 4,33 A^\circ, \quad \frac{U_{tot}}{N} = -0,17 ev, \quad B = 3,6 \times 10^{10} \frac{\text{داين}}{\text{سم}^2}$$

هذه القيم عملية، أحسب  $\rho$  و  $\lambda$ .

أ- طاقة التنافر بين الذرتين  $i$  و  $j$  منفصلتان عن بعضهما بالبعد  $r_{ij}$  تساوي:

$$U_{ij}^{(1)}(r) = \lambda e^{-r_{ij}/\rho}$$

وبما أن التفاعل يتم مع الجوار الأقرب، فإن طاقة التنافر الكلية لبلورة مكونة من  $N$  من الذرات تساوي:

$$U_{tot}^{(1)} = \frac{N}{2} Z \lambda e^{-R/\rho} \quad (1)$$

حيث  $Z$  العدد التناسقي (الجوار الأقرب) و  $R$  فاصلة الجوار الأقرب، ووجود  $\frac{1}{2}$  يبين أن التفاعل بين كل زوج من الذرات.

طاقة التجاذب المتأتية من قوة فان دروالز بين ذرتين تساوي:

$$U_{ij}^{(2)} = -C/r_{ij}^6$$

حيث  $C$  ثابت، وطاقة الأيون  $i$  الناتجة عن كل الأيونات  $j$  ( $j \neq i$ ) تساوي:

$$U_i^{(2)} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N U_{ij}^{(2)} = -\frac{C}{R^6} \sum_{j=1}^N \left(\frac{1}{\rho_{ij}}\right)^6$$

حيث جعلنا  $r_{ij} = R\rho_{ij}$  ، وطاقة التجاذب الكلية تساوي:

$$U_{tot}^{(2)} = \frac{N}{2} U_i^{(2)} = -\frac{NC}{2R^6} A_6 \quad (2)$$

حيث  $A_6 = \sum_{j=1}^N \rho_{ij}^{-6}$  ويساوي 14,45 للتركيب  $fcc$ .

والطاقة الكلية الداخلية للبلورة تساوي:

$$U_{tot} = U_{tot}^{(1)} + U_{tot}^{(2)} = \frac{N}{2} \left( Z\lambda e^{-R/\rho} - \frac{C}{R^6} A_6 \right) \quad (3)$$

وعند التوازن  $\left(\frac{dU_{tot}}{dR}\right)_{R_0} = 0$  نجد:

$$Z\lambda e^{-R_0/\rho} = \frac{6C\rho}{R_0^7} A_6 \quad (4)$$

والطاقة الداخلية عند التوازن:

$$U_{tot}(R_0) = -\frac{N}{2} \frac{CA_6}{R_0^6} \left(1 - \frac{6\rho}{R_0}\right) \quad (5)$$

ب- من تعريف  $B$ :

$$B = V \frac{d^2 U_{tot}}{dV^2} = \left[ V \left(\frac{dR}{dV}\right)^2 \frac{d^2 U_{tot}}{dR^2} \right]_{V_0}$$

## تمرينات ومسائل محلولة

حيث  $0$  الحجم عند التوازن، نعبر عن  $V$  بدلالة الجوار الأقرب:

$$V = \frac{a^2}{4} N = \frac{R^3 N}{\sqrt{2}}, \quad \left(R = \frac{a}{\sqrt{2}}\right) \text{ و } \frac{dR}{dV} = \frac{1}{3R^2 N/\sqrt{2}}$$

وباستعمال المعادلة (3) نجد:

$$\frac{d^2 U_{tot}}{dR^2} = \frac{N}{2} \left( \frac{Z\lambda}{\rho^2} e^{-R/\rho} - \frac{42 C A_6}{R^8} \right)$$

ومنه نجد  $B$  باستعمال الشرط (4):

$$B = \frac{2C A_6}{3\sqrt{2}R_0^9} \left( \frac{R_0}{\rho} - 7 \right) \quad (6)$$

من (5) و(6) نجد:

$$\frac{B}{U_{tot}(R_0)} = - \frac{2\sqrt{2}}{3} \frac{1}{R_0^3} \frac{\frac{R_0}{\rho} - 7}{1 - \frac{6\rho}{R_0}}$$

$$U_{tot}(R_0) = \frac{U_{tot}(R_0)}{N} \text{ حيث}$$

ج- وباستعمال القيم العملية نجد:

$$\frac{\frac{R_0}{\rho} - 7}{1 - \frac{6\rho}{R_0}} = 11,39 = K$$

$$\text{وبجعل } x = \frac{R_0}{\rho} \text{ إذن: } x^2 - (7 + K)x + 6K = 0$$

$$x = \frac{(7 + 11,39) \pm \sqrt{(7 + 11,39)^2 - 24 \times 11,39}}{2}$$

إذن:

$$\frac{R_0}{\rho} > 7 \quad \rightarrow \quad \rho \simeq 0,32 A^\circ$$

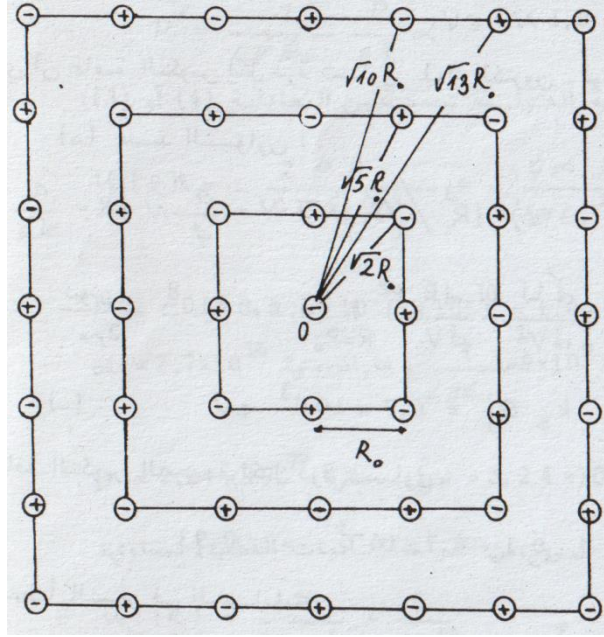
نعوض في (5) لاستخراج  $C$  ثم نستعمل (4) لاستخراج  $\lambda$ .

**التمرين 4:** أحسب ثابت مادلونك لشبكة مستوية لا نهائية كالمستوي (100) لبلورة ملح الطعام وذلك لدقة

$10^{-2}$ .

**الحل:**

## تمريبات ومسائل محلولة



نأخذ المربع الأول "ونجزئ" شحنه (حسب اشتراك الشحن مع المربعات المماثلة المجاورة) بحيث تكون شحنة المربع معدومة.

الشحن عند الرؤوس:  $(-1/4)$  عددها 4 وبعدها عن "0"  $\sqrt{2} R_0$

الشحن وسط الأضلاع:  $(+1/2)$  عددها 4 وبعدها عن "0"  $R_0$

حيث  $R_0$  فاصلة الجوار الأقرب (والشحن عند الرؤوس تشترك بأربعة مربعات بينما التي وسط الأضلاع تشترك بمربعين)، وشحنة المربع معدومة لأنه يحمل شحنة  $(-1)$  وسطه.

وعن طريق المجموع الجبري لجهود شحن المربع الأول في النقطة "0" نحسب مساهمة شحن المربع الأول في ثابت مدلونك  $\alpha_1$ :

$$\alpha_1 = \frac{4 \left(-\frac{1}{4}\right)}{\sqrt{2}} + \frac{4 \left(\frac{1}{2}\right)}{1} = -\frac{1}{\sqrt{2}} + 2 = 1,293$$

والآن نأخذ مربع أكبر مركزه "0" (ويقع المربع الأول داخله) و "ونجزئ" الشحن الموجودة على "سطحه" كما عملنا سابقا.

الشحن عند رؤوسه  $(-1/4)$  والشحن على أضلاعه  $(\pm 1/2)$ ، ومجموع شحنة هذا المربع الثاني معدومة أيضا (وتساوي شحنة المربع الداخلي بدون تجزأة + الشحنة على "سطحه" + الشحنة وسطه).

وعن طريق المجموع الجبري لجهود الشحن المتبقية للمربع الأول وجهود الشحن على سطح المربع الثاني في النقطة "0" نجد مساهمة شحن المربع الثاني في ثابت مدلونك  $(\alpha_2)$ :

## تمريبات ومسائل محلولة

$$\alpha_2 = \left( \frac{-4 \left(1 - \frac{1}{4}\right)}{\sqrt{2}} + \frac{4 \left(1 - \frac{1}{2}\right)}{1} \right) + \left( \frac{8 \left(\frac{1}{2}\right)}{\sqrt{5}} + \frac{4 \left(-\frac{1}{2}\right)}{2} + \frac{4 \left(-\frac{1}{4}\right)}{2\sqrt{2}} \right) = 0,314$$

ما تبقى من شحن المربع الأول

شحن سطح المربع الثاني

ونفس الأسلوب أعلاه نأخذ المربع الأكبر الثالث (الذي يشتمل داخله على المربع الثاني) ومساهمة المربع الثالث في ثابت مدلونك ( $\alpha_3$ ) تساوي:

$$\alpha_3 = \left( \frac{8 \left(1 - \frac{1}{2}\right)}{\sqrt{5}} + \frac{-4 \left(1 - \frac{1}{2}\right)}{2} + \frac{-4 \left(1 - \frac{1}{4}\right)}{2\sqrt{2}} \right) + \left( \frac{8 \left(\frac{1}{2}\right)}{\sqrt{13}} + \frac{8 \left(-\frac{1}{2}\right)}{\sqrt{10}} + \frac{4 \left(\frac{1}{2}\right)}{3} + \frac{4 \left(-\frac{1}{2}\right)}{3\sqrt{2}} \right) = 3,6 \times 10^{-3}$$

ما تبقى من شحن المربع الثاني

وثابت مدلونك يساوي:

$$\alpha = \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 \simeq 1,61$$

ونستطيع أن نستمر بالحساب لمربعات أكبر ولكن مساهمتها في ثابت مدلونك ستكون صغيرة جداً، وهذه هي ميزة أسلوب أيفن بالحساب.

**التمرين 5:** خذ شبكة مستوية لا نهائية كالمستوي (100) لبلورة ملح الطعام.

أ- إذا كانت طاقة التنافر بين الذرات في الصورة  $A R^{-n}$  ( $9 = n$ ) حيث  $R$  المسافة بين الذرات، فما هي العلاقة الرابطة بين فاصلة الجوار الأقرب عند التوازن ( $R_0$ ) وبقية الكميات والثوابت:  $\alpha, A, n, \dots$

ب- باستخدام نفس هيئة العلاقة (في الفراغ أ) لبلورة ملح الطعام، أحسب النسبة بين فاصلة الجوار

الأقرب للشبكة المستوية  $R_0^{(\rho)}$  وللشبكة البلورية لملح الطعام  $R_0^{NaCl}$  علماً أن  $\alpha_{NaCl} = 1,74$  ثابت مدلونك لملح الطعام.

ج- استنتج النسبة بين طاقتي التكوين لكل جزيئة (أي لكل زوج من الأيونات المختلفة) للشبكة البلورية

المستوية  $U_0^{(\rho)}(R_0)$  و لبلورة ملح الطعام  $U_0^{NaCl}(R_0)$  عند التوازن.

**الحل:**

أ- الشبكة المستوية موضحة في السؤال السابق، الطاقة الكهروستاتيكية تساوي:

$$U_{es} = -N|\alpha|g^2/4\pi \epsilon_0 R$$

## تمريبات ومسائل محلولة

حيث  $R$  فاصلة الجوار الأقرب:  $R = R_0$  عند التوازن و  $2N$  عدد الأيونات في "البلورة" المستوية والطاقة النافرة تظهر بين الجوار الأقرب فقط.

$$U_{rep} = N Z A R^{-n}$$

حيث  $Z$  العدد التناسقي ويساوي 4 للبلورة المستوية، والطاقة الكلية الرابطة تساوي:

$$U_{tot} = U_{es} + U_{rep} = -N \frac{|\alpha|g^2}{4\pi\epsilon_0 R} + N Z A R^{-n} \quad (1)$$

وعند التوازن  $\left(\frac{dU_{tot}}{dR}\right)_{R=R_0} = 0$  نجد:

$$R_0^{n-1} = 4\pi \epsilon_0 Z n A / |\alpha|g^2 \quad (2)$$

ب- للبلورة المستوية:  $\alpha = 1,61$  و  $Z = 4$

$$\left[R_0^{(\rho)}\right]^{n-1} = 4\pi \epsilon_0 \times 4 n A / 1,61 g^2$$

ولبلورة ملح الطعام:  $\alpha = 1,74$  و  $Z = 6$

$$\left[R_0^{Nacl}\right]^{n-1} = 4\pi \epsilon_0 \times 6 n A / 1,74 g^2$$

والنسبة بينهما حيث  $n = 9$  تساوي:

$$\frac{R_0^{(\rho)}}{R_0^{Nacl}} = \left[\frac{4 \cdot 1,74}{6 \cdot 1,61}\right]^{\frac{1}{8}} = 0,96 \quad (3)$$

ج- نعوض (2) في (1) لنجد:

$$U_{tot}(R_0) = -N \frac{|\alpha|g^2}{4\pi \epsilon_0 R_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

وللبلورة المستوية:

$$U_0^{(\rho)}(R_0) = -\frac{1,61 g^2}{4\pi \epsilon_0 R_0^{(\rho)}} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

ولبلورة ملح الطعام:

$$U_0^{Nacl}(R_0) = -\frac{1,74 g^2}{4\pi \epsilon_0 R_0^{Nacl}} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$

وبالقسمة نجد:  $U_0^{(\rho)}(R_0) = 0,957 U_0^{Nacl}(R_0)$  أي أن طاقة التكوين لكل جزيئة في المستوي (100) أقل من طاقة التكوين للبلورة Nacl بمقدار 4% .

