



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية  
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي  
جامعة العربي التبسي - تبسة  
كلية العلوم الدقيقة وعلوم الطبيعة والحياة



قسم: علوم المادة



مذكرة مقدمة لنيل شهادة الماجستير

الميدان: علوم المادة

التخصص: فيزياء المادة المكثفة

العنوان:

# دراسة نظرية لبعض التطبيقات الممكنة للحلقات الكوانتية

إعداد الطالبين

عوايطية عباس

عباد موسى

لجنة المناقشة:

رئيس

جامعة العربي التبسي

M.C.B

بوقرورة حمزة

مؤطر

جامعة العربي التبسي

M.C.B

بوديار عبيد

ممتحن

جامعة العربي التبسي

M.A.A

عون الله حسين

السنة الجامعية: 2019/2018



**Déclaration sur l'honneur de non-Plagiat**

(À joindre obligatoirement au mémoire; Remplie et signée)



Nous soussignons:

Nom, prénom: *Abbad Moussa & Aouatia Ales*

N° de carte d'étudiant: (1) *14/34022322/2014* (2) *2014-2197-34033128*

Régulièrement inscrits (es) en **Master** au **Département Sciences de la Matière**

Année universitaire: 2018/2019

Domaine: **Sciences de la matière**

Filière: **Physique**

Spécialité: *physique de la Matière Condensée*

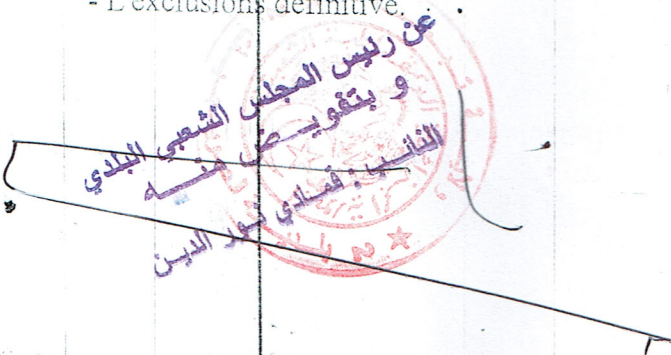
Intitulé du mémoire: *دراسة نظرية لبعض التطبيقات من الميكانيكا للتحولات الكمية*

Attestons que notre mémoire est un travail original et que toutes les sources utilisées ont été indiquées dans leur totalité. Nous certifions également que nous n'avons ni recopié ni utilisé des idées ou des formulations tirées d'un ouvrage, article, ou mémoire, en version imprimée ou électronique, sans mentionner précisément leur origine et que les citations intégrales sont signalées entre guillemets.

Sanctions en cas de plagiat prouvé:

Les étudiants seront convoqués devant le conseil de discipline, les sanctions prévues selon la gravité du plagiat sont:

- L'annulation du mémoire avec possibilité de le refaire sur un sujet différent.
- L'exclusion d'une année du master.
- L'exclusions définitive.



Fait à Tébessa, le:

Signature des étudiants (es):

(1):

(2):

تيسرة في

الجالبيين

عبد موسى  
عوانية عباس

الموضوع : تعمد بتصحيح المذاكرة

نتعمد نحن الجالبيين عبد موسى وعوانية عباس  
الى لجنة المناقشات انه تم تصحيح الأخطاء  
المذكورة من طرفكم لمذكرة التخرج بعنوان  
دراسة نظرية لبعض التطبيقات الممكنة  
للحلقات الكوانتية

وتشكرا

الاستاذ المؤطر  
بوديار عبدي

الاستاذ الرئيسي  
بو فزورة حمزة

الاستاذ المحقق  
عون الله حسين

المُلخَص

## ملخص

هذه الدراسة تتحقق من امكانية تكون تكاثف بوز أينشتاين في حلقات كمية ثنائية البعد ، حيث تتحقق حالة التوازن من خلال تقريب الفونون الوحيد المتبادل . يمكن تحديد السعة الحرارية ، الأنثروبي وكذلك الطاقة الحرة للنظام عند درجة حرارة حرجة . النتائج المتوصل إليها ترجح إمكانية حدوث تكاثف بوز أينشتاين ، وهي تساعد على توقع تصرف بعض المواد ثنائية البعد عند درجات الحرارة المنخفضة.

### الكلمات المفتاحية :

تكاثف - حلقات كمية - مواد ثنائية البعد

### Abstract

This study investigates the possibility of Bose – Einstein condensation (BEC) in 2D–quantumrings. A ground state equilibrium structure involves the single phonon exchange approximation. At critical temperature , the specific heat , entropy , and free energy of the system can be determined . The results support the existence of BEC , and they lead to predictions of the behaviour of 2D – materials at low temperatures.

### Keywords :

Condensation , Quantumrings , 2D – materials

## Résumé

Cette étude prouve la possibilité de condensation de Bose-Einstein en anneaux quantitatifs, l'équilibre est obtenu par la seule approximation des techniques, on peut déterminer la capacité thermique et l'entropie de plus l'énergie libre pour un système dans une température critique. Les résultats obtenus permettent de réaliser une condensation de Bose-Einstein. Cela aide à prévoir le comportement de certains matériaux à basse température.

### **Les mots clés**

La condensation, bagues quantique, matériaux de dimension

.

إهداء

## إهداء

إلهي لا يطيب الليل إلا بشكرك ولا يطيب النهار إلى بطاعتك ولا تطيب اللحظات إلا  
بذكرك ولا تطيب الآخرة إلا بعفوك ولا تطيب الجنة إلا برويتك ، وصلي اللهم على من بلغ  
الرسالة و أدى الأمانة ونصح الأمة ، نبي الرحمة ونور العالمين سيدنا محمد صلى الله  
عليه وسلم .

هذا ومن ملئ الوجدان ان نتقدم بأسمى التحايا والشكر والتقدير لوالدينا ، خير نور في  
هذه الحياة وأقوم سند في كل حين وحال .

أسرتنا وذوينا وأقاربنا لكم منا كل الود و الإمتنان

أساتذتنا الكرام لكم منا كل الاحترام وطاب مشاكم أينما كنتم وحيثما وليتم .

أحبابنا واصدقائنا وزملائنا يامن قاسمونا ضحكنا وحرزنا وجدنا فيهم نبض الأمل وحب  
العمل في الجد والهزل وكذا في الصعب والسهل .

و هذا ونبث لكل من إتقانا و إتقينا في مسيرتنا الجامعية طوال السنين الماضية كل  
عبارات المحبة والأخوة والوفاء ولتكن معرفتنا بكم أعظم ما إكتسبناه

و شكرا



## شكر وعرّفان

الحمد لله رب العالمين والصلاة والسلام على المبعوث رحمة للعالمين سيدنا محمد وعلى

اله وصحبه أجمعين

نشكر الله على نعمه التي لا تقدر و لا تحصى ومنها توفيقه تعالى على إتمام هذا العمل

ثم نتقدم بجزيل الشكر والامتنان وخالص العرفان والتقدير إلى الأستاذ المؤطر بوديار عبيد

الذي شرفنا بقبوله الإشراف على هذه المذكرة وعلى دعمه وتوجيهاته القيمة فجزاه الله خير

الجزاء .

كما نتقدم بالشكر الجزيل للأساتذة أعضاء لجنة المناقشة ، الأستاذ بوقرورة حمزة لقبوله

ترأس لجنة المناقشة والأستاذ عون الله حسين لقبوله إمتحاننا في مذكرة التخرج .

كما يسرنا أن نوجه أسمى آيات التقدير والعرفان إلى أساتذتنا الكرام بقسم علوم المادة

على إرشاداتهم وآرائهم .

## قائمة الرموز

كثافة الحالات	$d(K)$	إضطراب خارجي	$H_{ext}$
معامل الطور	$\phi_m$	قوة معممة	F
انحلال المستويات الطاقوية	$g_j$	كمون سلمي	$\Phi$
الكمون الكيميائي	$\mu$	الكثافة الالكترونية	$n(r)$
الحالات المجهرية لكل مستوي	$W_{(j)}$	الحساسية	$\chi$
الحالات المجهرية الكلية	$\Omega_{BE}$	دالة الموجة	$\Psi$
طاقة جسيم واحد	$\varepsilon_j$	مؤثر التطور	$U(t)$
كثافة الحالات	$g(\varepsilon)$	الاحتمال الإحصائي	$P_n$
العدد الكلي للجسيمات المثارة	$N_e$	دالة غرين المتأخرة	$D^R$
طول الموجة	$\lambda$	الهاملتوني	H
الطاقة الداخلية	$U$	سعة احتمال الانتقال	$\beta$
السعة الحرارية	$C_V$	القيمة المتوسطة للهاملتوني	$\alpha$
الأنتروبي	$S$	العدد الموجي	K
عدد ذرات الحلقة	n	المنطقة الطاقوية الممنوعة	$\Delta_n$
دالة القسمة	Z	مقدار يتعلق بكثافة الإلكترونات	$\eta$

## فهرس الأشكال

الصفحة	العنوان	الشكل
5	سلسلة خطية مكونة من $N$ ذرة هيدروجين	الشكل (1-1)
9	تمثيل الطيف الطاقوي لسلسلة خطية مكونة من $N$ ذرة	الشكل (1-2)
10	حلقة مكونة من $N$ ذرة متشكلة من ترابط الذرة 1 والذرة رقم $N$	الشكل (1-3)
11	الطيف الطاقوي لبعض الذرات الحلقية	الشكل (1-4)
16	يمثل تكاملات الانتقال $\beta_1, \beta_2, \beta_3$	الشكل (1-5)
17	يمثل طيف الطاقة الذاتية لحلقة لا نهائية مرسوم بالنسبة لـ $\theta$	الشكل (1-6)
28	يمثل ثلاثة عشر من جسيمات البوزون موزعة على تسعة من المستويات المتساوية الطاقة	الشكل (3-1)
34	يوضح كيفية تغير $\frac{N_e}{N}$ و $\frac{N_0}{N}$ مع الحرارة	الشكل (3-2)
37	تغير الحرارة النوعية تحت حجم ثابت مع درجة الحرارة	الشكل (3-3)
41	يمثل بعض نماذج الحلقات ودرجة الإتحلال من أجل $n = 2, 3, 4$	الشكل (4-1)
43	رسم تخطيطي للمناطق الطاقوية الممنوعة حسب عدد الذرات المكونة للحلقة	الشكل (4-2)
48	شكل السعة الحرارية المختزلة	الشكل (4-3)
49	شكل الأنتروبي المختزلة	الشكل (4-4)
50	شكل الطاقة الحرة المختزلة	الشكل (4-5)
51	رسم تخطيطي لكيفية الكشف عن بعض الأشعة باستخدام الحلقات الكمية	الشكل (4-6)

## قائمة الجداول

الصفحة	العنوان	الجدول
30	الفرق بين التوزيعات الثلاث	الجدول (3-1)
44	الابعاد المناسبة من حيث درجة الحرارة للمواد المستعملة	الجدول (4-2)

## الفهرس

2.....	المقدمة العامة.....
5.....	الفصل الاول : أبسط نماذج الحلقات الكمية .....
5.....	1.1. حالة سلسلة خطية.....
9.....	2.1. طيف الطاقة لسلسلة خطية.....
10.....	3.1. طيف الطاقة لحلقة ذرية.....
14.....	4.1. دوال بلوخ في الحلقات الكمية.....
15.....	5.1. تكاملات الانتقال الأعلى درجة .....
17.....	6.1. الفضاء k.....
20.....	الفصل الثاني : نظرية الاستجابة الخطية .....
20.....	1.2. مفهوم الاستجابة الخطية .....
21.....	2.2. الحساسية المعممة .....
21.....	3.2. القيم المتوسطة الكمية و الحرارية.....
25.....	4.2. الحساسية المعممة ودالة غرين المتأخرة .....
28.....	الفصل الثالث : تكاثف بوز أينشتاين .....
28.....	1.3. إحصاء بوز أينشتاين .....

28.....	1.1.3. جسيمات البوزون
28.....	2.1.3. الحالات المجهرية للبوزون
30.....	3.1.3. الفرق بين التوزيعات الاحصائية الثلاثة.
31.....	2.3. تكاثف بوز أينشتاين.
32.....	1.2.3. درجة الحرارة الحرجة.
35.....	3.3. خواص غاز البوزون المثالي عند درجات حرارة مختلفة.
35.....	1.3.3. الطاقة الداخلية
36.....	2.3.3. الحرارة النوعية
37.....	3.3.3. الأنتروبي.
37.....	4.3.3. طاقة هيلمولتز.
38.....	5.3.3. الضغط.
41.....	<b>الفصل الرابع : الحسابات النظرية والمحاكات.</b>
41.....	1.4. الترابط و ضد الترابط.
43.....	2.4. حسابات تقديرية
44.....	3.4. الخواص الترموديناميكية للحلقات
48.....	4.4. النتائج و المناقشة
53.....	5.4. الخاتمة

# المقدمة العامة

### المقدمة العامة

تتجه أغلب البحوث التجريبية و النظرية في عصرنا الحالي الى دراسة كيفية إنتاج أجهزة إلكترونية ذات أبعاد صغيرة و فائقة الحساسية ، إلا أن هنالك قوانين فيزيائية لا يمكن تجاوزها و تسبب بعض العراقيل و الصعوبات التي تواجه تطور هذه البحوث .

من أجل تصغير الأجهزة الحديثة فان المواد ثنائية البعد 2D هي المرشحة لريادة هذا المجال في السنوات القادمة مثل الغرافن .

و تعتبر الحلقات الكمية ثنائية البعد من أصغر التشكيلات الكمية التي يمكن استعمالها مباشرة في هذه الأجهزة ، و لذلك نهدف من خلال هذا العمل الى دراسة إمكانية إيجاد تطبيقات عملية للحلقات الكمية من خلال دراسة بعض الخواص الفيزيائية المتاحة لنا و لذلك قمنا بتقسيم المذكرة الى أربعة فصول موزعة كما يلي :

تكلّمنا في الفصل الأول عن أبسط نماذج الحلقات الكمية حيث تطرقنا الى علاقة شكل الحلقة الكمية بطاقتها و كذلك الى بعض الخواص الإلكترونية مثل حركة الإلكترونات في الحلقة من خلال دوال بلوخ .

وبما أننا نركز في هذا التطبيق على مجال القياس و الكشف فإن استخدام نظرية الاستجابة الخطية أمر طبيعي هنا لذلك فقد خصصنا الفصل الثاني لنظرية الاستجابة الخطية .

و من خلال دراستنا لعمليات الكشف و القياس باستخدام أجهزة مختلفة فان عملية تبريد الأجهزة أمر ضروري في بعض القياسات الدقيقة و هذا قد يسبب حدوث ظواهر فيزيائية معينة مثل تكاثف بوز- آينشتاين و لذلك فقد خصصنا الفصل الثالث من أجل شرح هذه الظاهرة الكمية

أما الفصل الرابع فقد خصصناه للحسابات النظرية و المحاكات حيث قمنا باستخراج طاقة الإثارة الخاصة بالحلقات الكمية باستخدام حسابات نظرية كما قمنا بحساب الخواص



الترموديناميكية من خلال دالة القسمة  $Z$  ، و التي من خلالها قمنا بعملية محاكات باستخدام برنامج Wolfram Mathematica 11.0 حيث حصلنا على السعة الحرارية و الأنتروبي و الطاقة الحرة و التي أعطت نتائج قمنا بتفسيرها و مناقشتها .

