أتجاهات الحيود والطرق التجريبية لدراسة الحيود

- $2\, d_{hkl} \sin \Theta = n\, \lambda$

- العلاقة الشهيره اعلاه التي استطاع العالم براك أستعمالها لتفسير نتائج تجارب الحيود التي اجراها العالم لاوي ، ولقد جرت العادة ان يكون التعبير عن مفهوم انعكاس الاشعة السينية مكافئة لمفهوم حيود الاشعة السينية، اي بمعنى اخر يمكن استعمال احدهما محل الاخر.
- ان الانعكاس الحقيقي من سطح مرأة مستويه هو تداخل في فضاء ثلاثي الابعاد ويكون غير مقيد بزوايا خاصة ولا علاقة له بقانون براك بينما انعكاس او حيود الاشعة السينيه من بلوره هو تداخل في فضاء ثلاثي الابعاد ومقيد بزوايا يعينها قانون براك.
- ان انعكاس براك يمكن ان يحدث فقط عندما يكون الطول الموجي λ أصغر او مساوي لضعف المسافة البينيه بين مستويين hkl
- للحصول على انعكاس من مستويات لهما نفس احداثيات ميلرمتعاقبين في البلوره ، اي ان شرط براك اللازم للانعكاس هو $\lambda \le 2\, d_{hkl}$
- ولهذا السبب لايمكن استخدام الضوء المرئي لدراسة البنية البلورية.

- لغرض الحصول على انعكاسات براك من مستويات ذات معاملات ميلر كبيره فنحتاج الى اشعة سينيه ذات اطوال موجية قصيره في حالة ثبوت زاوية براك للمجاميع المختلفة من السطوح المتوازية ، حيث ان قيم المسافات البينية بين السطوح بصوره عامه تتناسب عكسيا وقيم معاملات ميلر لتلك السطوح.

- $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$

- أما أذا كانت الاشعة السينيه ذات طول موجي محدد فللحصول على انعكاسات من سطوح ذات قيم hkl كبيرة نحتاج الى زوايا براك كبيره أيضا، ويمكن صياغة قانون براك كالاتي:

- $\theta = sin^{-1}(\frac{n\lambda}{2d})$

- وهذا يعني بالنسبة لطول موجي معين للاشعة السينيه ان الحيود ممكن فقط عند زوايا خاصة تعين بالفسح d بين السطوح ولما كانت قيم هذه الفسح تعني بالمحاور والزوايا البلوريه ، فأن شبيكة البلوره هي المسؤوله عن تحديد زوايا براك أو زوايا الحيود.

- أن قانون براك يعد نتيجه منطقيه لدورية الشبيكه ولايعتمد على ترتيب الذرات المرافقه لنقاطها حيث أن الأساس المرافق للشبيكة يحدد الشدة النسبية من الرتب n المتشتته من مجموعة معينة من السطوح المتوازيه. جرت العاده على حذف الرتبه من معادلة براك وتمييزها عن معادلة براك الاصلية بكتابة الصيغه الجديده كالاتي :

- λ=2d sin Θ_{hkl}
- λ=d_{hkl} sin Θ

- أن أختيار احدى الصيغتين الجديدتين لمعادلة براك يعتمد على مانريد فهل نريد حساب الزاوية المقاسة θ الى فسحة السطوح d_{hkl} كما هو الحال في تجارب الحيود البلوري عندما تكون λ معلومة ذات طول موجي محدد، ام نريد حساب الزاوية المقاسة θ الى الطول الموجي المجهول كما في تجارب طيف الأشعة السينية حيث تكون d معلومة.
- مثال: جد زاوية سقوط الاشعه السينيه ذات الطول الموجي 1.54 A من المستويات المتوازية التي لها احداثيات 100 في بلورة مكعبة ثابت شبيكتها يساوي 4 A.
- من قانون براغ $n\lambda=2d\sin\theta$ نفرض قيمة n=1

