كلية العلوم

القسم : **الفيزياء**

السنة : **الرابعة**

المادة : انصاف نواقل

المحاضرة : الخامسة/نظري/

دراسة الاهتزازات الحرارية للشبكة البلّورية Thermal Vibrations of Lattice:

- تهتز ذرات الشبكة البلّورية بالنسبة لمواضع اتزانها عشوائياً.
- وتتعلق هذه الاهتزازات التي تقوم بها ذرات الشبكة البلّورية بدرجة الحرارة ولذلك تسمى **اهتزازات حرارية**.
- وتكون انزياحات الجسيمات، $u_n(t)=u\ e^{i(qan-\omega t)}$، عن مواضع توازنها صغيرة عادةً بالمقارنة مع ثابت الشبكة البلّورية، a، (حيث ω تواتر الاهتزاز و q العدد الموجي لاهتزاز الشبكة البلّورية و n عدد صحيح).
- ومن ثَمَّ يمكن دراسة هذه الاهتزازات على أنها **اهتزازات توافقية** Harmonic Vibrations.

نكتب **معادلة حركة الجسيمات المهتزة** من أجل الانزياح $u_n(t)$ بالشكل:

$$\begin{aligned}
&M\,\ddot{u}_n=-M\omega^2 u_n=\vec{F}_n\\
&=-\beta\left(u_n-u_{n-1}\right)-\beta\left(u_n-u_{n+1}\right)\\
&=-\beta\left(u_n-u_n e^{-iqa}\right)-\beta\left(u_n-u_n e^{iqa}\right)=-\beta u_n\left[\left(1-e^{-iqa}\right)+\left(1-e^{iqa}\right)\right]\\
&=-\beta u_n\left(2-e^{iqa}+e^{-iqa}\right)=-\beta u_n\left(2-2\cos qa\right)=-2\beta u_n\left(1-\cos qa\right);\\
&-M\omega^2 u_n=-2\beta u_n\left(2\sin^2\frac{qa}{2}\right);
\end{aligned}$$

$$\boxed{\therefore\ \omega^2=4\frac{\beta}{M}\sin^2\frac{qa}{2};} \qquad (26)$$

حيث $\vec{u}_n$ متجه إزاحة كتلة الجسيمة (M) عن موضع اتزانها، و $\ddot{\vec{u}}_n$ تسارعها وتساوي $u_n''(t)=-\omega^2\ u\ e^{i(qan-\omega t)}$،

و $u_{n+1}(t)=u\ e^{i\,[qa\,(n+1)-\omega t]}=e^{i\,qa}u_n(t)$،

و $\vec{F}_n=-\beta\vec{u}_n$، و β معامل شبه- المرونة،

و $\vec{F}_n$ القوة المحصلة المؤثرة في الجسيمة المدروسة من قِبل باقي **كل جسيمات البلّورة**؛

تسمى الحركة الجماعية للجسيمات والتي يكون لها شكل موجة مرنة **اهتزازات نظامية** *Normal Vibrations* للشبكة البلّورية.

لندرس في البداية جسماً خطّياً (وتراً) **وسلاسل خطّية من الذرات**:

يمكن أن تنشأ في وتر متجانس؛ كجسمٍ صلبٍ كاملٍ متصلٍ (مستمرٍ)، **أمواج مرنة تنتشر بسرعة الصوت**، υ_s.

إن تواتر الاهتزازات في الوتر تتناسب طردياً مع **العدد الموجي**، $q=2\pi/\lambda$، (خلافاً للعدد الموجي للإلكترون الذي يُرمز له بالرمز k، نستعمل هنا الرمز q).

وعندها يكون لدينا العلاقة الآتية:

$$\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi}{\lambda}\upsilon_s = q\upsilon_s \,. \qquad (27)$$

ثمّ إن القيمة المطلقة لـ q يمكن أن تأخذ القيم من الصفر حتى اللانهاية $(0 \to \infty)$

ويتغير أيضاً تواتر الاهتزازات في المجال $(0 \to \infty)$.

يمكن الحصول من أجل سلسلة خطِّية من الذرات بحل المعادلة التفاضلية (26) على اهتزازات بتواترات تساوي:

$$\boxed{\omega = \pm\, \omega_{\max} \sin\frac{aq}{2}\,,} \qquad (28)$$

حيث يساوي التواتر الأعظي:

$$\boxed{\omega_{\max} = 2\sqrt{\beta / M}\,,}$$

حيث M كتلة الذرة المشاركة في الاهتزاز، و q العدد الموجي، و a ثابت الشبكة البلّورية الخطِّية للبلّورة المدروسة.