# الفصل الأول

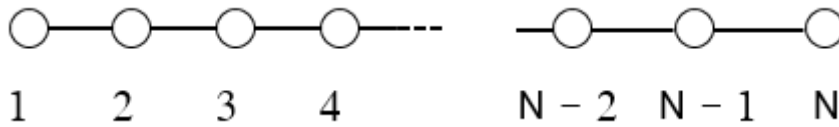
## أبسط نماذج الحلقات الكمية

الحسابات المتعلقة بالحلقات الكمية شديدة التعقيد لعدة اعتبارات من بينها العدد الكبير للترابطات الممكنة بالإضافة إلى التعقيد الناتج عن درجة حرية السبين [1 ، 2] ، في هذا الفصل سوف نركز على أبسط نماذج الحلقات الكمية والتي لا تأخذ التفاعل سبين مدار في عين الاعتبار وكذلك التفاعل سبين - سبين [3]

## أبسط نماذج الحلقات الكمية

### 1.1. حالة السلسلة الخطية

في هذا الجزء سوف نعتبر سلسلة مكونة من عدد منتهي و عدد غير منتهي من الذرات البسيطة مثل ذرات الهيدروجين ، وأحد الأهداف هو إظهار كيفية وصف ميكانيك الكم لترابطات سلسلة لا نهائية من الذرات ، ومن الأهداف الأخرى أيضا هو مناقشة سلسلة لا نهائية دورية في الفضاء  $K$  ، بمعرفة دوال بلوخ و مناطق بريلمان ، طاقة فيرمي ... إلخ نعتبر مثلا سلسلة مكونة من  $N$  ذرة هيدروجين كما في الشكل (1. 1)



الشكل (1. 1): سلسلة خطية مكونة من  $N$  ذرة هيدروجين

في الشكل (1. 1) كل ذرة هيدروجين تكون في الحالة  $S$  وسوف نعتبر أن هذه الحالات تمثل أساس متعامد ومتجانس لـ  $N$  ذرة هيدروجين ونرمز للجزء المكون من  $N$  ذرة بالرمز  $|\Psi\rangle$

$$|\Psi\rangle = \sum_{j=1}^N C_j |j\rangle \quad (1.1)$$

هنا الحالة  $S$  الموجودة على الذرة  $j$  نرمز لها بالرمز  $|j\rangle$  ، سوف نحاول إيجاد الثابت  $C_j$  و طاقة السلسلة  $|\Psi\rangle$  و للقيام بهذا يجب حل معادلة شرودينغر لهذه السلسلة :

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (1.2)$$

بتعويض المعادلة (1.1) من اجل  $|\Psi\rangle$  في المعادلة (1.2) نجد المعادلة التالية :

$$\sum_{j=1}^N C_j H|j\rangle = E \sum_{j=1}^N C_j |j\rangle \quad (1.3)$$

بضرب طرفي المعادلة (1.3) في  $\langle P|$  حيث  $P$  هو أحد المواقع من  $N$  ذرة و بالتالي سوف نجد المعادلة التالية :

$$\sum_{j=1}^N C_j \langle P|H|j\rangle = E \sum_{j=1}^N C_j \langle P|j\rangle \quad (1.4)$$

الحل الأبسط هو اعتبار عناصر مصفوفة الهاملتون معدومة ما عدى العناصر المحسوبة بنفس الموقع  $\langle P|H|P\rangle$  والتي نضعها تساوي  $\alpha$  ، والعناصر المصفوفية الناتجة عن الحالات الخاصة بالمواقع المتجاورة والتي نسميها  $\beta$  ، حيث  $\alpha$  و  $\beta$  وسائط بسيطة و من أجل تحديدها فهناك طريقتين إما حساب التكاملات السابقة او باستخدام حسابات تقريبية . أو باستخدام المعلومات التجريبية للمستويات الطاقوية ، و باعتبار العناصر المصفوفية نجد ما يلي :

$$\begin{cases} \alpha C_1 + \beta C_2 = E C_1 & P = 1 \\ \beta C_1 + \alpha C_2 + \beta C_3 = E C_2 & P = 2 \\ \beta C_2 + \alpha C_3 + \beta C_4 = E C_3 & P = 3 \\ \beta C_{j-1} + \alpha C_j + \beta C_{j+1} = E C_j & P = j \\ \beta C_{N-2} + \alpha C_{N-1} + \beta C_N = E C_{N-1} & P = N - 1 \\ \beta C_{N-1} + \alpha C_N = E C_N & P = N \end{cases} \quad (1.5)$$

حيث هنالك  $N$  معادلة خطية مترابطة حيث نلاحظ ان هذه المعادلة تملك نفس الشكل باستثناء الحالتين  $P = 1$  و  $P = N$  يمكن تبسيط جميع المعادلات الأخرى بالقسمة على  $\beta$  فمن أجل مثلا الحالة  $P = j$  نجد :

$$C_{j-1} - x C_j + C_{j+1} = 0 \quad (1.6)$$

حيث

$$x = (E - \alpha)/\beta \quad (1.7)$$

بتجريب الحل  $C_j = e^{ij\theta}$  ومن أجل تعيين  $\theta$  يمكن اعتبارها في هذه الحالة تخيلية أو حقيقية أو مركبة بالتعويض في المعادلة (1.6) نجد ما يلي :

$$e^{i(j-1)\theta} - x e^{ij\theta} + e^{i(j+1)\theta} = 0$$

$$x = e^{i\theta} + e^{-i\theta} = 2 \cos \theta \quad (1.8)$$

و عند استبدال  $\theta$  ب  $-\theta$  نجد نفس الحل من أجل  $x$  و على ذلك ينبغي على  $C_j$  ان يساوي  $C_j = A e^{ij\theta} + B e^{-ij\theta}$  حيث  $A$  و  $B$  ثابت كيفية . ويمكننا تحديد الثابت  $A$  و  $B$  من اجل  $P = 1$  حيث  $C_2 = x C_1$  وبالتالي:

$$A e^{2i\theta} + B e^{-2i\theta} = 2 \cos \theta (A e^{i\theta} + B e^{-i\theta}) \quad (1.9)$$

و هذه المعادلة محققة بوضع  $A = -B$  و لذلك المعادلة  $C_2 = x C_1$  تقود الى  $C_j = A(e^{ij\theta} - e^{-ij\theta})$  .  
يمكننا إعادة كتابة  $C_j$  كما يلي:

$$C_j = D \sin j\theta$$

حيث  $D = 2iA$  . وتصبح المعادلة من اجل الذرة الاخيرة

$$C_{N-1} = x C_N$$

وبالتالي تستعمل الان  $\theta$  من أجل تحديد القيم المسموحة ل :

$$D \sin(N-1)\theta = x D \sin(N\theta)$$

$$D \sin(N-1)\theta = 2 D \cos(\theta) \sin(N\theta)$$

$$\sin(N-1)\theta = 2 \cos(\theta) \sin(N\theta)$$

$$= \sin N\theta \cos \theta - \cos N\theta \sin \theta \quad (1.10)$$

حيث تم إلغاء الثابت  $D$  ويمكن تبسيط المعادلات كما يلي :

$$\tan(N\theta) - \tan(\theta) = 0$$

او

$$\frac{\sin N\theta \cos \theta - \cos N\theta \sin \theta}{\cos \theta \cos N\theta} = 0$$

والتي تصبح بالشكل التالي :

$$\sin(N-1)\theta = 0$$

ومنه :

$$\theta = \frac{m\pi}{N-1} \quad (1.11)$$

$m$ : هو عدد صحيح وبالتالي  $\theta$  حقيقي ، وعليه هنالك  $N$  حل مختلف من اجل :

$$m = 1.2.3 \dots \dots N$$

أما بقية قيم  $m$  فهي تعيد فقط إنتاج أحد هذه ال  $N$  حل

الطاقات المسموحة تعطى بالمعادلات (1.7) و(1.8) و(1.9)

$$E = \alpha + 2\beta \cos \frac{m\pi}{N-1} \quad (1.12)$$

حيث

$$m = 1.2.3 \dots \dots N$$

لنعتبر الحالة  $m$  للسلسلة التي ترمز لها بالرمز  $|\Psi(m)\rangle$  ونعتبر الثابت  $C_j^{(m)}$  حيث :

$$j = 1.2.3 \dots \dots N$$

$$C_j^{(m)} = D^{(m)} \sin \frac{mj\pi}{N+1} \quad (1.13)$$

حيث  $D^{(m)}$  لايزال شرط كفي يمكن تحديده باستخدام شرط التنظيم

$$\langle \Psi(m) | \Psi(m) \rangle = 1$$

حيث :

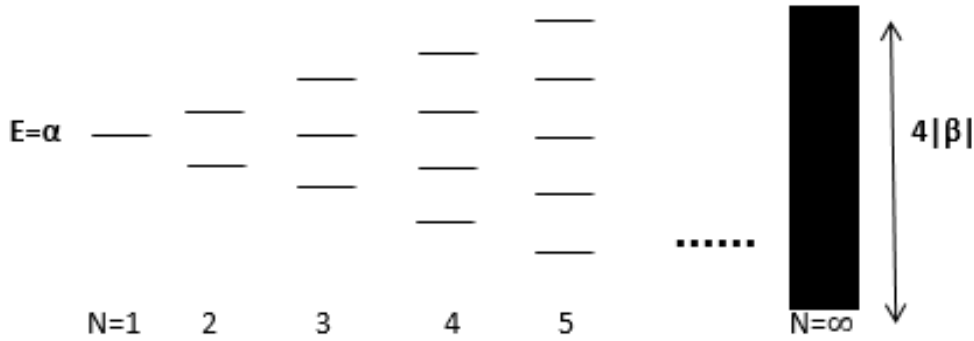
$$D^{(m)} = \left( \frac{2}{N-1} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.14)$$

في الشكل (1.2) الذي يظهر طيف الطاقة للمعادلة (1.2) من اجل سلسلة من الذرات

(1.2.3.4.5) وكذلك عدد لانهائي من ذرات الهيدروجين [4] .

## 2.1. طيف الطاقة لسلسلة خطية

كلما زاد عدد ذرات في سلسلة فان عرض الطيف ينتهي الى  $4|\beta|$



الشكل (1.2) : تمثيل الطيف الطاقي لسلسلة خطية مكونة من ذرات عددها

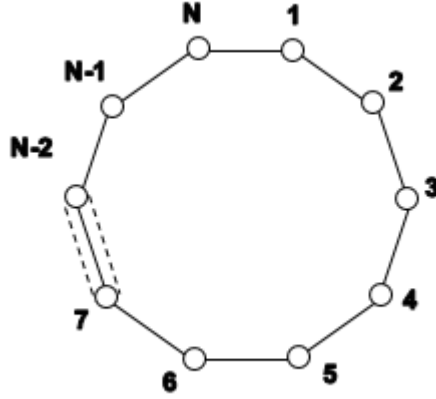
$$\infty \rightarrow N \text{ عندما تنتهي } N \rightarrow 1.2.3.\infty$$

يصبح عرض مستويات الطاقي  $4|\beta|$  متمركزة حول  $E = \alpha$  كما هو موضح في اللانهاية منطقة مجال الطاقة بين مستويين طاقيين متتاليين ينقلص المجال بينهما الى الصفر ويصبح المتغير  $\theta$  كما في المعادلة (1.11) مستمر بين المجال  $(0, \pi)$  ويسمى طيف الطاقة في هذه الحالة عصابة الطاقة ويتناسب عرض هذه العصابة مع تكامل الانتقال  $\beta$ . ومع أن  $\theta$  مستمرة فإنه في المالا لنهاية لا تزال هناك حالات تملك دليل  $\theta$  في المعادلة رقم (1.13) يمكن تمييزها من خلال القيم المختلفة التي يأخذها  $\theta$  في المجال  $(0, \pi)$  في المعادلة (1.11) .

ولهذا السبب تسمى  $\theta$  العدد الكمي للسلسلة ، تقريبا نفس الشكل الذي يكون فيه العزم الحركي هو العدد الكمي للذرة [5].

### 3.1. طيف الطاقة لحلقة ذرية

من الأسهل مناقشة الحالات الطاقوية لسلسلة لانهائية باعتبار الشروط الحدود الدورية وهذا يعني أن السلسلة أصبحت حلقة كما في الشكل (1.3)



الشكل (1.3) : حلقة مكونة من  $N$  ذرة متشكلة من ترابط الذرة رقم 1 والذرة رقم  $N$  للسلسلة الخطية المكونة من  $N$  كما في الشكل (1.1)  
 الهاملتوني هو نفسه تقريبا مع أخذ في الاعتبار أن الذرة رقم 1 والذرة رقم  $N$  تملكان الجوار الأقرب و بالتالي فعناصر مصفوفة الهاملتوني بينهما هو  $\beta$  بدلا من 0  
 من خلال شروط الحدود الدورية نجد المعادلة :

$$\begin{cases} C_0 = C_N \\ \text{و} \\ C_{N+1} = C_1 \end{cases} \quad (1.15)$$

حيث الذرة 0 والذرة  $N+1$  هي ذرات تخيلية والحل العام للمعادلة (1.6) يصبح كما في المعادلة :

$$e^{iN\theta} = 1$$

$$\theta = \frac{2m\pi}{N} \quad (1.16)$$

حيث :  $m = 1,2,3 \dots (N - 1)$

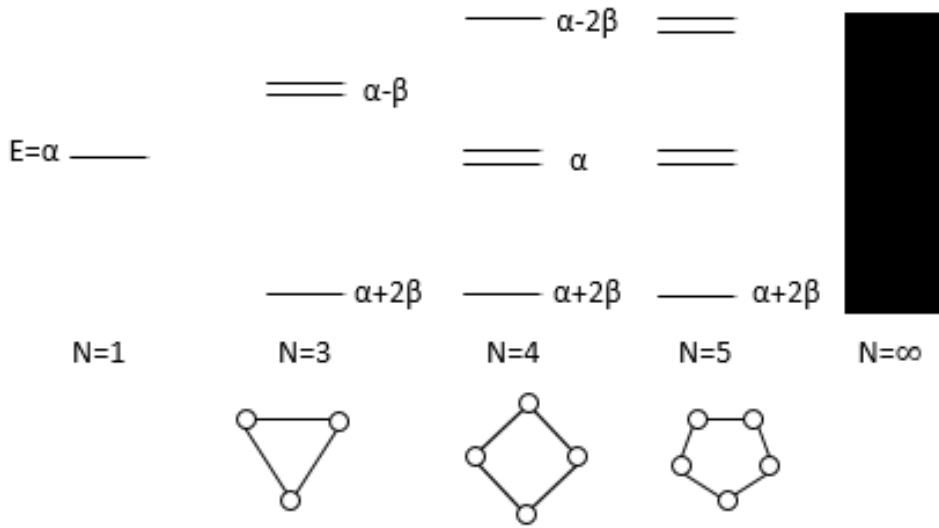


وثابت التنظيم يصبح كما في المعادلة :

$$C_j^{(m)} = \frac{1}{(N)^{\frac{1}{2}}} e^{\frac{i2\pi jm}{N}} \quad (1.17)$$

أما مستويات الطاقة فتعطى بالعلاقة :

$$E = \alpha + 2\beta \cos \frac{2\pi m}{N} \quad (1.18)$$



الشكل (1.4) نجد الطيف الطاقوي من أجل  $N=1,3,4,5,\dots,\infty$  وما لانهاية من الذرات الحلقية .