## تمريبات ومسائل محلولة

**التمرين 6:** أحسب معامل الانضغاط الحجمي  $B$  لبلورة  $LIF$  إذا علمت أن طاقة التكوين (الربط) تساوي  $246,3 \frac{\text{كيلو سعره}}{\text{مول}}$  والمسافة بين أقرب أيونين  $R_0 = 2,014 \text{ \AA}$  ، قارن النتيجة مع القيمة العملية.

**الحل:**

لبلورة  $LIF$  نفس تركيب  $NaCl$ .  
وطاقة التكوين تساوي:

$$U_{\text{tot}} = -\frac{N|\alpha|g^2}{4\pi \epsilon_0 R_0} \left(1 - \frac{\rho}{R_0}\right)$$

حيث:

$$\frac{U_{\text{tot}}}{N} = -246,3 \frac{K \text{ cal}}{\text{mole}} = 10,738 \text{ ev/جزيئة}$$

$$\left(\frac{\text{ev}}{\text{جزيئة}} 0,0433 = \text{كيلو سعرة/مول} = \text{جزيئة}\right)$$

$$\frac{1}{4\pi \epsilon_0} = 9 \times 10^9 \frac{\text{nt} \cdot \text{m}^2}{\text{cou l}^2}, \quad g = 1,6 \times 10^{-19} \text{ كولوم}$$

$$\alpha = 1,747565, \quad R_0 = 2,014 \times 10^{-10} \text{ m}$$

وعند التعويض نجد أن:

$$\frac{\rho}{R_0} = 0,141 \quad \text{و} \quad \rho = 0,283 \text{ \AA}$$

وللبورات ذات التركيب  $NaCl$  تصح العلاقة التالية:

$$B = \frac{|\alpha|g^2}{4\pi \epsilon_0 18 R_0^4} \left(\frac{R_0}{\rho} - 2\right) = 0,69 \times 10^{11} \frac{\text{nt}}{\text{m}^2}$$

$$B_{\text{theo}} = 6,92 \times 10^{11} \frac{\text{داين}}{\text{سم}^2} \quad \text{بينما} \quad B_{\text{exp}} = 6,71 \times 10^{11} \frac{\text{داين}}{\text{سم}^2}$$

والنتيجتان متقاربتان.

### • تمريبات المحور الرابع:

**التمرين 1:** يعطى ممتد الإجهاد بالنسبة للمحاور  $\Sigma$  بالصورة التالية:

$$\sigma = \begin{vmatrix} 0,7 & 3,6 & 0 \\ 3,6 & 2,8 & 0 \\ 0 & 0 & 7,6 \end{vmatrix} \text{ نيوتن/مم}^2$$

## تمرينات ومسائل محلولة

أ- حدد الاجهادات والمحاور الرئيسية وبين أن الاجهادات الرئيسية عمودية على المستويات المتعامدة مع المحاور الرئيسية.

ب- صف حالة الإجهاد على الوجه العمودي على الشعاع [100] وقارن النتائج مع عناصر الممتد  $\sigma$ .

ج- أحسب الإجهاد العمودي والمماسي عند النقطة  $n$  الواقعة على السطح ذو العمود  $\vec{n} \left( \frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, 0 \right)$ .

**الحل:**

أ- لحساب الاجهادات الرئيسية نطرق (Diagonalize) الممتد طبقا للعلاقة  $\det(\vec{\sigma} - \lambda \vec{I}) = 0$  ومنه:

$$\begin{vmatrix} 0,7 - \lambda & 3,6 & 0 \\ 3,6 & 2,8 - \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 7,6 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad \lambda_1 = 7,6, \quad \lambda_2 = -2, \quad \lambda_3 = 5,5$$

وهذه هي قيم الاجهادات الرئيسية، إذن يأخذ الممتد  $\sigma$  بالنسبة للمحاور الرئيسية الصورة:

$$\begin{matrix} (+) \text{ سحب} \\ (-) \text{ كبس} \end{matrix} : \begin{bmatrix} 7,6 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 5,5 \end{bmatrix}$$

نفرض أن أي من المحاور الرئيسية ينطبق على الشعاع  $\vec{r}$ ، وهذا الشعاع يحقق المعادلة:

$$\vec{\sigma} \vec{r} = \lambda \vec{r}$$

$$\vec{r} = \vec{r}_1(x_1, x_2, x_3) \begin{cases} -6,9x_1 + 3,6x_2 = 0 \\ 3,6x_1 - 4,8x_2 = 0 \\ 0 \cdot x_3 = 0 \end{cases} \begin{matrix} x_1 = x_2 = 0 \\ x_3 \neq 0 \end{matrix} \quad \therefore \vec{V}_1 = (0,0,1)$$

حيث  $\vec{V}_1$  وحدة الشعاع  $\vec{r}_1$  ويمثل "أول" محور رئيسي:

$$\vec{r} = \vec{r}_2(x_1, x_2, x_3) \begin{cases} -4,8x_1 + 3,6x_2 = 0 \\ 3,6x_1 - 2,8x_2 = 0 \\ 2,1x_3 = 0 \end{cases} \begin{matrix} x_2 = \frac{4}{3}x_1 \\ x_3 = 0 \end{matrix} \quad \therefore \begin{matrix} \vec{r}_3 = \left(1, \frac{4}{3}, 0\right) \\ \vec{V}_3 = \left(\frac{3}{5}, \frac{4}{5}, 0\right) \end{matrix}$$

وبنفس الأسلوب نجد:  $\vec{V}_2 = \left(\frac{-4}{5}, \frac{3}{5}, 0\right)$

ونستطيع تلخيص وترتيب النتائج أعلاه بالشكل التالي:

		محاور رئيسية		
		$\vec{V} \lambda$	$x_1$	$x_2$
اجهادات رئيسية	5,5	3/5	4/5	0

## تمرينات ومسائل محلولة

-2	-4/5	3/5	0
7,6	0	0	1

نأخذ مستوي عمودي على  $x_1$  أي أن العمودي عليه هو  $\vec{r}_1 \left( \frac{3}{5}, \frac{4}{5}, 0 \right)$ .  
وتحسب "شعاع" الإجهاد الكلي على هذا المستوي:

$$\vec{T}_1 = \vec{\sigma} \vec{r}_1 = \begin{bmatrix} 0,7 & 3,6 & 0 \\ 3,6 & 2,8 & 0 \\ 0 & 0 & 7,6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3/5 \\ 4/5 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3,3 \\ 4,4 \\ 0 \end{bmatrix} ; |\vec{T}_1| = 5,5$$

الإجهاد العمودي على هذا المستوي يساوي:

$$T_{1r} = \vec{T}_1 \cdot \vec{r}_1 = [3,3 \quad 4,4 \quad 0] \begin{bmatrix} 3/5 \\ 4/5 \\ 0 \end{bmatrix} = 5,5$$

معنى هذا أن الإجهاد المماسي على هذا المستوي معدوماً، إذن يتعامد الإجهاد الكلي (الرئيسي) على المستوي المدروس وهذا هو المطلوب إثباته، وبنفس الأسلوب نأخذ مستويات عمودية على  $x_2$  و  $x_3$  لنبين أن الإجهاد الكلي (الرئيسي) عمودي عليهما.

ب- شعاع الإجهاد الكلي على السطح (100) يساوي:

$$\vec{T} = \vec{\sigma} \vec{r} = \begin{bmatrix} 0,7 & 3,6 & 0 \\ 3,6 & 2,8 & 0 \\ 0 & 0 & 7,6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,7 \\ 3,6 \\ 0 \end{bmatrix} ; |\vec{T}| = \sigma_T = 3,66$$

المركبة الكلية للشعاع الرئيسي  $T_n$  (الإجهاد العمودي) تساوي:

$$\sigma_n = T_n = \vec{T} \cdot \vec{n} = [0,7 \quad 3,6 \quad 0] \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = +0,7 \quad \frac{\text{نيوتن}}{\text{مم}^2} \text{ (سحب)}$$

وهو متوقع سلفاً من الممتد  $\sigma$  :  $\sigma_{11}$

المركبة المماسية للإجهاد الرئيسي  $\sigma_\tau$  (الإجهاد المماسي) تساوي:

$$\sigma_\tau = \sqrt{\sigma_T^2 - \sigma_n^2} = 3,6 \quad \text{نيوتن}^2 / \text{مم}^2$$

وهي تساوي  $\sigma_{21}$ .

ج- شعاع الإجهاد الكلي على السطح ذو العمود  $\vec{n}$  يساوي:

$$\vec{T} = \vec{\sigma} \vec{n} = \begin{bmatrix} 0,7 & 3,6 & 0 \\ 3,6 & 2,8 & 0 \\ 0 & 0 & 7,6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{3}/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2,41 \\ 4,52 \\ 0 \end{bmatrix} ; \sigma_T = |\vec{T}| = 5,12 \quad \frac{\text{نيوتن}}{\text{مم}^2}$$

## تمريبات ومسائل محلولة

الإجهاد العمودي يساوي:

$$\sigma_n = T_n = \vec{T} \cdot \vec{n} = 4,3 \text{ نيوتن/مم}^2$$

والإجهاد المماسي يساوي:

$$\sigma_\tau = 2,7 \text{ نيوتن/مم}^2$$

**التمرين 2:** الحالة الإجهادية لبلورة الكوارتز بالنسبة للمحاور البلورية ( $\Sigma$ ) توصف كما يلي:

$$\sigma_{11} = 10, \quad \sigma_{22} = 20, \quad \sigma_{33} = 30, \quad \sigma_{12} = -5 \text{ نيوتن/سم}^2$$

أ- عين قيمة أقصى وأخفض إجهاد عمودي تعاني منه البلورة.

ب- توجه المستويات التي تعاني من أقصى وأخفض إجهاد عمودي.

**الحل:**

توصف الحالة الإجهادية للبلورة بالمتد:

$$[\sigma_{ij}]_\Sigma = \begin{bmatrix} 10 & -5 & 0 \\ -5 & 20 & 0 \\ 0 & 0 & 30 \end{bmatrix}$$

أ- للحصول على أقصى وأخفض إجهاد عمودي نعين الإجهادات الرئيسية أي نقرر الممتد أو نحسبه

بالنسبة للمحاور الرئيسية  $\Sigma$  ، والتقطير يتم طبقا للعلاقة:  $det(\vec{\sigma} - \lambda \vec{I}) = 0$ .

$$\begin{vmatrix} 10 - \lambda & -5 & 0 \\ -5 & 20 - \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 30 - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad \text{و} \quad \lambda_1 = 30, \quad \lambda_2 = 22,071067$$

أي أن أقصى إجهاد عمودي تعاني منه البلورة هو 30 نيوتن/سم<sup>2</sup>، وأخفض إجهاد عمودي هو 7,9 نيوتن/سم<sup>2</sup>.

ب- نحسب توجه المحاور الرئيسية: نفرض أن أي من المحاور الرئيسية ينطبق على الشعاع  $\vec{r}$  ، هذا

الشعاع يحقق المعادلة:  $\vec{\sigma} \vec{r} = \lambda \vec{r}$ .

$$\vec{r} = \vec{r}_1(x_1, x_2, x_3) \begin{cases} (10 - \lambda_1)x_1 - 5x_2 = 0 \\ -5x_1 + (20 - \lambda_1)x_2 = 0 \\ (30 - \lambda_1)x_3 = 0 \end{cases} \begin{cases} x_1 = 2,41421x_2 \\ x_3 = 0 \end{cases}$$

$$\vec{r} \simeq (2,4142, 1, 0) \text{ و } \vec{V}_1 = \frac{\vec{r}_1}{r_1} \simeq (0,924 \text{ و } 0,383 \text{ و } 0)$$

حيث:  $\vec{V}_1$  وحدة شعاع  $X_1$  (المحور الرئيسي).

