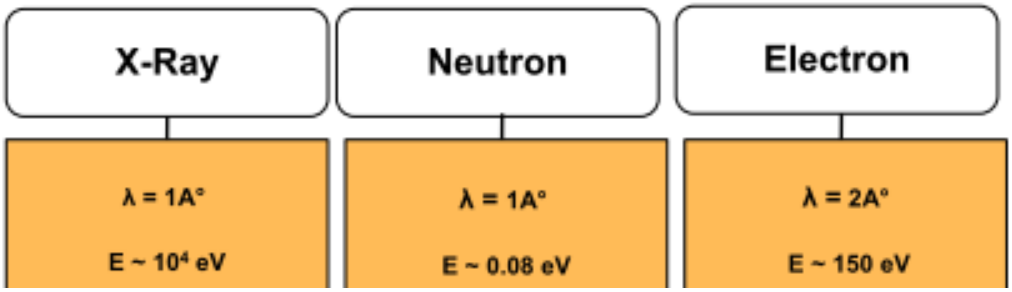
الفصل الثاني: الحيود في البلورات

١-مقدمة:

تناولنا في الفصل السابق موضوع الشبيكات البلورية حيث تبين ان اهم صفة للبلورة هي صفة التماثل الانتقالي مما يستوجب ان تكون جميع الخصائص البلورية خصائصاً دوريةً تكرر نفسها وفقا للاتجاهات البلورية المختلفة المحددة بمتجه في الشبيكة البلورية.

سنتطرق في هذا الفصل الى موضوع دورية الشبيكة وكيفية تعيين الشكل البلوري من خلال انموذج حيود الاشعة الساقطة على البلورة. يحدث الحيود فقط في اتجاهات محددة تماما مثلما يحدث للضوء بواسطة محزز الحيود. و من قياس اتجاهات الحيود وشدة الاشعة المحادة، يمكن الحصول على معلومات مفيدة لدراسة التركيب البلوري المسبب للحيود.

تستخدم ثلاثة انواع من حزم الاشعة لدراسة الحيود:



١-الاشعة السينية.

٢-حزم النيوترونات.

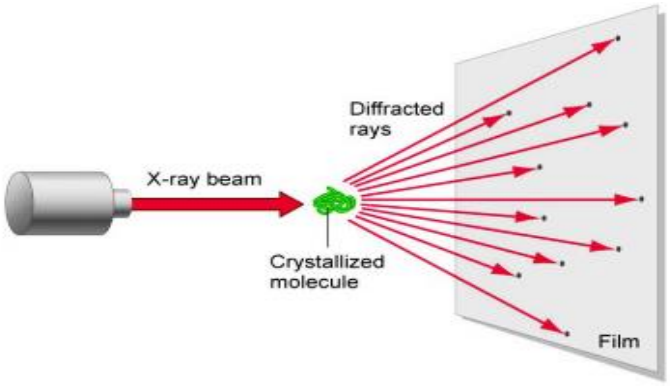
٣-حزم الالكترونات.

تكون المعالجة الرياضية للانواع الثلاثة متشابهة تقريبا و لذلك سوف نفحص بالتفصيل حالة الاشعة السينية فقط.

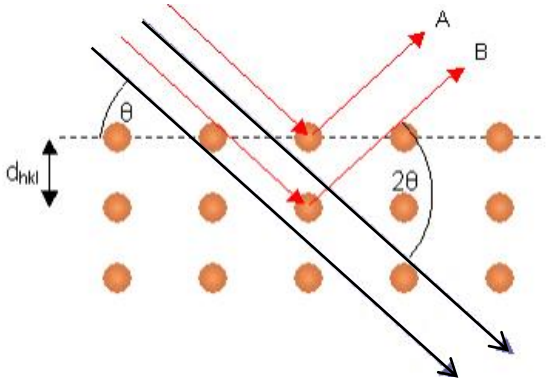
يتم التعامل مع الجسيمات المادية وفقاً لفرضية دي برولي (اي انها ذات طبيعة مزدوجة جسيم + موجة) ويتعين الطول الموجي بالعلاقة التالية:

—

ان شرط حيود الاشعة اثناء اختراقها للبلورة، هو ان يكون طولها الموجي مقاربا للمسافة البينية بين ذرات البلورة، اي بحدود اطوال المتجهات الاساسية a,b,c.



