

الاستیسیته جامدات خطی يك اتمی

نوشته :

آروکاس آراکلیان و حمید رفیع زاده

انستیتو مهندسی مکانیک - پلی تکنیک تهران

چکیده :

دینامیک شبکه‌ای مواد بعنوان رشته مطالعه خواص مواد معرفی شده و کاربرد آن در مورد کریستال گازهای خنثی با استفاده از مدل جامد خطی یک اتمی نشان داده شده است. ضرایب الاستیسیته کریستال گازهای خنثی با استفاده از تئوری کلاسیک الاستیسیته و تئوری دینامیک شبکه‌ای محاسبه و با مقادیر تجربی مقایسه شده است.

I - مقدمه :

بوجود آوردن ماده‌ای که دارای خواص ایده‌آل باشد همیشه مورد توجه بوده و بعنوان مثال میتوان خواص فولاد را با خواص سواد اولیه فولاد که آهن و کربن است مقایسه کرد که فولاد بسته به درصد کربن خیلی سخت‌تر از فولاد آهن یا کربن میباشد. بغیر از نیمه هادیها که خواص آنها بصورت تئوری قبلا پیش بینی شده بود^(۱) اغلب پیشرفته‌ها در مورد مواد دیگر بصورت تجربی بوده و متالژیست یا شیمیست با حدس زدن و انجام دادن آزمایشهای مختلف موفق در بهبود خواص فلزات یا پلاستیکها شده‌اند. در حال حاضر نیز بهبود خواص مواد از طریق انجام آزمایش انجام میگردد ولی با در نظر گرفتن اینکه با بیلونها نوع از ترکیبات مختلف مواد میتوان کار کرد دایره عمل در آزمایشگاهها خیلی محدود بوده و کاملا واضح است که تئوری خواص مواد در صورتیکه به تکمیل برسد میتواند وسیله مؤثرتری در پیش بینی خواص ماده‌ای که از مخلوط کردن درصدهای مختلفی از عناصر مختلف بدست می‌آید باشد.

تئوری خواص مواد^(۲) در حال حاضر سعی در بوجود آوردن مواد با خواص بخصوص نمیکند و برعکس با استفاده از نتایج آزمایشگاهی سعی در درک و فهم خواص مشاهده شده دارد. تئوری‌های فعلی سعی میکنند برای مواد شناخته شده و خواص اندازه گیری شده مدلهائی پیشنهاد کند که ساختمان و خواص

مشاهده شده را توجیه نماید. با تکمیل این مدلها و تئوریهها و با استفاده از کامپیوترهای سریع میتوان خیلی سریع تر از یک آزمایشگاه مخلوطهای مختلفی از اتمها را با ساختمانهای کریستالی مخصوص به خود مورد مطالعه قرار داد و خواص مکانیکی، الکتریکی، ترمودینامیکی و غیره آنها را محاسبه کرد و پس از اینکه خواص مورد نیاز معین شد از یک آزمایشگاه تجربی برای تأیید تئوری استفاده نمود.

منظور از این مقاله مطالعه خواص اجسام از طریق شناخت ساختمان اتمی و آنالیز نیروهای بین اتمها با استفاده از تئوری دینامیک شبکه‌ای مواد^(۳۲) است. در تئوریهای دینامیک شبکه‌ای مواد برای اجسامی که ساختمان کریستالی آنها مشخص است با فرض کردن نحوه عمل نیرو بین اتمها میتوان خواص مکانیکی، ترمودینامیکی و غیره را محاسبه و سپس با مقادیر تجربی این خواص مقایسه کرد. در قسمت II مطالبی درباره نیروی موجود بین اتمها و چگونگی نشان دادن این نیروها با استفاده از پتانسیل‌های ساده معرفی میشود. در قسمت III تئوری الاستیسیته از نقطه نظر کلاسیک معرفی میشود و برای یک کریستال مکعبی در جهات تقارن زیاد ارتعاشات الاستیسیته مطالعه میشوند. اضافه کردن این قسمت از نقطه نظر مقایسه ضرایب الاستیسیته با پارامترهای تئوری دینامیک شبکه‌ای آموزنده است. در قسمت IV اصول تئوری دینامیک شبکه‌ای و تعاریف مربوطه بصورت عمومی خواهد آمد و در قسمت V ساده‌ترین مدل یک جامد که خطی یک اتمی نامیده میشود از نقطه نظر تئوری دینامیک شبکه‌ای مطالعه خواهد شد. این مدل اساساً میتواند جانشین قسمتی از ساختمان یک جامد حقیقی شود که در جهت بخصوصی ساختمان آن با یک سیستم خطی تقریب شده است. برای نشان دادن اهمیت این مدل ساده برای کریستال‌های گازهای خنثی ضرایب الاستیسیته را با استفاده از پتانسیل لندارد - جونز برای عمل نیروها محاسبه و با مقادیر تجربی مقایسه خواهد شد که در بخش VI نتایج بدست آمده مورد تفسیر قرار میگیرد.