$$d = \frac{\boldsymbol{a}}{\sqrt[2]{h^2 + k^2 + l^2}}$$

$$d = \frac{\mathbf{4}}{\sqrt[2]{1 + 0 + 0}} = 4\ \text{Å}$$

$$\therefore \Theta = \sin^{-1}\left(\frac{n\lambda}{2\ d}\right)$$

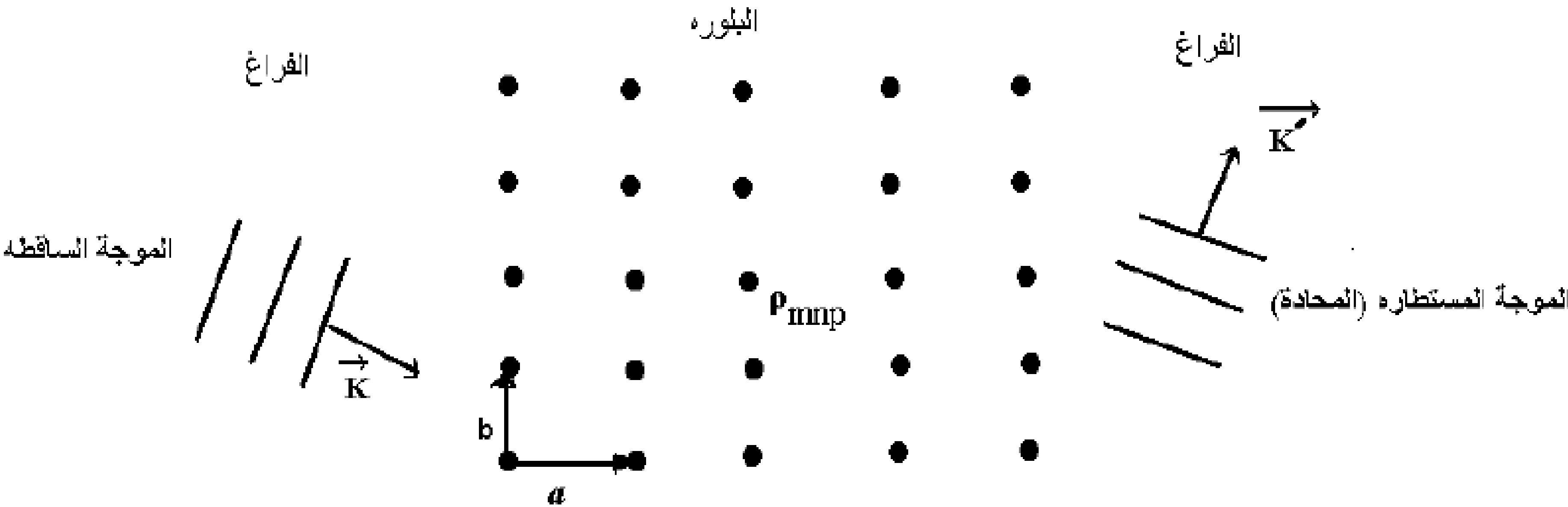
$$= \sin^{-1}\left(\frac{1.54}{2\ \times 4}\right)$$