## تمرينات ومسائل محلولة

$$\vec{r} = \vec{r}_2(x_1, x_2, x_3) : \vec{r}_2 \simeq (0, 42 \text{ و } 1 \text{ و } 0) \text{ و } \vec{V}_2 \simeq (-0, 383 \text{ و } 0, 924 \text{ و } 0)$$

$$\lambda = \lambda_2 = 22, 071$$

$$\vec{r} = \vec{r}_3(x_1, x_2, x_3) : \vec{r}_3 \simeq (0, 0, x_3) \text{ و } \vec{V}_3 \simeq (0, 0, 1)$$

$$\lambda = \lambda_3 = 30$$

أي أن أعظم إجهاد عمودي يعانيه المستوي ذو العمود  $(0, 0, 1)$ ، وأخفض إجهاد عمودي يعانيه المستوي الذي جيوب تمام توجيه العمود عليه هي  $(0, 924 \text{ و } 0, 383 \text{ و } 0)$ .

**التمرين 3:** تعاني عينة بيئة مكعب طول ضلعه  $l$  سم من تشوه مرن بحيث أزيحت نقاطها بالمقادير:

$U_1 = (4x_1 + 3x_2 - 5x_3)$ ,  $U_2 = (7x_1 - 13x_2 + 4x_3)$ ,  $U_3 = (9x_1 - 2x_2 + 4x_3) \times 10^{-4}$  سم  
حيث:  $(x_1, x_2, x_3)$  إحداثيات أية نقطة من نقاط العينة قبل التشوه بوحدات السنتمتر، والمطلوب حساب تغير الزوايا بين أحرف المكعب وتغير حجمه عند التشوه.

**الحل:**

ممتد الإزاحات الصغيرة، وممتد التشوه، وممتد الدوران هما على التوالي:

$$[\epsilon_{ij}] = \begin{bmatrix} 4 & 3 & -5 \\ 7 & -13 & 4 \\ 9 & -2 & 4 \end{bmatrix} 10^{-4} ; [e_{ij}] = \begin{bmatrix} 4 & 5 & 2 \\ 5 & -13 & 1 \\ 2 & 1 & 4 \end{bmatrix} 10^{-4} ; [w_{ij}] = \begin{bmatrix} 0 & -2 & -7 \\ 2 & 0 & 3 \\ 7 & -3 & 0 \end{bmatrix} 10^{-4}$$

تغير الزاوية بين المحورين  $x_i$  و  $x_j$  يساوي  $2e_{ij}$ :

$$3,42^\circ = 0,057^\circ = \frac{180^\circ}{\pi} \times 10^{-4} \times 5 \times 2 = 2e_{12} = x_2 \text{ و } x_1 \text{ بين الزاوية}$$

$$1,2^\circ = 2e_{13} = x_3 \text{ و } x_1 \text{ بين الزاوية}$$

$$0,68^\circ = 2e_{23} = x_3 \text{ و } x_2 \text{ بين الزاوية}$$

والتغير النسبي في الحجم يساوي تقريبا مجموع العناصر القطرية للممتد  $[e_{ij}]$ :

$$\frac{\Delta V}{V} \simeq (4 - 13 + 4) \times 10^{-4} = -5 \times 10^{-4}$$

**التمرين 4:** بلورة مكعبة الفئة تخضع لضغط هيدروستاتيكي  $\Delta p$ ، ما هي العلاقة بين معامل الانضغاط الحجمي  $B$  ومعاملات المرونة  $C$ .

**الحل:**

ممتد الإجهاد الهيدروستاتيكي هو:  $\sigma_{ij} = \Delta p \delta_{ij}$

$$e_p = \sum_{g=1}^6 p_g \sigma_g \quad \text{إذن: } e_p = \Delta p (S_{11} + 2S_{12}) \quad e_1 = e_2 = e_3 = -$$

## تمريبات ومسائل محلولة

$$\frac{\Delta V}{V} = \sum_{i=1}^3 e_{ij} = -3\Delta p(S_{11} + 2S_{12}) \text{ ومنه:}$$

ولدينا للبلورة ذات الفئة المكعبة:  $(S_{11} + 2S_{12})^{-1} = C_{11} + 2C_{12}$ ، إذن:

$$B = \frac{\Delta p}{\Delta V/V} = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12})$$

**التمرين 5:** أدرس طبيعة الموجات المنتشرة في الإتجاه [111] للبلورات ذات الفئة المكعبة:

1- ما هو المحدد الذي يعين ترددات الموجات المنتشرة في الاتجاه أعلاه؟

2- ما هي سرعة انتشار الموجات في الاتجاه المبين؟

3- ما هي طبيعة الحركات الموجية في الاتجاه المبين؟

**الحل:** للإجابة على الأسئلة أعلاه نستخدم المعادلات التالية:

$$\sum_{l=1}^3 (L_{il} - \rho w^2 \delta_{il}) u_l = 0 \quad , \quad (i = 1, 2, 3) \quad (1)$$

حيث:

$$L_{il} = \sum_{j,m=1}^3 C_{ijlm} k_j k_m \quad (2)$$

وللبلورات المكعبة:

$$L_{11} = \alpha k_1^2 + C_{44} k^2; \quad L_{22} = \alpha k_2^2 + C_{44} k^2; \quad L_{33} = \alpha k_3^2 + C_{44} k^2$$

$$L_{ij} = \beta k_i k_j \quad (i \neq j); \quad \alpha = C_{11} - C_{44}; \quad \beta = C_{12} + C_{44}$$

بما أن الانتشار في الاتجاه [111]، إذن:

$$k_1 = k_2 = k_3 = \frac{k}{\sqrt{3}} \quad (3)$$

إذن:

$$L_{11} = L_{22} = L_{33} = \left(\frac{\alpha}{3} + C_{44}\right) k^2 = \left(\frac{C_{11} - C_{44}}{3} + C_{44}\right) k^2 = \frac{C_{11} - 2C_{44}}{3} k^2$$

$$L_{ij} = (C_{12} + C_{44}) \frac{k^2}{3} \quad (i \neq j)$$

والمعادلات الأساسية (1) هي:

$$\left(\frac{C_{11} - 2C_{44}}{3} k^2 - \rho w^2\right) u_1 + \frac{C_{12} + C_{44}}{3} k^2 u_2 + \frac{C_{12} + C_{44}}{3} k^2 u_3 = 0$$

$$\frac{C_{12} + C_{44}}{3} k^2 u_1 + \left(\frac{C_{11} - 2C_{44}}{3} k^2 - \rho w^2\right) u_2 + \frac{C_{12} + C_{44}}{3} k^2 u_3 = 0$$

$$\frac{C_{12} + C_{44}}{3} k^2 u_1 + \frac{C_{12} + C_{44}}{3} k^2 u_2 + \left(\frac{C_{11} - 2C_{44}}{3} k^2 - \rho w^2\right) u_3 = 0$$

## تمريبات ومسائل محلولة

1- ولهذه المعادلات المتجانسة حل مشروط بالمحدد:

$$\begin{vmatrix} g - \rho w^2 & \rho & \rho \\ \rho & g - \rho w^2 & \rho \\ \rho & \rho & g - \rho w^2 \end{vmatrix} = 0; \quad \begin{aligned} g &= \frac{C_{11} - 2C_{44}}{3} k^2 \\ \rho &= \frac{C_{12} + C_{44}}{3} k^2 \end{aligned}$$

- لحل معادلة المحدد أعلاه نطبق النظرية الرياضية التالية:

للمحدد المربع من الدرجة  $R$  بحيث تتساوى عناصره القطرية وتساوي  $g - \lambda$  ، وبقية العناصر اللاقطرية متساوية وتساوي  $\rho$ ، فإن له الجذور التالية:

الجذر الأول  $\lambda_1$  يساوي:  $(R - 1)\rho + g$

وبقية الجذور وعددها  $(R - 1)$  :  $\lambda_2, \dots, \lambda_R$  متساوية وتساوي  $g - \rho$

في حالتنا الراهنة  $R = 3$  و  $\lambda = \rho w^2$ ، إذن:

$$\rho(w^{(1)})^2 = 2\rho + g \quad , \quad \rho(w^{(2)})^2 = \rho(w^{(3)})^2 = g - \rho$$

إذن:

$$w^{(1)} = \sqrt{\frac{2\rho + g}{\rho}} = \sqrt{\frac{C_{11} - 4C_{44} + 2C_{12}}{3\rho}} K$$

$$w^{(2)} = w^{(3)} = \sqrt{\frac{g - \rho}{\rho}} = \sqrt{\frac{C_{11} - C_{12} + C_{44}}{3\rho}} K$$

2- والموجات أعلاه تتحرك بالسرعة الطورية التالية:  $v = \frac{w}{k}$

$$v^{(1)} = \sqrt{\frac{C_{11} - 4C_{44} + 2C_{12}}{3\rho}} \quad \text{و} \quad v^{(2)} = v^{(3)} = \sqrt{\frac{C_{11} - C_{12} + C_{44}}{3\rho}}$$

3- الموجة (1) ،  $\vec{u}^{(1)}$  لدينا:  $g - \rho w^2 = g - (2\rho + g) = -2\rho$

والمعادلات (4) تؤول إلى:

$$\begin{cases} -2u_1 + u_2 + u_3 = 0 \\ u_1 - 2u_2 + u_3 = 0 \\ u_1 + u_2 - 2u_3 = 0 \end{cases} \quad u_1 = u_2 = u_3 = u$$

إذا  $\vec{u}^{(1)}$  يوازي [111] وبالتالي يوازي  $\vec{k}$  أي أن هذه الموجة طولية (اتجاه التذبذب يوازي اتجاه الانتشار).

الموجتان  $u^{(2)}$  و  $\vec{u}^{(2)}$  و  $w^{(3)}$  و  $\vec{u}^{(3)}$  ، لدينا:

## تمريبات ومسائل محلولة

$$g - \rho w^2 = g - (g - \rho) = -\rho$$

ومن المعادلات (4) نحصل على معادلة واحدة هي:

$$u_1 + u_2 + u_3 = 0$$

نفرض أن  $\vec{u}(u_1, u_2, u_3)$  ونفرض وجود شعاع  $\vec{A}(A_1, A_2, A_3)$  عمودي على  $\vec{u}$  عندئذ:

$$\vec{A} \cdot \vec{u} = A_1 u_1 + A_2 u_2 + A_3 u_3 = 0$$

وحيث أن:  $u_1 + u_2 + u_3 = 0$  إذن:  $A_1 = A_2 = A_3$ .

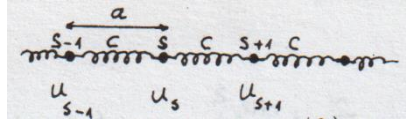
معنى هذا أن الشعاع  $\vec{u}$  العمودي هو الشعاع [111] أو هو شعاع الانتشار  $\vec{k}$ ، لذلك فالتذبذب  $\vec{u}$  (الذي يمثل موجتان) عمودي على اتجاه الانتشار، معنى هذا أن الموجتان  $u^{(2)}$  و  $u^{(3)}$  هما مستعرضتان (T).