في النهاية من أجل حلقة لانهاية تصبح  $\theta$  متغير مستمر في المجال  $(0, 2\pi)$  والطيف الطاقوي يصبح :

$$E = \alpha + 2\beta \cos \theta \quad (1.19)$$

الشكل (1.4) طيف الطاقوي للحلقات مكونة من  $3,4,5,\dots,\infty$  ذرة كما في الشكل (1.2) حيث يصبح الطيف عصابة عرضها  $4|\beta|$  متمركزة عند  $E = \alpha$  لما  $N \rightarrow \infty$  بما أن هذه عبارة دالة دورية في  $\theta$  فإنه يمكن إعادة صياغة مجال  $\theta$  من  $(-\pi, \pi)$  . الحالات الخاصة لحلقة لانهاية :

بما أن معاملات النشر تصبح :

$$C_j(\theta) = \frac{1}{(N)^{\frac{1}{2}}} e^{ij\theta} \quad (1.20)$$

عند أسفل العصابة ( $\theta = 0$ ) تكون جميع معاملات النشر متساوية وبالتالي لا توجد عقد في هذا الجزء وهي أكثر الحالات ترابطا .

من ناحية أخرى نجد في أعلى العصابة  $\theta = \pm\pi$  بأن  $C_j(\theta)$  يبدل إشارته عند الانتقال من ذرة إلى أخرى حول الحلقة وهذه أكثر حالة ضد مترابطة .

وبالتالي كما في الشكل السابق نسمي الحالات اسفل  $\alpha$  بالحالات المترابطة بينما الحالات فوق  $\alpha$  ضد مترابطة بينما في وسط العصابة عند  $\theta = \pm\pi/2$  فالحالات لاهي مترابطة و لاهي ضد مترابطة .

ما هو المعنى الفيزيائي بأن الحالات الكمية تكون أعداد مركبة في الحالة الحلقية بينما تكون حقيقية في السلسلة الخطية ؟

الجواب هو أن السلسلة الحلقية يمكنها نقل التيار الكهربائي بينما السلسلة الخطية لا يمكنها ذلك [6] .

كنا قد رأينا أنه في حالة لانهائية تكون الحالات الكمية متعلقة ب  $\theta$  وأنه في حالة سلسلة حلقية يمكننا اختيار مجال  $\theta = (\pi - \pi)$  . وإذا ذهبنا خارج هذا المجال فإننا ببساطة نعيد إنتاج أحد الحالات الكمية الموجودة في الحلقة .

بما أن  $\theta$  تصف الطاقة ونشر الحالات بالنسبة للأساس في السلسلة الحلقية فإننا نرى كما في المعادلة (1.20) أن الحالات تنتقل حول الحلقة ببعد موجي  $K = \frac{2\pi}{\theta}$  . الانحلال في الحالات الكمية المتعلقة ب  $\theta$  و  $-\theta$  يعني أن طاقة الأمواج تنتقل في الاتجاه المعاكس

ولكن بنفس العدد الموجي حيث  $K$  نسميه بالعدد الموجي

1- بإدخال ثابت التنظيم  $\frac{1}{\sqrt{N}}$  حالة نجد :

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{(N)^{\frac{1}{2}}} \sum_{j=1}^N e^{ij\theta} |j\rangle \quad (1.21)$$

2- بتعويض هذا في معادلة شرودينغر :

$$H |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle$$

نحصل على :

$$\sum_{j=1}^N e^{ij\theta} H|j\rangle = E \sum_{j=1}^N e^{ij\theta} |j\rangle \quad (1.22)$$

- بضرب الطرفين من اليسار في  $\langle P|$  نحصل على المعادلة :

$$\sum_{j=1}^N e^{ij\theta} \langle P|H|j\rangle = E \sum_{j=1}^N e^{ij\theta} \langle P|j\rangle \quad (1.23)$$

3- بما أن الجداء السلمي  $\langle P|j\rangle = 0$  باستثناء  $j=P$  تصبح المعادلة :

$$\sum_{j=1}^N e^{ij\theta} \langle P|H|j\rangle = E e^{iP\theta} \quad (1.24)$$

$$\sum_{j=1}^N e^{i(j-p)\theta} \langle P|H|j\rangle = E(\theta) \quad (1.25)$$

4- العناصر المصفوفية  $\langle P|H|j\rangle$  تساوي صفر باستثناء الحالات  $P=j$  او  $P=j+1$  ،  
 عندما  $P=j-1$  فإن :

$$\langle P|H|P\rangle = \alpha$$

عندما  $j=P+1$  او  $j=P-1$  فإن :

$$\langle P|H|j\rangle = \beta$$

ولذلك فهناك فقط ثلاثة حدود في المجموع للجهة اليسرى تكون غير معدومة حسب المعادلة  
 رقم (1.19)

5- نلاحظ أننا أخذنا قيم  $P = 1,2,3 \dots N$  لأن الذرات في السلسلة الحلقية متكافئة بمعنى  
 آخر توجد مشكلة في أي ذرة  $P$  سوف نبدأ لأن تكامل الانتقال  $\beta$  لأحد الجوارين الاقربين هو  
 نفسه

6- تحديد القيم الممكنة ل  $\theta$  ثم من خلال الشروط الدورية

$$C_{N+1} = C_1 \quad , \quad C_N = C_0$$

#### 4.1. دوال بلوخ في الحلقات الكمية

نظرية بلوخ مشتقة من التناظر الانسحابي في السلسلة الحلقية حيث تكون جميع المواقع الذرية متكافئة بالنسبة لإنسحاب بسيط حول الحلقة كثافة احتمال أن نجد الإلكترون في الموقع  $x$  حول الحلقة هو  $|\Psi(x)|^2$  و هذا يعني أن تناظر الانسحاب يعطى بالعلاقة التالية :

$$|\Psi(x)|^2 = |\Psi(x + m)|^2 \quad (1.26)$$

حيث المسافة بين ذرتين متتاليتين في الحلقة أخذت تساوي 1 و المسافة بين نقطتين  $x$  و  $x+m$  حيث  $m$  هي مسافة ذرية .

من أجل ان تحقق المعادلة (1.26) فينبغي على الدالتين الموجبتين  $\Psi(x)$  و

$\Psi(x + m)$  أن تختلف فقط بمعامل طور يتعلق فقط بالمسافة بين النقاط كالتالي :

$$\Psi(x + m) = e^{i\phi_m}\Psi(x) \quad (1.27)$$

حيث  $\phi_m$  هو معامل الطور، يمكن التعبير عن دالة الموجة  $\Psi(x) = \langle x|\Psi \rangle$  بدلالة حدود المدارات الذرية  $\langle x|j \rangle$  كما يلي :

$$\Psi(x) = \sum_{j=1}^N C_j \langle x|j \rangle \quad (1.28)$$

بنفس الطريقة يمكننا التعبير عن دالة الموجة  $\Psi(x + m)$  بدلالة حدود المدارات  $\langle x + m|j \rangle$  كالتالي :

$$\Psi(x + m) = \sum_{j=1}^N C_j \langle x + m|j \rangle \quad (1.29)$$

ومن أجل تحقيق المعادلة (1.27) ينبغي أولاً أن نعيد كتابة  $\langle x + m|j \rangle$  كالتالي :

$$\langle x|j - m \rangle$$

تصبح المعادلة (1.29) كما يلي :

$$\Psi(x + m) = \sum_{j=1}^N C_{j+m} \langle x|j \rangle \quad (1.30)$$

وحتى تكون المعادلة (1.27) محققة ينبغي أن نجد ما يلي :

$$\frac{C_{j+m}}{C_j} = e^{i\phi_m} \quad (1.31)$$

هذه العلاقة ينبغي أن تكون صحيحة من أجل أي قيمة ل  $m$  و  $z$  وبما أن الجزء الأيمن للمعادلة يتعلق فقط ب  $m$  فينبغي أن نجد :

$$C_j = Ae^{ij\theta} \quad (1.32)$$

حيث  $A$  هو ثابت كفي و  $\theta$  هو أي عدد حقيقي , يتم تعيين الثابت  $A$  باستخدام شروط التنظيم  $A = \frac{1}{\sqrt{N}}$

و تكتب نظرية بلوخ في بعد واحد كما يلي :

$$\Psi(x + m) = e^{im\theta}\Psi(x) \quad (1.33)$$

و ينتج عن ذلك تلقائيا أن  $\Psi(x)$  تمثل غالبا بدالة دورية و لتكن  $P(x)$  مع دورية في بعد واحد من الشبكة مضروبة في موجة مستوية  $e^{i\theta x}$  و تكون كالتالي :

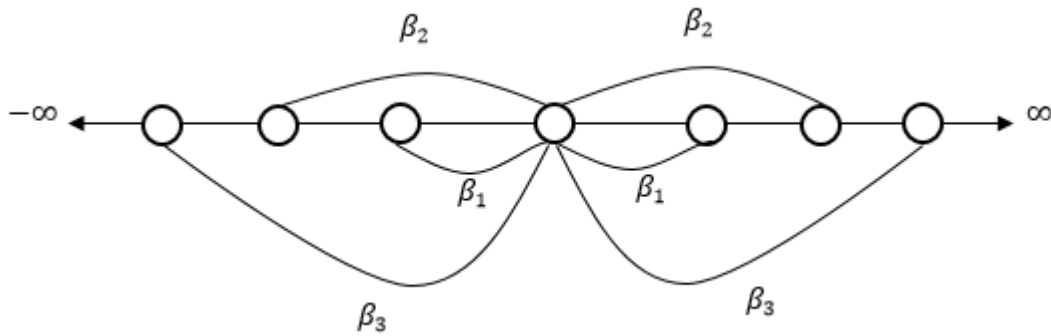
$$\Psi(x) = e^{i\theta x}P(x) \quad (1.34)$$

نظرية بلوخ تخبرنا مباشرة عبارة المعاملات  $C_j$  من أجل سلسلة حلقة مكونة من  $N$  ذرة ، ونلاحظ أنه عند رسم  $E$  بدلالة  $\theta$  أنها متعلقة مباشرة بتكامل الانتقال [7 ، 8].

### 5.1. تكاملات الانتقال الأعلى درجة

من أجل توضيح ذلك تخيل بأنه ليس هناك فقط تكامل الانتقال من أجل الجوار الأقرب الأول و لكنه يوجد أيضا من أجل الجوار الأقرب الثاني و الثالث و لنسمي تكاملات الانتقال هذه ب  $\beta_1, \beta_2, \beta_3$  ، كما هو موضح في الشكل (1.5) و بالتالي نلاحظ أن  $E(\theta)$  هي مجرد تحويل فورييه بسيط لتكاملات الانتقال هذه كالتالي :

$$\begin{aligned}
 E(\theta) &= \sum_{j=1}^N e^{i(j-p)\theta} \langle p|H|j \rangle \\
 &= \alpha + \beta_1(e^{i\theta} + e^{-i\theta}) + \beta_2(e^{2i\theta} + e^{-2i\theta}) \\
 &\quad + \beta_3(e^{3i\theta} + e^{-3i\theta}) \\
 &= \alpha + 2\beta_1 \cos \theta + 2\beta_2 \cos 2\theta + 2\beta_3 \cos 3\theta
 \end{aligned} \tag{1.35}$$



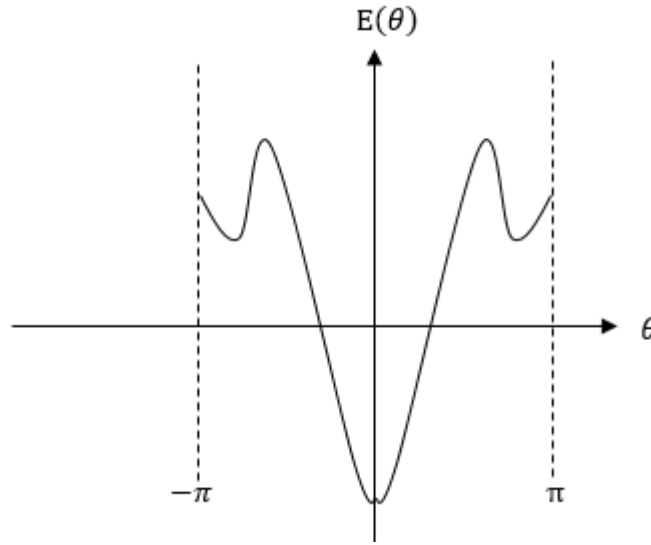
الشكل (1.5) يمثل تكاملات الانتقال  $\beta_3, \beta_2, \beta_1$  بين الجوار الأقرب الأول و الثاني و

الثالث على الترتيب في سلسلة حلقيّة لا نهائية

في الشكل (1.6) نرى عبارة  $E(\theta)$  في بعد واحد كما نلاحظ أن التفاعل مع الجوار الأقرب

الثاني  $\beta_2$  يعطي اهتزاز في  $E(\theta)$  مع عدد موجي يساوي نصف العدد الموجي لتفاعل الجوار الأقرب

هذه التذبذبات المتخامدة في عبارة  $E(\theta)$  تحدد بالمجال المتزايد لتكامل الانتقال حيث يوجد هناك تكاملات انتقال بين الجوار الأقرب الأول و الثاني و الثالث كما هو موضح في الشكل (1.5)



الشكل (1.6) يمثل طيف الطاقة الذاتية لحلقة لا نهائية مرسوم بالنسبة لـ  $\theta$

و كما أشرنا سابقا أن  $\theta$  يسمى العدد الموجي و يسمى هذا في معظم الكتب العدد  $K$  ومن الآن فصاعدا نسمي  $\theta$  بـ  $K$

### 6.1. الفضاء $K$

عند اعتبار الحلقة لا نهائية فجميع الحالات يمكن أن نميزها برمز واحد  $K$  يتغير في المجال  $[-\pi +$

فإذا كانت المسافة بين الذرات هي  $a$  حسب نظرية بلوخ فمعامل الطور يصبح كالتالي

$e^{i\theta a}$  و بالتالي مجال تغير  $K$  هو  $[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$  و لهذا في الفضاء  $K$  من أجل حلقة لا

نهائية هو مجرد خط [9].

