i. At high temp.

$$\frac{\theta_E}{T} \Rightarrow small\ ;\ e^{\frac{\theta_E}{T}} = 1 + \frac{\theta_E}{T} + \frac{(\frac{\theta_E}{T})^2}{2! \quad \text{يهمل}}$$

$$e^y = 1 + y + \frac{y^2}{2!}$$

$$\therefore\ c_v = \frac{3R(\frac{\theta_E}{T})^2.\left\{1 + \frac{\theta_E}{T} + \cdots\right\} \rightarrow \text{يهمل لصغره}}{\left(1 + e^{\frac{\theta_E}{T}} + \cdots - 1\ \right)^2}$$

$$\Rightarrow \qquad c_v = 3R\ Dulong\ and\ petit\ law$$

Where $\theta_E\ (w, T)$

وهذه النتيجة تتفق مع المنحنى العملي عند درجات الحرارة العالية.

ii. At average low temp .

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

$$\frac{\theta_E}{T} \Rightarrow large\ ;\ e^{\frac{\theta_E}{T}} \ggg 1$$

لذلك يهمل رقم 1 في العلاقة (9) وتصبح :

$$c_v = \frac{3R\left(\frac{\theta_E}{T}\right)^2.e^{\frac{\theta_E}{T}}}{e^{2\frac{\theta_E}{T}}} = 3R\left(\frac{\theta_E}{T}\right)^2.e^{\frac{\theta_E}{T}} \qquad (10).$$

في المعادلة (10) يسيطر المقدار $e^{\frac{-\theta_E}{T}}$ على قيمة c_v حيث ان c_v تتناقص اسياً عندما تتناقص درجة الحرارة وهذه النتيجة على تناقص مع المنحني العملي الذي فيه $c_v \propto T^3$ عند درجات الحرارة الواطئة جداً . وهذا يعتبر ضعف في نموذج انشتاين وكذلك تشير المعادلة (10) الى ان $c_v = 0$ عندما T=0 K.

$$c_v \propto e^{\frac{-\theta_E}{T}} \propto e^{\frac{-\theta_E}{0}} \propto e^{-\infty} = 0$$

على ضوء ما تقدم في الحالة الثانية والثالثة الماضيتين يمكن ان نوحد مقارنة ما بين الميكانيك الكلاسيكي والميكانيك الكمي في اسلوب معالجة اهتزاز الذرة في البلورة.

1) في الميكانيك الكمي توجد قيمة غير صفرية (صغرى) $\frac{1}{2}\hbar\omega$ لطاقة نقطة الصفر عند درجة حرارة الصفر المطلق وغيرها من درجات الحرارة بينما يسمح الميكانيك الكلاسيكي ببقاء الذرة ساكنة وبطاقة تساوي صفر عند درجة حرارة الصفر المطلق .
2) في الميكانيك الكمي توجد قيم محددة ومقيدة لمستويات طاقة اهتزاز الذرة بينما يسمح الميكانيك الكلاسيكي للذرة المهتزة بان تمتلك اي طاقة .
3) في الميكانيك الكلاسيكي يمكن التنبؤ باحتمالية ثابتة عن وجود الذرة في موقع معين بينما لا يتنبأ الميكانيك الكمي باحتمالية ثابتة (متغيرة) اي متذبذبة.

Exp :prove that: $\langle \xi \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{-\hbar\omega}{k_B T}} - 1}$?

sol : - لقد برهن الميكانيك الموجي بان الطاقة المكمأة لمذبذب توافقي يجب ان يعطى بالعلاقة :

$$\xi = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad where \quad \frac{1}{2}\hbar\omega \Rightarrow zero \longrightarrow point\ energy$$

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

$$\langle \xi \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\, e^{-B\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-B\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega}} \quad where\ B = \frac{1}{k_B T}$$

$$\langle\xi\rangle = \frac{\hbar\omega\{\sum e^{-Bn\hbar\omega-\frac{B}{2}\hbar\omega} + \frac{1}{2}e^{-Bn\hbar\omega-\frac{B}{2}\hbar\omega})\}}{\sum e^{-Bn\hbar\omega-\frac{B}{2}\hbar\omega}} = \hbar\omega\left\{\frac{\sum ne^{-Bn\hbar\omega}}{\sum e^{-Bn\hbar\omega}} + \frac{1}{2}\right\};$$

Let x=−Bħω

$$\therefore \langle\xi\rangle = \hbar\omega\left\{\frac{\sum ne^{nx}}{\sum e^{-nx}} + \frac{1}{2}\right\}$$

$$\langle\xi\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega + \hbar\omega\frac{\sum ne^{nx}}{\sum e^{-nx}}$$

$$\frac{1}{2}\hbar\omega + \hbar\omega\left\{\frac{0 + e^{x} + 2e^{2x} + 3e^{3x}\ldots\ldots\ldots}{1 + e^{x} + e^{2x} + e^{3x}\ldots\ldots}\right\}$$

Let u = 1 + $e^{x} + e^{2x} + \cdots$

$$\frac{du}{dx} = 0 + e^{x} + 2e^{2x} + 3e^{3x}\ldots\ldots\ldots \quad \Longrightarrow \therefore \langle\xi\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega + \hbar\omega\frac{1}{u}\frac{du}{dx}$$

$$\langle\xi\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega + \hbar\omega\frac{d}{dx}\ln u$$

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

We have : $(1-x)^{-1} = 1 + x + x^2 + x^3 + \cdots$

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

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

$$\langle\xi\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{(1-e^{x})^{-1}}(-e^{x})(1-e^{x})^{-2}(-1)$$

$$= \frac{1}{2}\ \hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{(1-e^{x})^{-1}} - e^{x}$$

$$= \frac{1}{2}\ \hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{e^{-x}-1}$$

$$x= -Bk_B T \Longrightarrow \therefore \langle\xi\rangle = \frac{1}{2}\ \hbar\omega + \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{-\hbar\omega}{k_B T}}-1}$$

وعلى ضوء ما تقدم فان نموذج انشتاين يعتبر غير واقعي لأنه افترض ان التردد الزاوي متساوي لجميع انماط الاهتزاز في البلورة وهذا معناه ان جميع الذرات في البلورة تهتز بصورة مستقلة بعضها عن بعض بينما تشير الظواهر الفيزيائية الى التردد الزاوي يختلف للموجات المرنة في المواد الصلبة .