### • تمرينات (اهتزازات الشبكة البلورية)

**التمرين 1:** خذ الموجة الطولية (النمط) المنتشرة في "شبكة" خطية ثابتها وكتلة كل ذرة من ذراتها. اعتبر التفاعل يتم مع الجوار الأقرب وخذ ثابت قوة هوك وبرهن أن المعدل الزمني للطاقة الكلية المنسوبة لذرة واحدة من ذرات السلسلة المشتركة في النمط تساوي:

$$w^2 = \frac{2c}{M} (1 - \cos ka) \quad \frac{1}{2} M w^2 u^2$$

الحل:



نأخذ الذرة  $S$ ، طاقتها الكلية وهي متحركة ضمن النمط المعطى في السؤال تساوي:

$$E_s = (E_c)_s + (E_p)_s = \frac{1}{2} M \left( \frac{du_s}{dt} \right)^2 + (E_p)_s$$

حيث  $(E_c)_s$ : الطاقة الحركية للذرة  $s$  و  $(E_p)_s$  هي الطاقة الكامنة التي تحسب على أساس التفاعل مع الجوار الأقرب: القوة على الذرة  $s$  تساوي:

$$F_s = -c(u_s - u_{s+1}) - c(u_s - u_{s-1})$$

حيث:

$$\begin{aligned} u_{s\pm 1} &= u \cos[wt - (s \pm 1)ka] = u \cos[(wt - s ka) \pm ka] \\ &= u(\cos(wt - s ka) \cos ka \pm \sin(wt - s ka) \sin ka) \end{aligned}$$

إذن:

## تمرينات ومسائل محلولة

$$u_{s+1} + u_{s-1} = 2u_s \cos ka$$

وبالتالي فإن:

$$F_s = -c(2u_s - 2u_s \cos ka) = -2c u_s(1 - \cos ka)$$

والطاقة الكامنة تساوي:

$$(E_p)_s = \int F_s du_s = c(1 - \cos ka)u_s^2$$

وبالتالي نجد:

$$E_s = \frac{1}{2} M \left( \frac{du_s}{dt} \right)^2 + c(1 - \cos ka)u_s^2$$

وبالتعويض عن  $E_s$  والجمع على كل الذرات  $N$  في السلسلة نجد الطاقة الكلية للنمط المعطى:

$$\begin{aligned} E &= \sum_{s=1}^N E_s = \frac{1}{2} M \sum_{s=1}^N \left( \frac{du_s}{dt} \right)^2 + c(1 - \cos ka) \sum_{s=1}^N u_s^2 \\ &= \frac{1}{2} M w^2 u^2 \sum_{s=1}^N \sin^2(wt - s ka) + c(1 - \cos ka) u^2 \sum_{s=1}^N \cos^2(wt - s ka) \end{aligned}$$

والآن نأخذ معدل الطرفين الزمني، ولدينا:

$$\left\langle \sum_{s=1}^N \sin^2(wt - s ka) \right\rangle = \langle \sin^2(wt - ka) \rangle + \langle \sin^2(wt - 2ka) \rangle + \dots + \langle \sin^2(wt - Nka) \rangle$$

المعدل الزمني لمربع الجيب أو الجيب تمام يساوي  $\frac{1}{2}$ ، عندئذ نجد:

$$\left\langle \sum_{s=1}^N \sin^2(wt - s ka) \right\rangle = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \dots (\text{حدا } N) = \frac{N}{2}$$

$$\left\langle \sum_{s=1}^N \cos^2(wt - s ka) \right\rangle = \frac{N}{2}$$

إذن:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{4} N M w^2 u^2 + \frac{1}{2} N c(1 - \cos ka) u^2$$

وباستعمال علاقة التبديد نجد:

$$\langle E \rangle = N \frac{1}{2} M w^2 u^2$$

## تمرينات ومسائل محلولة

$$\langle E \rangle / N = \frac{1}{2} M \omega^2 u^2$$

وهذا هو المطلوب إثباته.

**التمرين 2:** سلسلة خطية من الذرات المتماثلة، كتلة كل منها  $M$  والمسافة الفاصلة بين كل ذرتين  $a$ .  
 (أ) ما هو قانون التبدد عندما يتم التفاعل المتبادل بين كل ذرات السلسلة (أي ليس فقط الجوار القريب).

(ب) اعتبر الموجة طولية وعين اندفاع "البلورة" الخطية إذا كان شعاع الموجة المارة  $\vec{k}$ ، ثم أثبت انعدام اندفاع الفونون.

### الحل:

(أ) القوة على الذرة  $s$  الناتجة عن انزياح الذرة  $(s + \rho)$  تتناسب وفق قانون هوك مع فرق الازاحة  $(U_{s+\rho} - U_s)$ ، والقوة المحصلة على الذرة  $s$  الناتجة عن انزياح كل الذرات تساوي:

$$F_s = M \frac{d^2 U_s}{dt^2} = \sum_{\rho} \beta_{\rho} (U_{s+\rho} - U_s) \quad (1)$$

والجمع يتم على كل قيم  $\rho$  السالبة والموجبة، الثابت  $\beta_{\rho}$  هو ثابت القوة بين الذرتين  $s$  و  $s + \rho$  المفصولتين بالمسافة  $\rho a$  ويفترض بأن  $\beta_{\rho}$  يعتمد على المسافة بين الذرات، فإذا كانت ذرات السلسلة متماثلة فإن التناظر الانسحابي يستوجب كون  $\beta_{\rho} = \beta_{-\rho}$ ، عندئذ يكون لدينا:

$$F_s = M \frac{d^2 U_s}{dt^2} = \sum_{\rho > 0} \beta_{\rho} (U_{s+\rho} - U_{s-\rho} - 2U_s) \quad (2)$$

ونجرب حلاً لمعادلة الحركة هذه بصورة أمواج منتشرة:

$$U_{s+\rho} = U e^{i[(s+\rho)ka - \omega t]} \quad (3)$$

وبالتعويض والاختصار نجد:

$$\omega^2 = \frac{2}{M} \sum_{\rho > 0} \beta_{\rho} (1 - \cos \rho ka) \quad (4)$$

حيث:  $2 \cos \rho ka = e^{i\rho ka} + e^{-i\rho ka}$ ، وهذه هي علاقة التبدد.

أعظم قيمة للتبدد  $\omega^2$  يستنتج من:

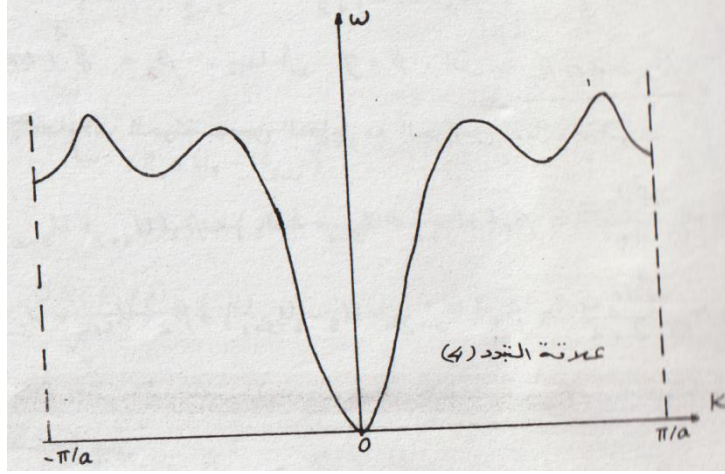
$$\frac{d\omega^2}{dk} = \frac{2}{M} \sum_{\rho > 0} \rho a \beta_{\rho} \sin \rho ka = 0$$

لو أخذنا الموجة  $U'_{s+\rho}$  ذات الشعاع  $\vec{k} = \vec{k} + \vec{G}$  خارج منطقة بريليون الأولى حيث  $\vec{G}$  هو شعاع الشبكة المعكوسة لشبكة سلسلة الذرات  $G = \frac{2\pi}{a} n$ ،  $n$  عدد صحيح، لوجدنا بأن  $U'_{s+\rho} = U_{s+\rho}$  معنى

## تمرينات ومسائل محلولة

هذا أن الموجة الموافقة للشعاع  $\vec{k}$  (خارج منطقة بريليون) ما هي إلا تكرار للموجة  $\vec{k}$  الموجودة داخل منطقة بريليون، لذلك نقول أن كل الأنماط المستقلة موجودة داخل منطقة بريليون، حيث  $K_{max} = \pm \frac{\pi}{a}$

والتي عندها يساوي  $\frac{d\omega^2}{dk} = 0$ .



(ب) نجعل  $s + \rho = r$  في المعادلة (3) ونكتب انزياح ذرة السلسلة  $r$ :

$$\vec{u}_r = \vec{u} e^{i(rka - \omega t)}$$

حيث يكون  $\vec{u}$  باتجاه  $\vec{u}$  للموجات الطولية، اندفاع الذرة  $r$  هو:

$$\vec{P}_r = M \frac{d\vec{u}_r}{dt} = -i M \omega \vec{u} e^{i(rka - \omega t)}$$

واندفاع كل ذرات السلسلة يساوي:

$$\vec{P} = \sum_{r=0}^{N-1} \vec{P}_r = -i M \omega \vec{u} e^{-i\omega t} \sum_{r=0}^{N-1} e^{irka}$$

حيث  $N$  عدد ذرات السلسلة.

وحيث أن:

$$\sum_{r=0}^{N-1} x^r = \frac{1 - x^N}{1 - x}$$

وبإبدال  $x \equiv e^{ika}$  نجد:

$$\vec{P} = -i M \omega \vec{u} e^{-i\omega t} \frac{1 - e^{ikaN}}{1 - e^{ika}}$$

## تمريبات ومسائل محلولة

وبتطبيق الشروط الحدودية الدورية  $U_r = U_{r+N}$  نجد أن:  $e^{ikaN} = 1$  إذن:  $\vec{P} = 0$ ، وحيث أن الموجة تمثل بفونون، لذلك فإن اندفاع الفونون معدوم (عدا الحالة  $k = 0$ )، فعند  $(k = 0)$  فإن كل الذرات تتحرك بسرعة  $-i\omega\vec{u}$  أي أن الاندفاع  $\vec{P}(0)$  هو اندفاع كل السلسلة بالسرعة  $-i\omega\vec{u}$ .

**التمرين 3:** اعتبر سلسلة خطية طويلة مكونة من  $2N$  أيونا متعاكسة الإشارة  $\pm g$  فاصلتها  $R_0$  وكتلتها  $m_{(-)}$  و  $m_{(+)}$ ، خذ التفاعل الكهروستاتيكي مع الجوار الأول والثاني، ومع الجوار الأول فقط لقوة التنافر ذات الصورة  $AR^{-\rho}$  (حيث  $\rho = g$ ،  $R$  فاصلة الجوار الأول عند التذبذب و  $A = \frac{g^2 \ln 2}{\rho} R_0^{\rho-1}$  عند التوازن).

(أ) اعتبر الانزياح صغيرا  $U \ll R_0$ ، قرب لتحصل على قانون هوك، أحسب ثوابت القوة والعلاقة بينها.

(ب) أكتب معادلات الحركة لكلا الأيونات، واقترح حلولها.

(ج) استنتج علاقة التبدد، أرسمها، ثم استنتج منطقة الترددات المحرمة.

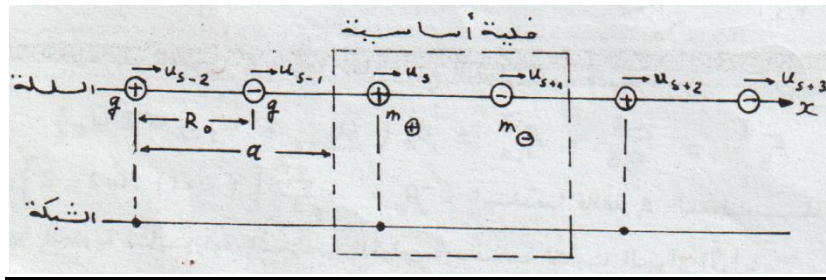
(د) تطبيق عددي:  $m_{(+)} = (Na)$ ،  $m_{(-)} = (cl)$ ،  $R_0 = 3A^\circ$

أحسب ثوابت هوك والترددات الصوتية الضوئية عند  $k = 0$  وعند حدود منطقة بريليون.

(هـ) إذا كان عرض منطقة الترددات المحرمة يساوي  $(U_g)$  أو  $(\dot{U}_g)$  عندما يؤخذ التفاعل مع الجوارين الأول والثاني (أو مع الجوار الأول فقط).

والمطلوب حساب  $\Delta U_g = U_g - \dot{U}_g$  بشكل تقريبي.

**الحل:**



(أ) القوة الكولومية على الأيون  $s$  بتفاعله مع الجوار الأقرب (الأول):

$$F_{c,s}^I = -\frac{g^2}{(R_0 + U_s - U_{s-1})} + \frac{g^2}{(R_0 + U_{s+1} - U_s)}$$

باتجاه  $x$  الموجب، والآن نقرب للإنزياحات الصغيرة:

$$(R_0 + U_s - U_{s-1})^{-2} = R_0^{-2} \left(1 + \frac{U_s - U_{s-1}}{R_0}\right)^{-2} \simeq R_0^{-2} \left(1 - 2 \frac{U_s - U_{s-1}}{R_0}\right)$$

$$(R_0 + U_{s+1} - U_s) = R_0^{-2} \left(1 + \frac{U_{s+1} - U_s}{R_0}\right)^{-2} \simeq R_0^{-2} \left(1 - 2 \frac{U_{s+1} - U_s}{R_0}\right)$$

إذن:

$$F_{c,s}^I = \frac{2g^2}{R_0^3} (U_{s+1} + U_{s-1} - 2U_s)$$

$$|\vec{F}| = \frac{\partial U}{\partial R}, \quad U = A R^{-\rho} \text{ العلاقة بتفاضل بتفاضل: } U = A R^{-\rho}$$

$$|\vec{F}| = P A R^{-\rho-1}$$

إذن:

$$F_{r,s}^I = P A \left[ + \frac{1}{(R_0 + U_s - U_{s-1})^{\rho+1}} - \frac{1}{(R_0 + U_{s+1} - U_s)^{\rho+1}} \right]$$

باتجاه  $x$  الموجبة، وباستعمال التقريب أعلاه نجد:

$$F_{r,s}^I = \frac{PA(P+1)}{R_0^{\rho+2}} (U_{s+1} + U_{s-1} - 2U_s)$$

والقوة الكلية على الأيون  $S$  نتيجة تفاعله مع الجوار الأول هي:

$$F_s^I = F_{c,s}^I + F_{r,s}^I = \beta_1 (U_{s+1} + U_{s-1} - 2U_s)$$

حيث:  $\beta_1 = \frac{g^2}{R_0^3} [(\rho+1) \ln 2 - 2]$  استخدمنا علاقة  $A$  المعطاة، والنسبة المئوية لثابت قوة التجاذب

الكولومية بالنسبة لثابت الجوار الأول.