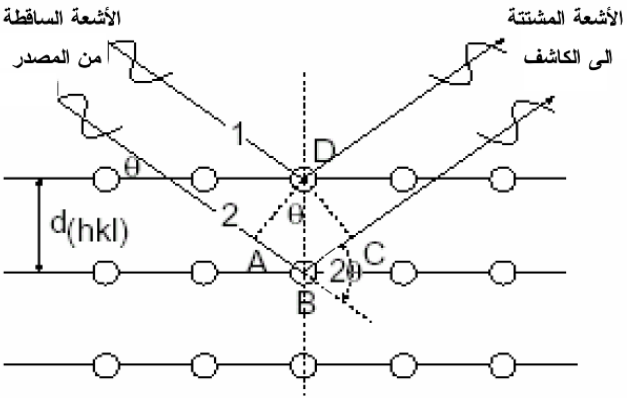
٢-حيود الاشعة السينية وقانون براغ:



الشكل المجاور يبين مقطع من بلورة مكونة من مستويات متوازية و المسافة العمودية الفاصلة بين المستويات هي d_{hkl} . سقوط اشعة سينية متوازية بزاوية مقدارها θ على المستويات الذ المفترض انها تخترق الطبقات (المستويات) المختلفة. لكن في الواقع ان دخول الاشعة الى اعماق البلورة يؤدي الى ظهور كم هائل من الاشعة المنعكسة عن المستويات الذرية، القسم الاكبر منها تضعف شدته نتيجة لعمليات التداخل الاتلافي والقسم الاخر تزداد شدته نتيجة التداخل البنّاء **الذي يتحقق عندما يكون فرق المسار Δ بين الاشعة الساقطة والمنعكسة يساوي عدداً صحيحاً من طول الموجة الساقطة λ .**

$$\Delta = n\lambda \quad , \quad n = 1, 2, 3, \ldots..$$

كان براغ Bragg اول من وضع شروطاً هندسية يجب ان تتحقق لكي يحدث الحيود في البلورة. حيث اعتبر شعاعاً احادي الطول الموجي من الاشعة السينية يسقط على البلورة وكما موضح في الشكل التالي:



ان الذرات التي هي مراكز التشتت لمجموعة المستويات المتوازية يعمل كل منها كمرآة تعكس الاشعة.

لكي تتداخل الاشعة تداخلاً بناءاً يجب ان تكون في طور واحد، يعني تمتلك نفس جبهة الموجة بعد مغادرتها سطح

البلورة، يعني ان تكون الاشعة الساقطة والمنعكسة بنفس الطور. و من الشكل اعلاه يتضح ان هناك فرقاً بين مسارات الاشعة (الشعاعين 1 و 2) ولكي نحصل على التداخل البناء يجب ان يكون هذا الفرق مساوياً الى مضاعفات صحيحة للطول الموجي. يمكن توضيح ذلك من الرسم اعلاه وكما يلي:

ننزل عمود من النقطة D على الشعاع رقم2 عند النقطة A لكي نحصل على جبهة موجة موّحدة للشعاعين 1 و 2. كذلك ننزل عمود من النقطة D الى النقطة C الواقعة على الشعاع رقم 2 المنعكس من النقطة الذرية B لكي نحصل على جبهة موجة مشتركة للشعاعين المنعكسين. وبذلك نحصل على المثلثين ABD و CBD القائمة الزاوية في A و C. وعليه فأن، فرق المسار بين الشعاعين 1 و 2 هو:

$$\Delta = \overrightarrow{AB} + \overrightarrow{BC} = n\,\lambda$$

$$\sin\theta = \frac{\left|\overrightarrow{AB}\right|}{d} \quad and \quad \sin\theta = \frac{\left|\overrightarrow{BC}\right|}{d} \Rightarrow \left|\overrightarrow{AB}\right| = \left|\overrightarrow{BC}\right| = d \quad \sin\theta$$

$$\Delta = 2\left|\overrightarrow{AB}\right| = 2\,d \quad \sin\theta \Rightarrow \boxed{2\,d \quad \sin\theta = n\,\lambda}$$

العلاقة اعلاه تمثل قانون براغ لحيود الاشعة السينية.