تتعلق سرعة انتشار الموجة المرنة في هذه الحالة بطول الموجة، مما يُعدُّ صفة مميزة للموجة المرنة في وسط ذي بنية ذريّةٍ مختلفة عن الوتر (أو عن جسم صلب آخر)؛ كوسطٍ متصلٍ. إذن، لدينا:

$$\upsilon = \frac{\omega}{q} = \frac{\lambda}{\pi}\sqrt{\frac{\beta}{M}}\sin\frac{\pi a}{\lambda}\,. \qquad (29)$$

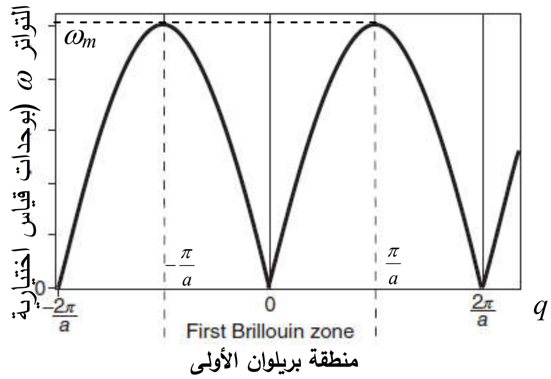
ونتيجة **لدوريّة** السلسلة الخطِّية الذريّة للشبكة يكفي إعطاء العدد الموجي الموافق لها القيم الواقعة في المجال الآتي فقط:

$$\boxed{-\frac{\pi}{a} \le q \le \frac{\pi}{a}\,.} \qquad (30)$$

- هذا يعني أن مجال العدد الموجي q يتطابق مع **منطقة بريلوان الأولى** من أجل المتجه الموجي للإلكترون $\vec{k}$.
- ومن ثمَّ، يمكن دراسة قيمة q في نفس الفضاء الذي ندرس فيه قيم k،
- فضلاً عن أن **عدد** قيم q من أجل سلسلة ذريّة أحادية متجانسة **يساوي** عدد ذرات السلسلة N.
- وتسمى تابعية التواتر ω بالعدد الموجي q **بقانون التبدد** Dispersion Law من أجل اهتزازات الذرات.

ومن أجل سلسلة خطِّية من الذرات المتماثلة يُكتب هذا القانون وفق المعادلة (28) ويوضحه الشكل (1).

من أجل **قيم كبيرة لطول الموجة** λ، أي قيم صغيرة للعدد الموجي q، يمكن كتابة المساواة التقريبية



الشكل (1): قانون التبدد من أجل اهتزازات الذرات في سلسلة خطّيّة متجانسة

$$\sin\frac{aq}{2} \cong \frac{aq}{2}$$

أضف إلى ذلك، من أجل سلسلة خطّية من الذرات $\upsilon_s = a\sqrt{\frac{\beta}{M}}$،

ومن ثمَّ نحصل على العلاقة الآتية:

$$\boxed{\omega = q\upsilon_s\ .} \qquad (31)$$

وبالتالي يتعين تواتر اهتزازات السلسلة الذريّة من أجل الأطوال الموجية الطويلة، كما تعيَّن من أجل وتر متصل، العلاقة (27)، ولكن مع اختلاف مجال قيم q.

نحصل من أجل الطول الموجي الأصغري

$$\lambda_{\min} = 2a \qquad (32)$$

و

$$\boxed{q = \frac{2\pi}{\lambda_{\min}} = \frac{\pi}{a}.} \qquad (33)$$

على القيمة القصوى للتواتر الآتية:

$$\boxed{\omega_{\max} = 2\sqrt{\frac{\beta}{M}} = \frac{2\upsilon_s}{a}.} \qquad (34)$$

طالما في الأجسام الصلبة $\upsilon_s \approx 3\times10^{3}$ m/s و $a \approx 3\times10^{-10}$ m،

نجد أن التواتر الأعظمي يبلغ، وفق العلاقة (34) القيمة القصوى $\omega_{\max} \approx 2\times10^{13}\ \mathrm{s}^{-1}$، ما ينسجم مع تواتر الاهتزازات الذاتية لذرات الأجسام الصلبة.

إذا تمّ رصد تبدد الأمواج، فيجب التمييز بين **سرعة الطّور**، $\upsilon_p = \omega/q$، و**سرعة المجموعة**، $\upsilon_g = d\omega/dq$.

فمن أجل سلسلة خطِّية من الذرات لدينا من المعادلة (35):

$$\boxed{\upsilon_p=\frac{\omega}{k}=\omega_{\max}\left|\frac{\sin\frac{1}{2}aq}{q}\right|=\upsilon_s\left|\frac{\sin\frac{1}{2}aq}{\frac{1}{2}aq}\right|,} \tag{35}$$

$$\boxed{\upsilon_g=\frac{d\omega}{dk}=\frac{a\omega_{\max}}{2}\left|\cos\tfrac{1}{2}aq\right|=\upsilon_s\left|\cos\tfrac{1}{2}aq\right|.} \tag{36}$$

- ومن أجل **الأطوال الموجية الطويلة**، أي قيم q الصغيرة، نحصل على المساواة:

$$\upsilon=\upsilon_g=\upsilon_s\,. \tag{37}$$

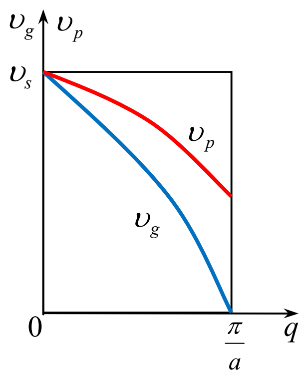
- وبالنسبة **للأطوال الموجية القصيرة جداً**، التي من أجلها $q=\pi/a$، نجد

$$\upsilon_p=\frac{2\upsilon_s}{\pi} \tag{38}$$

$$\upsilon_g=0\,. \tag{39}$$

يوضح الشكل (2) تابعيتي $\upsilon_p=f(q)$ و $\upsilon_g=f(q)$ من أجل نصف منطقة بريلوان.