(ج) وبالتعويض بمعادلة الحركة التفاضلية نجد:

$$-m_{(+)} w^2 A = \beta_1 B (2 \cos kR_0) - 2A\beta_1 + A\beta_2 (2 \cos 2kR_0) - 2A\beta_2$$

$$-m_{(-)} w^2 B = \beta_1 A (2 \cos kR_0) - 2B\beta_1 + B\beta_2 (2 \cos 2kR_0) - 2B\beta_2$$

والمعادلتان متجانستان لهما حل عندما يندم محدد معاملات  $A$  و  $B$ ، إذن:

$$m_{(+)} m_{(-)} w^4 - 2w^2 (m_{(+)} + m_{(-)}) (\beta_1 + \beta_2 - \beta_2 \cos 2kR_0)$$

$$+ 4(\beta_1 + \beta_2 - \beta_2 \cos 2kR_0)^2 - 4\beta_1^2 \cos^2 kR_0 = 0$$

لهذه المعادلة جذران  $w_1^2(k), w_2^2(k)$  أحدهما ضوئي والآخر صوتي، نعين قيمهما عند حدود منطقة

بريليون وعند مركزها (لأن  $k$  تتغير في حدود منطقة بريليون الأولى)  $-\frac{\pi}{2R_0} \leq k \leq \frac{\pi}{2R_0}$  :

$$k = 0 \begin{cases} m_{(+)}m_{(-)}w^4 - 2w^2(m_{(+)} + m_{(-)})\beta_1 = 0 \\ w_1^2 = 0, \quad w_2^2 = 2\beta_1 \left( \frac{1}{m_{(+)}} + \frac{1}{m_{(-)}} \right) = 2\beta_1/\mu \end{cases}$$

$$k = \frac{\pi}{2R_0}; m_{(+)}m_{(-)}w^4 - 2w^2(m_{(+)} + m_{(-)})\beta_1 + 4(\beta_1 + 2\beta_2)^2 = 0$$

$$w_{1,2}^2 = \frac{\beta_1 + 2\beta_2}{m_{(+)}m_{(-)}} [(m_{(+)} + m_{(-)}) \pm |m_{(+)} - m_{(-)}|]$$

نأخذ  $m_{(+)} < m_{(-)}$  عندئذ نحصل على:

$$w_{1,2}^2 = \frac{\beta_1 + 2\beta_2}{m_{(+)}m_{(-)}} [(m_{(+)} + m_{(-)}) \pm (m_{(-)} - m_{(+)})]$$

$$w_1^2 = \frac{2(\beta_1 + 2\beta_2)}{m_{(-)}}, \quad w_2^2 = \frac{2(\beta_1 + 2\beta_2)}{m_{(+)}}$$

$$\beta_1 = \frac{g^2}{4\pi\epsilon_0 R_0^3} [(\rho + 1) \ln 2 - 2] = 42 \frac{nt}{m} \quad (د)$$

$$\beta_2 = \frac{g^2}{4\pi\epsilon_0 4R_0^3} = 2,13 \frac{nt}{m}$$

$$w_{op}(k=0) \simeq 6 \times 10^{13} \frac{rad}{sec}, \quad w_{op} \left( k = \frac{\pi}{2R_0} \right) \simeq 4,93 \times 10^{13} \frac{rad}{sec}$$

$$\text{الصوتي} \begin{cases} w_{ac} \left( k = \frac{\pi}{2R_0} \right) \simeq 4 \times 10^{13} \text{ rad/sec} \\ v_s = R_0 \left( \frac{2\beta_1}{m_{(+)} + m_{(-)}} \right)^{1/2} \simeq 8,8 \times 10^3 \text{ m/sec} \end{cases}$$

(هـ) من الشكل يتضح أن:

$$U_g = \sqrt{\frac{2(\beta_1 + 2\beta_2)}{m_{(+)}}} - \sqrt{\frac{2(\beta_1 + 2\beta_2)}{m_{(-)}}}$$

وبالتقريب لدينا:

$$\left[ \frac{2(\beta_1 + 2\beta_2)}{m_{(+)}} \right]^{1/2} \simeq \sqrt{\frac{2\beta_1}{m_{(+)}}} \left[ 1 + \frac{\beta_2}{\beta_1} \right]$$

إذن:

## تمريعات ومسائل محلولة

$$U_g = \left[ 1 + \frac{\beta_2}{\beta_1} \right] \sqrt{2\beta_1} \left( \frac{1}{\sqrt{m_{(+)}}} - \frac{1}{\sqrt{m_{(-)}}} \right)$$

وعندما نعتبر التفاعل يتم فقط مع الجوار الأول  $\beta_2 = 0$  يكون لدينا:  
ومنه:

$$\Delta U = U_g - \dot{U}_g \simeq \sqrt{\frac{2\beta_2^2}{\beta_1}} \left( \frac{\sqrt{m_{(-)}} - \sqrt{m_{(+)}}}{\sqrt{m_{(+)m_{(-)}}}} \right)$$

### التمرين 4: تطبيق العلاقة العامة لحساب كثافة الأنماط

أ- أحسب كثافة أنماط فرع واحد طولي أو مستعرض عندما تعطى علاقة التبدد لبلورة ثلاثية الأبعاد متماثلة المناحي بالصورة:

$$(1) \text{ (ديبيي) } w = v_s k \quad (2) \quad w = w_m \sin \left| \frac{ka}{2} \right|$$

ب- صور العلاقة العامة لحساب  $D(w)$  لشبكة ثنائية البعد واستعمل قانون التبدد أعلاه.  
ج- صور العلاقة العامة لحساب  $D(w)$  لشبكة خطية واستعمل نفس قانون التبدد أعلاه.

### الحل:

سرعة الجماعة تساوي  $v_g = \frac{dw}{dk}$  تكون الوسط متماثل المناحي عندئذ تكون سطوح تساوي التردد كروية: نصف القطر  $k$  يقابل التردد  $w$ :

$$v_g = v_s ; \quad D(w) = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi k^2}{v_s} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi w^2}{v_s^3} \quad (1)$$

$$v_g = \frac{w_m a}{2} \cos \left| \frac{ka}{2} \right| ; \quad D(w) = \frac{4V}{\pi^2 a^3 w_m} \frac{(\sin^{-1} \frac{w}{w_m})}{\left(1 - \frac{w^2}{w_m^2}\right)^{1/2}} \quad (2)$$

ب- في حال البعدين، يتحول سطح تساوي التردد إلى خط تساوي التردد في الفضاء  $k_x - k_y$ ، لذلك تؤول المعادلة العامة إلى الصورة التالية:

$$D(w) = \left( \frac{L}{2\pi} \right)^2 \int_{l_w} \frac{dl_w}{v_g}$$

حيث  $dl_w$  عنصر طولي لخط تساوي التردد  $w$ ، ونستبدل الكمية  $\left( \frac{L}{2\pi} \right)^3$  بالكمية  $\left( \frac{L}{2\pi} \right)^2$ .  
وعلاقة التبدد متماثلة المناحي أي أن خط تساوي التردد دائري، نصف قطره  $k$  يقابل تردد  $w$ :

## تمريبات ومسائل محلولة

$$D(w) = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \frac{2\pi k}{v_g} = \frac{L^2}{2\pi} \frac{w}{v_g^2} \quad (1)$$

$$D(w) = \left(\frac{2L}{a}\right)^2 \frac{\sin^{-1}(w/w_m)}{2\pi(w_m^2 - w^2)^{1/2}} \quad (2)$$

ج- وفي حالة البعد فإن خط تساوي التردد سيؤول إلى نقطتين  $-k$  و  $k$ ، والعلاقة تصبح:

$$D(w) = \left(\frac{2L}{a}\right) \frac{2}{v_g}$$

إذن:

$$D(w) = \frac{Na}{\pi v_s} \quad ; \quad L = Na \quad (1)$$

$$D(w) = \frac{2N}{\pi} (w_m^2 - w^2)^{-1/2} \quad ; \quad L = Na \quad (2)$$

وهذه العلاقة مألوفة لدينا وكنا قد حصلنا عليها سابقا ولكنها هنا لفرع واحد من فروع التذبذب (نمط واحد).

### • تمريبات المحور الرابع: الخواص الحرارية

#### أسئلة قصيرة:

أ- قدر نهائي الطيف لأمواف حرارية في "بلورة" خطية طولها 1 سم والفاصلة بين ذراتها =  $5^\circ$

$$\alpha, \text{ علما أن سرعة الصوت } v_s = 3 \times 10^5 \text{ cm/sec}$$

ب- درجة حرارة ديبي للتيان (Ti) تساوي  $\theta_D = 180^\circ$  وسرعة الصوت فيه  $v_s = 6 \frac{\text{km}}{\text{sec}}$  قدر

$$\lambda_{min}$$

ج- كتلة معدنية مقدارها 100 غم تعطى 8300 ج لترفع درجة حرارتها من  $1220^\circ\text{C}$  إلى  $1250^\circ\text{C}$ ،

بمعرفة درجة حرارة ديبي لهذا الجسم  $\theta_D = 1440^\circ$  ما هي طبيعة هذا الجسم.

#### الحل:

أ- للبلورة الخطية، لدينا: وكذلك: ، إذن

$$k_{max} = \frac{\pi}{a} = 0,62 \times 10^{10} \text{ }^{-1} \text{ ، وكذلك } w_{max} = \frac{\pi v_s}{a} = 1,88 \times 10^{13} \frac{\text{راد}}{\text{ثانية}} (I.R)$$

ب- لدينا  $w_D = w_{max}$  إذن:  $w_D = h \frac{v_s}{\lambda_{min}} = k_B \theta_D$  ومنه:

## تمرينات ومسائل محلولة

$$\lambda_{min} = \frac{h v_s}{k_B \theta_D} = \frac{6,62 \times 10^{-34} \times 6 \times 10^3}{1,38 \times 10^{-23} (180 + 273)} = 6,35 \times 10^{-10} m$$

ج- السعة الحرارية تساوي  $C = nc = \frac{Q}{\Delta T}$  حيث:  $n$  عدد مولات العينة،  $c$  الحرارة النوعية وتساوي كلاسيكيا  $c = 3R$  ما دامت درجة الحرارة أكبر من  $\theta_D$ ، إذن:

$$n = \frac{Q}{3R\Delta T} = \frac{8300}{3 \times 8,3 \times 30} = \frac{100}{9} \text{ مول}$$

لدينا: 100 غم =  $n$  مول  $\times$  كتلة المول الواحد  $\therefore$  كتلة المول =  $\frac{100 \text{ غم}}{n}$  =  $\frac{100 \text{ غم}}{100/9 \text{ مول}}$

$$\text{كتلة الذرة} = \frac{10^{-3} \times 9 \text{ كغم/مول}}{N_{av}^{-1} \text{ مول}} = \frac{10^{-3} \times 9}{6,03 \times 10^{23}} \text{ كغم}$$

$$a. m. u \ 8,99 = a. m. u \ \frac{1}{10^{-27} \times 1,66} \times \frac{10^{-3} \times 9}{10^{23} \times 6,03} = \text{الذرية الكتلة}$$

$$a. m. u \ 9,01 \simeq$$

(وحدة الكتل الذرية):  $a. m. u$   $\therefore$  هو  $[Be]$

**التمرين 2:** سلسلة خطية من ذرات متماثلة (كتلتها  $m$ ) عددها  $N$  وفاصلتها  $a$ .

أ) أكتب معادلة الأنماط، طبق الشروط الحدودية، أستعن بتقريب ديبياي لتحصل على كثافة الأنماط

الطولية، أحسب تردد ودرجة حرارة ديبياي بدلالة سرعة الضوء.

