$$\langle \xi \rangle = \frac{\int_0^\infty \frac{mv^2}{2} e^{-mv^2/2k_BT} dv}{\int_0^\infty e^{-mv^2/2k_BT} dv} + \frac{\int_0^\infty \frac{m\omega^2 x^2}{2} e^{-m\omega^2 x^2/2k_BT} dx}{\int_0^\infty e^{-m\omega^2 x^2/2k_BT} dx} \qquad (2)$$

From mathematical table :

$$\int_0^\infty x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}} \; ; \; \int_0^\infty e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\langle \xi \rangle = \frac{\frac{m}{2}\cdot\frac{1}{4}\left\{\frac{\pi}{(\frac{m}{2k_BT})^{1/2}}\right\}^{1/2}}{\frac{1}{2}\left\{\frac{\pi}{(\frac{m}{2k_BT})}\right\}^{1/2}} + \frac{\frac{m\omega^2}{2}\cdot\frac{1}{4}\left\{\frac{\pi}{(\frac{m\omega^2}{2k_BT})^{1/2}}\right\}^{1/2}}{\frac{1}{2}\left\{\frac{\pi}{(\frac{m\omega^2}{2k_BT})}\right\}^{1/2}}$$

$$\langle \xi \rangle = \frac{1}{2} k_BT + \frac{1}{2} k_BT \quad \Rightarrow \therefore \; \langle \xi \rangle = k_BT \qquad (4).$$

ان المعادلة (4) تعود للطاقة الكلية لمتذبذب توافقي واحد فقط . لذلك ولمجموعة n من الذرات ولكل منها ثلاث درجات حرية .

$$\langle \xi \rangle = 3\, k_BT$$

$$\because u = Na\,\langle \xi \rangle \Rightarrow u = 3(N_a k_B)T \Longrightarrow u = 3RT$$

$$\because \; c_v = \frac{\partial u}{\partial t}\Big]_v \quad \Rightarrow \quad c_v = 3R \qquad \text{Dulong and petit law}$$

هذه النتيجة توضح منطقة الحرارة العالية للخط البياني العملي لتغاير c_v مع درجة الحرارة وطبقا لهذه النتيجة فان c_v لا تعتمد على درجة الحرارة اي ان هذه النتيجة لا تستطيع تفسير تغاير c_v مع درجة الحرارة .

نلاحظ ان النظرية الكلاسيكية صحيحة لكثير من المواد الصلبة عند درجة حرارة اعلى من درجة حرارة الغرفة ولكنها فشلت في تفسير تناقص c_v مع درجة الحرارة ولمعالجة هذا الفشل يجب ان نتعلم لماذا يعتمد معدل الطاقة المرافقة لنمط اهتزاز ما على درجة الحرارة وعلى التردد الزاوي ω ولقد بقيت هذه المشكلة حتى عام 1905 عندما جاء انشتاين وبحث السعة الحرارية من وجهة الطاقة المكمأة .

1. الحالة الثالثة :

Fixed quantized harmonic atomic oscillator (Einstein's model for c_v)

لقد افترض انشتاين ان المادة الصلبة تتكون من ذرات تهتز عند مواضع اتزانها بثلاث درجات حرية اي ان N_a يكافئ 3 من N_a مع تردد زاوي ω.

ان المذبذب الذري يستطيع ان يمتلك فقط طاقة مكمأة اي ان ليس هناك طيف مستمر من الطاقة. لذلك فان الطاقة ⟨ξ⟩ تعطى بالعلاقة :

$$\langle \xi \rangle = n\hbar w \qquad (1) \; where\; n = 0,1,2\,, \dots\dots\dots$$

$$and\; where\; \hbar = \frac{h}{2\pi} = \quad 1.054 * 10^{-34} \quad J.S$$

اي ان انشتاين استفاد من فكرة بلانك لكي يوجد معدل الطاقة ⟨ξ⟩:

$$\langle \xi \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \xi\, e^{-\xi/k_B T}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\xi/k_B T}} \qquad (2)$$

نعوض العلاقة (1) في العلاقة (2):

$$\langle \xi \rangle = \frac{\hbar\omega \sum_{n=0}^{\infty} n\, e^{-n\hbar\omega/k_B T}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\hbar\omega/k_B T}} \qquad (3)$$

$$Let\; \frac{-\hbar\omega}{k_B T} = x \;\Rightarrow\; \langle \xi \rangle = \frac{\hbar\omega \sum_{n=0}^{\infty} n\, e^{nx}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{nx}}$$