II - نیروی بین اتمها

در این مقاله که منظور مطالعه خواص کریستال اجسام است باید در نظر گرفت که طرز قرار گرفتن هسته یا یونها و الکترونها عناصر در فضا متفاوت میباشد و در نتیجه ساختمان مواد مختلف از این لحاظ متفاوت خواهد بود. سؤال اساسی این است که چه عاملی ساختمان یک کریستال را نگه میدارد؟ جواب آنکه مهمترین عامل نیروی الکترواستاتیکی بین الکترونها و هسته خواهد بود و بقیه نیروها مانند نیروهای مغناطیسی بسیار ناچیز و اثر نیروی ثقل اتمها قابل اغماض میباشد. برای آنکه نیروی الکترواستاتیکی بتواند ساختمان کریستالی جسم را حفظ کند هسته‌ها و الکترونها باید از همدیگر طوری جدا باشند که نیروی دافعه کولمب بارهای مشابه به مینیمم برسد و همچنین الکترونها تا حد امکان به یونها مثبت نزدیک باشد تا نیروی جاذبه کولمب به حداکثر برسد. آنالیز کامل نیروها با استفاده از مکانیک کوانتومی ممکن است گرچه در این صورت عبارات بدست آمده استفاده عملی نخواهد داشت. در اغلب موارد این امکان

وجود دارد که با ساده کردن تئوری و همچنین با استفاده از نتایج تجربی ، عبارات و فرمولهای ساده‌ای برای عمل نیروها بین اتمها و ملکولهای یک جامد بدست آورد.

آنالیز عمل نیروهای بین اتمهای یک جامد خیلی ساده میشود در صورتیکه ایده پتانسیل عمل نیروها معرفی شود.

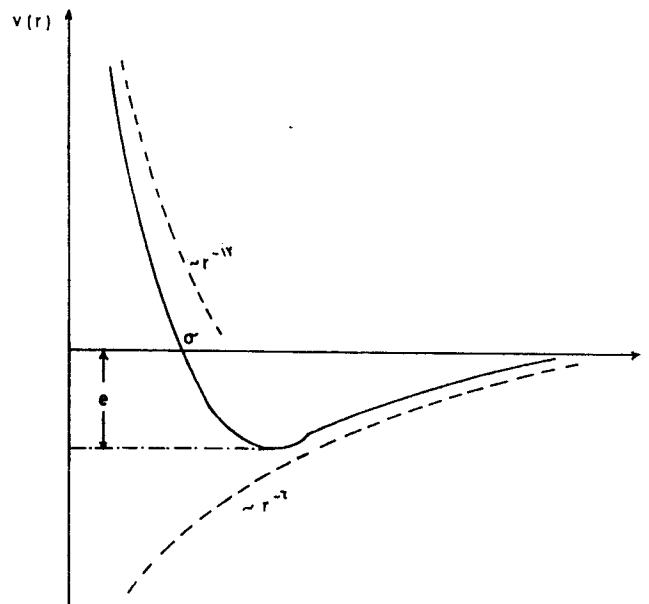
میتوان بسادگی نشان داد^(۴) که نیروی بین دو اتم F که در فاصله r از هم قرار دارند

بصورت :

$$F = -V'(r) \quad (1)$$

به پتانسیل عمل نیرو $V(r)$ مربوط میباشد . پتانسیل بین اتمها در یک کریستال از این جهت حائز اهمیت است که توسط آن میتوان تمام خواص مکانیکی و ترمودینامیکی جسم مورد نظر را با استفاده از تئوری دینامیک شبکه‌ای بدست آورد . پس یکی از موارد مورد ملاحظه در این تئوری تعیین و بدست آوردن فرمولهای لازم پتانسیل عمل نیرو برای اتمهای یک کریستال میباشد . ساده‌ترین حالت جامداتی هستند که در آنها اتمها از لحاظ بار الکتریکی خنثی میباشند که در این صورت از پتانسیل (لنارد - جونز) میتوان استفاده کرد . این پتانسیل دارای دو جزء است . یک جزء انرژی مربوط به نیروهای واندروالس بصورت عمومی r^{-6} و جزء دوم پتانسیل مربوط به نیروهای دافعه میباشد که متناسب با r^{-12} میباشد^(۵) . فرمول پتانسیل (لنارد - جونز) که براساس تجربه و تئوری میباشد با استفاده از این دو نیرو بصورت زیر نوشته میشود .

$$V(r) = \epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (2)$$



شکل ۱ - پتانسیل لنارد - جونز با خط سیاه نشان داده شده و دو جزء دافعه و جاذبه با خط چین مشخص شده‌اند.

که $V(r)$ پتانسیل بی دو اتم به فاصله r بوده که ϵ مربوط به شدت پتانسیل و σ مربوط به حدود قدرت دافعه پتانسیل میباشد. در شکل (۱) تغییرات پتانسیل لنارد - جونز در مقابل فاصله بین دو اتم نشان داده شده است. در مطالعه‌ای که در قسمتهای بعدی صورت خواهد گرفت از این پتانسیل برای محاسبه نیروهای بین اتمهای یک جامد استفاده خواهیم کرد.