ب) استعمل الميكانيك الكمي للحصول على الطاقة الداخلية الكلية.

ج) أحسب الطاقة الداخلية والسعة الحرارية بدرجات الحرارة المنخفضة والمرتفعة.

د) تطبيق عددي، خذ:  $v_s = 3000 \text{ m/s}$  ،  $a = 3A^\circ$

أحسب  $D$  ، والسعة الحرارية منسوبة لذرة واحدة بدرجة  $10^\circ k$

$$\int_0^\infty \frac{x dx}{e^x - 1} = \pi^2/6 \text{ اعتبر التكامل التالي:}$$

**الحل:**

أ) يوصف التذبذب في السلسلة بالمعادلة:

$$U_s = A e^{i(Ska - wt)} \quad (1)$$

وباستخدام ش.ح.د:  $U_s = U_{s+L}$  حيث:  $L = Na$  ، إذن:

$$k = \frac{2\pi}{L} n \quad -\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a} \quad (2)$$

## تمرينات ومسائل محلولة

في المجال  $\frac{2}{L}$  توجد كل قيم  $k$  المستقلة، عدد الأنماط في المجال  $dk$  تساوي:

$$g(k) dk = \frac{1}{(2\pi/L)} dk = \frac{L}{2\pi} dk ; \quad \left(-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}\right) \quad (3)$$

أو:

$$g(k) dk = \frac{L}{\pi} dk , \quad \left(0 \leq k \leq \frac{\pi}{a}\right) \quad (4)$$

أي أنه لكل قيمة مقدارها  $k$  (موجبة) يوجد نمطان  $k$  و  $-k$  لهما نفس التردد  $w$ :

$$D(w) dw = g(|k|) dk$$

$$D(w) dw = \frac{L}{\pi} dk \quad (5)$$

وبتقريب ديبياي  $w = v_s k$ ، إذن:

$$D(w) = \frac{Na}{\pi v_s} \quad (6)$$

تردد ديبياي  $w_D = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}$  يستحصل مما يلي:

$$\int_0^{w_D} D(w) dw = N ; \quad w_D = \frac{\pi v_s}{a} , \quad \theta_D = \frac{\hbar w_D}{k_\beta} = \frac{\hbar v_s}{2 a k_\beta} \quad (7)$$

(ب) الطاقة الداخلية تساوي:

$$U = \int_0^{w_D} \langle \varepsilon \rangle D(w) dw \quad (8)$$

حيث معدل طاقة الهزازة التوافقية يساوي:

$$\langle \varepsilon \rangle = \left( \langle n \rangle + \frac{1}{2} \right) \hbar w$$

و  $\langle n \rangle = (e^{\beta \hbar w} - 1)^{-1}$  معدل عدد الفوتونات الشاغلة للسوي الطاق  $\hbar w$ .

وعند حساب  $C_v$  نهمل الطاقة الصفرية  $\frac{1}{2} \hbar w$  لعدم تعلقها بدرجة الحرارة، وبالتالي نتعامل مع طاقة

الهزازات كتعاملنا مع طاقة غاز الفونونات.

$$U = \int_0^{w_D} \frac{\hbar w}{e^{\beta \hbar w} - 1} D(w) dw \quad (9)$$

وباستعمال (6) نجد:

$$U = \frac{Na}{\pi v_s} \int_0^{w_D} \frac{\hbar w dw}{e^{\beta \hbar w} - 1} \quad (10)$$

(ج) - في درجات الحرارة المرتفعة:  $k_B T \gg \hbar w_D$  إذن:

$$U = N k_B T \quad \text{إذن: } e^{\beta \hbar w} \simeq 1 + \frac{\hbar w}{k_B T}$$

## تمريبات ومسائل محلولة

حيث:  $w_D = \frac{\pi v_s}{a}$  وهي نفس قيمة ديولنك وبتي لأن.

$$C_v = \frac{\partial U}{\partial T} = N k_B$$

- في درجات الحرارة المنخفضة:  $k_B T \ll \hbar w_D$  إذن:

$$\int_0^{w_D} \rightarrow \int_0^{\infty} \text{ ويوضع } \frac{\hbar w}{k_B T} = x \text{ نجد:}$$

$$U = \frac{Na}{\pi v_s} \frac{(k_B T)^2}{\hbar} \int_0^{\infty} \frac{x dx}{e^x - 1} = \frac{2 Na}{v_s \hbar} (k_B T)^2 \frac{\pi^2}{6}$$

إذن:

$$C_v = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{2 \pi^2 Na k_B^2}{3 v_s} T = \frac{\pi^2}{3} N k_B \frac{T}{\theta_D}$$

$$\theta_D = \frac{\hbar v_s}{2a k_B} \text{ لأن:}$$

ومن هذا نستنتج أن السعة الحرارية تتناسب مع  $\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^1$  للشبكة الخطية وهي تتناسب مع  $\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^2$  للشبكة

المستوية ومع  $\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3$  للشبكة الثلاثية الأبعاد (قانون ديبي).

(د) تطبيق عددي:

$$\theta_D = \frac{\hbar v_s}{k_B 2a} = 239^\circ k$$

$$\begin{aligned} \frac{C_v}{N} (10^\circ k) &= 0,138 k_B = 0,19 \times 10^{-23} J/^\circ k \\ &= 0,12 \times 10^{-4} ev/^\circ k \end{aligned}$$

**التمرين 3:** سرعة الموجات الصوتية الطولية في سائل  $^4He$  عند  $(T < 0,6^\circ k)$  تساوي

$$\rho = 0,145 \text{ gm cm}^{-3} \text{ كثافة السائل } ( \text{لا توجد موجات مستعرضة} ), 2,383 \times 10^4 \text{ cm s}^{-1}$$

(أ) أحسب  $\theta_D$ .

(ب) أحسب الحرارة النوعية لكل غرام، ماذا تستنتج، قارن مع القيمة العملية  $C_v =$

$$0,0204 T^3 \text{ j g}^{-1} k^{-1}$$

**الحل:** لنحط طولي واحد، وطبقا لنظرية ديبي نجد:

$$C_v = \frac{234}{3} N K_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3$$

## تمريبات ومسائل محلولة

$$\theta_D = \frac{\hbar v_s}{K_B} K_D \quad , \quad K_D = (6 \pi^2 n)^{1/3} \quad (أ)$$

$$n = \frac{\rho N_{av}}{M} = \frac{145 \times 6 \times 10^{26}}{4} = 2,175 \times 10^{28} / m^3 , K_D = 1,08 \times 10^{10} m^{-1}$$

$$\theta_D = 19,7 \text{ } ^\circ K , \quad C_v = 0,0844 T^3 j \text{ mole}^{-1} \text{ } ^\circ K^{-1}$$

$$C_v = 0,02111 j \text{ gm}^{-1} \text{ } ^\circ K^{-1}$$

وهي مقارنة للنتيجة العملية، والعلاقة  $C_v \sim T^3$  تبين بأن الفونونات تلعب الدور الرئيسي بإثارة سائل الهيليوم بالدرجات  $0,6 > T$ .

### • تمريبات المحور الخامس: الخواص الكهربائية

#### التمرين 1:

• دراسة غاز الفيرميونات: عدد الفيرميونات  $dN$  ذات الاندفاع  $\vec{P}$  (أو الموجودة في الحجم  $dP_x dP_y dP_z$  للفضاء  $\vec{P}$ ) هو:

$$dN = \frac{gV}{h^3} f(E) dP_x dP_y dP_z$$

حيث  $V$  حجم الفضاء الاعتيادي،  $g$  أكبر عدد من الفيرميونات في السوي الكوانتي،  $f(E)$  دالة توزيع فيرمي.

أ- أدرس التوزيع  $f(E)$  كدالة لدرجة الحرارة.

ب- أحسب الجهد الكيماوي  $\mu_0$  ومعدل الطاقة  $\langle E_0 \rangle$  في الصفر المطلق.

ج- أحسب علاقة الجهد الكيماوي  $\mu(T)$  ومعدل الطاقة  $\langle E \rangle$  بدرجة الحرارة عندما  $K_B T \ll \mu_0$  علماً أن:

$$\int_0^\infty f(E) \varphi(E) dE = \int_0^\mu \varphi(E) dE + \frac{(\pi K_B T)^2}{6} \varphi'(\mu) + \varepsilon T^4$$

حيث:  $\varphi'(\mu) = \left( \frac{d \varphi(E)}{d E} \right)_{E=\mu}$  كمية قليلة جداً.

• غاز الإلكترونات في المعدن: اعتبر أن كل ذرة تمنح إلكترون واحد، والكتلة الذرية = 107 وكتافة المعدن 10500 كغم/م<sup>3</sup>.

## تمريبات ومسائل محلولة

- أحسب:  $\mu_0$ ,  $\mu(300^\circ k)$  درجة حرارة فيرمي من التعريف  $\mu_0 = K_B T_F$  ، سرعة الإلكترونات عند سوي فيرمي ( $E_F = \mu_0$ ) ، السعة الحرارية لغاز الإلكترونات عند  $1^\circ k$  و  $300^\circ k$ .

### الحل:

• دراسة غاز الفيرميونات:

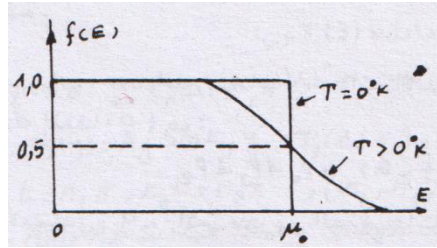
أ- دالة توزيع فيرمي هي:

$$f(E) = \frac{1}{e^x + 1} , \quad x = \frac{E - \mu}{K_B T} \quad (1)$$

بدرجة الصفر المطلق ( $\mu = \mu_0$ ):

$$f(E) = \begin{cases} 0 & E > \mu_0 \\ 1 & E < \mu_0 \end{cases} \quad (2)$$

وبزيادة درجة الحرارة تبدأ فيرميونات الطاقات العالية بالانتقال إلى سويات طاقة أعلى كما في الشكل، حيث تكون  $f(E) = 0,5$  عندما  $E \simeq \mu_0$  أي تعتمد بضعف على درجة الحرارة).



ب- في درجة الصفر المطلق، كل السويات مشغولة حتى  $E = \mu_0$ :

$$N = \int_{E=0}^{\mu_0} \frac{gV}{h^3} f(E) dP_x dP_y dP_z \quad (T = 0^\circ k) \quad (3)$$

حيث  $N$  عدد الفيرميونات، وفي الفضاء  $\vec{P}$  لدينا:

$$dP_x dP_y dP_z \rightarrow 4\pi P^2 dP = 4\pi\sqrt{2}m^{3/2}\sqrt{E} dE$$

لأن:  $E = \frac{1}{2}mv^2$  (الطاقة الحركية)، إذن:

$$N = A \int_0^{\mu_0} f(E)\sqrt{E} dE ; \quad A = 4\pi\sqrt{2}m^{3/2} gV/h^3 , \quad f(E) = 1 \quad (4)$$

إذن:

$$N = \frac{2}{3} A \mu_0^{3/2} , \quad \mu_0 = \left( \frac{3}{8\pi g\sqrt{2}} \right)^{2/3} \frac{h^2}{m} n^{2/3} \quad (5)$$

حيث:  $n = \frac{N}{V}$  تركيز الفيرميونات، ومعدل الطاقة عند  $0^\circ k$  يساوي:

## تمريبات ومسائل محلولة

$$\langle E_0 \rangle = \frac{E_{tot}}{N} = \frac{\int_0^{\mu_0} E dN}{\int_0^{\mu_0} dN} = \frac{A \int_0^{\mu_0} E^{3/2} dE}{A \int_0^{\mu_0} E^{1/2} dE} = \frac{3}{5} \mu_0 \quad (6)$$

ج- بدرجات الحرارة  $T = 70^\circ k$  : نطبق المعادلة (4) بعد إبدال  $\mu_0$  بالنهاية:

$N = A \int_0^{\infty} f(E) \sqrt{E} dE$  وبدرجات الحرارة  $\mu_0 \ll B$  (وهي حالة عامة للجسم الصلب) نستعمل التكامل المعطى:

$$N = A \left[ \int_0^{\mu} \sqrt{E} dE + \frac{(\pi K_B T)^2}{6} \left[ \frac{1}{2\sqrt{E}} \right]_{E=\mu} + \dots \right] = \frac{2}{3} A \mu_0^{3/2}$$

$$\frac{2}{3} \mu + \frac{(\pi K_B T)^2}{6} \frac{1}{2} \mu^{-1/2} \simeq \frac{2}{3} \mu_0^{3/2} \quad \text{إذن:}$$