$$\theta = 11^{\circ}$$

أشتقاق لاوي لسعة الموجة المستطيرة

- ان معادلة براغ لاتعطي تفاصيل دقيقة عما يحدث داخل البلوره أثناء الحيود وكذلك لاتعطي معلومات عن شدة وسعة الموجة المستطيره. لقد أهمل براك في نظريته دور التوزيع الالكتروني سواءا داخل الذره أو في داخل وحدة الخلية وكذلك أهمل في حساباته مساهمه الموجات المستطاره الناتجة من كل عنصر حجمي للبلوره.
- فعند سقوط حزمه من الاشعة ذات طول موجي معين على ذرات البلوره فأن كل الكترون من الالكترونات تلك الذرات تعمل على استطارة جزء من الاشعه الساقطه بصوره متشاكهه وفي أتجاهات مختلفة وقد تساهم النواة في عملية الاستطاره ايضا وذلك حسب قانون ثومسون وذلك لكونها تحمل شحنة الا ان مساهمتها يمكن ان تهمل وذلك لكونها أثقل من الالكترون وان استجاباتها واهتزازها ضعيف جدا.
- أن سعة الموجه الكلية المستطاره التي يمكن ان ترصد عند نقطة معينة تساوي حاصل جمع سعات الموجات المستطاره والتي تقع جميعها في نفس الاتجاه.
- أن أول من درس ظاهرة الموجات المستطاره هو العالم لاوي Laue حيث استطاع ان يحصل على علاقة اتجاهات الموجات المستطيره الخارجة من البلوره بالنسبة للموجه الساقطه . وكذلك حصل على معادلات مكافئه لمعادلة براك أطلق عليها بمعادلات لاوي.

- نفرض أن موجه كهرومغناطيسيه مستوية تسقط على شبيكة بلوره صغيره ذات مجموعة من الشحنات النقطيه مرتبة بنظام وبشكل دوري ومحدده بالمتجهات a و b و c الشكل ادناه



- نفرض أن سعة الموجه الكهرومغناطيسيه E عند نقطة تبعد عن نقطة الأصل x
- $E(x) = A \exp[\, i\,(K \cdot x - \omega t)]$
- حيث ان K متجه الموجة ويساوي $\frac{2\pi}{\lambda}$ و λ الطول الموجي و ω التردد الزاوي و t الزمن و A سعة الموجة.
- لنفترض أن التفاعل بين الاشعه الساقطه والبلوره هو من النوع الخطي اي أن التردد الزاوي ′ω للموجة المستطيرة أو الحائدة يساوي التردد الزاوي ω للموجة الساقطة والعلاقة بين التردد الزاوي والطول الموجي لموجة ما في الفراغ تعطى بالعلاقة:
- $\omega = C K$
- حيث ان C سرعة الضوء
- لذا فعندما يكون $\omega = \omega'$ و $K = K'$ (تشتت مرن)
- يمكن التعبير عن موقع اية ذره في البلوره بمتجه صادر عن نقطة أصل مشتركة ان المتجه ρ_{mnp} يساوي:
- $\rho_{mnp} = ma + nb + pc$
- حيث ان m,n,p أعداد صحيحه ، وينطلق هذا المتجه من نقطة الاصل ويمر عبر نقاط الشبيكه داخل البلوره.
- في حالة التشتت المرن $|K| = |K'| = \frac{2\pi}{\lambda}$

- وللحصول على اقصى شده للموجة المستطيره من بلوره يجب أن تتحقق المعادلات الثلاث الاتيه أنيا لأية قيم موجبه أو سالبه من ضمنها الصفر للاعداد الصحيحه h k l

- $a.\Delta K = 2\pi h$
- $b.\Delta K = 2\pi k$
- $c.\Delta K = 2\pi l$

- هذه المعادلات تدعى بمعادلات لاوي للنهايات العظمى للحيود
- أن ΔK يعطى بالعلاقة التالية:

- ΔK=K-K’

- حيث ΔK يمثل التغير الأتجاهي لمتجه الموجة ويدعى متجه الحيود.
- K متجه جبهة الموجة الساقطة.
- K’ متجه جبهة الموجة المشتتة.
- يكون حل معادلات لاوي سهلا عندما تكون المحاور الاساسية للبلوره a,b,c متعامدة مع بعضها كما في أنظمة البلورات المكعبه والرباعية والمعينيه القائمة وعند ذلك يصبح الحل بالشكل:

- $\Delta K = 2\pi \left(\frac{h}{a} i + \frac{k}{b} j + \frac{l}{c} k \right)$

- حيث i,j,k تمثل وحدات المتجهات باتجاه محاور البلوره a,b,c
- أما أذا كانت محاور البلوره غير متعامده بعضها مع بعض فسيكون الحل أكثر تعقيدا من المعادلة اعلاه وذلك لانه في هذه الحاله a.b≠0 ولهذا نحتاج الى معرفة بعض المفاهيم الخاصة بالمتجهات في الفضاء المقلوب reciprocal space والشبيكة المقلوبة او المعكوسة reciprocal lattice.