أما من أجل عدد لانهائي من الذرات في حلقة يكون الفضاء  $K$  مستمر و تكون أي قيمة لـ  $K$  في هذا الخط مسموحة و مع أن جميع الحالات في الحلقة مربوطة داخل أي مجال  $\frac{2\pi}{a}$

في الفضاء  $K$  و هي ببساطة مكررة خارج هذا المجال

من أجل عدد محدود من الذرات  $N$  في الحلقة فالشرط هو  $e^{iNaK} = 1$

في هذه الحالة يجبر  $K$  على أخذ القيم  $\frac{2\pi m}{Na}$  حيث  $m$  هو عدد صحيح و لذلك من أجل أي

عدد محدود  $N$  ففضاء الشبكة المعكوسة  $K$  يكون متقطع و هذا لأن  $K$  لا يمكنه سوى أن

يأخذ مضاعفات العدد  $\frac{2\pi}{Na}$  و من جهة أخرى فإن عدد الحالات التي يمكننا أن نجدها في

وحدة البعد على طول المحور  $K$  هي  $\frac{Na}{2\pi}$  أو  $\frac{L}{2\pi}$  حيث  $L$  هو طول الحلقة و هذا يسمى كثافة الحالات  $d(K)$  في الفضاء  $K$  حيث :

$$d(K) = \frac{Na}{2\pi} \quad (1.36)$$



## الفصل الثاني

# نظرية الإستجابة الخطية

يتم القياس النموذجي لجملة أو نظام عن طريق إحداث اضطراب في نقطة ' و زمن  $t'$  في هذا النظام بتأثير حقل كهرومغناطيسي أو شعاع من الإلكترونات أو النترونات ثم نقوم بقياس مدى استجابة هذا النظام بجوار نقطة  $r$  في لحظة زمنية  $t$  فمثلا عند استعمال حقل كهرومغناطيسي ضعيف على معدن فإن الكمون السلمي  $\phi(r, t)$  يتربط مع كثافة الشحنة الموضعية  $\rho(r) = -en(r)$  حيث :  $n(r)$  هو الكثافة العددية للإلكترونات ، وهذا يسبب اضطراب ينتشر إلى بقية أجزاء النظام .

وبنفس الشكل ، فإن شعاع الكمون المغناطيسي  $A(r)$  يتربط مع كثافة التيار الموضعية  $j(r)$  كما أن استعمال النترونات في عملية القياس يؤدي إلى ترابط موضعي لكثافة السبين مع سبين النترونات وتستخدم النترونات عادة من أجل قياس الخواص المغناطيسية للنظام . عادة عند القياس ينبغي أن نستخدم أشعة ضعيفة لأنه إذا كان التفاعل قوي فسوف يؤدي إلى تغيير خواص المادة المدروسة وبالتالي سوف نحصل على نتائج خاطئة لأن الجملة في ذاتها قد أثرتنا عليها و أصبحت مختلفة عن الجملة المراد دراستها

## نظرية الاستجابة الخطية

### 1.2. مفهوم الاستجابة الخطية

من أجل عملية القياس ينبغي أن تكون أشعة القياس ضعيفة وهذا يعني استخدام تقريب من الدرجة الأولى للاضطراب (تقريب خطي) ولذلك تسمى نظرية الاستجابة الخطية . تقوم التجربة بقياس المقدار :

$$\delta\langle A \rangle = \langle A \rangle_{\text{ext}} - \langle A \rangle \quad (2.1)$$

$\langle A \rangle$  : القيمة المتوسطة الحرارية الكمية قبل القياس

$\langle A \rangle_{\text{ext}}$  : القيمة المتوسطة الحرارية الكمية بعد القياس

كدالة في القوى المعممة  $F$  حيث يتربط الحقل الخارجي في منطقة موضعية مع المؤثر  $A$  . وفي الحالة العامة فإن الاضطراب الذي يتم إنتاجه بفعل مؤثر الحقل الخارجي يعطى بالهاملتوني :

$$H^{\text{ext}}(t) = \int d^3 r F(r, t) A(r) \quad (2.2)$$

$F(r, t)$ : قوة معممة . فعلى سبيل المثال إذا كان المؤثر الخارجي هو حقل سلمي  $\phi(r, t)$  لموجة كهرومغناطيسية فإن هذا الكمون السلمي يتربط مع الكثافة العددية للإلكترونات  $n(r)$  معطيا الاضطراب :

$$H^{\text{ext}}(t) = -e \int d^3 r \Phi(r, t) n(r) \quad (2.3)$$

القوى المعممة في هذه الحالة هي :

$$F(r, t) = -e \Phi(r, t) , \quad A(r) = n(r)$$

الاضطراب الخارجي يسبب خروج الجملة المدروسة من حالتها الغير مضطربة ، ويؤدي إلى إنتاج ظواهر قابلة للقياس تنتقل القيمة المتوسطة الحرارية  $A(r)$  إلى قيمة جديدة  $\langle A \rangle_{\text{ext}}$  فعلى سبيل المثال في حالة غياب الكمون السلمي ، تكون القيمة  $\langle n(r, t) \rangle$  ثابتة و لكن عندما يؤثر الكمون السلمي  $\phi(r, t)$  سوف ينشئ تيار يبدأ بالتدفق من لحظة عملية القياس . و بالتالي فالتجربة سوف تقيس المقدار كما في المعادلة رقم (2.1) كدالة في القوى المعممة  $F$  .

## 2.2. الحساسية المعممة

من خلال العبارات النظرية ، يمكن بأن نقول بأنه إذا كانت  $F$  ضعيفة فإن استجابة النظام أو الجملة  $\langle A \rangle$  سوف يكون وبتقريب جيد عبارة خطية بالنسبة ل  $F$  كما موضح في المعادلة التالية :

$$\delta \langle A \rangle(r, t) = \int d^3 r' \int dt' \chi(rt, r't') F(r't') \quad (2.4)$$

$\chi(rt, r't')$  : هي الحساسية المعممة وهي خاصية ذاتية تميز النظام المدروس ، وهي تحدد كيف تستجيب الجملة للاضطراب الخارجي ، ويعتبر حساب هذا المقدار أحد أهداف هذه النظرية . وسوف نرى لاحقا بأنه يمكن التعبير عن الحساسية المعممة كدالة تربط متأخرة [10] .

## 3.2. القيم المتوسطة الكمية والحرارية

لنعتبر جملة مكونة من جسيمات متطابقة مع هاملتوني مستقل عن الزمن  $H$  ، نؤثر على هذا النظام بواسطة اضطراب خارجي  $H^{\text{ext}}(t)$  حيث نعتبر أن  $H^{\text{ext}}(t)$  يبدأ التأثير في

لحظة زمنية  $t_0$  تتطور حالة النظام بسبب  $H$  كما يلي :

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\frac{H}{\hbar}t} |\Psi(0)\rangle \quad (2.5)$$

حيث  $t > t_0$

أما من أجل  $t < t_0$  فإن الحالة تتطور وفق معادلة شرودينغر كما يلي :

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = (H + H^{\text{ext}}) |\Psi(t)\rangle \quad (2.6)$$

لنعتبر أن الحل يأخذ الشكل التالي :

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\frac{H}{\hbar}t} U(t) |\Psi(0)\rangle \quad (2.7)$$

حيث:

$U(t)$  : هو مؤثر سوف يتم تحديد شكله لاحقا مع ملاحظة أن  $U(t) = 1$  من أجل  $t < t_0$

بتعويض الحل المقترح سابقا في معادلة شرودينغر سوف نحصل على :

$$\begin{aligned} \hbar \left( -i \frac{H}{\hbar} e^{-i\frac{H}{\hbar}t} U(t) + e^{-i\frac{H}{\hbar}t} \frac{dU}{dt} \right) |\Psi(0)\rangle \\ = H e^{-i\frac{H}{\hbar}t} U(t) |\Psi(0)\rangle + H^{\text{ext}}(t) e^{-i\frac{H}{\hbar}t} U(t) |\Psi(0)\rangle \\ i\hbar e^{-i\frac{H}{\hbar}t} \frac{dU}{dt} = H^{\text{ext}}(t) e^{-i\frac{H}{\hbar}t} U(t) \end{aligned} \quad (2.8)$$

حيث حصلنا على المعادلة السابقة لأن  $|\Psi(0)\rangle$  هي إختيارية . بضرب الطرفين في  $e^{i\frac{H}{\hbar}t}$  من اليسار نحصل على :

$$i\hbar \frac{dU}{dt} = H_H^{\text{ext}}(t) U(t) \quad (2.9)$$

حيث  $H_H^{\text{ext}}(t)$  هو كتابة هايزنبرغ للهاملتوني  $H^{\text{ext}}(t)$  وتعطى بالعلاقة التالية :

$$H_H^{\text{ext}}(t) = e^{i\frac{H}{\hbar}t} H^{\text{ext}} e^{-i\frac{H}{\hbar}t} \quad (1.10)$$

يتم تحديد المؤثر  $U(t)$  من خلال المعادلة التفاضلية السابقة رقم (1. 11)

نقوم بمكاملة الطرفين لهذه المعادلة من اللحظة  $t_0$  حتى اللحظة  $t$  وبما ان  $U(t_0) = 1$

فإننا نجد :

$$\int_{t_0}^t dU = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H_H^{\text{ext}}(t') U(t') \quad (2.11)$$

$$U(t) - U(t_0) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H_H^{\text{ext}}(t') U(t') \quad (2.12)$$

$$U(t) = 1 - \int_{t_0}^t dt' H_H^{\text{ext}}(t') U(t') \quad (2.13)$$

وهذه عبارة عن معادلة تكاملية خاصة بالمؤثر  $U(t)$  ، ويمكن حلها باستخدام التعويض المتتالي فنحصل على :

$$U(t) = 1 - \int_{t_0}^t dt' H_H^{\text{ext}}(t') \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t'} dt'' H_H^{\text{ext}}(t'') U(t'') \right] \quad (2.14)$$

وبمواصلة عملية التعويض نحصل على :

$$U = 1 - \int_{t_0}^t dt' H_H^{\text{ext}}(t') - \left( \frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' H_H^{\text{ext}}(t') H_H^{\text{ext}}(t'') U(t'') \quad (2.15)$$

نضع  $dt' = dt_1$

$$U(t) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 H_H^{\text{ext}}(t_1) - \left( \frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^{t_1} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H_H^{\text{ext}}(t_1) H_H^{\text{ext}}(t_2) U(t_2) \quad (2.16)$$

من الناحية العملية فإننا نهتم بتأثير  $H^{\text{ext}}(t)$  على القيمة المتوسطة الحرارية للمؤثر A الذي يمثل ملحوظة للجمله المدروسة مثل شحنتها أو كثافة التيار .

لنرمز للأشعة الذاتية والقيم الذاتية الخاصة بالهاملتوني H (الهاملتوني الغير مضطرب ) وكذلك مؤثر العد N بالرمز  $|n\rangle$  حيث :

$$H|n\rangle = E_n |n\rangle \quad (2.17)$$

$$N|n\rangle = n |n\rangle \quad (2.18)$$

الحالات الذاتية  $|n\rangle$  مستقلة عن الزمن ويمكن اعتبارها بأنها حالات مستقرة في اللحظة الزمنية  $t = 0$  وهي تتطور مع الزمن في غياب الإضطراب الخارجي  $H^{\text{ext}}(t)$  كما يلي :

$$|n, t\rangle = e^{-i\frac{H}{\hbar}t} |n\rangle \quad (2.19)$$

وفي غياب الاضطراب الخارجي  $H^{\text{ext}}(t)$  تكون القيمة المتوسطة للمؤثر  $A$  في الحالة  $|n\rangle$  في اللحظة الزمنية  $t$  هي :

$$\langle n, t|A|n, t\rangle = \left\langle n \left| e^{i\frac{H}{\hbar}t} A e^{-i\frac{H}{\hbar}t} \right| n \right\rangle$$

$$\langle n, t|A|n, t\rangle = \langle n|A_H|n\rangle \quad (2.20)$$

حيث  $A_H$  كتابة هايزنبرغ للمؤثر  $A$ .

أما في حالة وجود المؤثر الخارجي  $H^{\text{ext}}(t)$  فإن الحالة تتطور وفق المعادلة (2.7) القيمة المتوسطة الحرارية للمؤثر  $A$  من أجل  $t_0 < t$  هي :

$$\begin{aligned} \langle n, t|A|n, t\rangle &= \left\langle n \left| U^+(t) e^{i\frac{H}{\hbar}t} A e^{-i\frac{H}{\hbar}t} U(t) \right| n \right\rangle \\ &= \langle n| U^+(t) A_H U(t) |n\rangle \\ &= \left\langle n \left| \left[ 1 + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H_H^{\text{ext}}(t') + \dots \right] \times \right. \right. \\ &\quad \left. \left. A_H(t) \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H_H^{\text{ext}}(t') + \dots \right] \right| n \right\rangle \\ &= \langle n|A_H(t)|n\rangle \\ &+ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle n| H_H^{\text{ext}}(t') A_H(t) - A_H(t) H_H^{\text{ext}}(t') |n\rangle + \dots \quad (2.20) \end{aligned}$$

إذا كان  $H^{\text{ext}}(t)$  ضعيف فإن إهمال الرتب الأعلى في نشر  $H^{\text{ext}}(t)$  والاحتفاظ بالحدود ذات الرتب الأولى يكون مبررا ومن خلال المعادلة السابقة فإن الجهة اليمنى تمثل فقط القيمة المتوسطة الحرارية للمؤثر  $A$  في غياب  $H^{\text{ext}}(t)$  وبالتالي التغير في القيمة المتوسطة الحرارية ل  $A$  يعطى بالعلاقة التالية :

$$\delta \langle n|A_H|n\rangle = - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle n| [ A_H(t), H_H^{\text{ext}}(t') ] |n\rangle \quad (2.22)$$

حيث من أجل  $t_0 < t$  تكون الجملة في حالة توازن والحالة  $|n\rangle$  تكون مشغولة بإحتمال  $P_n$  يعطى بالعلاقة التالية :

$$P_n = \frac{e^{-\beta(H-\mu N)}}{Z_G} \quad (2.23)$$

ولهذا فإنه يمكن إعتبار التغير  $\delta\langle A \rangle$  في القيمة المتوسطة الحرارية لـ  $A$  المسببة بـ  $H^{\text{ext}}(t)$  وأخذ القيمة المتوسطة لطرفي المعادلة السابقة نحصل من أجل  $t > t_0$  على ما يلي :

$$\delta\langle A_H \rangle (r, t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle [A_H(r, t), H_H^{\text{ext}}(r', t')] \rangle \quad (2.24)$$

بملاحظة الجهة اليمنى للمعادلة السابقة فإن القيمة المتوسطة الحرارية يتم أخذها بالنسبة للجملة غير مضطربة .

من أجل عبارة  $H^{\text{ext}}(t)$  معطاة بالمعادلة (2.2) فإن استجابة الجملة المدروسة تكتب بالعلاقة التالية :

$$\delta\langle A_H \rangle (r, t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \int d^3r' \langle [A_H(r, t), A_H(r', t')] \rangle F(r', t')$$

$$\delta\langle A_H \rangle (r, t) = \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \int d^3r' D^R(r, t, r', t') F(r', t') \quad (1.25)$$

حيث  $D^R(r, t, r', t')$  هي :

$$D^R(r, t, r', t') = -i \theta(t - t') \langle [A_H(r, t), A_H(r', t')] \rangle \quad (2.26)$$

وبما أن  $t' > t$  فإن التكامل الذي يتم على  $t'$  سوف يأخذ المجال من  $t_0$  إلى  $t$  حيث  $t > t_0$  و بالتالي فإن دالة هيفسايد  $\theta(t - t')$  تساوي 1. تمثل المعادلة السابقة عبارة كيوبو لنظرية الاستجابة الخطية [11] .