نبدل  $\mu$  بـ  $\mu_0$  في الحد التصحيحي للطرف الأيسر لنجد:

$$\mu^{3/2} \simeq \mu_0^{3/2} - \frac{3}{2} \frac{(\pi K_B T)^2}{12} \mu_0^{-1/2}, \quad \mu \simeq \mu_0 \left( 1 - \frac{(\pi K_B T)^2}{12 \mu_0^2} \right) \quad (7)$$

حيث يتبين قلة الفرق بين  $\mu$  و  $\mu_0$  الذي يبلغ % 0,01 عند درجة حرارة الغرفة. معدل الطاقة عند  $T = 70^\circ k$  هي:

$$\langle E_0 \rangle = \frac{A}{N} \int_0^{\infty} f(E) E^{3/2} dE \simeq \frac{3}{5} \mu_0 \left[ 1 + \frac{5\pi^2}{12} \left( \frac{K_B T}{\mu_0} \right)^2 \right] \quad (8)$$

• غاز الإلكترونات في المعدن:

لدينا:  $\rho = n \frac{m}{N_{av}}$  إذن:

$$n = \frac{\rho N_{av}}{m} = \frac{10500 \times 6,02 \times 10^{26}}{107} = 5,9 \times 10^{28} \frac{\text{ذرة}}{\text{متر}^3}$$

وهو نفس تركيب الإلكترونات، لدينا:

$$m = 9,1 \times 10^{-31} \text{ كغم}, \quad h = 6,62 \times 10^{-34} \text{ جول.ثانية}, \quad g = 2$$

$$\mu_0 = 8,86 \times 10^{-19} \text{ j}, \quad 5,52 \text{ ev} \quad \text{نجد:}$$

عند  $T = 300^\circ k$  يكون  $K_B T = 0,026$  إذن:

$$\frac{K_B T}{\mu_0} \simeq 4,7 \times 10^{-3} \text{ و } \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{K_B T}{\mu_0} \right)^2 \simeq 1,8 \times 10^{-5}$$

$$\mu = \mu_0 (1 - 1,8 \times 10^{-5}) \simeq \mu_0 \quad \text{إذن:}$$

$$T_F = \frac{\mu_0}{K_B} = 64 \, 200 \, ^\circ k \quad \text{وكذلك:}$$

## تمرينات ومسائل محلولة

$$K_B T_F = \frac{1}{2} m v_F^2 \quad , \quad v_F = 1,4 \times 10^6 \text{ m/s}$$

وباستعمال (8) نجد:

$$C_{el} = \frac{\partial E_{tot}}{\partial T} = N \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = N \frac{\pi^2 k_B^2 T}{2 \mu_0} = N \pi^2 K_B \left( \frac{T}{T_F} \right)^2$$

$$C_{el}(1 \text{ } ^\circ k) = 6,4 \times 10^{-4} \text{ j/}^\circ k \quad , \quad C_{el}(300 \text{ } ^\circ k) = 0,19 \text{ j/}^\circ k$$

### • تمرينات المحور السادس:

**التمرين 1:** على أساس نموذج نيل للمغناطيسية الحديدية المضادة أعتبر ذرات الشبكة الفرعية  $A$  تعاني من حقل فعال ناتج عن الحقل الخارجي  $\vec{B}$  والحقل الناتج عن الشبكة الفرعية  $B$ ، وكذلك الحقل الذاتي الناتج عن ذرات الشبكة الفرعية  $A$  نفسها، وكذلك الحال بالنسبة لذرات الشبكة الفرعية  $B$ ، على هذا الأساس أستنتج العلاقة  $X(T)$ .

**الحل:** على أساس النموذج أعلاه يكون لدينا:

$$\begin{aligned} \vec{B}_{eff}^A &= -\mu_0 \mu \vec{M}_B - \mu_0 \epsilon \vec{M}_A + \vec{B} \\ \vec{B}_{eff}^B &= -\mu_0 \mu \vec{M}_A - \mu_0 \epsilon \vec{M}_B + \vec{B} \end{aligned} \quad \mu > 0 \text{ , } \epsilon < 0 \quad (1)$$

حيث  $(-\epsilon)$  ثابت الحقل المعدل (الجزئي) للتفاعل الذاتي للشبكة الفرعية، حساسية الطور المغناطيسي

الطردية  $X_P = \frac{C}{T}$  ، إذن:

$$\begin{aligned} \mu_0 M_A &= X_P^B B_{eff}^A \quad , \quad M_A T = C \left( \frac{B}{\mu_0} - \mu M_B - \epsilon M_A \right) \\ \mu_0 M_B &= X_P^A B_{eff}^B \quad , \quad M_B T = C \left( \frac{A}{\mu_0} - \mu M_A - \epsilon M_B \right) \end{aligned} \quad (2)$$

حيث  $C_A = C_B = C$  وكذلك  $|\vec{M}_A| = |\vec{M}_B|$  للمغطة الحديدية المضادة.

نجعل  $\frac{B}{\mu_0} = H$  :

$$\begin{aligned} (T + \epsilon C) M_A + C \mu M_B &= CH \\ C \mu M_A + (T + \epsilon C) M_B &= CH \end{aligned} \quad (3)$$

وبعدم وجود حقل خارجي  $\vec{H} = 0$  يكون للمعادلات حل يفترض فيه انعدام معاملات  $M_B$  و  $M_A$  عند

إذن:  $T = T_N$

$$\begin{vmatrix} T_N + \epsilon C & C \mu \\ C \mu & T_N + \epsilon C \end{vmatrix} = 0 \quad \text{و } T_N = C (\epsilon - \mu) \quad (4)$$

## تمريبات ومسائل محلولة

$$\frac{M_A}{H} = \frac{M_B}{H} = \frac{C}{T+C(\epsilon+\mu)} \text{ نجد: (3) المعادلات و}$$

والحساسية عند  $T > T_N$  تساوي:

$$X = \frac{M_A + M_B}{H} = \frac{2C}{T + \theta} \text{ و } \theta = C(\epsilon + \mu) \text{ و } T_N = C(\mu - \epsilon)$$

إذن:

$$\theta = T_N \frac{\epsilon + \mu}{\mu - \epsilon}$$

**التمرين 2:** أحسب الحساسية المغناطيسية عند  $300^\circ k$  لملمح يحتوي على غرام مول من أيونات  $n^+3$  ، وكيف تكون النتيجة لو أن الأيونات  $P_m^+3$  .

**الحل:** طبقا لقاعدة هند لدينا:

$$M_n^+3 : 3 d^4 , S = 2 , \quad L = 2 , \quad J = |L - S| = 0 , \quad {}^5D_0$$

$$P_m^+3 : 4 f^4 , S = 2 , \quad L = 6 , \quad J = |L - S| = 4 , \quad {}^5I_4$$

- حالة  $n^+3$  : للعناصر  $3d$  يتجمد العزم المداري  $L = 0$  لذلك نعتبر:

$$g = 2, p = g[S(S + 1)]^{1/2} = 4,9 , \mu = p\mu_B = 4,9 \times 10^{-23} A.m^2 ; n = 6.10^{23}/mole$$

$$C = \frac{\mu_0 n \mu^2}{3K_B} = 4,37.10^{-5} \text{ } ^\circ k \frac{m^3}{mole} ; X = \frac{C}{T} = 1,45.10^{-7} \frac{m^3}{mole}$$

- حالة  $m^+3$  : لا يتجمد العزم المداري للعناصر  $4f$  ، إذن:

$$g = 0,558, \quad p = g[J(J + 1)]^{1/2} = 2,495 , \quad \mu = p\mu_B = 2,495 \times 10^{-23} A.m^2$$

$$C = \frac{\mu_0 n \mu^2}{3K_B} = 1,13.10^{-5} \text{ } ^\circ k \frac{m^3}{mole} ; X = \frac{C}{T} = 0,37.10^{-7} \frac{m^3}{mole}$$

ملاحظة: طبقت العلاقة  $X = \frac{C}{T}$  لتتحقق الشرط:  $Jg\mu_B B \gg K_B T$  للحقول الطبيعية.

### التمرين 3:

• طبق نظرية لانجفين البارامغناطيسية على الفيرومغناطيس.

أ- بين أسلوب حساب الدالة  $M_S(T)$  المغنطة الذاتية، متى تختفي المغنطة الذاتية؟

ب- ما هي  $M_S(T)$  قرب  $T_c$  درجة كيوري؟

ج- أحسب الحساسية عند  $T_c < T$ .

• طبق نظرية بريليون البارامغناطيسية على الفيرومغناطيسي وخذ مجموعة السبينات  $(1/2)$ :

## تمريبات ومسائل محلولة

أ- أجب عن السؤالين أ و ب في الفرع الأول.

ب- أحسب السعة الحرارية بدرجات الحرارة القريبة والأقل من  $(T \leq T_c)T_c$ .

**الحل:**

• تنطبق معادلة لانجفين البارامغناطيسية في حالة الفيرومغناطيس وذلك بإبدال الحقل  $\vec{B}$  بالحقل

الفعال  $\vec{B}_{eff}$ :

$$\vec{B}_E = \mu_0 \lambda \vec{M} \text{ حيث } \vec{B}_{eff} = \vec{B} + \vec{B}_E$$

والمغطة تساوي:

$$M = n \mu L(y) , L(y) = Cth y - \frac{1}{y} , y = \mu B_{eff} / K_B T$$

حيث  $n \mu = M_s(0)$  المغطة الذاتية الإشعاعية عند  $(0^\circ k)$ .

أ- عند  $T < T_c$  يمتلك الفيرومغناطيس مغطة ذاتية  $M_s(T)$  قيمتها تعتمد على  $T$ ، بوضع:

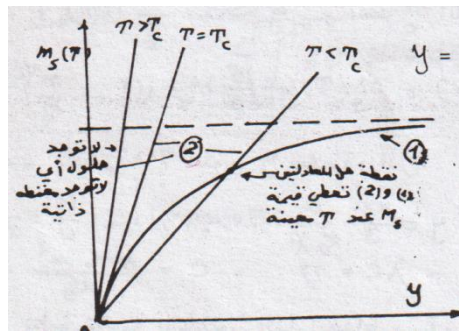
$$y = \frac{\mu \mu_0 \lambda M_s(T)}{K_B T} \text{ نجد } B = 0$$

ونجد المعادلتين التاليتين الآتيتين:

$$m_s(T) = \frac{M_s(T)}{M_s(0)} = L(y) \quad (1)$$

$$m_s(T) = \frac{K_B T}{\mu^2 \mu_0 \lambda n} y \quad (2)$$

وتحل هاتان المعادلتان بيانيا من نقطة التقاطع عند  $y \neq 0$ .



حيث يلاحظ وجود حلول (أي وجود قيم ذاتية فقط في درجات الحرارة  $T < T_c$ ، وعند  $T_c$  تنتهي المغطة الذاتية، والدرجة  $T_c$  تستنتج مما يلي:

$$\text{قرب } y = 0 : L(y) = \frac{y}{3} - \frac{y^3}{15} \text{ وانحدار المنحنى (1) أو المماس عند } y = 0 \text{ يساوي } \hat{L}(y) = \frac{1}{3}$$

هذه القيمة تقابل التحول من وجود إلى لا وجود المغطة الذاتية أي تقابل الدرجة  $T_c$ :

## تمرينات ومسائل محلولة

من المعادلة (2) ينتج الانحدار  $\left(\frac{K_B T}{2 \mu_0 \lambda n}\right)_{T_c}$  عند  $T_c$  والذي يساوي  $\frac{1}{3}$ ، إذن:

$$T_c = \frac{\mu_0 \mu^2 \lambda n}{3 K_B}$$

ب- عند  $T \lesssim T_c$  (أي  $y \rightarrow 0$ ) ينتج من المعادلات (1)، (2) مايلي:

$$(1) m_s(T) = \frac{y}{3} - \frac{y^3}{15}$$

$$(2) m_s(T) = \frac{T}{3 T_c} y$$

وتحل هاتين المعادلتين بطريقة جبرية، فنجد:

$$T \lesssim T_c y^2 = 5 \left(1 - \frac{T}{T_c}\right) \text{ عند}$$

$$y = 0 \left(T_c \frac{y}{3} - \frac{y^3}{15} = \frac{T}{3 T_c} y\right) \text{ وعند}$$

إذن:

$$m_s^2 \simeq \frac{y^2}{9} = \frac{5}{9} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right), \quad M_s(T) = \sqrt{\frac{5}{9}} M_s(0) \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{1/2}$$