تجري في نظرية تبعثر حاملات الشحنة على الاهتزازات الحرارية للشبكة البلّورية الخطِّية دراسة شكلين من الاهتزازات؛



الشكل (2): تابعية سرعة الطَّور وسرعة المجموعة للعدد الموجي q.

الاهتزازات **الضوئية** Optical والاهتزازات **الصوتية** Acoustic.

→ يدور الحديث عن مفهوم الاهتزازات الضوئية والصوتية لسلسلة خطِّية من الذرات من خلال وصف السلسلة الخطِّية التي يتناوب فيها **نوعان من الذرات**، يختلفان عن بعضهما البعض بالكتلة،

→ والمسافة الفاصلة بين أي ذرتين متجاورتين يساوي، كما في السابق، a.

→ وكل زوج من الذرات M_1 و M_2 يكوِّن **خليّة أوليّة للشبكة البلّورية الخطِّية**.

→ وبكتابة المعادلات التفاضلية للاهتزازات وحلها نجد أن الاهتزازات تتوافر بتواترين ω_1 و ω_2، كما سنرى.

$$M_1\frac{d^2u_n}{dt^2}=-\beta\left(2u_n-v_{n-1}-v_n\right),$$

$$M_2\frac{d^2v_n}{dt^2}=-\beta\left(2v_n-u_{n-1}-u_n\right),$$

حيث u_n و v_n انزياح الذرتين الأولى والثانية في وحدة الخلية ذات الرقم-n، على الترتيب.

يمكن حل هاتين المعادلتين مرة أخرى بتوابع من النوع الموجي من الشكل الآتي:

$$u_n(t) = u\ e^{i(kan-\omega t)}\ , \qquad v_n(t) = v\ e^{i(kan-\omega t)}\ .$$

وعند التعويض عن هذين الحلين في المعادلتين التفاضليتين نحصل على جملة خطيّة متجانسة من المعادلات من أجل المطالين u و v:

$$-\omega^2 M_1 u = \eta v\left(1+e^{-ika}\right) - 2\eta u\ ,$$
$$-\omega^2 M_2 v = \eta u\left(e^{ika}+1\right) - 2\eta v\ .$$

ويكون لجملة هاتين المعادلتين حل إذا كان معيَّن مصفوفة المعاملات (الأمثال) مساوياً الصفر، أي أن:

$$\begin{vmatrix} 2\eta-\omega^2 M_1 & -\eta\left(e^{-ika}+1\right) \\ -\eta\left(1+e^{ika}\right) & 2\eta-\omega^2 M_2 \end{vmatrix} = 0\ .$$

وهذا ما يحدث عندما:

$$\boxed{\omega_1^2 = \frac{\omega_0^2}{2}\left[1+\sqrt{1-\gamma^2\sin^2\frac{aq}{2}}\right];} \qquad \text{OPTIC} \qquad (40)$$

$$\boxed{\omega_2^2 = \frac{\omega_0^2}{2}\left[1-\sqrt{1-\gamma^2\sin^2\frac{aq}{2}}\right],} \qquad \text{ACOUSTIC} \qquad (41)$$

حيث

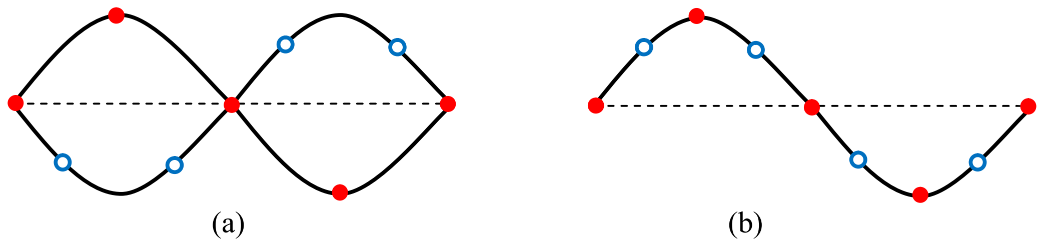
$$\omega_0^2 = 2\beta\frac{M_1+M_2}{M_1 M_2}$$

و

$$\gamma^2 = 4\frac{M_1 M_2}{(M_1+M_2)^2}\ .$$

ليس للقيم السالبة للتواترين ω_1 و ω_2 معنى فيزيائياً، ومن ثمَّ عند البحث عن ω_1 و ω_2 من خلال العلاقتين (40) و (41) لا بد من التقيّد بالحلول الموجبة.