III - تئوری الاستیسیته و حرکت موج الاستیک در یک کریستال مکعبی

در این قسمت حرکات ارتعاشی الاستیک یک جامد مورد مطالعه قرار میگیرد و ارتعاشات یک کریستال با تقارن مکعبی در جهات با تقارن زیاد بررسی میشود تا در قسمت V با نتایج تئوری دینامیک شبکه‌ای مقایسه شود. اگر یک المان از ماده‌ای تحت اثر نیروهای وارده بر آن تغییر مکان و تغییر شکل دهد طبق اصول اولیه الاستیسیته با استفاده از اصل بقا حرکت خطی برای المان (شکل ۲) میتوان نوشت که:

$$F_x = \rho \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} \quad (۳)$$

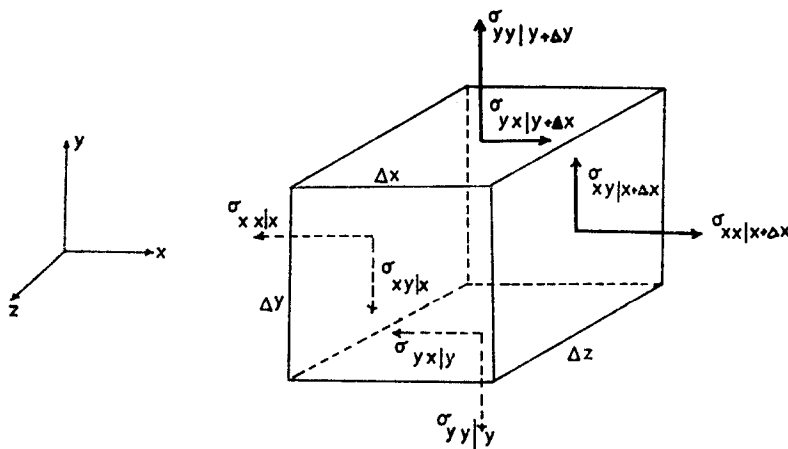
و:

$$F_x = \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial z} \quad (۴)$$

که u_x مؤلفه تغییر مکان المان در جهت x و ρ دانسیته جسم مورد مطالعه است. با تساوی دو رابطه (۳) و (۴):

$$\rho \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial z} \quad (۵)$$

روابطی نظیر رابطه (۵) برای جهات y و z نیز بسادگی بدست خواهد آمد.



شکل ۲ - یک المان برای آنالیز تنش‌ها به منظور بدست آوردن معادلات الاستیسیته کلاسیک

برای حل این معادله رابطه‌ای بین σ و u باید فرض شود که با استفاده از تئوری کلاسیک

الاستیسیته میتوان نوشت :

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \epsilon_{kl} \quad (۶)$$

و :

$$\epsilon_{ij} = \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (۷)$$

که C_{ijkl} ضریب الاستیسیته میباشد. با انتخاب :

$$xx=۱, yy=۲, zz=۳, yz=۴, zx=۵, xy=۶ \quad (۸)$$

معادله (۵) بصورت :

$$\rho \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + C_{\xi\xi} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + (C_{12} + C_{\xi\xi}) \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial x \partial z} \right)$$

نوشته میشود که برای جهات y و z نیز بسادگی میتوان نشان داد که :

$$\rho \frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + C \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} \right) + (C_{12} + C_{\xi\xi}) \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y \partial z} \right)$$

و :

$$\rho \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} + C \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} \right) + (C_{12} + C_{\xi\xi}) \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y \partial z} \right)$$

در اینجا :

$$\mathbf{u} = u_x \hat{x} + u_y \hat{y} + u_z \hat{z} \quad (۱۲)$$

میباشد. حل معادلات (۹ تا ۱۱) را میتوان حرکت نوسانی با معادله :

$$\mathbf{u} = \mathbf{U} \exp(i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)) \quad (۱۳)$$

فرض کرد. اگر در حل بدست آمده جهت \mathbf{u} و \mathbf{q} یکی باشد به این حرکت موج طولی (longitudinal) و در صورتیکه \mathbf{u} عمود بر \mathbf{q} باشد این حرکت عرضی (transverse) نامیده میشود. \mathbf{q} بردار موج الاستیک و \mathbf{r} فاصله بین دو نقطه در جسم و ω فرکانس موج الاستیک میباشد.

در اینجا برای مقایسه بعدی و همچنین برای آشنایی با کاربرد معادلات الاستیسیته این معادلات

را برای ارتعاشات یک جامد در حالت‌های مختلف حل میکنیم. در حالت اول فرض میکنیم که ارتعاشات آنها

در جهت x بوده و جهت حرکت بردار موج \mathbf{q} نیز همان x میباشد. با علامت گذاری $\mathbf{q} = [q_x, q_y, q_z]$

در جهت $[1, 0, 0]$.

$$\mathbf{u} = u_x \hat{x} \quad (۱۴)$$

$$\mathbf{q} = q_x \hat{x} \quad (۱۵)$$

$$\mathbf{r} = x \hat{x} + y \hat{y} + z \hat{z} \quad (۱۶)$$

با قرار دادن روابط (۱۴ تا ۱۶) در رابطه (۱۳) خواهیم داشت :

$$u_x = U_x \exp(i(q_x x - \omega t)) \quad (17)$$

و از طرفی با توجه باینکه :

$$u_y = u_z = 0$$

است رابطه (۹) بصورت زیر در خواهد آمد :

$$\rho \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} \quad (18)$$

حال رابطه (۱۷) را در رابطه (۱۸) قرار میدهیم :