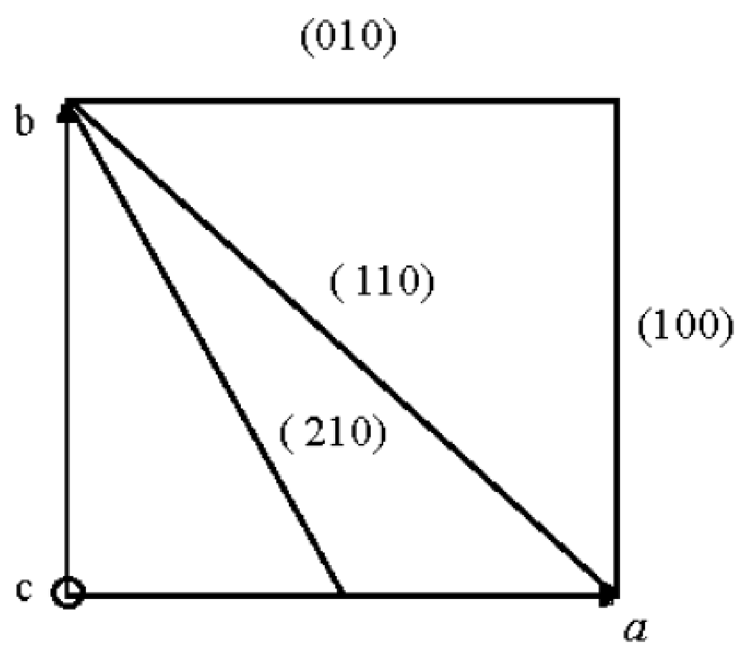
Reciprocal Lattice الشبيكة المقلوبة

- أن نظرية الشبيكه المقلوبة تعد من المفاهيم الاساسيه في علم البلورات وفي فيزياء الحاله الصلبة بحيث يمكن استخدامها للتعبير عن كل الظواهر التي تنتج من تفاعل الموجات في المواد الصلبة مثل الحيود والاستطاره وكذلك يمكن استعمال مفهوم الشبيكه المقلوبة في تفسير نظرية الحزم (Band theory) .
- أن حيود الاشعه السينيه تنتج من أستطارتها من الذرات الواقعة ضمن اي مجموعة من المستويات المتوازية في البلوره ، فعليه من الصعب عمليا تعقب معرفة مصدر كل أستطاره وذلك بسبب التداخل بين المستويات في البلوره فلاجل معرفة مصدر كل استطاره يمكن استخدام الشبيكة المقلوبة واظهار كل مجموعة من المستويات في البلوره بدلالة نقطة يطلق عليها بنقطة الشبيكة المقلوبة.
- تعد الشبيكة المقلوبة من الناحية الرياضية عبارة عن تحويلات فورير للشبيكة الحقيقية.تعتمد تحويلات فورير على نقاط أو موجات تعيد نفسها بشكل دوري . وبما أن المستويات البلورية في اي مجموعة من المستويات المتوازية تعيد نفسها بشكل دوري بمسافة بينية (d) فعليه يمكن تطبيق نظرية تحويلات فورير هنا وكذلك يمكن كتابة دالة فورير بالشكل:
- F(r+d)=F(r)
- أستطاع فورير أن يجزء هذه الداله الى مركبتين الاولى تدعى بالمركبه الجيبيه $\sin(\alpha r)$ ومركبة الجيب تمام $\cos(\alpha r)$ ويمكن كتابة الدالة بصيغة $\exp(i(\alpha r))$ حيث ان d المسافة البينية بين المستويات و n عددا صحيحا $\alpha=2\pi n/d$ حيث أن الداله النهائية والتي لها علاقة بالشبيكة المقلوبه هي :
- $F(r) = \int_{-\infty}^{\infty} f(n) \exp\left(\frac{2\pi n i r}{d}\right) dr$
- ففي الحقيقه جاءت تسمية الشبيكة المقلوبة من خلال المعادلة اعلاه حيث نرى ان المسافة d بين المستويات تظهر في المعادلة بصورة مقلوبة.