- توافق التواترات ω_1 الاهتزازات الضوئية في حين توافق التواترات ω_2 الاهتزازات الصوتية ثمَّ إنَّ $\omega_1 > \omega_2$ في كامل مجال قيم المتجهة الموجي للفونون q.
- وكما يدل التحليل التفصيلي بالنسبة للاهتزازات الضوئية، فإن اهتزازات **ذرات الخليّة** تنزاح في اتجاهات متعاكسة، أي أنها تهتز على تعاكس بالطَّور، بحيث يبقى مركز ثقل كل زوجٍ مكوّنٍ للخليّة **ساكناً**.



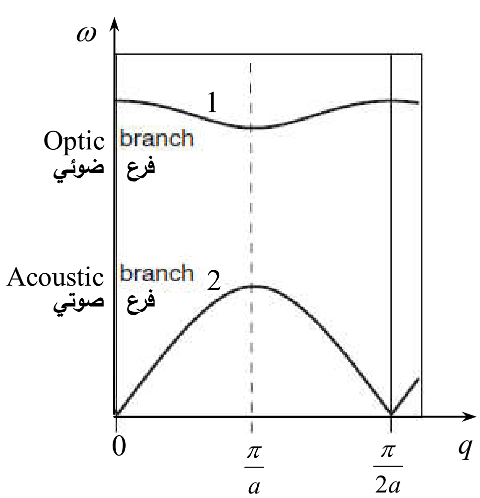
الشكل (3): أمواج عرضانية ضوئية (a) وصوتية (b) في سلسلة خطّيّة من الذرات.

- وهنا إذا شكَّلت الخليّة الأولية المُشار إليها **أيونات من نوعين مختلفين**، فإن اهتزازاتها المتعاكسة بالطور تؤدي إلى **تغيّر عزم ثنائي القطب** الكهربائي الموافق للزوج. وفي هذه الحالة يمكن أن تَصدرُ أو تُمتصُ أشعة تحت حمراء IR Rays، ولهذا السبب، تسمى الاهتزازات الموصوفة **اهتزازات ضوئية**. يوضح الشكل (3a) إحدى "اللقطات اللحظية" لموجة ضوئية عرضانية لشبكة بلّورية خطِّية (لسلسلة).
- أمَّا في الفرع الصوتي فإنَّ ذرات الخلية تنزاح في **اتجاه واحد**، كما يوضح الشكل (3b)، وهذا ما يشابه الموجة المرنة العادية، ولذلك سُميَّ الفرع المذكور **فرعاً صوتياً**.

يوافق الشكلان (3a) و (3b) طولاً موجياً واحداً (يظهر في "اللقطتين" طول موجي واحد). ولكن يجب أن نأخذ بالحسبان أنَّ منحني التبدد $\omega_1 = f(q)$ يسلك سلوكاً مختلفاً عن سلوك منحني التبدد $\omega_2 = f(q)$: إذْ يوافق المنحني 1 في الشكل (4) الفرع الضوئي في حين يوافق المنحني 2 الفرع الصوتي.

فمن أجل الأطوال الموجية الطويلة يكون **الاختلاف بينهما أعظمياً**؛ إذْ أن القيمة $q = 0$ توافق أكبر تواتر للاهتزازات الضوئية وأصغر تواتر للاهتزازات الصوتية. ومن أجل الأطوال الموجية القصيرة الموافقة لـ $q = \pi / a$ تكون النهاية الدنيا للتواتر الضوئي أعلى من النهاية القصوى للتواتر الصوتي.

نلاحظ، أنه على الرغم من أن النظريّة تطورت من أجل سلسلة خطِّية من الذرات المتناوبة M_1 و M_2، إلاَّ أن الاستنتاجات تتحقق من أجل سلسلة خطّية من الذرات المتماثلة، ولكن

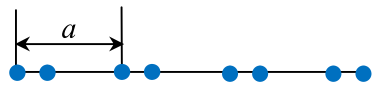


الشكل (4): منحنيات التبدد من أجل اهتزازات الفرعين الضوئي (1) والصوتي (2).

في شروط توافر شبكتين جزئيتين.

← إذْ يمكن دراسة الاهتزازات ذات الأطوار المتعاكسة؛ كاهتزازات **شبكتين جزئيتين** متماثلتين (متجانستين) بالنسبة لبعضهما البعض حيث تقع إحداهما في الأخرى.

← يوضح الشكل (5) سلسلة خطِّية مركّبة ومؤلفة من شبكتين جزئيتين من الذرات المتماثلة حيث توجد ذرتان في الخلية الأولية لمثل هذه السلسلة.



الشكل (5): سلسلة خطّيّة بقاعدة مكونة من ذرات متماثلة تنشأ عندها اهتزازات ضوئية

← فالاهتزازات الضوئية تظهر في الجملة الفيزيائية المدروسة هنا نتيجةً لاهتزاز إحدى الشبكتين الجزئيتين بطَّورٍ معاكسٍ لطور اهتزاز الشبكة الجزئية الأخرى.