$$\rho \omega^2 = C_{11} q_x^2 \quad (19)$$

و یا بصورت معمول :

$$\omega / q_x = (C_{11} / \rho)^{\frac{1}{2}} \quad (20)$$

که نسبت ω / q_x عبارت از سرعت انتشار صوت در امتداد مورد نظر است پس اگر سرعت صوت در این امتداد مشخص باشد با دانستن ρ میتوان C_{11} را در این امتداد برای جسم جامد مورد نظر بدست آورد. برای آشنائی بیشتر به کار برد معادلات (۹ تا ۱۱) برای حرکت عرضی نیز این معادلات حل میشوند یعنی وقتی که ارتعاش الاستیک در جهت y و بردار موج الاستیک در جهت x میباشد. در این صورت :

$$\mathbf{u} = u_y \hat{y} \quad (21)$$

$$\mathbf{q} = q_x \hat{x} \quad (22)$$

با قرار دادن روابط (۲۱ و ۲۲) در رابطه (۱۳) خواهیم داشت :

$$u_y = U_y \exp(i(q_x x - \omega t)) \quad (23)$$

که با قرار دادن در رابطه (۱۰) و با توجه باینکه $u_x = u_z = 0$ است نتیجه میشود که :

$$\omega^2 / q_x^2 = C_{\xi\xi} / \rho \quad (24)$$

سرعت صوت طولی را برای یک مدل ساده در تئوری دینامیک شبکه ای در قسمت IV محاسبه خواهیم کرد و با رابطه (۲۰) مقایسه میکنیم تا عبارتی برای ضریب الاستیسیته C_{11} بدست آید که مربوط به نیروی بین اتمها و فواصل آنها میباشد.

IV - تئوری دینامیک شبکه ای

برای آنکه نتایج تئوری الاستیسیته را از طریق تئوری دینامیک شبکه ای مطالعه کنیم ابتدا در این قسمت این تئوری را بصورت عمومی معرفی میکنیم. در یک سلول واحد از کریستال مورد نظر اتمها را

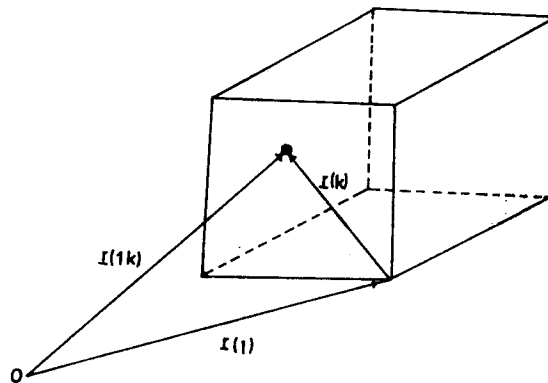
با حرف k و سلولهای واحد یک کریستال را با حرف l مشخص میکنیم. اتم k از سلول واحد l و اتم k' از سلول واحد l' را در نظر بگیرید. انرژی پتانسیل V بین اتمهای کریستال بستگی به فاصله بین هر دو اتم دارد و انرژی پتانسیل کریستال از مجموعه اثرهای اتمها بریکدیگر خواهد بود که بطور عموم:

$$V = V[\mathbf{r}(lk), \dots, \mathbf{r}(l'k')] \quad (25)$$

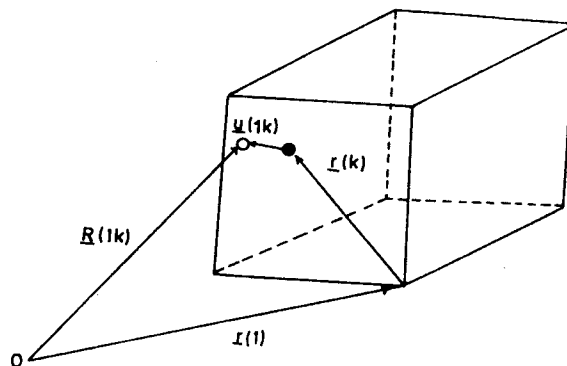
که $\mathbf{r}(lk)$ محل اتم k در سلول l بصورت زیر تعریف میشود:

$$\mathbf{r}(lk) = \mathbf{r}(l) + \mathbf{r}(k) \quad (26)$$

که $\mathbf{r}(k)$ محل اتم k در سلول واحد و $\mathbf{r}(l)$ محل سلول واحد l در کریستال میباشد که بطور واضح در (شکل ۳، الف) نشان داده شده است.



شکل ۳- الف - تعریف محل یک سلول واحد $\mathbf{r}(l)$ و محل یک اتم در سلول واحد $\mathbf{r}(lk)$ با $\mathbf{r}(k)$ که محل اتم k در سلول واحد l میباشد.



شکل ۳- ب - موقعیت دینامیکی هر اتم $\mathbf{R}(lk)$ میباشد که مجموع محل تعادل اتم $\mathbf{r}(lk)$ و جابجائی اتم از نقطه تعادل یعنی $\mathbf{u}(lk)$ میباشد.