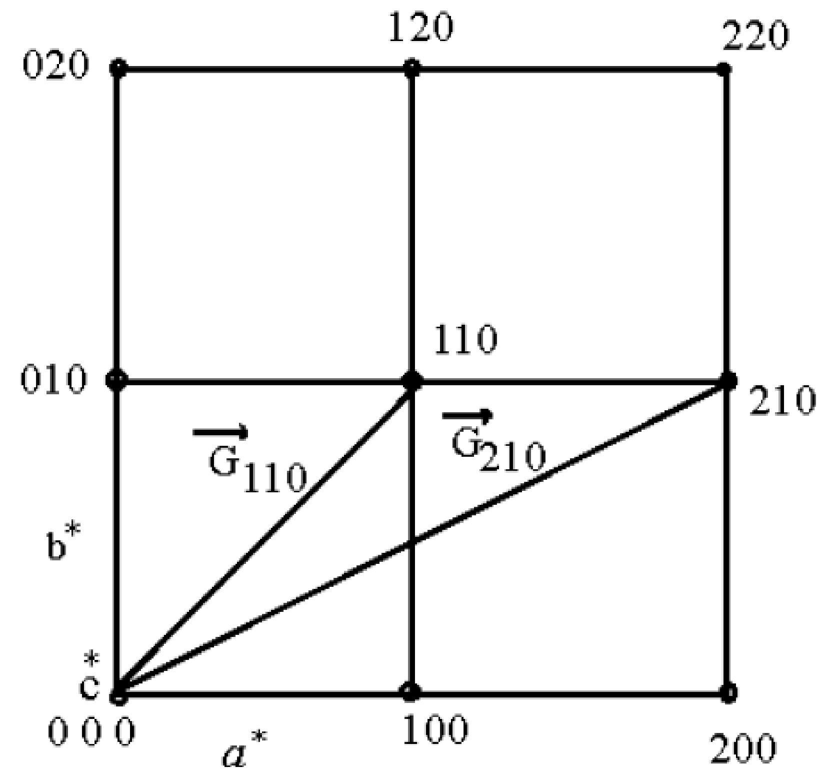
- لذا تعرف الشبيكة المقلوبة بأنها عدد غير محدود من نقاط مرتبه بنظام دوري في فضاء ثلاثي الابعاد بحيث أن الفسح بين هذه النقاط تتناسب عكسيا مع الفسح (المسافة البينيه) للمجاميع من السطوح في شبيكه اعتياديه او مباشره.
- أن كل مجموعة من السطوح في بلوره تمثل بمتجهات من نقطة الاصل لشبيكة مقلوبة ، وكل متجه عمودي على تلك المجموعة من السطوح المتجه التي يمثلها طوله يتناسب عكسيا مع الفسحة d لتلك المجموعة من السطوح وبعباره اخرى ، ان النقاط الواقعة عند نهايات تلك المتجهات العمودية تشكل نقاط الشبيكة المقلوبه للبلوره، تقاس أطوال المتجهات في الشبيكه المقلوبه بمقلوب وحدات المتجهات في الشبيكة المباشره كأن تكون A^{-1} او cm^{-1} او m^{-1}