#### 4.2. الحساسية المعممة ودالة غرين المتأخرة

بما أن المؤثر  $A$  يمثل ملحوظة متبادلة مع مؤثر العد  $N$  و أيضا  $H$  متبادل مع  $N$  فإنه يمكننا أن نكتب :

$$A_H(r, t) = e^{i\frac{H}{\hbar}t} A(t) e^{-i\frac{H}{\hbar}t}$$

$$= e^{-i\frac{\mu N t}{\hbar}} e^{i\frac{H}{\hbar}t} A(t) e^{-i\frac{H}{\hbar}t} e^{i\frac{\mu N t}{\hbar}}$$

$$= e^{i\frac{(H-\mu N)t}{\hbar}} A(t) e^{i\frac{(H-\mu N)t}{\hbar}} \quad (2.27)$$

وبالتالي فان  $D^R$  مجرد دالة ترابط متأخرة [12] وتعطى الحساسية المعممة  $\chi$  بدلالة دالة الترابط هذه كما يلي :

$$\chi(rt, r't') = \frac{D^R(r t, r't')}{\hbar} \quad (2.28)$$



## الفصل الثالث

تكاتف بوز - أينشتاين

يلعب تكاثف بوز - أينشتاين دور مهم في دقة أجهزة القياس حيث أن هذه الظاهرة الكمية تؤدي إلى تغير تصرف المادة بشكل جذري حيث تتحول من الحركة الفردية للجسيمات المشكلة لها إلى حركة جماعية في موجة واحدة ولذلك سوف نتكلم في هذا الفصل عن تكاثف بوز - أينشتاين ولكن قبل يجب أن نتطرق إلى إحصاء بوز - أينشتاين

### 1.3. إحصاء بوز - أينشتاين

#### 1.3. جسيمات البوزون

هو إحصاء يطبق على الجسيمات الغير متمايزة وتسمى بوزونات ، مثل الفوتونات و الفونونات . وجسيمات البوزون لها دوال موجية متناظرة و لا تخضع لمبدأ باولي للإستبعاد وتملك سبين عدد صحيح من قيمة  $\hbar$  . لذلك فإنه يمكن لأي عدد من الجسيمات ان يشغل نفس المستوى الكمي [13 - 15] .

وتعتبر جسيمات البوزون غازات مثالية إذا أهملت طاقة التفاعل بينهما . وتطبيقات إحصاء بوز - أينشتاين كثيرة ومهمة وخصوصا لدراسة سلوك فوتونات الإشعاع وجزئيات الغاز عند درجات الحرارة المنخفضة [16 - 19] .

#### 2.1.3. الحالات المجهرية للبوزون

طريقة حساب عدد الحالات المجهرية للبوزون تعتبر أكثر تعقيدا من توزيع فيرمي - ديراك . فإنه لمستوي الطاقة  $j$  ,  $g_j$  من المستويات والتي تحتوي على عدد  $n_j$  من الجسيمات الغير متمايزة والتي لا تنطبق عليها أي قيود بالنسبة لعددها في نفس المستوى . ولذلك من الملائم هنا أن نتخيل ، كما بالشكل (3.1) ، ترتيب عدد  $n_j$  من الجسيمات والتي تمثل بالنقاط السوداء من المستويات والمقسمة بواسطة  $g_j$  خلال  $(g_j - 1)$  من الخطوط .

$$\begin{array}{c} \bullet\bullet | \bullet | \quad | \bullet | \bullet\bullet\bullet | \quad | \bullet | \bullet\bullet\bullet | \bullet \\ g_j = 9 \\ n_j = 13 \end{array}$$

الشكل (3.1) : يمثل ثلاثة عشر من جسيمات البوزون موزعة على تسع من المستويات المتساوية الطاقة

والآن نستطيع ان نحصل على حالات مجهرية جديدة بواسطة خلط الخطوط والجسيمات مع الاحتفاظ بالأعداد  $g_j$  و  $n_j$  ثابتة . ويظهر لنا السؤال التالي :

ماهي عدد الطرق التي ترتب بها  $(n_j + g_j - 1)$  من الرموز (وهي الخطوط والنقاط) في عدد  $(g_j - 1)$  من الخطوط و  $n_j$  من النقاط؟

وفي حالة كون عدد الجسيمات أقل بكثير من عدد المستويات المسموح بها حسب الشرط :

$$n_j \ll g_j$$

يعطى قانون حساب عدد الحالات المجهرية لكل مستوي طاقة  $z$  هي :

$$W_{(j)} = \frac{(n_j + g_j - 1)!}{n_j! (g_j - 1)!} \quad (3.1)$$

بالتالي فإن العدد الكلي للحالات المجهرية المسموح بها هو ببساطة حاصل الضرب المعادلة

(3.1) لكل مستوي طاقي ، بمعنى  $\Omega_{BE}$  تعطى بالمعادلة :

$$\Omega_{BE} = \prod_{j=1}^n \frac{(n_j + g_j - 1)!}{n_j! (g_j - 1)!} \quad (3.2)$$

ويأخذ توزيع بوز - أينشتاين الصورة :

$$f_j = \frac{n_j^*}{g_j} = \frac{1}{e^{(\varepsilon_j - \mu)/k\beta T} - 1} \quad (3.3)$$

وذلك في حالة مستويات الطاقة المنفصلة

$n_j^*$  : يمثل عدد جسيمات البوزون التي لها الطاقة  $\varepsilon_j$

$g_j$  : هو عدد المستويات التي لها نفس الطاقة  $\varepsilon_j$

$$\alpha = \frac{\mu}{K_\beta T} \quad \text{و} \quad \beta = \frac{1}{K_\beta T} \quad \text{حيث}$$

أما في حالة مستويات الطاقة المتصلة نجد أن التوزيع يعطى بالشكل :

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu)/k\beta T} - 1} \quad (3.4)$$

### 3.1.3. الفرق بين التوزيعات الاحصائية الثلاثة

الجدول التالي يعطي أهم الفوارق بين توزيع بوز - أينشتاين و التوزيعات الأخرى :

	التوزيعات		
	بوز - أينشتاين	فرمي - ديراك	ماكسويل - بولتزمان
الجسيمات	غير مميزة	غير مميزة	مميزة
الدالة الموجية	متماثلة	غير متماثلة	متماثلة و غير متماثلة
Spin	1 ، 2 ، 3.....	1/2 ، 3/2.....	الكل
أمثلة للجسيمات	فوتون ، فونون ، ميزون	إلكترون ، بروتون	كل الجسيمات
$n_i$	0 ، 1 ، 2 .....	0 ، 1	0 ، 1 ، 2 ....
$\omega(i)$	$\omega_{BE} = \frac{(n_j + g_j - 1)!}{n_j! (g_j - 1)!}$	$\omega_{FD} = \frac{g_j!}{n_j! (g_j - n_j)!}$	$\omega_{MB} = \frac{g_i^{n_i}}{n_i!}$
$\Omega$	$\Omega_{BE} = \prod_{i=1}^n \omega_{BE}$	$\Omega_{FD} = \prod_{i=1}^n \omega_{FD}$	$\Omega_{MB} = \prod_{i=1}^n \omega_{MB}$
$f(\varepsilon_i) = \frac{n_i}{g_i}$	$\frac{1}{e^{-\alpha+\beta\varepsilon_i} - 1}$	$\frac{1}{e^{-\alpha+\beta\varepsilon_i} + 1}$	$e^{\alpha-\beta\varepsilon_i}$

في حالة كون تركيز الغازات منخفض فإن التوزيعات الثلاثة تصبح متساوية أي

$$\Omega_{BE} = \Omega_{FD} = \Omega_{MB}$$

### 2.3. تكاثف بوز - أينشتاين

بما أن الجملة المكونة من  $N$  عدد جسيمات بوز المستقلة الموجودة في حجم  $V$  و درجة حرارة مطلقة  $T$  يكون توزيعها الأكثر احتمالا هو :

$$f(\varepsilon_i) = \frac{N_i^*}{g_i} = \frac{g_i}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} - 1} \quad (3.5)$$

حيث  $N_i$  يمثل عدد البوزونات التي لها طاقة  $\varepsilon_i$  و  $g_i$  هي درجة الإنحلال وهي تعبر عن مستويات الطاقة التي لها نفس الطاقة  $\varepsilon_i$

ومن خلال شرط الإنحفاظ للعدد الكلي للجسيمات داخل جملة مغلقة [20 - 22]

$$\begin{aligned} N &= \sum_{i=0}^{\infty} N_i^* = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{g_i}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} - 1} \\ &= \frac{g_0}{e^{\beta(\varepsilon_0 - \mu)} - 1} + \frac{g_1}{e^{\beta(\varepsilon_1 - \mu)} - 1} + \dots \\ &= N_0 + N_1 + \dots \end{aligned} \quad (3.6)$$

حيث يتم الجمع في المعادلة 2 على جميع مستويات الطاقة . وحتى يكون عدد الجسيمات لكل مستوى طاقي  $N_i$  فيجب أن يتحقق الشرط  $\mu \leq 0$  او  $e^{-\beta\mu} \geq 1$  لجميع الطاقات  $\varepsilon_i$  .

عند التركيز على عدد الجسيمات في المستوي الطاقي الأساسي  $N_0$  مع اعتبار  $\varepsilon_0 = 0$  نجد أن :

$$N_0 = f(\varepsilon_0 = 0) = \frac{1}{e^{\alpha} - 1} \quad (3.7)$$

وفي هذه الحالة يجب ان يكون  $\alpha > 0$  حتى نحصل على عدد موجب ومحدود من الجسيمات ومن أجل تعيين قيمة  $e^{\alpha}$  فمن المنطقي عند إنخفاض درجة حرارة الغاز و إقترابها من الصفر المطلق فإن  $N_0 = N$  لذلك نجد :

$$N = \frac{1}{e^{\alpha} - 1} \Rightarrow \alpha = \ln\left(1 + \frac{1}{N}\right) \approx \frac{1}{N} \quad (3.8)$$

وحيث ان  $N$  هو عدد كبير فإننا نستطيع وبدون أخطاء حسابيا أن نضع  $\alpha = 0$  أو  $e^\alpha = 1$

في المعادلة رقم 1 و ذلك عند درجات الحرارة المنخفضة

لذلك نجد أن المستوى الأساسي يمكن أن يملأ بعدد كبير من الجسيمات الكلية ولكي نحسب العدد الكلي للبوزونات للمستويات المثارة الذي يكون مساوي للعدد الكلي للجسيمات عند درجة الحرارة المرتفعة سوف نستخدم حسابات كلاسيكية كما يلي :

$$N = N_e = \sum_{i=0}^{\infty} N_i^* = \int_0^{\infty} \frac{g(\mathcal{E}) d\mathcal{E}}{e^{\alpha+\beta\mathcal{E}} - 1} \quad (3.9)$$

وباستخدام كثافة الشحنات :

$$g(\mathcal{E}) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{\mathcal{E}} \quad (3.10)$$

نجد عدد الجسيمات الكلية هي :

$$N_e = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\mathcal{E}} d\mathcal{E}}{e^{\alpha+\beta\mathcal{E}} - 1} = \frac{V}{\lambda^3} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{x} dx}{Z^{-1}e^x - 1} \quad (3.11)$$

حيث استخدمنا  $x = \beta\mathcal{E}$  و وسيط الطول الموجي لدبرولي  $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_\beta T}}$  و

، وباستخدام التكامل التالي:

$$\int_0^{\infty} \frac{x^{1/2} dx}{e^x - 1} = 1.306\sqrt{\pi}$$

فإن المعادلة تصبح بالشكل التالي :

$$N_e = 2.612V \left(\frac{2\pi m k_\beta T}{h^2}\right)^{3/2} \quad (3.12)$$

### 1.2.3 درجة الحرارة الحرجة

كما هو معلوم فإن البوزونات تفضل أن تجتمع في نفس المستوي الطاقوي على عكس الفرميونات ، وبالتالي نجد أنه عندما تصل درجة حرارة الغاز إلى درجة الحرارة الحرجة  $T_c$  فإن البوزونات تبدأ بالتجمع في المستوى الأساسي ولكن تبقى أيضا كثافة البوزونات بالمستويات المثارة مرتفعة جدا بمعنى  $N_0 = N$  وبخفض درجات الحرارة أقل من  $T_c$  نجد

أن الجسيمات تزداد كثافتها بالمستوى الأساسي حيث أن  $N^{-1}$  يتناسب مع  $\alpha$  وعندما نصل إلى درجة الصفر المطلق نجد أن جميع البوزونات تملئ المستوى الأساسي فقط لذلك عندما  $T = 0$  نجد أن  $N_0 = N$  ولحساب درجة الحرارة الحرجة نضع  $T_c$  بدلا من  $T$  و  $N$  بدلا من  $N_e$  في المعادلة 4 لنحصل على :

$$T_c = \frac{h^2}{2\pi m k_B} \left( \frac{N}{2.612V} \right)^{2/3} \quad (3.13)$$

فمثلا من أجل 1 مول من غاز الهليوم 4 تحت ضغط جوي 1 تكون  $T_c$  تساوي ( 0,036 كلفن ) وهي قيمة صغيرة جدا بالمقارنة مع القيمة العملية هي ( 4,21 كلفن ) وكحالة عامة فإن جميع الغازات المثالية تتحول إلى الحالة السائلة قبل أن تصل إلى درجة الحرارة الحرجة  $T_c$ .