اگر جابجائی کوچک اتم k از سلول واحد l را حول نقطه تعادل $\mathbf{u}(lk)$ بشامیم نسبت به

مبدأ موقعیت دینامیکی هر اتم عبارت خواهد بود از:

$$\mathbf{R}(\mathbf{l}k) = \mathbf{r}(\mathbf{l}) + \mathbf{r}(\mathbf{k}) + \mathbf{u}(\mathbf{l}k) \quad (27)$$

که برای هر اتم این بردار تابعی از زمان خواهد بود بطوریکه :

$$\int_0^{\infty} \mathbf{u}(\mathbf{l}k, t) dt = 0 \quad (28)$$

که صورت ریاضی فرض اولیه ایست که اتمها دارای ارتعاشات دلبخواه کوچک حول نقطه تعادل میباشد. پتانسیل کلی برای مجموعه اتمهای یک کریستال تابعی از بردارهای ارتعاشات دینامیکی اتمها بصورت :

$$V = V[\mathbf{r}(\mathbf{l}k) + \mathbf{u}(\mathbf{l}k), \dots, \mathbf{r}(\mathbf{l}'k') + \mathbf{u}(\mathbf{l}'k'), \dots] \quad (29)$$

خواهد بود که با بسط رابطه (29) با سری تیلور حول نقطه تعادل میتوان رابطه را بصورت زیر نوشت :

$$\begin{aligned} V = & V(\mathbf{r}(\mathbf{l}k), \dots, \mathbf{r}(\mathbf{l}'k'), \dots) + \frac{1}{1!} \sum_{\mathbf{l}kx} \left. \frac{\partial V}{\partial u_x(\mathbf{l}k)} \right|_0 u_x(\mathbf{l}k) \\ & + \frac{1}{2!} \sum_{\substack{\mathbf{l}kx \\ \mathbf{l}'k'y}} \left. \frac{\partial^2 V}{\partial u_x(\mathbf{l}k) \partial u_y(\mathbf{l}'k')} \right|_0 u_x(\mathbf{l}k) u_y(\mathbf{l}'k') \\ & + \dots (u^3, u^4, \dots) \end{aligned} \quad (30)$$

که اندیس 0 محاسبه مقادیر مورد نظر در حالت تعادل کریستال و (u^3, u^4, \dots) نشانه عبارتهائی تابع مراتب سه به بالا از جایجائی اتم میباشد که بعلا کجکی u صرف نظر میشود. بصورت ساده رابطه (30) بصورت زیر نشان داده میشود :

$$V = V_0 + V_1 + V_2 \dots \quad (31)$$

که :

$$V_0 = V(\mathbf{r}(\mathbf{l}k), \dots, \mathbf{r}(\mathbf{l}'k'), \dots) \quad (32)$$

$$V_1 = \sum_{\mathbf{l}kx} \left. \frac{\partial V}{\partial u_x(\mathbf{l}k)} \right|_0 u_x(\mathbf{l}k) \quad (33)$$

$$V_2 = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{l}kx \\ \mathbf{l}'k'y}} \left. \frac{\partial^2 V}{\partial u_x(\mathbf{l}k) \partial u_y(\mathbf{l}'k')} \right|_0 u_x(\mathbf{l}k) u_y(\mathbf{l}'k') \quad (34)$$

با توجه باینکه $\left. \frac{\partial V}{\partial u_x(\mathbf{l}k)} \right|_0$ معادل است با نیرو در جهت x روی اتم $\mathbf{l}k$ در حالت تعادل و چون در حالت تعادل تمام نیروها باید صفر باشند پس ضرایب V_1 صفر خواهد بود.

رابطه (۳۴) را بصورت زیر تغییر میدهیم :

$$V_T = \frac{1}{\nu!} \sum_{\substack{lyx \\ l'k'y}} \varphi_{xy}(lk, l'k') u_x(lk) u_y(l'k') \quad (35)$$

که $\varphi_{xy}(lk, l'k')$ بنام ضریب ثابت نیرو تعریف میشود. بطور کلی :

$$\varphi_{xy} = \left. \frac{\partial^2 V}{\partial u_x(lk) \partial u_y(l'k')} \right|_0 \quad (36)$$

تفسیر $\varphi_{xy}(lk, l'k')$ باین صورت است که نیروی وارده در جهت x را براتم k در سلول واحد l در اثر حرکت اتم k' در سلول واحد l' در جهت y را نشان میدهد.

برای ساده کردن فرم پتانسیل از (u^r, u^e, \dots) بعلت کوچک بودن u که در حدود 10^{-4} انگستریم است صرفنظر میشود و V_0 که مقدار ثابتی است در مشتق گیری معادلات بعدی حذف خواهد شد. در نتیجه میتوان پتانسیل عمل نیروها را برای یک کریستال بصورت زیر نوشت :

$$V = V_T \quad (37)$$

با نوشتن معادله نیروئی که براتم lk در امتداد x وارد میشود :

$$F_x(lk) = m_k \frac{\partial^2 u_x(lk)}{\partial t^2} = - \frac{\partial V_T}{\partial u_x(lk)} = - \sum_{l'k'y} \varphi_{xy}(lk, l'k') u_y(l'k') \quad (38)$$

که این معادله مطابق معمول دارای حل :

$$u(lk) = U(k, \mathbf{q}) \exp\{i[\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}(lk) - \omega(\mathbf{q})t]\} \quad (39)$$