كيفية رسم الشبيكة المقلوبة

- يبين الشكل ادناه مجموعة الخطوط المستقيمة التي تمثل المستويات ذات الأحداثيات (010) و (100) و (110) و (210) مرسومة في بعدين وتعود هذه المستويات الى خلية مكعبة عند النظر اليها على طول محورها c بينما محوراها الأخران a و b فلأجل تعيين مواقع نقاط الشبيكة المقلوبة التي تناظر هذه المستويات نتبع الخطوات التالية:
- ١- نرسم من نقطة الأصل المشتركة O احداثيات البلورة.
- ٢- نجد قيمة $\frac{1}{d_{hkl}}$ لكل مجموعة من المستويات المتوازي
- نرسم من نقطة الاصل عمود على المستوي ثم ضع نقطة على العمود تبعد عن نقطة الاصل بمسافة $\frac{1}{d_{hkl}}$



الشكل (3-4)



الشكل (3-5)

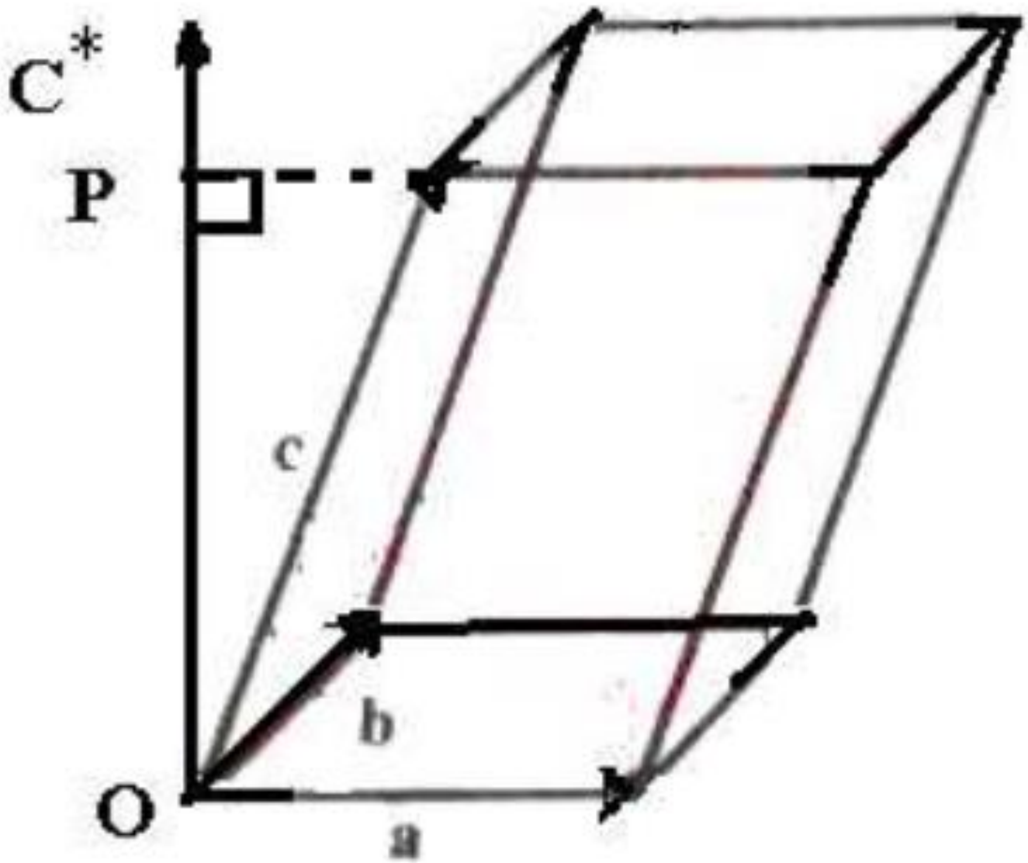
- أن أتجاه وطول المتجه الذي يربط نقطة الاصل بأية نقطة يميز توجه وفسحة تلك المجموعة من السطوح التي تمثلها النقطة . أن مثل هذا المتجه يسمى بمتجه الشبيكة المقلوبة وسنرمز له بالرمز G ولذلك تكون قيمة G