من تعريف معاملات ميلر، تكون المستويات (nh nk nl) موازية للمستويات (hkl) ولكن بمسافات بينية اكبر بمقدار مساوٍ لرتبة الحيود n ، لذا يمكن اعتبار الانعكاس من اي مرتبة = الانعكاس من المرتبة الاولى (n=1) بدلالة المسافة البينية $\boldsymbol{d = d_{hkl}}$ ، وعليه يمكن كتابة قانون براغ كالاتي:

$$\boxed{2\,d_{hkl}\sin\theta = \lambda}$$

ان **شرط الحيود لبراغ** هو: الطول الموجي للاشعة الساقطة على احد المستويات البلورية، **اصغر من او يساوي** ضعف المسافة البينية d_{hkl} لأي مستويين متتالين، اي ان :

$$\boxed{\lambda \leq 2\,d_{hkl}}$$

ملاحظات على قانون براغ:

١- عندما $n=1$ فان الفرق في المسار $\Delta = n\lambda$ للشعاعين المنعكسين يساوي طول موجي واحد، اي ان الانعكاس حدث من المستويين الاول و الثاني. وعندما $n=2$ فان الفرق في المسار $\Delta = n\lambda$ للشعاعين المنعكسين يساوي 2λ، اي ان الانعكاس حدث من المستويين الاول و الثالث. وهكذا ...

٢-لطول موجي معين و قيمة محددة لـ d هناك قيم متعددة لزوايا السقوط $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \ldots$ و التي تحقق شرط الحيود من مراتب مختلفة، لكل قيمة n هناك قيمة لـ θ_n .

٣-ان المسافة البينية d_{hkl} للمستويات الذرية لاغلب المواد هي بحدود طول موجة الاشعة السينية ، تقريبا 3 انجستروم او اقل من ذلك. لذا فان الطول الموجي يجب ان يكون اقل من او يساوي 6 انجستروم.

٤-للحصول على انعكاسات براغ من مستويات ذات معاملات ميلر كبيرة، نحتاج الى اشعة سينية ذات اطوال موجية قصيرة (اشعة ذات طاقات عالية).

٥-يمكن حساب الطول الموجي لفوتون الاشعة السينية كما يلي:

$$E = \frac{h\,c}{\lambda} \ldots\ldots \qquad \Rightarrow \quad \lambda = \frac{12.4 \quad (A^o.KeV)}{E \qquad (KeV)} \qquad (H.W)$$

طاقة فوتون الاشعة السينية تكون بحدود (10 – 50 KeV) و تعطي طول موجي بحدود(0.4 – 1.2 A^o).

س/ لدراسة الحيود في البلورات هل نستطيع استخدام الاشعة فوق البنفسجية بدلا عن الاشعة السينية ؟ و لماذا ؟

ج/ لا يمكن استخدام الاشعة فوق البنفسجية لدراسة الحيود في البلورات. لان طولها الموجي كبير جدا (500 انجستروم) ولا يحقق شرط براغ للحيود. و كذلك لا يمكن استخدام الضوء المرئي.

<u>معرفة نمط الحيود (زاوية الحيود وشدة الاشعة المحادة):</u>

يمكن إيجاد علاقة لمعرفة زاوية الحيود من خلال العلاقة بين ثوابت الشبيكة والمسافة البينية للمستويات بدلالة معاملات ميلر، وكما يلي:

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$$

ومن شرط براغ للحيود $2\,d_{hkl}\sin\theta = \lambda$ فان:

$$\lambda = \frac{2\sin\theta}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2}+\frac{k^2}{b^2}+\frac{l^2}{c^2}}}$$

وعليه فان

$$\boldsymbol{\sin\theta = \frac{\lambda}{2}\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$$

ولحالة الخلية المكعبة $a=b=c$:

$$\sin\theta = \frac{\lambda}{2a}\sqrt{h^2+k^2+l^2}$$

ولطول موجي معين وثابت شبيكة معين فان العلاقة أعلاه تعطي فكرة عن جميع زوايا الحيود للمستويات (hkl)

$$\theta_{hkl} = sin^{-1}\left(\frac{\lambda}{2a}\sqrt{h^2+k^2+l^2}\right)$$

==========

مثال 1: بلورة الرصاص تتبلور بشكل مكعب متمركز الأوجه، ثابت الشبيكة a=4.93 A° احسب زاوية الحيود للمستويات (111) ,(110)، في حال اسقطت عليها اشعة سينية ذات طول موجي 0.152 nm