← تُرصد الاهتزازات الضوئية، على وجه الخصوص، في الجرمانيوم والسيلكون، لأن البلّورات الحجمية من Ge و Si تملك بنية الألماس، المؤلفة من شبكتين مكعبتين متمركزتي الوجوه FCC تنزاح إحداهما بالنسبة للأخرى بمقدار **ربع القطر الحجمي.**

← وفي البلّورة الحجمية تُصان المفاهيم الأساسية المحققة من أجل الشبكات الأحادية البعد.

ولكن من أجل البلّورات الحجمية ذات شبكة **برافيه** والتي تحوي ذرة واحدة في الخلية الأولية، كما في حالة السلاسل الخطِّية (المتجانسة) البسيطة، تتوافر الاهتزازات الصوتية **فقط.**

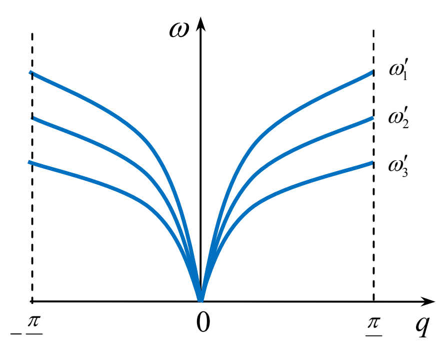
في هذه الحالة، يوافق المتجه الموجي q في البلّورة الحجمية ثلاثة اهتزازات؛ اهتزاز طولاني تواتره ω_1'، واهتزازان عرضانيان تواترهما ω_2' و ω_3'. والشكل (6) يوضح منحنيات التبدد لهذه الاهتزازات.

في الحالة العامة، يمكن أن تحوي **الخلية الأولية**، في البلّورات الحجمية المركَّبة، s ذرة، وعندها تظهر ثلاثة فروع صوتية للاهتزاز و $3(s-1)$ فرعاً ضوئياً موافقاً للاهتزازات "داخل الخلية". يملك المتجه الموجي q من القيم المسموحة بقدر ما يوجد خلايا أولية في البلّورة.

وعندها تتغير قيم q في حدود المجال

$$\boxed{-\frac{\pi}{a_i} < q_i \le \frac{\pi}{a_i},} \quad (42)$$

حيث a_i ثابت الشبكة البلّورية $(i = x, y, z)$.

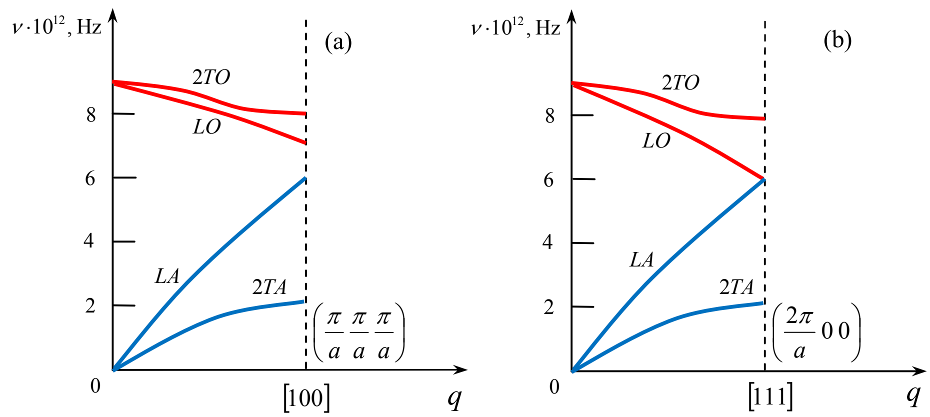


الشكل (6): الفروع الصوتية للاهتزازات النظامية لشبكة ثلاثية البعد.

تحوي البلّورة الحجمية $N(=N_x N_y N)_z$ خليةً أوليةً، التي يوجد في كل منها، في الحالة العامة، s ذرة، كما ذكرنا سابقاً. وبما أن كل ذرة تمتلك ثلاث درجات حرية، فإنه يوجد $3\,sN$ موجةً في البلّورة، ومن ثمَّ $3\,s$ فرعاً مختلفاً من الاهتزازات؛ ثلاثة منها صوتية و $3\,(s-1)$ فرعاً ضوئياً.

سرعة الأمواج الطولانية (التي يوجد منها s نوعاً) أكبر من سرعة الأمواج العرضانية (التي يوجد منها $2\,s$ نوعاً).

ثمَّ إنَّ منحنيات التبدد من أجل الأمواج المختلفة الاستقطابية تختلف عن بعضها البعض، ولكن من أجل



الشكل (7): الطيف الاهتزاز للشبكة البلّورية للجرمانيوم من أجل الاتجاهين [111] و [100].

البلّورات المتماثلة المناحي ثمة موجتان عرضانيتان **متحللتان** توافقهما نفس قيم التواتر، ω_q، كما في الشكل (7) مثلاً.

يوضح الشكل (7) الطيف الاهتزازي لشبكة الجرمانيوم الذي تمّ الحصول عليه بطريقة الحساب استناداً إلى معطيات تجريبية. يُشير الحرفان L و T إلى الأمواج الطولانية والعرضانية على الترتيب، كما يُشير الحرفان O و A إلى الأمواج الضوئية والصوتية على الترتيب. والرقم $2(2TA\ ,\ 2TO)$ المرفق يُشير إلى **التحلل** (التطبّق) الثنائي.