$$\left|\overrightarrow{G}\right| = A\ \frac{1}{d_{\mathbf{hkl}}}$$

- حيث ان A يمثل عامل مقياس الرسم وقيمته اما واحد او 2π

Reciprocal lattice vectors متجهات الشبيكة المقلوبة

- يمكن تحديد الشبيكة المباشرة (الحقيقية) في فضاء حقيقي بالمحاور الاساسية a,b,c كما يمكن تحديد الشبيكة المقلوبة بمحاور أساسية أخرى ، تعرف المتجهات الاساسية للشبيكة المقلوبة a^*,b^*,c^* بدلالة المتجهات الاساسية للشبيكة a,b,c
- ولاجل أشتقاق العلاقة بين المتجهات الاساسية للشبيكة الحقيقيه و متجهات الشبيكة المقلوبة ، نفرض لدينا وحدة خلية في نظام ثلاثي الميل ذات محاورأساسية a,b,c والمبينة بالشكل ادناه



C*
P
c
b
O
a

- ان حجم هذه الخلية يساوي مساحة القاعدة التي اضلاعها a وb مضروبا في أرتفاع الخلية الذي يمثل op ويعادل d_{001} أي أن الحجم يساوي [الحجم = (d_{001}) ٠المساحة]أن العلاقة بين المساحة والحجم يمكن ان تكتب التالي:

- $$\frac{\text{المساحة}\ Area}{\text{الحجم}\ Volume} = \frac{1}{d_{001}}$$

- وبموجب الجبر الاتجاهي يمكن تمثيل العمود على السطح بوحدة قيمة $\bar{n}$ وعليه يمكن كتابة متجه الشبيكة المقلوبة $\bar{G}$

- $$G = A\frac{1}{d_{001}}n$$

- أما مساحة القاعدة فيمكن التعبير عنها بالضرب الاتجاهي لضلعيها ، أما الحجم فيعبر عنه بحاصل ضرب المتجهات a,b,c فتصبح المعادلة:

- $$\frac{1}{d_{001}}n = \frac{a\times b}{a.b\times c}$$

- $$G_{001} = 2\pi\frac{a\times b}{a.b\times c}$$

- وبنفس الطريقة يمكن التعبير عن $\bar{G}_{010}$ و $\bar{G}_{100}$ اي ان:

- $$G_{010} = 2\pi\frac{cxa}{a.b\times c}$$

- $$G_{100} = 2\pi\frac{bxc}{a.b\times c}$$

- وقد جرت العادة التعبير عن $\bar{G}_{100}$ بـ $\overline{a}^*$ و G_{010} بـ $\overline{b}^*$ و G_{001} بـ $\overline{c}^*$
- $a^* = G_{100} = 2\pi \frac{b\times c}{a.b\times c}$
- $b^* = G_{010} = 2\pi \frac{c\times a}{a.b\times c}$
- $c^* = G_{001} = 2\pi \frac{a\times b}{a.b\times c}$
- من المعادلات اعلاه نجد ان a^* عموديا على b,c و b^* عموديا على a,c و c^* عموديا على b,c كما يمكن استنتاج المعادلات التالية:
- $a^*.a=2\pi$, $a^*.b=0$, $a^*.c=0$
- $b^*.b=2\pi$, $b^*.a=0$, $b^*.c=0$
- $c^*.c=2\pi$, $c^*.a=0$, $c^*.b=0$