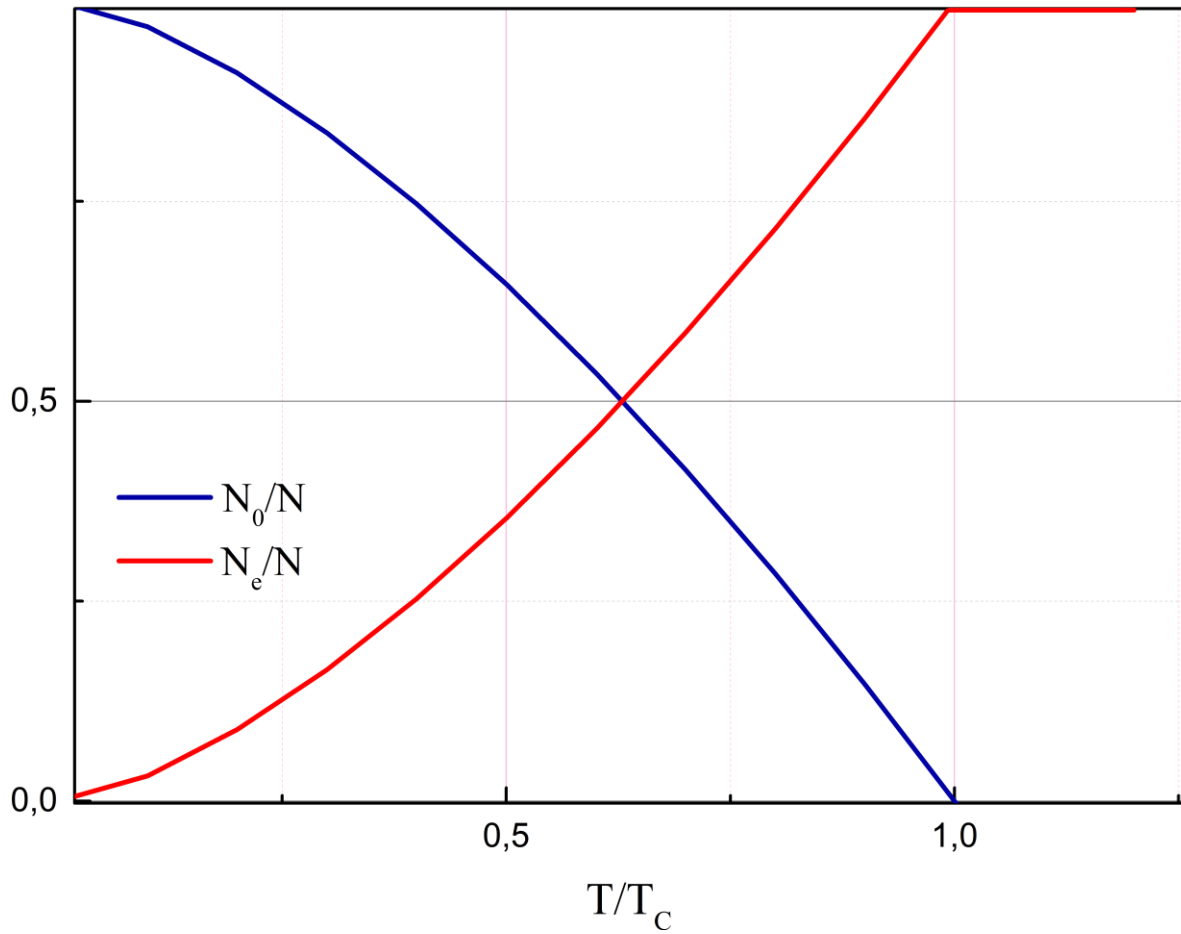
بقسمة المعادلتين (3.4) و (3.5) نحصل على عدد البوزونات في المستويات المثارة بدلالة درجة الحرارة كما يلي :

$$N_e = N \left( \frac{T}{T_c} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.14)$$

في حين أن باقي الجسيمات تتجمع في المستوى الأساسي وفق المعادلة التالية :

$$N_0 = N - N_e = N \left[ 1 - \left( \frac{T}{T_c} \right)^{\frac{3}{2}} \right] \quad (3.15)$$

وهذا التكاثف السريع للبوزونات يحدث عندما تقل درجة حرارة الجملة عن  $T_c$  وتسمى هذه الظاهرة تكاثف بوز - أينشتاين



الشكل (1-3) : يوضح كيفية تغير  $\frac{N_e}{N}$  و  $\frac{N_0}{N}$  مع درجة الحرارة المطلقة للغاز .  
 وقد كان الفيزيائيون يعتقدون لسنوات عديدة أن تكاثف بوز - أينشتاين هو نوع من الخيال ولا يمكن أن يوجد في الطبيعة ولكن في سنة 1995 أنتج الباحثون تكثيف بواسطة عملية تبريد لبخار مكون من ذرات الروبيديوم لدرجة حرارة (  $1,3 \cdot 10^{-7}$  كلفن ) وقد عرف هذا الإنجاز بأنه أهم إنجاز في الفيزياء الذرية في القرن الماضي وقد فتح الإنجاز الباب على مصراعيه للبحث في مجال جديد .

### ملاحظات

1- تجميع (تكثيف) جسيمات البوزون يحدث فقط في حال الجسيمات التي تحتفظ بعدد ثابت . هذا الشرط يجعل جسيمات الفوتون لا تتكاثف حيث أن لها صفة الإنشاء والإفناء .



2- عند الشرط  $T < T_c$  نستطيع أن ننظر إلى النظام على أنه مزيج من حالتين (طورين) ألا وهما :

أ- حالة غازية تتكون من  $N_e$  من الجسيمات والتي تتوزع على المستويات المثارة ، حيث  $\epsilon \neq 0$ .

ب- حالة تكثيف تتكون من  $N_0$  من الجسيمات والتي تتجمع في المستوى الأرضي ، حيث  $\epsilon = 0$

3- نجد أن الطول الموجي عندما  $T < T_c$  يعرف من المعادلة

$$N = \frac{V}{\lambda_c^3} 2,612$$

$$\Rightarrow \lambda_c^3 = \frac{2,612}{\rho} , \quad \rho = \frac{N}{V} \quad (3.16)$$

ولهذا فإن الطول الموجي مرتبط بمتوسط المسافة بين الجسيمات ولذلك يظهر التداخل بين الدوال الموجية ، وهنا تتضح أهمية التأثير الكمي .

4- بالطبع فإن جسيمات البوزون المستقرة بالمستوى الأرضي لا تساهم بالطاقة الداخلية أو الحرارة النوعية للنظام

وذلك لأنه عندما تكون  $T < T_c$  فإن عدد جسيمات البوزون المستقرة بالمستوى الأرضي يصبح كبيراً جداً ، ولكن طاقة المستوى  $\epsilon = 0$  أما في حالة  $T > T_c$  فإن  $N_0 = 0$  في أية حال .

### 3.3. خواص غاز البوزون المثالي عند درجات الحرارة المختلفة

من توزيع بوز أينشتاين الأكثر احتمالاً حسب المعادلة (3.4) نستطيع حساب خواص غاز البوزون المثالي التالية :

#### 1.3.3. الطاقة الداخلية

عند درجات الحرارة المرتفعة  $T > T_c$  نجد أن قانون ديولنج - بيتي يعطى بالعلاقة :

$$U \rightarrow \frac{3}{2} NK_B T \quad (3.17)$$

عند درجة الحرارة المنخفضة  $T < T_c$  نجد أن :

$$U = N\varepsilon = \int_0^{\infty} \frac{g(\varepsilon)\varepsilon d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1}$$

$$= 2\pi V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{3/2} d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} \quad (3.18)$$

و بالقرب من المستوى الأرضي نضع  $\mu = 0$  , و باستخدام التعويض التالي :

$x = \varepsilon/K_{\beta}T$  نحصل على :

$$U = \frac{2}{\sqrt{\pi}} K_{\beta}T \left(\frac{2m\pi K_{\beta}T}{h^2}\right)^{3/2} V \int_0^{\infty} \frac{x^{3/2} dx}{e^x - 1} \quad (3.19)$$

$$\int_0^{\infty} \frac{x^{3/2} dx}{e^x - 1} = 1,78$$

بتعويض عبارة  $V$  في المعادلة (3.19) نحصل على :

$$U = 0,77 NK_{\beta}T \left(\frac{T}{T_B}\right)^{3/2} \quad (3.20)$$

و هذا يدل على أن الطاقة الداخلية تتغير كما  $T^{5/2}$  عند الدرجات المنخفضة

### 2.3.3. الحرارة النوعية

عند درجات الحرارة المرتفعة  $T > T_c$  نجد أن الحرارة النوعية تأخذ القيم الكلاسيكية :

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V \approx \frac{3}{2} NK_{\beta} \quad (3.21)$$

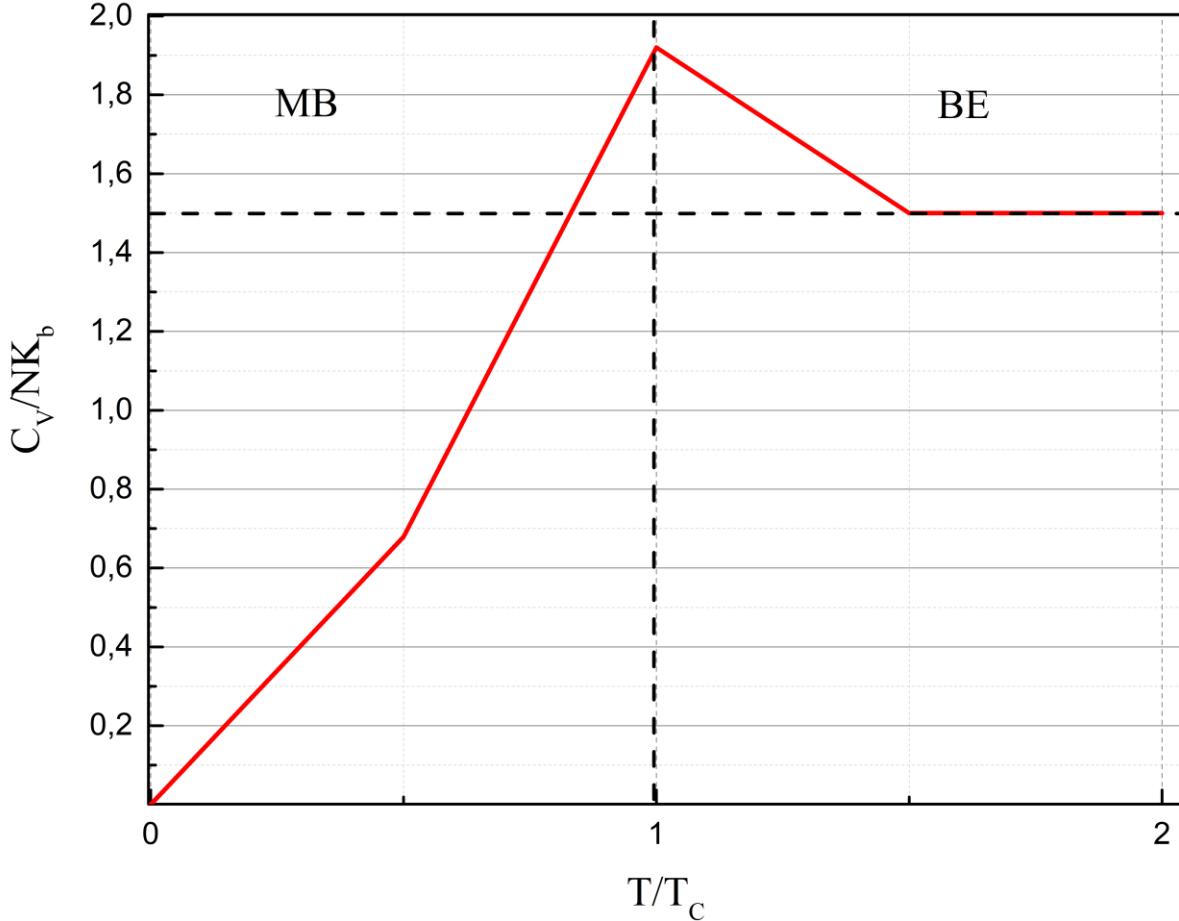
أما عند درجات الحرارة المنخفضة  $T < T_c$  نجد أن :

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V \approx 1,92 NK_{\beta} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.22)$$

و يظهر سلوك الحرارة النوعية مع درجة الحرارة بالشكل (2-3) ، فعند درجات الحرارة المنخفضة يبدأ المنحنى في الازدياد من القيمة الصفر المطلق حتى يصل إلى قيمة عظمى

و هي  $1,92 NK_{\beta}$  و ذلك عندما تكون  $T = T_c$

وبعدها يبدأ ميل المنحنى في التغير مع ارتفاع درجة الحرارة ، و عند درجات الحرارة العالية تأخذ الحرارة النوعية القيمة الكلاسيكية و هي  $1,5 NK_{\beta}$



شكل (2-3) : تغير الحرارة النوعية تحت حجم ثابت مع درجة الحرارة

MB : إحصاء ماكسويل - بولتزمان

BE : إحصاء بوز - أينشتاين

### 3.3.3. الأنتروبي

القيمة المطلقة للأنتروبي عند درجات الحرارة المنخفضة تحسب من قانون الحرارة النوعية

كالتالي :

$$S = \int_0^T \frac{C_V}{T} dT = 1,28NK_{\beta} \left( \frac{T}{T_c} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.23)$$

و نجد أن الأنتروبي يؤول للصفر عند  $T = 0$  كما هو معرف بالقانون الثالث للديناميك الحرارية .

### 4.3.3. طاقة هيلمولتز

تحسب دالة هيلمولتز عند  $T < T_c$  الشرط كالتالي :

$$F = U - TS$$

$$= 0,51NK_\beta \left(\frac{T}{T_c}\right)^{\frac{3}{2}}$$

$$= -1,33K_\beta T \left(\frac{2m\pi K_\beta T}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} V \quad (3.24)$$

### 5.3.3. الضغط

من المعادلة (9) نستطيع أن نحسب الضغط بالعلاقة التالية :

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,N}$$

$$= 1.33K_\beta T \left(\frac{2m\pi K_\beta T}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.25)$$

و من المعادلة (3.25) نجد أن الضغط يتناسب مع  $T^{5/2}$  عند درجات الحرارة المنخفضة ، و لا يعتمد على الحجم .

و عند الصفر المطلق نجد أن جميع جسيمات البوزون تحتل المستوى الأرضي  $\mathcal{E} = 0$  ، و لا يكون لها كمية حركة خطية و بالتالي ليست لها أية مساهمة في الضغط [23 ، 24]

## الفصل الرابع

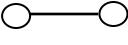

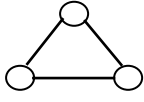



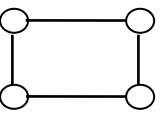




# الحسابات النظرية والمحاكات

في هذا الفصل سوف نحاول إجراء عملية محاكات لبعض الخواص الترموديناميكية مثل السعة الحرارية و الأنتروبي والطاقة الحرة ، وهذا ما يسمح لنا بتحديد الظواهر الكمية التي يمكن أن تؤثر على تطبيقات العملية الممكنة للحلقات الكمية ، وخاصة التطبيق في مجال القياس الذي نحن بصدد مناقشته في هذا الفصل

### الحسابات النظرية والمحاكات

#### 1.4. الترابط وضد الترابط

عند درجات الحرارة المنخفضة تبحث الإلكترونات عن حالة الطاقة الأصغر لتستقر فيها وبالتالي لا نستطيع أن نفرق حالات الترابط وحالات ضد الترابط و بالتالي سوف يكون هناك انحلال نلخصه في الجدول التالي :

n	B	A-B	الانحلال
2			2
3		  	4
4		   	6

الشكل (1 - 4) : يمثل بعض نماذج الحلقات و درجة الإنحلال من أجل  $n = 2 3 4$

نلاحظ في هذه الحلقات أنه سيحدث هناك صراع بين حالتين كميتين هما ، قوة الترابط تحاول إبقاء الذرات المكونة للحلقة ضمن الشكل الهندسي للحلقة بينما تحاول الذرات الحصول على درجة من الحرية والحركة بشكل حر داخل الشكل الهندسي للحلقة كما يتحرك جسيم كمي داخل سطح ( في هذه الحالة  $2D$  )

وبالتالي سوف ينشأ هناك فرق في الطاقة ومنطقة ممنوعة  $\Delta_n$  وهي الفرق بين طاقة الذرات في حالة الترابط ضمن الشكل الهندسي للحلقة وحالة الجسيم الحر داخل سطح الحلقة ، ومن أجل درجات الحرارة المنخفضة جدا يمكن التعامل مع نظرية الفوتون الوحيد المتبادل ويمكننا اعتبار التقريب الخطي الذي يكافئ هزاز توافقي كمي ذو بعدين بالتالي نحصل على