الحل:

$$\theta_{hkl} = sin^{-1}\left(\frac{\lambda}{2a}\sqrt{h^2+k^2+l^2}\right)$$

$$\theta_{111} = sin^{-1}\left(\frac{0.152\times10^{-9}}{2\times4.93\times10^{-10}}\sqrt{1+1+1}\right)$$

$$\theta_{111} = sin^{-1}\left(\frac{1.52}{2\times4.93}\times\sqrt{3}\right) = \sin^{-1}0.267 = 15.5^o$$

$$\theta_{110} = sin^{-1}\left(\frac{1.52}{2\times4.93}\times\sqrt{2}\right) = \sin^{-1}0.218 = 12.6^o$$

==========

مثال 2: احسب ثابت الشبيكة لبلورة مكعبة سقطت عليها اشعة سينية ذات طول موجي 1.54 A° بزاوية 11.1^o فحققت انعكاسات (حيود براغ) من الرتبة الاولى من المستوي (110).

الحل: يمكن الحل بطريقتين: الاولى من قانون براغ(H.W) والطريقة الثانية من علاقة جيب الزاوية وكما يلي:

$$\sin\theta = \frac{\lambda}{2a}\sqrt{h^2+k^2+l^2}$$

$$a = \frac{\lambda}{2\ \sin\theta}\sqrt{h^2+k^2+l^2} = \frac{1.54\ A^o}{2\ \sin 11.1^o}\sqrt{1^2+1^2+0} = 4\sqrt{2}\ A^o = 5.67\ A^o$$

ملاحظة: في المثالين السابقين (1 و 2) نلاحظ ان شرط الحيود متحققاً من خلال العلاقة $\lambda \leq 2\, d_{hkl}$. حيث في المثال الاول كان الطول الموجي $1.52\ A^{o}$ و المسافة البينية بين المستويات $2.85\ A^{o}$ و في المثال الثاني كان الطول الموجي $1.54\ A^{o}$ و المسافة البينية $4.01\ A^{o}$

==========

٣-الطرق التجريبية لحيود الاشعة السينية من المستويات البلورية

في هذه الفقرة سنوضح كيف يمكن استخدام تقنية حيود الاشعة السينية للاغراض التالية:

١-التعرف على التراكيب البلورية للمواد.

٢-تعيين ثابت الشبيكة.

٣-التعرف على المستويات و الاتجاهات في البلورة.

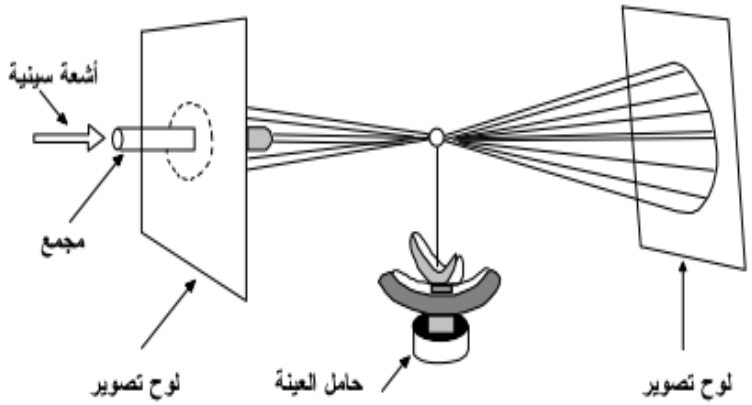
ان المبدأ الاساس في الطرق التجريبية هو تطبيق قانون براغ للحيود $\lambda = 2\, d_{hkl} \sin\theta$ ، حيث يمكن تحقيقه بأخذ قيمة محددة للمسافة البينية d_{hkl} والتحكم بتغيير الطول الموجي تارةً و زاوية سقوط الاشعة تارةً اخرى. اي ان جميع الطرق المختبرية مبنية على اساس تثبيت احد المتغيرين (λ, θ) و تغيير قيمة الاخر. ومن اهم هذه الطرق التجريبية هي:

١- طريقة فون لاوي

هي طريقة سريعة ومجدية لكشف توجهات البلورة و كشف العيوب البلورية، حيث تتعرض البلورة الى حزمة من الاشعة السينية البيضاء و بطيف مستمر يتراوح بين $0.2\text{-}3\ A^{o}$ لتغطية كافة الاحتمالات الممكنة للابعاد الذرية (ثابت الشبيكة و المسافة البينية) اذ ان كل مستوي انعكاس للبلورة يختار طولاً موجياً متناسباً مع الابعاد الذرية للمستوي بحيث يتحقق شرط و قانون براغ للحيود.