خواهد بود. با قرار دادن رابطه (۳۹) در رابطه (۳۸) این رابطه را بصورت زیر میتوان نوشت :

$$m_k \omega^2 U_x(k, \mathbf{q}) = \sum_{k'y} M_{xy}(kk', \mathbf{q}) U_y(k', \mathbf{q}) \quad (40)$$

که $M_{xy}(kk', \mathbf{q})$ را بنابه تعریف ماتریس دینامیک مینامند و عبارت خواهد بود از :

$$M_{xy}(kk', \mathbf{q}) = \sum_{l'} \varphi_{xy}(lk, l'k') \exp(i \mathbf{q} \cdot [\mathbf{r}(l'k') - \mathbf{r}(lk)]) \quad (41)$$

باانتخاب :

$$\mathbf{r}'_{kk'} = \mathbf{r}(l'k') - \mathbf{r}(lk) \quad (42)$$

و :

$$\bar{M}_{xy}(kk', \mathbf{q}) = \sum_{l'} \varphi_{xy}(l', kk') \exp[i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}'_{kk'}] \quad (43)$$

معادله حرکت اتم lk و همچنین ماتریس دینامیک ساده میشود در صورتیکه آنرا بصورت زیر بنویسیم :

$$M_{xy}(kk', \mathbf{q}) = \sum_{l'} \varphi_{xy}(l', kk') \exp[i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}'_{kk'}] + \varphi_{xy}(0, kk') \delta_{kk'} \quad (44)$$

که در رابطه (44) ضریب ثابت نیرو برای $l' = 0$ را از سیستم بقیه سلولهای واحد جدا کرده ایم. از طرفی طبق اصل عمل و عکس العمل^(۲) میتوان نشان داد که:

$$\varphi_{xy}(0, kk') = - \sum_{l'k'} \varphi_{xv}(l', kk') \quad (45)$$

با استفاده از رابطه (45) در رابطه (44) خواهیم داشت:

$$M_{xy}(kk', \mathbf{q}) = \bar{M}_{xy}(kk', \mathbf{q}) - \delta_{kk'} \sum_{k''} \bar{M}_{xy}(0, k'k'') \quad (46)$$

که:

$$\bar{M}_{xy}(kk', \mathbf{q}) = \sum_{l'} \varphi_{xy}(l', kk') \exp[i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}'_{kk'}] \quad (47)$$

باین ترتیب رابطه (47) بصورت کلی زیر نوشته میشود:

$$\underline{\underline{\mathbf{m}}} \omega^r \underline{\underline{\mathbf{U}}} = \underline{\underline{\mathbf{M}}} \underline{\underline{\mathbf{U}}} \quad (48)$$

که $\underline{\underline{\mathbf{m}}}$ و $\underline{\underline{\mathbf{M}}}$ بترتیب ماتریسهای مربوط به جرمهای اتمها و ماتریس دینامیک کریستال خواهد بود. با تغییر فرم:

$$\omega^r \underline{\underline{\mathbf{U}}} = \underline{\underline{\mathbf{m}}}^{-1} \underline{\underline{\mathbf{M}}} \underline{\underline{\mathbf{U}}} \quad (49)$$

که معادل است با:

$$\lambda \underline{\underline{\mathbf{U}}} = \underline{\underline{\mathbf{A}}} \underline{\underline{\mathbf{U}}} \quad (50)$$

میتوان این معادله را در مقادیر مختلف بردار موج \mathbf{q} حل کرد و فرکانسهای موج الاستیک را بصورت مقدار مشخصه ماتریس دینامیک بدست آورد.

روابطی که در این بخش بدست آورده عمومیت دارد و درحالتیکه $1 \ll |\mathbf{r}|, |\mathbf{q}|$ باشد با اینکه $0 \rightarrow \mathbf{q}$ میتوان نشان داد که این معادلات تبدیل به معادلات کلاسیک ذکر شده در قسمت III خواهند شد.

V - جامد خطی یک اتمی از نقطه نظر تئوری دینامیک شبکه‌ای

برای مشخص کردن روش آنالیز خواص جامدات با استفاده از تئوری دینامیک شبکه‌ای در (شکل ۴) ساده‌ترین مدل یک راکه جامد خطی یک اتمی نامیده میشود در نظر میگیریم. جامد خطی یک اتمی دارای اتمهای مشابه با جرم m میباشد که فاصله هردو اتم مجاور از هم d است. باین

جامد از این نظر خطی گفته میشود که سلول واحد فقط در یک امتداد تکرار میشود و در ضمن یک اتمی نامیده میشود چون در هر سلول واحد آن فقط یک اتم وجود دارد. برای مقایسه این سیستم با نتایج تئوری الاستیسیته سادهترین حالت یعنی ارتعاش اتمها در امتداد زنجیر و انتشار موج الاستیک در همین جهت در نظر گرفته میشود و در ضمن تنها اثر نیروهای دو اتم مجاور هراتم بر آن منظور خواهد شد. با در نظر گرفتن تمام این فرضیات برای هراتم زنجیر ماتریس ضریب ثابت نیرو بصورت زیر خواهد بود:

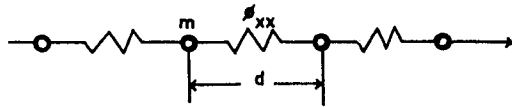
$$\underline{\varphi}(kk') = \begin{bmatrix} \varphi_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (51)$$