بفتح حدود الجمع نحصل على :

$$\langle \xi \rangle = \frac{\hbar\omega\{0 + e^{x} + 2e^{2x} + 3e^{3x} \dots\dots\dots\}}{\{1 + e^{x} + e^{2x} + e^{3x} \dots\dots\}}$$

$Let\, u = \{1 + e^{x} + e^{2x} + e^{3x} \dots\dots\}$ المقام

$\dfrac{du}{dx} = 0 + e^{x} + 2e^{2x} + 3e^{3x} \dots\dots\dots$ البسط

$$\langle \xi \rangle = \hbar\omega \frac{1}{u}\frac{du}{dx} \qquad \Rightarrow but\ \frac{du}{u} = \ln u$$

$$\therefore \langle \xi \rangle = \hbar\omega \frac{d}{dx}(\ln u)$$

$$\langle \xi \rangle = \hbar\omega \frac{d}{dx}(\ln(1 + e^{x} + e^{2x} + e^{3x} \dots\dots)$$

$Note : \frac{1}{1-y} = (1-y)^{-1} = 1 + y + y^{2} + y^{3} + \cdots$

$$if\ y = e^{x} \Rightarrow \therefore (1-y)^{-1} = (1-e^{x})^{-1} = 1 + e^{x} + e^{2x} + e^{3x} + \cdots$$

$$\langle \xi \rangle = \hbar\omega \frac{d}{dx}\{\ln(1-e^{x})^{-1}\} = -\hbar\omega \frac{d}{dx}\{\ln(1-e^{x})^{-1}\} = -\hbar\omega \frac{-e^{x}}{1-e^{x}}$$

نقسم البسط والمقام على e^{x} :

$$\therefore \langle \xi \rangle = \frac{\hbar\omega}{e^{-x} - 1}$$

$$but\ x = \frac{-\hbar\omega}{k_B T} \quad \Rightarrow \quad \langle \xi \rangle = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{-\hbar\omega}{k_B T}} - 1} \qquad (4)$$

$$\because \langle \xi \rangle = \hbar\omega\langle n \rangle \Rightarrow \therefore \langle n \rangle = \frac{\langle \xi \rangle}{\hbar\omega} = \frac{1}{e^{\frac{-\hbar\omega}{k_B T}} - 1} \qquad Einstein's\ distrbution\ (5)$$

لقد فرضنا ان هناك ثلاث درجات للحرية :

$$N_a = 3N_a$$

$$u = 3N_a\langle n\rangle \Rightarrow u = \frac{3N_a\hbar\omega}{e^{\frac{-\hbar\omega}{k_BT}} - 1} \qquad (6)$$

$$\because\ c_v = \frac{\partial u}{\partial T}\Big]_v = \frac{3N_a\hbar\omega.\, e^{\frac{\hbar\omega}{k_BT}}.\left(e^{\frac{-\hbar\omega}{k_BT}}\right)^{-1}}{\left(e^{\frac{-\hbar\omega}{k_BT}} - 1\right)^2}$$

نضرب العلاقة الاخيرة اعلاه في $\frac{K_B}{K_B}$

$$\mathrm{c_v} = \frac{3Re^{\frac{\hbar\omega}{k_BT}}.\left(\frac{-\hbar\omega}{k_BT}\right)^2}{\left(e^{\frac{-\hbar\omega}{k_BT}} - 1\right)^2} \qquad (7)\ where\ R = N_aK_B$$

وهذه العلاقة تمثل السعة الحرارية على اي نقطة على المنحنى . ان نموذج انشتاين اوجد علاقة بين c_v من جهة وكل من درجة حرارة البلورة والتردد الزاوي ω .

ادخل انشتاين عاملا جديدا اسماه درجة حرارة انشتاين ويرمز له θ_E والذي يعرف كما يلي :

$$\theta_E = \frac{\hbar\omega}{k_B}$$

$$\therefore\ \mathrm{c_v} = \frac{3R(\frac{\theta_E}{T})^2.\, e^{\frac{\theta_E}{T}}}{\left(e^{\frac{\theta_E}{T}} - 1\right)^2} \qquad (9)$$