الهدف من هذه الطريقة: تحديد التناظر واتجاه المستويات في البلورة المفردة المعلومة التركيب والتعرف على مستويات او اتجاهات معينة، كما و تستخدم احيانا في تحديد التشوهات والعيوب التي تنشأ عند المعالجة الحرارية او الميكانيكية للبلورات.

الطريقة:



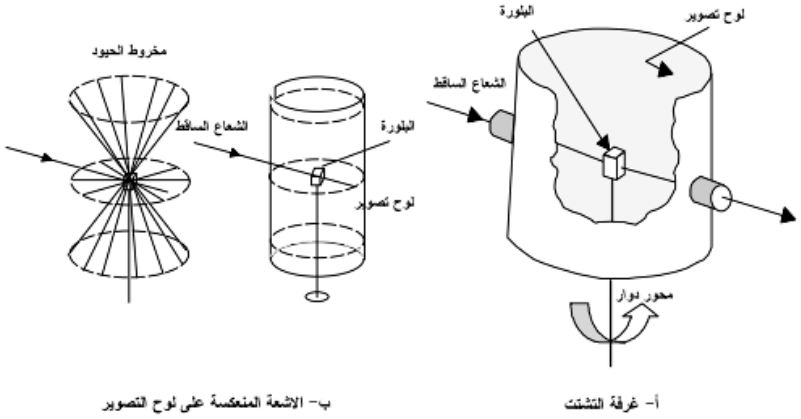
تسلط الاشعة السينية على العينّة (البلورة) باتجاه ثابت و يوضع غشاء فوتوغرافي مسطح واحد في طريق الاشعة أمام البلورة و لوح اخر خلف البلورة.

حزمة الاشعة الساقطة تغطي مجالاً واسعاً من الاطوال الموجية، لذلك فأن لكل مجموعة من المستويات البلورية المتوازية (d_{hkl}) طولاً موجياً ملائماً لتحقيق قانون براغ للحيود بزاوية θ_{hkl}. و نتيجة للانعكاسات من كافة مجاميع المستويات المتوازية، سيظهر نموذج الحيود والذي يكون بهيئة بقع (تلطخات) على اللوح الفوتوغرافي خلف البلورة.

==========

٢- طريقة البلورة الدوراة Rotating Crystal Method

في هذه الطريقة، يتم استخدام بلورة احادية صغيرة ابعادها بحدود 1mm مثبته على محور يكون عمودياً على اتجاه الاشعة السينية احادية اللون، يدور المحور حول نفسه بسرعة زاوية ω. توضع البلورة بحيث يكون احد متجهاتها الاساسية (مثلاً a) موازياً لمحور الدوران. ويثبت لوح تصوير لاستقبال الاشعة المنعكسة على السطح الداخلي لغرفة التشتت الاسطوانية. انظر الشكل التالي:

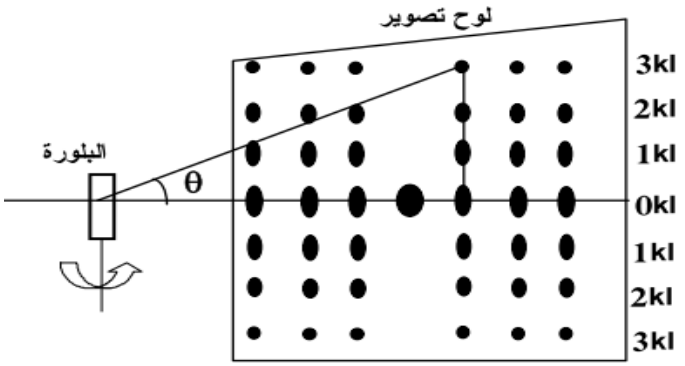


ب- الاشعة المنعكسة على لوح التصوير

أ- غرفة التشتت

الطريقة: عند سقوط الاشعة السينية على البلورة، فانها تنعكس من المستويات البلورية المتوازية مكونة اشكال مخروطية فوق و تحت خط الاتزان للبلورة، مكونة بذلك نماذج حيود بهيئة بقع على لوح التصوير.