چون فقط جابجائی یک اتم در جهت x میتواند باعث وارد شدن نیروئی در همان جهت بر اتم دیگر باشد. با استفاده از روابط (47) و (51):

$$\begin{aligned} \bar{M}_{xx}(\mathbf{q}) &= \varphi_{xx} \exp(iq_1 d) + \varphi_{xx} \exp(-iq_1 d) \\ &= 2\varphi_{xx} \cos(q_1 d) \end{aligned} \quad (52)$$

که در اینجا 1 مخفف longitudinal میباشد. با استفاده از رابطه (47):

$$M_{xx}(\mathbf{q}) = \bar{M}_{xx}(\mathbf{q}) - \bar{M}_{xx}(0) = 2\varphi_{xx} [\cos(q_1 d) - 1] \quad (53)$$



شکل 4 - جامد خطی یک اتمی که اثر نیروی دو اتم بصورت یک فنر نشان داده شده است.

با قرار دادن رابطه (47) در رابطه (53) معادله حرکت بصورت زیر درمیآید:

$$m \omega^2 U_x = M_{xx}(\mathbf{q}) U_x \quad (54)$$

که بسادگی مقدار مشخصه آن یعنی توان دوم فرکانس ارتعاش تعیین میشود. این مقدار عبارت است از:

$$\omega^2 = \frac{1}{M_{xx}(\mathbf{q})} = \frac{2}{m} \varphi_{xx} [\cos(q_1 d) - 1] \quad (55)$$

همانطور که قبلا اشاره شد در حالتی که $q \rightarrow 0$ این معادله مشابه معادلات بدست آمده از

تئوری الاستیسیته میشود. با بسط $\cos(q_1 d)$ و با در نظر گرفتن تقریب دوم:

$$\omega^2 = \frac{2}{m} \varphi_{xx} \left(1 - \frac{(q_1 d)^2}{2!} + \dots \right) = -\frac{\varphi_{xx} d^2}{m} q_1^2 \quad (56)$$

و یا :

$$(\omega / q_1)^2 = - \frac{\sigma_{xx} d^2}{m} \quad (57)$$

با استفاده از رابطه (۲) و با توجه باینکه حرکت‌های طولی اتمها در زنجیر خطی معادل امواج الاستیسیته در جهت طولی میباشد خواهیم داشت :

$$C_1 / \rho = - d^2 \sigma_{xx} / m \quad (58)$$

و یا :

$$C_1 = - \frac{\rho d^2 \sigma_{xx}}{m} \quad (59)$$

از رابطه (۵۹) در صورتی میتوان استفاده کرد که پتانسیل عمل نیرو بین اتمها مشخص باشد که در اینصورت میتوان σ_{xx} را از مشتق دوم این پتانسیل بدست آورد.

IV - ضرایب الاستیسیته کریستال گازهای خنثی

برای نشان دادن اهمیت استفاده از مدلی بسادگی جامد خطی یک اتمی، کریستال گازهای خنثی را در نظر میگیریم. ساختمان کریستالی این اجسام FCC میباشد که قرار گرفتن اتمها در سلول واحد آن در (شکل ۵) نشان داده شده است^(۴).

چنانچه در جهت قطریکی از شش وجه مکعب نگاه کنیم متوجه خواهیم شد که طرز قرار گرفتن در این امتداد که در ضمن دارای کوتاهترین فاصله بین اتمها نیز میباشد بصورت یک زنجیر خطی است که در سلول واحد آن فقط یک اتم قرار دارد. از این روبعنوان یک تقریب اولیه بجای ساختمان کامل کریستال فقط این جهت بخصوص را در نظر میگیریم و خواص را فقط در این جهت بخصوص مورد آنالیز قرار میدهیم و فرض میکنیم که اتمهای مجاور دیگر هیچ تأثیری در رفتار زنجیر نخواهند داشت. دلیل اضافه ای برای انتخاب کریستالهای گازهای خنثی برای این مطالعه این است که اطلاعات تجربی در مورد اندازه سلول واحد^(۷) ضریب الاستیسیته^(۱۰۷۸) و همچنین پتانسیل عمل نیروها بین اتمهای این نوع کریستالها^(۱۱۲۴) وجود دارد.

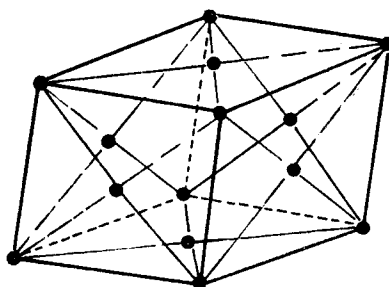
برای حالت بخصوص کریستال گازهای خنثی میتوان پتانسیل (لنارد - جونز) را بکار برد در ضمن برای این کریستالها بسادگی میتوان نشان داد که با جرم اتمی m مقدار دانسیته حجمی :

$$\rho = \frac{1}{\tau} m / d^3 \quad (60)$$

میباشد که d نزدیکترین فاصله بین دو اتم کریستال خواهد بود. در اینصورت رابطه (۵۹) بصورت زیر ساده میشود.

$$C_1 = - \tau \frac{1}{\tau} \sigma_{xx} / d \quad (61)$$

با دو بار مشتق گیری از پتانسیل (لنارد - جونز) مقدار ضریب ثابت نیرو :