نلاحظ أن طاقة كل اهتزاز نظامي **مُكمَّاة** *Quantized*. يمكن دراسة الاهتزازات النظامية بشكل مشابه لهزّازات توافقية خطِّية بتواترٍ ذاتيٍ، ω_q، وطاقةٍ تساوي

$$E_q = h\nu_q\left(n_q + \tfrac{1}{2}\right) = \hbar\omega_q\left(n_q + \tfrac{1}{2}\right), \tag{43}$$

حيث $n_q = 0, 1, 2, \cdots$.

ثمَّ إنَّ **الطاقة الكليّة للحركة الاهتزازية الحرارية** للذرات في البلّورة تُجمعُ من طاقات كل الاهتزازات النظامية:

$$\boxed{E = \sum_{qj} E_{qj} = \sum_{qj} h\nu_{qj} \left(n_{qj} + \tfrac{1}{2}\right),} \tag{44}$$

حيث q العدد الموجي الذي يملك N قيمةً، و j فرع الاهتزاز (ما مجموعه $3s$ فرعاً أو $3s$ نوعاً اهتزازياً)،

و $n_{qj} = 0, 1, 2, \cdots$ العدد الكوانتي الرئيس للهزَّاز التوافقي ذو الرقم qj والمهتز بالتواتر ν_{qj}.

بمقدور الهزَّاز الكوانتي ذو الطاقة $E_{qj} = h\nu_{qj}\left(n_{qj} + \tfrac{1}{2}\right)$ أن يُغيِّر طاقته بمقدار $\Delta E_{qj} = h\nu_{qj}\Delta n_{qj}$.

وعندها، تبعاً للميكانيك الكوانتي يساوي تغيّر العدد الكوانتي للهزَّاز

$$\boxed{\Delta n_{qj} = \pm 1} \tag{45}$$

يُسَّمى كمّ الطاقة $h\nu_{qj}$، **كمّ طاقة اهتزازات الشبكة البلّورية** أو **فونوناً** *Phonon* وهو شبه جسيمٍ.

في الشروط الموافقة للمساواة $\Delta n_{qj} = +1$ تنتقل الشبكة البلّورية إلى حالة طاقية أعلى (امتصاص فونون)، والموافقة للمساواة $\Delta n_{qj} = -1$ تنتقل إلى حالة طاقية أدنى (إصدار فونون).

بهذا الشكل، نرى أن اهتزازات الشبكة البلّورية في السياق الطاقي (أي "بلغة الطاقة") تكافئ **غازاً فونونياً** *Phonon Gas*.

تجدر الإشارة إلى أن الفونون لا يمتلك طاقةً وحسب، بل شبه اندفاعٍ أيضاً

$$p = \hbar q \,. \tag{46}$$

توصف الفونونات بإحصاء بوزة- اينشتاين **والتركيز الوسطي للفونونات** (التي طاقاتها $E_s = h\nu_s = \hbar\omega_s$) في الخلية الأولية لفضاءٍ طَّوري حجمه h^3 يساوي

$$\boxed{\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} = f \,.} \tag{47-18}$$

وفي درجات **الحرارة المرتفعة**، عندما $T >> h\nu_s / k_B$، تؤول العلاقة الأخيرة إلى الشكل

$$\langle n \rangle \cong \frac{1}{1 + \frac{h\nu}{k_B T} - 1}$$

ومن ثمَّ

$$\boxed{\langle n \rangle = \frac{k_B T}{h\nu_s} \,.} \tag{48}$$

وهذا يعني أنَّ **التركيز الوسطي للفونونات** يتناسب طرداً مع درجة حرارة الشبكة البلّورية وفق علاقة **خطّيّة**. ثمَّ إنَّ الطاقة الوسطية للهزَّاز الموافقة تساوي

$$E_s = h\nu_s \langle n \rangle = k_B T \,. \tag{49}$$

أمَّا في درجات **الحرارة المنخفضة**، عندما $T << h\nu / k_B$، تؤول العلاقة (47) إلى الشكل

$$\boxed{\langle n \rangle = \mathrm{e}^{-\frac{h\nu_s}{k_B T}}} \tag{50}$$

وهذا يعني أنَّ **التركيز الوسطي للفونونات** يتناسب طرداً مع درجة حرارة الشبكة البلّورية وفق علاقة أسيّة. تُعدُّ الكميّة $\langle n \rangle$، كما ذكرنا، تركيزاً وسطياً للفونونات من أجل خلايا أولية، h^3، أو **كثافةً وسطيةً لانشغال الحالات الطاقية**. لإيجاد التركيز الكليّ للفونونات في واحدة الحجم للبلّورة لا بد:

- من إيجاد عدد الحالات الكمومية من أجل المجال المعطى، $d\omega$، ثمّ ضربه بكثافة انشغال الحالات الكمومية، f؛
- وبعد ذلك، مكاملة الناتج بالنسبة لتواترت طيف الاهتزازات النظامية.