$\Delta_n$  هي :

$$\Delta_n = n \hbar \omega (n - 1) - \varepsilon_l n \quad (4.1)$$

حيث

$$\varepsilon_l = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2Ml^2} n_l^2 \quad (4.2)$$

حيث

$M$  : كتلة احد الذرات المكونة للحلقة

$n_l$  : عدد كمي طبيعي يأخذ أصغر قيمة مساوية لـ 1

$l$  : متوسط بعد الحلقة

$\hbar \omega$  : الحد الأدنى لطاقة الفوتون المتبادل بين ذرات الحلقة من أجل التبسيط نجد عبارة

$\Delta_n$  كالتالي :

$$\widetilde{\Delta}_n = n^2 - \theta_l n \quad (4.3)$$

حيث  $\theta_l$  هي :

$$\theta_l = \frac{\varepsilon_l}{\hbar \omega} - 1 \quad (4.4)$$

بما أننا نتكلم عن حلقات كمية فإن أصغر قيمة يمكن أن تأخذها  $n$  هي 2 وبالتالي نحصل

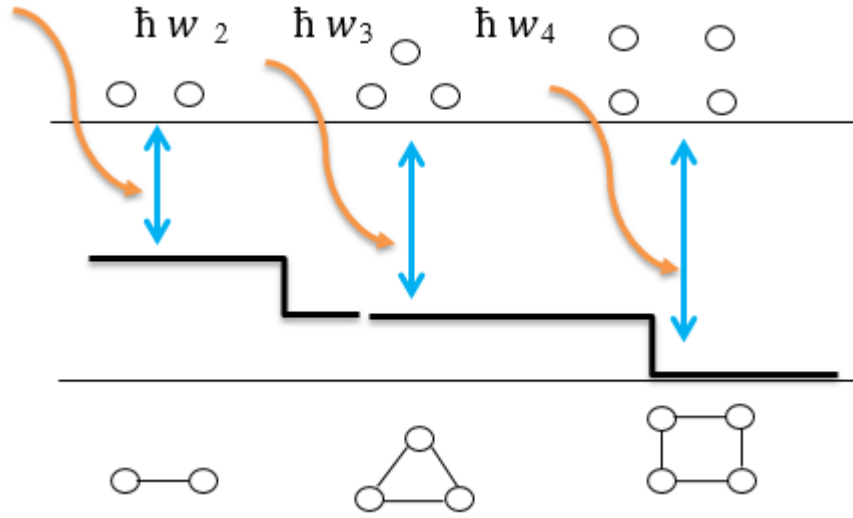
على العبارة التالية :

$$\varepsilon_l = 2\hbar\omega \quad (4.5)$$

عند حدوث إثارة للحلقة بسبب إضطراب خارجي فسوف نحصل على طاقة إثارة كما في

الشكل (4.5) :

$$E_n = \Delta_n + \eta k_\beta T \quad (4.6)$$



الشكل (4-2) رسم تخطيطي للمناطق الطاقوية الممنوعة حسب عدد الذرات المكونة للحلقة

حيث  $\eta$  تتعلق بكثافة الحالات ويمكن كتابتها بالشكل المختزل في وحدات  $\hbar\omega$

$$\bar{E}_n = n(n-1) + \tilde{\eta} K_{\beta} T \quad (4.7)$$

#### 2.4. حسابات تقديرية

من خلال عبارة المعادلة (4.5) يمكننا إجراء حسابات تقريبية للمجال الذي يمكننا العمل فيه عند تطبيق هذه الطريقة من أجل :

$$M \approx 1836 Z \quad \text{و} \quad n_l = 1$$

يمكننا تقدير الطاقة  $\hbar\omega$  التي نحتاجها داخل هذه الحلقات وهي :

$$\hbar\omega \approx \frac{10^{-22}}{Z l^2} (ev) \quad (4.8)$$

حيث :

$$1 (ev) = 1160,52 K$$



L	$\Delta_{70} (K^\circ)$	$Z \leq 56$
$1 \text{ \AA}$	$5,6 \cdot 10^5 Z^{-1}$	$\Delta_{70} \geq 10^4 K$
nm	$5,6 \cdot 10^3 Z^{-1}$	$\Delta_{70} \geq 10^2 K$
5 nm	$224 Z^{-1}$	$\Delta_{70} \geq 10 K$

يبين هذا الجدول الابعاد المناسبة من حيث درجة الحرارة التي تتحملها المواد المستعملة هي من رتبة  $5 \text{ nm}$

### 3.4. الخواص الترموديناميكية للحلقات

دالة القسمة تعطى بالعلاقة :

$$Z = \sum_n g_n e^{-\beta E_n} \quad (4.9)$$

حيث :

$g_n$  : إنحلال المستويات

$E_n$  : تمثل طاقة الإثارة

بالتعويض في العبارة (4.9) نجد :

$$\begin{aligned} Z &= e^{-\eta} \sum_{n=0}^{\infty} 2n e^{-\beta \hbar \omega n(n+1)} \\ &= e^{\frac{\beta \hbar \omega}{4}} e^{-\eta} \sum_{n=0}^{\infty} 2n e^{-\beta \hbar \omega \left(n+\frac{1}{2}\right)^2} \end{aligned} \quad (4.10)$$

نضع :

$$S = \sum_{n=0}^{\infty} 2n e^{-\beta \hbar \omega (n+1/2)^2} \quad (4.11)$$

حيث :

$$\alpha = \frac{1}{2} \quad \text{و} \quad \frac{1}{\lambda} = \beta \hbar \omega$$

لدينا الدالة :  $\mathcal{F}(x) = x e^{-\frac{1}{\lambda}(x+\alpha)^2}$

باستخدام صيغة أولر ماكلوران التالية :

$$\sum_{x=0}^{\infty} \mathcal{F}(x) = \frac{1}{2} \mathcal{F}(0) + \int_0^{\infty} \mathcal{F}(x) dx - \sum_{p=1}^{\infty} \frac{B_{2p}}{(2p)!} \mathcal{F}(0)^{(2p-1)} \quad (4.12)$$

حيث  $B_{2p}$  هي اعداد برنولي

$$\mathcal{F}(0) = 0$$

$$\begin{aligned} I &= \int_0^{\infty} x e^{-\frac{1}{\lambda}(x+\alpha)^2} dx = \int_0^{\infty} (x + \alpha) e^{-\frac{1}{\lambda}(x+\alpha)^2} dx - \alpha \int_0^{\infty} e^{-\frac{1}{\lambda}(x+\alpha)^2} dx \\ &= -\frac{\lambda}{2} e^{-\frac{1}{\lambda}(x+\alpha)^2} \Big|_0^{\infty} - \alpha \sqrt{\lambda} \int_{\frac{\alpha}{\sqrt{\lambda}}}^{\infty} e^{-y^2} dy \end{aligned}$$

$$\int_{\frac{\alpha}{\sqrt{\lambda}}}^{\infty} e^{-y^2} dy = -\int_0^{\frac{\alpha}{\sqrt{\lambda}}} e^{-y^2} dy + \int_0^{\infty} e^{-y^2} dy$$

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$$

$$\int_{\frac{\alpha}{\sqrt{\lambda}}}^{\infty} e^{-y^2} dy = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left( 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{\alpha}{\sqrt{\lambda}} \right) \right)$$

$$I = \frac{\lambda}{2} e^{-\frac{\alpha^2}{\lambda}} - \alpha \sqrt{\lambda} \left( 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{\alpha}{\sqrt{\lambda}} \right) \right) \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$\frac{d^n \mathcal{F}(x)}{dx^n} = \sum_{k=0}^{\infty} C_n^k \frac{d^{n-k}}{dx^{n-k}}(x) \frac{d^k}{dx^k} \left( e^{-\frac{1}{\lambda}(x+\alpha)^2} \right)$$

$$\frac{d^{n-k}}{dx^{n-k}}(x) = \begin{cases} 0 & n - k \geq 2 \\ 1 & n - k = 1 \\ 1 & n = k \end{cases}$$

$$\frac{d^n \mathcal{F}(x)}{dx^n} = C_n^{n-1} \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} \left( e^{-\frac{1}{\lambda} (x+\alpha)^2} \right) + C_n^n x \frac{d^n}{dx^n} \left( e^{-\frac{1}{\lambda} (x+\alpha)^2} \right)$$

باستخدام كثيرات حدود هرميت

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

$$H_{n-1}(x) = (-1)^{n-1} e^{x^2} \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}} e^{-x^2}$$

$$\Rightarrow f^{(n)}(0) = n (-1)^{n-1} e^{-\frac{\alpha^2}{\lambda}} \left( \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \right)^{n-1} H_{n-1} \left( \frac{\alpha}{\sqrt{\lambda}} \right)$$

$$f^{(2p-1)}(0) = (2p-1) e^{-\frac{\alpha^2}{\lambda}} \left( \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \right)^{2p-2} H_{2p-2} \left( \frac{\alpha}{\sqrt{\lambda}} \right)$$

$$S = \lambda e^{-\frac{\alpha^2}{\lambda}} + \alpha \sqrt{\pi \lambda} \left\{ \operatorname{erf} \left( \frac{\alpha}{\sqrt{\lambda}} \right) - 1 \right\} - 2 \sum_{p=1}^{\infty} \frac{B_{2p}}{(2p)!} (2p+1) e^{-\frac{\alpha^2}{\lambda}} \left( \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \right)^{2p-2} H_{2p-2} \left( \frac{\alpha}{\sqrt{\lambda}} \right)$$

$$Z = \lambda e^{-\frac{\alpha^2}{\lambda}} + \alpha \sqrt{\pi \lambda} \left\{ \operatorname{erf} \left( \frac{\alpha}{\sqrt{\lambda}} \right) - 1 \right\} - 2 \sum_{p=1}^{\infty} \frac{B_{2p}}{(2p)!} (2p-1) e^{-\frac{\alpha^2}{\lambda}} \left( \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \right)^{2p-2} H_{2p-2} \left( \frac{\alpha}{\sqrt{\lambda}} \right)$$

$$x = \frac{\lambda}{\alpha^2}$$

$$Z = \alpha^2 X \left\{ 1 - 2 \sum_{P=1}^{\infty} (2P-1) \frac{B_{2P}}{(2P)!} \left( \frac{1}{\alpha^2 X} \right)^P H_{2(P-1)} \left( \frac{1}{\sqrt{X}} \right) \right\} e^{-\frac{1}{X}} + \alpha^2 \sqrt{\pi X} \left\{ \operatorname{erf} \left( \frac{1}{\sqrt{X}} \right) - 1 \right\} \quad (4.11)$$

$$\alpha = \frac{1}{2} \quad , \quad \frac{1}{\lambda} = \beta \hbar \omega \quad , \quad \lambda = \frac{x}{4}$$

$$x = \frac{4}{\beta \hbar \omega} = \frac{K_{\beta} T}{\frac{\hbar \omega}{4}}$$

$$\frac{\hbar \omega}{4} = E_0 \quad \Rightarrow \quad x = \frac{K_{\beta} T}{E_0}$$

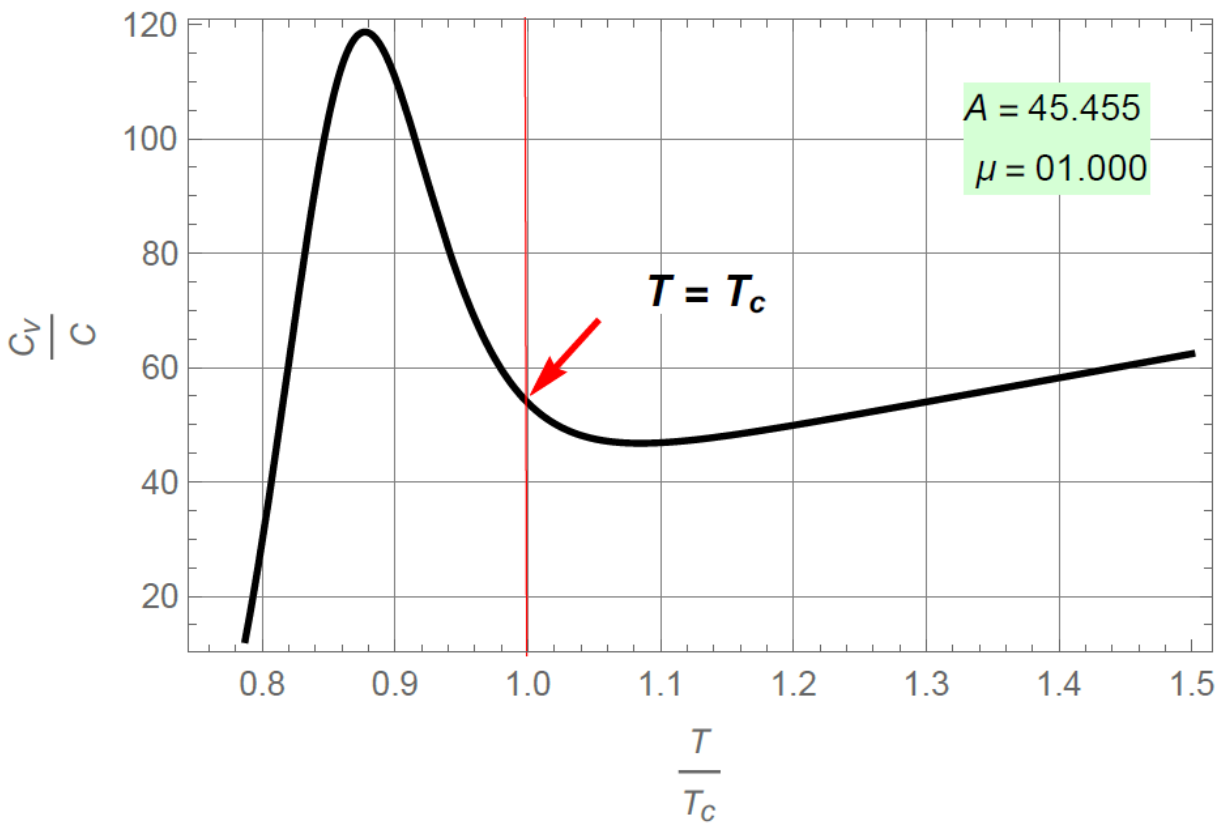
$$\mu = \frac{E_0}{K_{\beta} T} \quad , \quad \frac{T}{T_c} = \mu x$$