1. الحالة الرابعة : Debye model

لقد افترض ديباي بأن ذرات البلورة مترابطة بعضها ببعض بحيث لا يمكن لذرة ما ان تكون بحالة اهتزاز دون ان تؤثر في الذرات المجاورة لها ومن ثم على جميع الذرات البلورة , لذلك ادخل ديباي في حساباته كثافة الحالات (عدد الانماط التي يمكن تميزها لكل وحدة مدى لتردد الزاوي) وعلى هذا الاساس يمكن اعتبار البلورة مجموعة من الاهتزازات المترابطة المشابه الاهتزازات الشبكية الخطية احادية الذرات ان هذه الاهتزازات المتجمعة تشير موجات واقفة تعتمد تردداتها على شكل و حجم البلورة بطريقة مشابهة للموجات الواقفة في تجويف .

اضاف ديباي الى نموذجه عدة نقاط هي :

1- التعامل مع حركية الشبيكة كليا , اي اعتبر ذرات الصلب كأنها مذبذبات تتذبذب جميعا وليس مستقلة عن بعضها البعص كما قال انشتاين . ولكن انماط الاهتزاز الجماعية تتذبذب بصورة مستقلة بعضها عن بعض بينما الذرات تتفاعل مع بعضها البعض .

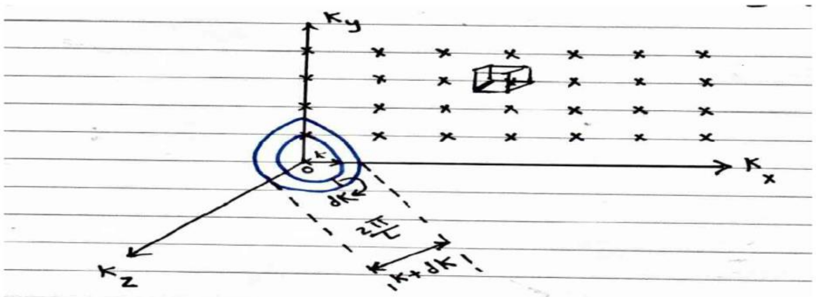
وبموجب ذلك قد تنتشر موجتان صوتيتان في صلب بحيث تكون احداهما مستقلة عن الاخرى ولكن يجب ان يحدث تفاعل الذرات مع بعضها البعض لكي يتم انتشار الموجة في الصلب

2- اذا كان الطول الموجي لموجة مرنة تنتشر خلال بلورة اكبر من المسافات البينية للبلورة امكن اعتبارها (البلورة) وسطا مستمراً(ليس نقطة كتلية منفصلة) بالنسبة لتلك الموجة وعلى هذا الاساس يمكن استخدام مواصفات الوسط المستمر لدراسة انماط الاهتزاز المختلفة في البلورة .

وهذا يعني ان التردد الزاوي ω لنمط اهتزاز هو كمية تعتمد على متجه الموجة k وليس كمية ثابتة , اي ان تردد اهتزاز الشبيكة يغطي مدى واسع من القيم بحيث ان تغير متجه الموجة k يصاحبه تغير في التردد الزاوي وهذا مخالف لفرضيه انشتاين الذي فرض ان التردد الزاوي واحد.

3- ان طيف التردد الزاوي لوسط مستمر يجب ان ينقطع عند قيمة معينة للتردد الزاوي وذلك لكي يستجيب مع العدد الكلي لأنماط الاهتزاز ($3N_a$) ويسمى اقصى تردد زاوي يحدث عنده انقطاع

الطيف بتردد ديباي $(\omega_D = Debye\ freq.or\ cut - off\ freq.)$ وهو كمية ثابتة لجميع انماط الاهتزاز سواء كانت طولية او مستعرضة . ويسمى متجه الموجة المقابل لهذا التردد بمتجه موجة ديباي .



والان لو فرضنا ان هناك قشرة كروية shell في فضاء متجه الموجة المركزة نصف قطرها k وسمكها dk وان حجمها$4\pi k^2 dk$. ان عدد النقاط (مواضع الاهتزاز المسموحة) في القشرة بين الكرتين ذات انصاف اقطار k+ dk, k يمكن ايجادها بقسمة حجم القشرة على الحجم الذي تشغله النقطة الواحدة .

$$\text{عدد النقاط} = \frac{1}{8}\left\{\frac{4\pi k^2 dk}{\frac{\pi^3}{v}}\right\} * 3$$

وحيث ان كل نقطة تكافئ ثلاثة انواع مختلفة من الاستقطاب (اثنين مستعرضة والاخرى طولية) لكل قيمة من قيم متجه الموجةk .

اذاً لإيجاد عدد النقاط (المذبذبات) في القشرة dk يجب ان نضرب العلاقة اعلاه في 3.

$$\mathrm{g(x)dk} = \frac{1}{8}\left\{\frac{4\pi k^2 dk}{\frac{\pi^3}{v}}\right\} * 3 = \frac{3v}{2\pi^2} k^2 \mathrm{dk}$$