ج- عند  $T > T_c$  تكون  $y$  صغيرة، إذن:

$$L(y) = \frac{y}{3}; \quad M(T) = \frac{n \mu}{3} y = \frac{n \mu}{3} \frac{\mu}{K_B T} (B + \mu_0 \lambda M); \quad x = \frac{M}{H} = \frac{C}{T - T_c}$$

$$\text{حيث: } \lambda C = T_c \text{ و } C = \frac{n \mu^2}{3 K_B}$$

• نطبق نظرية بريليون البارامغناطيسية:

$$M = g J \mu_B B_J(\beta); \quad B_J(\beta) = \frac{25 + 1}{2J} \text{cth} \frac{25 + 1}{2J} \beta - \frac{1}{2J} \text{cth} \frac{\beta}{2J}$$

$$\beta = J g \mu_B B_{eff} / K_B T$$

وفي الحالة الخاصة  $g = 2$ ،  $J = S = \frac{1}{2}$ ، يكون لدينا:

$$\mu_a = S g \mu_B = \mu_B, \mu = g [s(s + 1)]^{1/2} \mu_B = \sqrt{3} \mu_B, M_s(0) = g J \mu_B n$$

$$M_s(0) = n \mu_B$$

$$\beta = \frac{\mu_B}{K_B T} (B + \mu_0 \lambda M)$$

أ- لدراسة المغنطة الذاتية  $T < T_c$  نجعل  $B \rightarrow 0$  و  $M \rightarrow M_s$  نجد:

$$m_s(T) = \frac{K_B T \beta}{n \mu_B^2 \mu_0 \lambda} \quad (4) \quad \text{و} \quad m_s(T) = \frac{M_s(T)}{M_s(0)} \quad (3)$$

وتحل هاتان المعادلتان بيانيا بنفس الأسلوب السابق، وتختفي المغنطة الذاتية عند درجة الحرارة  $T_c$  التي

تستنتج من مماس المنحني  $th\beta$  عند  $\beta = 0$  : قرب  $\beta = 0$  لدينا  $m_s(T) \simeq \beta$  وانحدار المنحني (1)

يساوي انحدار المستقيم (4) عند  $T_c$ .

$$\left( \frac{K_B T}{n \mu_B^2 \mu_0 \lambda} \right)_{T_c} = 1, \quad T_c = \frac{n \mu_0 \mu_B^2 \lambda}{K_B}$$

قرب  $T_c$  أي  $T \lesssim T_c$  (قرب  $\beta = 0$ ) يكون لدينا:

$$; \quad (4) m_s(T) = \frac{T}{T_c} \beta \quad (3) m_s(T) \simeq \beta - \frac{\beta^3}{3}$$

وبحل المعادلتين جبريا نجد:

$$(\text{عند } T_c) \beta^2 = 3 \left(1 - \frac{T}{T_c}\right) T \lesssim T_c$$

إذن:

$$m_s^2(T) = \left(\frac{T}{T_c}\right)^2 \beta^2 = 3 \left(\frac{T}{T_c}\right)^2 \left(1 - \frac{T}{T_c}\right) \xrightarrow{\left(\frac{T}{T_c}\right)^2 \rightarrow 1} 3 \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)$$

$$m_s(T) = M_s(0) \cdot \sqrt{3} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{1/2}$$

ب- نحسب الطاقة المغناطيسية:

$$d U_{mag} = -d\vec{M} \cdot \vec{B}_{eff} \xrightarrow{\vec{B}=0} -d\vec{M}_s \cdot \mu_0 \lambda \vec{M}_s = -\mu_0 \lambda \frac{1}{2} d M_s^2$$

إذن:

$$C_{mag} = (dU_{mag}/dT) = -\frac{1}{2} \mu_0 \lambda \frac{d}{dT} [M_s(T)]^2$$

قرب  $T \lesssim T_c$  لدينا:

$$\begin{aligned} C_{mag} &= -\frac{1}{2} \mu_0 \lambda M_S^2(0) \frac{d}{dT} 3 \left( \frac{T}{T_c} \right)^2 \left( 1 - \frac{T}{T_c} \right) \\ &= \frac{3}{2} \mu_0 \frac{\lambda}{T_c} \left( \frac{T}{T_c} \right)^2 M_S^2(0) \left[ 3 - 2 \frac{T_c}{T} \right] \approx \frac{3}{2} \left( 3 - 2 \frac{T_c}{T} \right) n K_B \end{aligned}$$

بوضع  $(T/T_c)^2 \rightarrow 1$ .

مسائل على الجسم الصلب

مسألة 1:

- أحسب السعة الحرارية إذا كان  $Na = 6,0221$ .

- أحسب ( $C_v$ ) في درجات الحرارة العادية.

$$C_v = 3R = 3 \times 1,987 = 6 \text{ cal/mol.k}^\circ$$

$$= 6 \times 4,18 \text{ J/mol.k}^\circ$$

$$= 25 \text{ J/mol.k}^\circ$$

$$C_v = 3Na K = 3 R$$

- حساب السعة الحرارية في ضوء نظرية ديبياي:

$$C_v = 12 \frac{\pi^4}{5} R \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3$$

إذا كانت:  $T = 200 \text{ K}$  ،  $\theta_D = \hbar \frac{w_p}{k}$

$$Al \theta_D = 428$$

$$pb \theta_D = 110$$

$$C_v = 12 \frac{\pi^4}{5} (1,987) \left( \frac{200}{428} \right)^3$$

مسألة 2:

- أحسب ( $C_v$ ) في ضوء نظرية ديبياي إذا كانت النسبة أحسب  $\frac{T}{\theta_D} = 0,2$

$$C_v = \frac{12}{5} \pi^4 (1,987) (0,2)^3$$

مسألة 3:

- أحسب المسافة بين المستويات البلورية إذا علمت أن  $(hkl) = (100)$  وأن  $a = 3,58 \text{ Å}$

الحل:

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = \frac{3,58}{\sqrt{(1)^2 + (0)^2 + (0)^2}} = \frac{3,58}{\sqrt{1 + 0 + 0}} = 3,58 \text{ Å}$$

مسألة 4:

إذا علمت أن زاوية براغ  $(\theta) = 22^\circ$  الموافقة لإنعكاس حزمة من الأشعة السينية طول موجتها

$\lambda = 1,54 \text{ Å}$  عن المستوي البلوري (110) في الحديد المتبلور بالشكل BCC.

## تمريبات ومسائل محلولة

- أحسب طول ضلع المكعب للبلورة السابقة ثم أحسب زاوية براغ الموافقة لإنعكاس الحزمة السابقة عن المستوي (111).

الحل:

$$2 d \sin \theta = n \lambda$$

- أولاً:  $n = 1$

$$2 \times \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \sin \theta = n \lambda$$

$$2 \times \frac{a}{\sqrt{1+1+0}} \sin 22 = 1,54$$

$$\Rightarrow a = 2,91 \text{ \AA}$$

- لمعرفة زاوية براغ نحسب ( $d$ ) للمستوي الجديد:

$$d = \frac{2,91}{\sqrt{1+1+1}} = 1,68 \text{ \AA}$$

- نفرض أن:  $n = 1$

$$\Rightarrow 2 \times 1,68 \times \sin \theta = 1 \times 1,54$$

$$\Rightarrow \sin \theta = 0,45$$

$$\Rightarrow \theta = 26^\circ$$

قاعدة ماتيسيني:

المقاومة النوعية لمعدن ما ( $\mathcal{P}$ ):

$$\mathcal{P} = \mathcal{P}_i + \mathcal{P}_0$$

حيث  $\mathcal{P}$ : المقاومة النوعية.

$\mathcal{P}_i$ : المقاومة النوعية للشوائب.

$\mathcal{P}_0$ : المقاومة النوعية للجسم الصلب النقي دون شوائب.

في حالة الحرارة المنخفضة فإن ( $\mathcal{P}_0 \rightarrow 0$ ) ويبقى لدينا:

$$\mathcal{P} = \mathcal{P}_i$$

يعطى قانون هول (معامل هول) بالعلاقة:

$$\mathcal{R}_H = -\frac{1}{ne}$$

$$\mathcal{R}_H = -\frac{3\pi}{8ne}$$

## تمريبات ومسائل محلولة

### مسألة 5:

- أحسب معامل هول إذا علمت أن  $n = 2,9 \times 10^{25} m^3$ .

### الحل:

$$\mathcal{R}_H = -\frac{3\pi}{8ne}$$

$$\mathcal{R}_H = -\frac{3 \times (3,14)}{8(2,9 \times 10^{25})(1,6 \times 10^{-19})} = -2,5 \times 10^{-7}$$

### ملاحظة هامة:

لقد اكتشف طومسون أن الناقلية الكهربائية لأي معدن تنقص حين يوضع المعدن في حقل مغناطيسي، وهذا ما يسمى بالمقاومة المغناطيسية.

### مسألة 6:

- أحسب نفوذية الوسط ( $\mu$ ) لمادة الألومنيوم إذا علمت أن  $(\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \frac{H}{m})$   
( $X = 2,2 \times 10^{-5} cm^2$ )

### الحل:

$$\mu_r = \frac{\mu}{\mu_0} = 1 + X$$

$$\frac{\mu}{4\pi \times 10^{-7}} = 1 + 2,2 \times 10^{-5}$$

### مسألة 7: إذا كان اندفاع إلكترون يعطى بالعلاقة التالية:

$$P = m \cdot v = (9,11 \times 10^{-31})(V) \\ = 9,11 \times 10^{-26}$$

- أحسب قيمة سرعة الإلكترون.

### الحل:

$$P = m \cdot v \Rightarrow v = \frac{P}{m}$$

$$\Rightarrow v = \frac{9,11 \times 10^{-26}}{9,11 \times 10^{-31}} = 10^5 cm \cdot s^{-1}$$

- طلب إضافي: أوجد طول موجة التي تعطى بالعلاقة  $(\lambda = \frac{h}{p})$

## تمرينات ومسائل محلولة

$$\Rightarrow \lambda = \frac{6,625 \times 10^{-34}}{9,11 \times 10^{-26}} = 72,7 \text{ \AA}$$

• إذا كانت لدينا بئر كمون فإن الطاقة تعطى بالعلاقة:

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2 m a^2}$$

يمكن أن تكون قيمة ( $E_n$  و  $n$ ) معلومة والمطلوب حساب ( $a$ ).

تعطى جميع المعطيات في الجدول بالكامل

المسافة بين الذرات بـ $\text{\AA}$	البنية البلورية	نوع البلورة	نوع الرابطة
3,76 4,34 3,75	<i>FCC</i> رباعي <i>HCP</i> سداسي	أرغون كلور هيدروجين	رابطة فاندر فالس
2,35 2,80 2,92	مكعبة (ألماس) مكعبة ( <i>Zns</i> ) مكعبة (فلوريت)	السيليسيوم <i>In.Sb</i> <i>Mg.Sn</i>	الرابطة التساهمية
3,14 2,88 2,69	مكعب ( <i>Nacl</i> ) مكعب ( <i>Nacl</i> ) مكعب (فلوريت)	<i>Kcl</i> <i>AgBr</i> <i>BaFe</i>	الرابطة الأيونية
3,7 2,88 2,48	<i>BCC</i> <i>FCC</i> <i>FCC</i>	<i>Na</i> <i>Ag</i> <i>Ni</i>	الرابطة المعدنية

## المراجع

- كتاب "مقدمة في فيزياء الجسم الصلب" الجزء الاول ; والجزء الثاني: الدكتور, عزيز عقيل داخل, ديوان المطبوعات الجامعية, 1991.
- كتاب "فيزياء الحالة الصلبة وتطبيقاتها" المؤلف الدكتور أ.د. يسري مصطفى, و أ.د. أحمد الغامدي, مركز النشر العلمي , جامعة الملك عبد العزيز, 1436هـ.
- -كتاب "فيزياء الجسم الصلب II" المؤلف الدكتور : فوزي غالب عوض, منشورات جامعة دمشق, 2011- 2012.
- كتاب "فيزياء الجوامد" المؤلف الدكتور : سعود بن حميد اللحياي, جامعة ام القرى.
- كتاب "فيزياء الجوامد" الجزء الاول المؤلف الدكتور : عبد الفتاح احمد الشادلي, جامعة عين شمس , كتب عربية.
- سلسلة محاضرات أَلجلالي في الفيزياء - فيزياء الحالة الصلبة (الفصل الثالث) - الدكتور محمد احمد أَلجلالي

قسم الفيزياء – كلية العلوم - جامعة الطائف

- -Physique de l'état solide - 8ème édition ,Cours et problèmes ,Charles Kittel, Dunod.février 2007
- -Initiation à la physique du solide : 170 exercices commentés avec rappels de cours Broché, Jacques Cazaux , MASSON