- أن تحديد مواقع نقاط الشبيكة الحقيقيه بواسطة المتجهات الانتقالية البدائية a,b,c وبهذا يكون المتجه الأنتقالي:
- $\bar{R}=n_1\bar{a}+n_2\bar{b}+n_3\bar{c}$
- وبنفس الطريقة يمكن تعريف موقع اي نقطة في الشبيكة المقلوبة بمتجه الشبيكة المقلوبة $\bar{G}_{hkl}$ بدلالة اعداد صحيحة hkl لمحاور الشبيكة المقلوبة $\bar{a}^*$ و $\bar{b}^*$ و $\bar{c}^*$
- $\bar{G}_{hkl}=h\,\bar{a}^*+k\,\bar{b}^*+l\,\bar{c}^*$
- هذا يعني ان الوصول الى نقطة ما في الشبيكة المقلوبة مثل hkl يتطلب h من الوحدات باتجاه $\bar{a}^*$ و k من الوحدات باتجاه $\bar{b}^*$ و l من الوحدات باتجاه $\bar{c}^*$.

- س: جد المتجهات الأساسية للشبيكة المقلوبة لشبيكة المكعب البسيط و لمتمركزة الجسم و لمتمركزة الوجوه.
- For Simple Cubic
- $\bar{a}$=ai
- $\bar{b}$=bj
- $\bar{c}$=ck
- $a^* = 2\pi \frac{b\times c}{a.b\times c} = 2\pi \frac{a^2 i}{a^3} = \frac{2\pi}{a} i$
- $b^* = 2\pi \frac{c\times a}{a.b\times c} = 2\pi \frac{a^2 j}{a^3} = \frac{2\pi}{a} j$
- $c^* = 2\pi \frac{a\times b}{a.b\times c} = 2\pi \frac{a^2 k}{a^3} = \frac{2\pi}{a} k$
- نستنتج مما تقدم ان الشبيكة المقلوبة للمكعب البسيط هو مكعب بسيط ايضا وبثابت شبيكة $\frac{2\pi}{a}$.

- جد المتجهات الاساسية للشبكة المقلوبة لشبكة المكعب المتمركز الجسم BCC حيث ان:

$$\vec{a} = \frac{a}{2}(\hat{\imath} + \hat{\jmath} - \hat{k}) \quad , \quad \vec{b} = \frac{a}{2}(-\hat{\imath} + \hat{\jmath} + \hat{k}) \quad , \quad \vec{c} = \frac{a}{2}(\hat{\imath} - \hat{\jmath} + \hat{k})$$

- $a^* = 2\pi \frac{b\times c}{a.b\times c}$

- $b \times c = \frac{a}{2}(-i + j + k) \times \frac{a}{2}(i - j + k) = \frac{a^2}{4}\begin{vmatrix} i & j & k \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{vmatrix} = \frac{a^2}{4}(2i + 2j)$

$= \frac{a^2}{2}(i + j)$

- $a.b \times c = \frac{a}{2}(i + j - k).\frac{a}{2}(-i + j + k) \times \frac{a}{2}(i - j + k) = \frac{a}{2}(i + j - k).$
$\frac{a^2}{2}(i + j) = \frac{a^3}{4}(1 + 1 + 0) = \frac{a^3}{2}$

- $a^* = 2\pi \frac{\frac{a^2}{2}(i+j)}{\frac{a^3}{2}} = \frac{2\pi}{a}(i + j)$

- بنفس الطريقة

- $b^* = 2\pi \frac{\frac{a^2}{2}(j+k)}{\frac{a^3}{2}} = \frac{2\pi}{a}(j + k), c^* = 2\pi \frac{\frac{a^2}{2}(k+i)}{\frac{a^3}{2}} = \frac{2\pi}{a}(k + i)$

- اي ان وحدة الخلية في الشبيكة المقلوبة للمكعب المتمركز الجسم ايضا مكعب ولكنه متمركز الاوجه وطول ضلعه $\frac{2\sqrt{2}}{a}\pi$ $|\boldsymbol{a}|.$