لنرمز لتركيز الفونونات التي طاقاتها محصورة في المجال من $\hbar\omega$ إلى $\hbar(\omega + d\omega)$ بالرمز dN_{ph}.

تُحدَّدُ الكمية dN_{ph}؛ كحاصل ضرب للحالات الكمومية، dz، في f:

$$dN_{ph} = f\, dz\,. \tag{51}$$

تقتصر دراستنا هنا على البلّورات التي تتصف بشبكة برافيه، حيث الاهتزازات الممكنة فيها هي الاهتزازات الصوتية فقط. وعندها، إذا كان $\omega = \overline{\upsilon}_s q$، حيث $\overline{\upsilon}_s$ السرعة الوسطية للصوت للفروع الصوتية، وشبه الاندفاع $p = \hbar q = \hbar\omega / \overline{\upsilon}_s$، فيمكن إيجاد dz بالشكل

$$dz = 3\frac{d\left(\frac{4}{3}\pi\, p^3\right)}{h^3} = 3\frac{4\pi\, p^2 dp}{h^3} = 3\frac{4\pi\left(\hbar\omega/\overline{\upsilon}_s\right)^2 d\left(\hbar\omega/\overline{\upsilon}_s\right)}{h^3} = \frac{3\,\omega^2 d\omega}{2\pi^2 \overline{\upsilon}_s^{\,3}}\,. \tag{52}$$

حيث يُشير العامل 3 إلى وجود ثلاثة استقطابات ممكنة للفونون (استقطاب طولاني واثنان عرضانيان).

ومن ثمَّ نعوض في المعادلة (51) مع الأخذ بالحسبان العلاقة (47) فنحصل على العلاقة الآتية:

$$dN_{ph} = \frac{3}{2\pi^2 \overline{\upsilon}_s^{\,3}} \frac{\omega^2 d\omega}{\left(\mathrm{e}^{\hbar\omega/k_B T} - 1\right)}\,. \tag{53}$$

لإيجاد التركيز الكليّ للفونونات الصوتية، نُكامل المعادلة (53) في مجال التواترات من 0 إلى $\omega_{\max}$:

$\omega_{\max}$ هو التواتر الأعظمي للاهتزازات الصوتية الطولانية المرتبطة بدرجة حرارة ديباي Θ_D بالعلاقة

$$\boxed{\Theta_D = \frac{\hbar\omega_{\max}}{k_B}}\,. \tag{54}$$

يجدر بالذكر أن درجة حرارة ديباي أو درجة الحرارة المميزة تقع من أجل معظم الأجسام الصلبة في المجال الحراري $100 - 300\ \mathrm{K}$. وهي توافق درجة الحرارة التي بانخفاضها اللاحق يُلاحظ انخفاض السعة الحرارية للجسم الصلب ثمَّ إنّها درجة حرارة الشبكية البلّورية التي تتحرّض عندها جميع الفونونات.

وهكذا يكون لدينا العلاقة:

$$N_{ph}=\frac{3}{2\pi^2 \upsilon_s^{-3}}\int_0^{\omega_{\max}}\frac{\omega^2 d\omega}{\left(e^{\hbar\omega/k_BT}-1\right)}, \tag{55}$$

أو العلاقة:

$$N_{ph}=\frac{3}{2\pi^2 \upsilon_s^{-3}}\left(\frac{k_BT}{\hbar}\right)^3\int_0^{\Theta_D/T}\frac{x^2 dx}{\left(e^{x}-1\right)}, \tag{56}$$

حيث $x=\hbar\omega/k_BT$.

أولاً– في درجات الحرارة المنخفضة، عندما $T<<\Theta_D$، يمكن استبدال الحد العلوي للتكامل في المعادلة (56) باللانهاية، وعندها نحصل على المساواة

$$\int_0^{\infty}\frac{x^2 dx}{\left(e^{x}-1\right)}=\frac{\pi^2}{3}, \tag{57}$$

ومن ثمَّ

$$\boxed{N_{ph}=\frac{1}{2}\left(\frac{k_B}{\upsilon_s\hbar}\right)^3 T^3 .} \tag{58}$$

ثانياً– أمَّا في درجات الحرارة المرتفعة، عندما $T>>\Theta_D$ و $x<<1$، يمكن نشر المقدار e^x في سلسلة والاكتفاء بالحدين الأول والثاني من المنشور. في هذه الحالة يمكن كتابة المساواة

$$\int_0^{\Theta_D/T}\frac{x^2 dx}{e^{x}-1}=\int_0^{\Theta_D/T}x dx=\frac{1}{2}\left(\frac{\Theta_D}{T}\right)^2, \tag{59}$$

وفي هذه الحالة نجد أن التركيز الكليّ للفونونات يساوي:

$$\boxed{N_{ph}=\frac{3\Theta_D^2}{4\pi^2}\left(\frac{k_B}{\hbar\upsilon_s}\right)^3 T .} \tag{60}$$

بهذه الطريقة نجد، في درجات الحرارة المنخفضة، أن المقدار N_{ph} يتناسب طردياً مع المرتبة الثالثة لدرجة الحرارة، وفي درجات الحرارة المرتفعة، يتناسب خطّياً مع درجة الحرارة.