عبارة السعة الحرارية

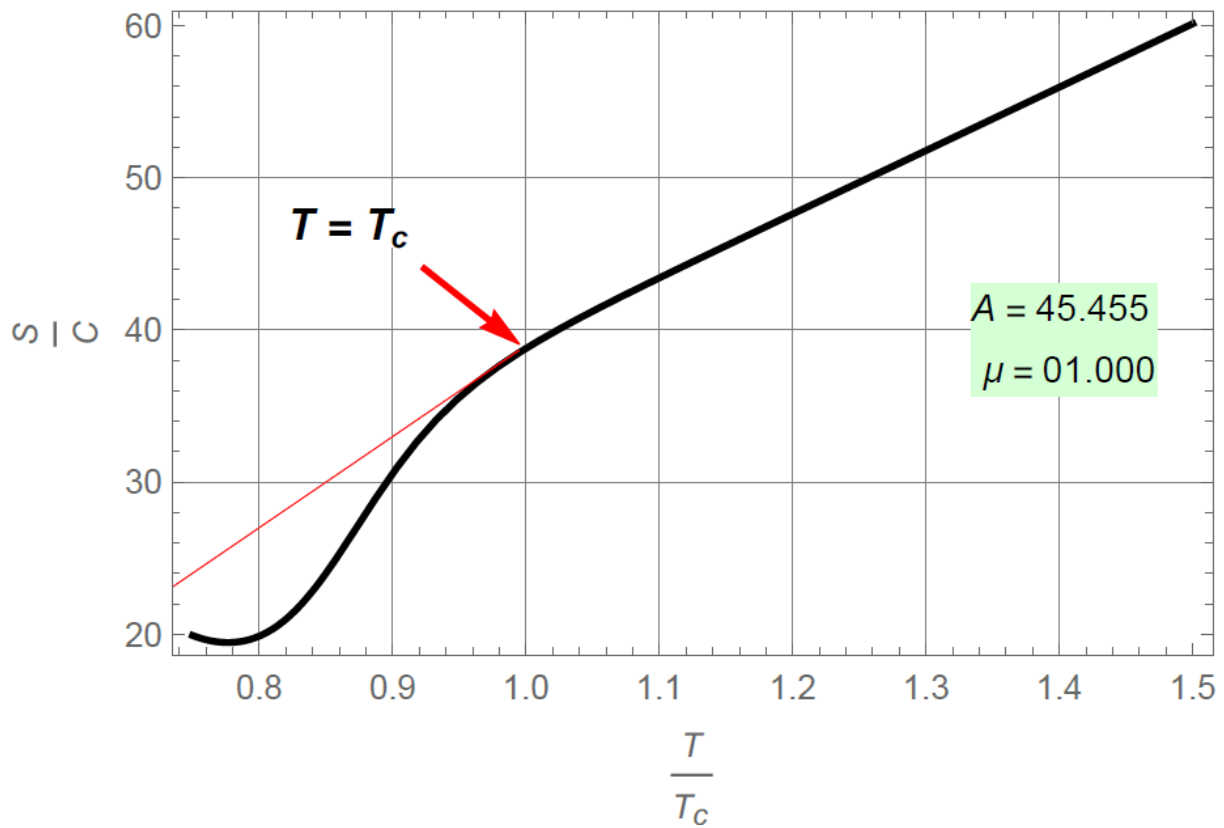
$$\frac{C_V}{C} = Ax + x \frac{\partial^2}{\partial x^2} x^2 \log \left[ \left( 1 - 2 \sum_{p=1}^{\infty} (2p-1) \frac{B_{2p}}{(2p)!} \left( \frac{4}{x} \right)^p H_{2(p-1)} \left( \frac{1}{\sqrt{x}} \right) \right) \exp \left( \frac{-1}{x} \right) + \sqrt{\pi x^{-1}} \left[ -1 + \operatorname{erf} \left( \frac{1}{\sqrt{x}} \right) \right] \right]$$

#### 4.4. النتائج و المناقشة

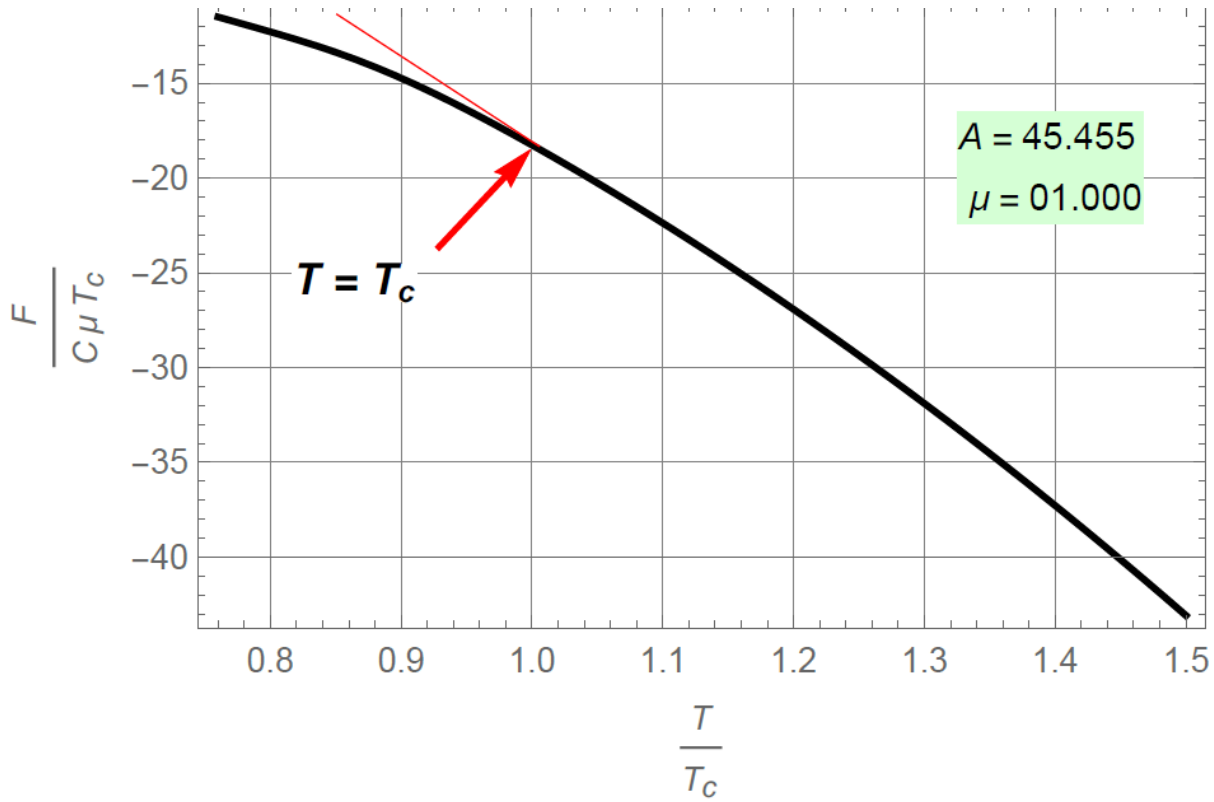
باستعمال عبارة  $Z$  التي تحصلنا عليها في المعادلة (4-11) قمنا باستخدام برنامج Wolfram Mathematica 11.0.1 حيث أن  $Z$  تحتوي على وسائط  $C$  و  $\mu$  و  $\alpha$  و من خلال عملية محاكاة و تغير قيم هذه الوسائط توصلنا إلى الأشكال المقبولة فيزيائيا التالية :



الشكل(4-3): السعة الحرارية المختزلة بدلالة  $x$  من أجل  $\mu = 1$



الشكل (4-4) : الأنتروبي المختزلة بدلالة  $x$  من اجل  $\mu = 1$



الشكل (4-5) : الطاقة الحرة المختزلة من اجل  $\mu = 1$

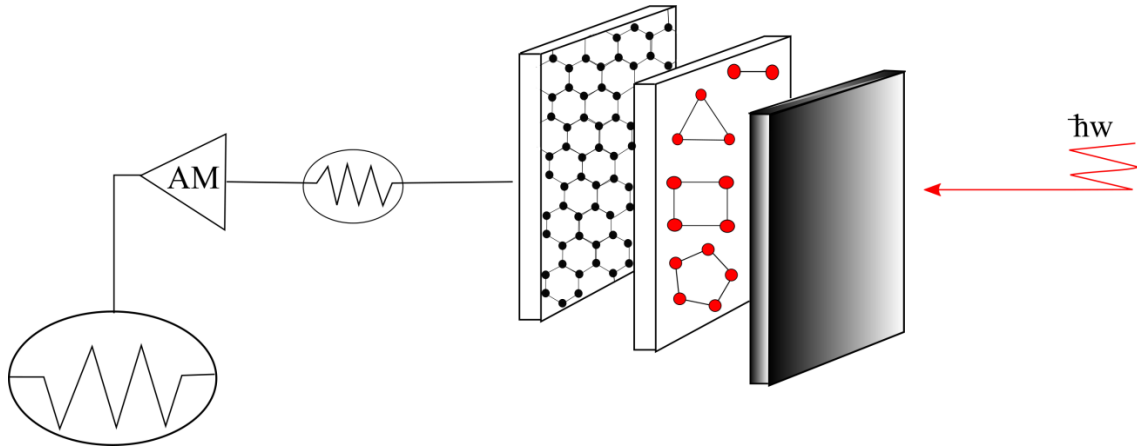
حيث نلاحظ مايلي :

1. عند البدء بعملية الخفض لدرجة الحرارة و عند  $x = 1$  أي  $T = T_c$  من أجل  $\mu = 1$  نلاحظ تغير مفاجيء في شكل البيانات الثلاث أي السعة الحرارية ، الأنتروبي و الطاقة الحرة مما يدل على وجود درجة حرارة حرجة  $T_c$  ، نفسرها بحدوث شبه تكاثف بوز أينشتاين
2. نستنتج أيضا أن إستخدام الحلقات الكمية في عملية القياس أو الكشف لإشعاعات معينة يكون محدود في مجال حرارة معينة ، وبما أن درجة حرارة التكاثف تكون صغيرة جدا فإن عملية تبريد جهاز الكشف المصنوع بهذه الطريقة لا تتطلب درجات حرارة منخفضة جدا  $T > T_c$

3. كنا نهدف من خلال هذا العمل إلى إمكانية إيجاد تطبيقات عملية للحلقات الكمية و قد أشرنا الى أن المجال المناسب لهذا الهدف هو أجهزة الكشف عن إشعاعات معينة ، و بما

أن الحلقات الكمية المدروسة هي ثنائية البعد فهذا سوف يستدعي وضعها على طبقة ثنائية البعد ، و يعتبر الغرافن من المواد المرشحة لذلك بسبب الخواص الفيزيائية الغير عادية المكتشفة مؤخرا من بينها أنه فائق الناقلية

4. عند تسليط أشعة معينة التي نريد كشفها باستخدام هذه الآلية فإن عملية الإثارة تتسبب في تفكيك بعض الحلقات الكمية و هذا سوف يؤثر على شكل الكمون الدوري لطبقة الغرافن و بالتالي سوف يحدث اضطراب على شكل دالة بلوخ و الذي يؤثر على توزيع الإلكترونات مما يسبب تكون إشارة كهربائية يمكن تضخيمها باستخدام مضخمات إلكترونية ، ويمكن قياس شدة الإشعاع على حسب قدرته على تفكيك حلقة من النوع  $n$  كما هو موضح في المخطط التالي :



الشكل (6-4) : رسم تخطيطي لكيفية الكشف عن بعض الأشعة باستخدام الحلقات

الكمية



النتيجة العامة

### النتيجة العامة

لقد أحدثت تكنولوجيا النانو ثورة صناعية في عصرنا الحالي من حيث صغر الأجهزة و ثمنها و تكلفتها و سهولة استعمالها و لكن هناك حدود تفرضها القوانين الكمية على مدى صغر حجم هذه الأجهزة .

تعتبر الحلقات الكمية من أصغر التشكيلات الكمية التي يمكن استعمالها كجهاز في حد ذاته نهدف من خلال هذا العمل الى دراسة إمكانية تطبيق الحلقات الكمية في أجهزة القياس و الكشف حيث قمنا بحساب الخواص الحرارية للحلقات الكمية ثنائية البعد و التي أعطت إمكانية حدوث شبه تكاثف بوز - أينشتاين تحت درجة حرارة  $T_c$  ، و هذا ما يفرض حدود على مجال استخدام هذا النوع من الكواشف ، و بسبب كون الحلقات المدروسة ثنائية البعد فقد اقترحنا استعمال رقاقات الغرافن كحامل لهذه الحلقات في صناعة هذا النوع من

الكواشف

قائمة المصادر

والمراجع

1–S. Viefers , P. Koskinen , P. Singha Deo and M. Manninen,–  
Quantum rings for beginners: Energy spectra and persistent currents,  
– arXive :cond–mat :0310064v1– (2003).

2–Charles Kittel – Introduction to Solid State Physics–Wiley –  
(2005).

3–Neil W. Ashcroft, N. David Mermin – Solid State Physics –Brooks  
Cole – (1976).

4–Charles Kittel – Quantum theory of solids–Wiley – (1987)

5–Vladimir M. Fomin – Physics of Quantum Rings –Springer Verlag  
Berlin Heidelberg – (2014).

6–M. Koskinen, M. Manninen, B. Mottelson and S.M. Reimann –  
Rotational and vibrational spectra of quantum rings – arXive :cond–  
mat0004059v1 – (2000).

7–Thomas Ihn, Andreas , Lorenz Meier, Martin Sigrist and Klaus  
Enslin – Quantum physics in quantum rings – Europhysics news–  
May – (2005).

8–O. Voskoboynikov, Yiming Li, Hsiao–Mei Lu, Cheng–Feng Shih, and C. P. Lee – Energy states and magnetization in nanoscale quantum rings – Phys. Rev. B 66, 155306 – (2002).

9–P. Koskinen, M. Koskinen, and M. Manninen – Low–energy spectrum and finite temperature properties of quantum rings – Eur. Phys. J. B 28, 483–489 – (2002).

10–Kubo, R – Statistical Mechanical Theory of Irreversible Processes – Journal of the Physical Society of Japan, vol. 12, pp. 570–586– (1957).

11–De Clozeaux – Linear Response Theory, Theory of condensed matter – IAEA Vienna – (1968).

12–R. Kubo, H. Ichimura, T. Usui, N. Hashitsume – Statistical mechanics–North Holland – (1990).

13–Carolyne M. Van Vliet – Equilibrium and Non–equilibrium Statistical Mechanics–World Scientific Publishing Company – (2008).

14–Michel Le Bellac – Thermal field theory–Cambridge University Press – (1996).

15–G. Venkataraman – Bose and His Statistics –Vantage Press – (1992).

16–Carlo Maria Becchi, Massimo D'Elia – Introduction to the Basic Concepts of Modern Physics\_ Special Relativity, Quantum and Statistical Physics– Springer International Publishing – (2015).

17–Jochen Rau – Statistical Physics and Thermodynamics\_ An Introduction to Key Concepts– Oxford University Press – (2017).

18–Linda E. Reichl – A Modern Course in Statistical PhysicsWiley–VCH – (2016).

19–R. Kubo, H. Ichimura, T. Usui, N. Hashitsume – Statistical mechanics–North Holland – (1990).

20–NOZIERES, P. (PHILIPPE) – The Theory of Quantum Liquids, Volume 2 \_ superfluid bose liquids–ADDISON–WESLEY – (1994).

21–Pitaevski, Lev Petrovitch\_ Stringari, Sandro – Bose–Einstein Condensation and Superfluidity–Oxford University Press – (2016).

22–L. Pitaevskii, S. Stringari – Bose–Einstein Condensation–Clarendon Press – (2003).

23–A. Griffin, D. W. Snoke, S. Stringari – Bose–Einstein Condensation–Cambridge University Press – (1995).

24–J.T. Mendonça, Hugo Terças – Physics of Ultra–Cold Matter\_ Atomic Clouds, Bose–Einstein Condensates and Rydberg Plasmas–Springer–Verlag New York – (2013).