شکل ۵ - ساختمان سلول واحد کریستال FCC

$$\sigma_{xx} = -\frac{\partial^2 V(r)}{\partial r^2} = -\frac{\epsilon}{r^2} [10.6(\sigma/r)^{12} - 42(\sigma/r)^6] \quad (62)$$

خواهد شد . باین سبب زنجیر در جهت [110] کریستال گازهای خنثی فرض شده که در این امتداد عمل نیرو بین اتمها قوی ترین میباشد چون کوتاه ترین فاصله اتمی در این جهت است . در این حالت برای کریستالهای FCC میتوان نشان داد که ضریب الاستیسیته در جهت [110] برابر است با :

$$C_{11} = \frac{1}{2} (C_{111} + C_{112} + 2C_{44}) \quad (63)$$

که از رابطه (۶۲) برای مقایسه مقادیر تجربی ضریب الاستیسیته با محاسبات تئوری از رابطه (۶۱) استفاده شده و نتایج در (جدول ۱) آمده است .

با توجه به نتایج (جدول ۱) ، در مقایسه تئوری با آزمایش مشاهده میشود که برای نئون با ضریب ۸ و برای آرگون ضریب ۴ و برای کریپتون ضریب ۶ باید منظور شود تا مقادیر تئوری و آزمایش با هم منطبق شوند . چنین اختلافی در وهله اول قابل ملاحظه بنظر میرسد ولی هرگاه در نظر گرفته شود که برای کریستال گازهای خنثی از پتانسیل (لنارد - جونز) که برای اتمهای گازهای خنثی در حالت گاز بدست آمده است استفاده و از طرفی حرکت اتمها به جای سه بعدی یک بعدی فرض شده است و همچنین فقط اثر اتمهای مجاور روی زنجیر مورد نظر بوده و اثر سایر اتمهای اطراف اتم در واقع در نظر گرفته نشده است ، تقریب اخیر کاملاً قابل درک میباشد . برای آنکه مزیت این مقایسه ساده روشن شود لازم است اشاره شود که هرگاه سیستم واقعی یک کریستال در نظر گرفته شود با استفاده از مدل‌های ساده‌ای همانند مدل خطی یک اتمی میتوان تقریبی از پتانسیل عمل نیروها در حالت جامد بدست آورد و سپس با استفاده از این پتانسیل ها و در نظر داشتن ساختمان سه بعدی کریستال خواص را محاسبه و سپس با تجربه مقایسه نمود . مطالعاتی از این نوع باعث درک بهتر خواص مواد خواهد شد که عاقبت میتواند در جهت بهتر ساختن خواص مورد استفاده مؤثر و مفید باشد .

جدول ۱ - مقایسه ضرایب الاستیسیته کریستال گازهای خنثی که از تئوری و تجربه بدست آمده‌اند.

کریستال	σ A°	d A°	ϵ_y 10 ⁻¹⁶ erg	تجربه				تئوری	
				C ₁₁ × 10 ⁸	C ₁₂ × 10 ⁸	C ₄₄ × 10 ⁸	C ₁ × 10 ⁸	σ_{xx} dyn/cm	C ₁ × 10 ⁸
نئون	۲۷۷۴	۳۱۳	۵۰	۱۶۶	۸۵۰۵	۹۲۲۲	۲۱۶	-۶۴۷	۲۸۲۲
آرگون	۳۴۴۰	۳۷۶	۱۶۷	۴۳۹	۱۸۳	۱۶۴	۴۸۴۵	-۲۷۷۸	۱۰۳۹
کریپتون	۳۳۶۵	۴۰۱	۲۲۵	۵۱۴	۲۸۴	۲۶۸	۶۷۵۵۱	-۳۶۶۵	۱۲۹۵

شناسائی :

این مقاله براساس قسمتی از تز فوق لیسانس مهندس آروکاس آرا کلیان در انستیتو مهندسی مکانیک پلی تکنیک تهران نوشته شده است.

منابع و مأخذ

- ۱) J. Mckelvey , **Solid State and Semiconductor Physics** (Harper and Row 1969)
- ۲) M. Born and K. Huanq , **Dynamical Theory of Crystal Lattices** (Clarendon, 1954)
- ۳) W. Ludwiq , **Rcent Dvelopments in Lattice Theory** (Springer , Verlag , 1967)
- ۴) A.T. Di Benedetto , **The Structure and Properties of Materials** (Mc Graw – Hill , 1967)
- ۵) C. Kittel , **Introduction to Solid State Physics** (Wiley , 1967)
- ۶) R.N. Thurston , **Physical Acoustics** , edited by W.P. Mason , (Academic, 1964) , Vol. 1
- ۷) G.K. Horton , **Am. J. Phys.** **36** , 93 (1968)
- ۸) G.J. Keeler and D.N. Batchelder , **J. Phys. C** **3** , 510 (1970)
- ۹) J. Skalyo et al , **BNL - 18159** , 1973
- ۱۰) J. Skalyo et al : **Phys. Rev. B** **6** , 4766 (1972)
- ۱۱) J.A. Barker and A. Pompe , **Aust. J. Chem.** **21** , 1983 (1968)