بشكل مشابه، يمكن إجراء الحساب من أجل شبكات بلّورية معقدة التي من الممكن أن تتهيَّج فيها الاهتزازات الضوئية. وعندها، يؤخذ بالحسبان، أن الاهتزازات الضوئية تتهيَّج في درجات الحرارة المرتفعة نسبياً، طالما أن تواتراتها أكبر من تواتر الاهتزازات الصوتية. وفي الكثير من الحالات، يمكن عدّ تواتر الاهتزازات الضوئية ثابتاً في كامل مجال تغيّر العدد الموجي q، فضلاً عن أن $\omega=10^{13}\ \mathrm{s}^{-1}$.

دراسة تبعثر الإلكترونات على الفونونات (الاهتزازات الحرارية للشبكة البلّورية):

Study of Scattering Electrons on Thermal Vibrations of Lattice

لدى تآثر إلكترون (أو ثقب) مع اهتزازات الشبكة البلّورية– الفونونات، يمكن رصد انتقال طاقةٍ منه إلى الشبكة البلّورية ومن ثمَّ ولادة فونون جديد أو رصد عملية معاكسة (انتقال طاقةٍ من الشبكة ومن ثمَّ فناء فونون). وعندها تتحقق قوانين انحفاظ الطاقة وشبه الاندفاع. فعند ولادة فونون يكون لدينا

$$E(\vec{k}) = E_1(\vec{k}_1) + \hbar\omega_q \; ; \tag{61}$$

$$\vec{k} = \vec{k}_1 + \vec{q} \, , \tag{62}$$

حيث $E(\vec{k})$ طاقة الإلكترون قبل التصادم (قبل التآثر مع اهتزازات الشبكة البلّورية)، و $\vec{k}$ المتجه الموجي الموافق له،

و $E_1(\vec{k}_1)$ طاقة الإلكترون بعد ولادة فونون جديد بمتجه موجي $\vec{q}$ وطاقة $\hbar\omega_q$، و $\vec{k}_1$ المتجه الموجي لهذا الإلكترون.

وعند امتصاص الإلكترون لفونون يكون لدينا

$$E_1(\vec{k}_1) = E(\vec{k}) + \hbar\omega_q \; ; \qquad \text{أو} \qquad E(\vec{k}) = E_1(\vec{k}_1) - \hbar\omega_q \; ; \tag{63}$$

$$\vec{k}_1 = \vec{k} + \vec{q} \, , \qquad \text{أو} \qquad \vec{k} = \vec{k}_1 - \vec{q} \, , \tag{64}$$

حيث $E_1(\vec{k}_1)$ طاقة الإلكترون بعد امتصاصه فونون، و $\vec{k}_1$ المتجه الموجي الموافق لهذا الإلكترون، تسَّمى الآلية الموصوفة هنا للتبعثر **آليةً التبعثر أحادية الفونون** *One-phonon Mechanism*. وبما أن عدد الفونونات يتحدد بدرجة الحرارة، فإن تبعثر الإلكترونات على الاهتزازات الحرارية للشبكة البلّورية يتعلق بدرجة الحرارة أيضاً.

من الممكن أن تحدث في البلّورة، وإنما باحتمال أقل، **آلية التبعثر متعددة الفونون** *Multi-phonon Mechanism*، عندما تُرصد ولادة أو امتصاص أكثر من فونونٍ.

يُحسب زمن الاسترخاء عند تبعثر الإلكترونات على الفونونات الصوتية الطولانية في أنصاف النواقل الذريّة من العلاقة الآتية:

$$\tau(\vec{k}) = \frac{\tau_0}{(m^*)^{3/2}(E)^{1/2}\,T} \, , \tag{65}$$

حيث τ_0 مقدار ثابت من أجل البلّورة المدروسة، و m^* الكتلة الفعَّالة للإلكترونات، و E طاقة الإلكترونات.

وبالتالي، عند تبعثر الإلكترونات على الاهتزازات الصوتية الطولانية للشبكة البلّورية يمكن التعبير عن حركيّتها بالعلاقة

$$\boxed{\mu_{TV} = \frac{4e\tau_0}{3\sqrt{\pi}\left(k_B\right)^{1/2}\left(m^*\right)^{5/2}T^{3/2}} = bT^{-3/2}.} \tag{66}$$

أي بعلاقة من شكل المعادلة (17-13).

تُرصد عادةً تابعية قريبة من العلاقة (66) في مجالات واسعة جداً من درجات الحرارة، ولكن فضلاً عن ذلك، يحدث وبآنٍ معاً تبعثرٌ على الاهتزازات الضوئية للشبكة البلّورية، وتبعثرٌ ثنائي الفونون، وأنواع أخرى من التبعثر، ولذلك يجب أن لا نتوقع تحقيقاً دقيقاً للعلاقات من الشكل (66).