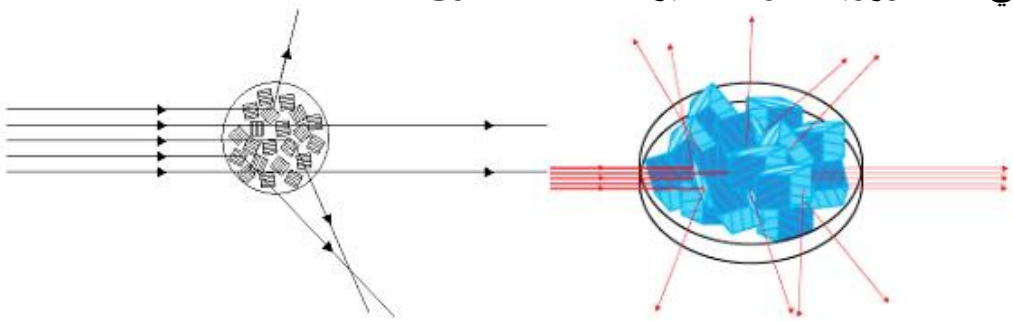
الشعاع المستخدم: اشعة سينية احادية الطول الموجي (λ ثابتة) و θ متغيرة، وبما ان لكل زاوية انعكاس يوجد d_{hkl} لذلك فانه يعتبر متغيراً ايضاً. غالباً ما يستعاض عن تدوير البلورة بتغيير زاوية سقوط الاشعة الساقطة على البلورة والحصول على نفس النتائج.



٣- طريقة المسحوق (طريقة ديباي – شرر)

تستخدم هذه الطريقة تجمع اكبر عدد ممكن من البلورات في مكان واحد و تصبح كل بلورة مصدرا لتحقيق قانون براغ وذلك من خلال الحصول على العديد من الانعكاسات وبالتالي الحصول على العديد من نماذج الحيود (التي تمثل الابعاد البلورية). يستخدم في هذه الطريقة الافلام التي تصور كافة الحالات المتحقق فيها شرط الحيود.

الشعاع المستخدم: طول موجي ثابت وزاوية سقوط متغيرة بسبب المسحوق.



٤- طرق تجريبية اخرى:

بعد فرضية دي برولي ظهرت الحاجة الى تقصي حقيقة الموجة المرافقة للجسيم المادي ولهذا الغرض اجريت تجارب هدفها الحصول على طول الموجة المرافقة للجسيم وذلك من معرفة البعد بين ذرات البلورة. و بعد ذلك استخدمت تلك الجسيمات في دراسة البنية البلورية للأجسام الصلبة ، ومن هذه الطرق:

١-تجارب دافيسون – جيرمر على الالكترونات.

٢-تجارب ثومسون على الالكترونات.

٣-تجارب حزم النيوترونات عالية الدقة و كذلك حزم من الذرات عبر قنوات خاصة في المفاعلات النووية والمعجلات (المسرعات).

ملاحظات:

١-احيانا تستخدم عدادات الكترونية لتسجيل طيف الحيود وجهاز راسم بدل الواح التصوير.

٢-للحصول على طول موجي احادي اللون، توضع بلورة تعمل كمرشح في طريق الاشعة السينية الساقطة.

٣-يمكن استخدام طريقة تدوير البلورة وطريقة المسحوق معاً وذلك بأن يوضع المسحوق (مجاميع من البلورات) داخل كبسولة التجربة وتدوير الكبسولة.

٤-ممكن المقارنة بين الطرق كما يلي:

ت	الطريقة المستخدمة	الطول الموجي	زاوية سقوط الاشعة
١	طريقة لاوي	متغير	ثابتة
٢	طريقة تدوير البلورة	ثابت	متغيرة جزئيا
٣	طريقة المسحوق	ثابت	متغيرة

مثال: اشعة سينية ذات طول موجي $1.5\ A^o$ تنعكس من المستويات (222) في بلورة مكعبة بثابت شبيكة $a=5\ A^o$ ، احسب زاوية براغ.

الحل:

$$\boldsymbol{\theta_{hkl} = sin^{-1}\left(\frac{\lambda}{2a}\sqrt{h^2+k^2+l^2}\right)}$$

$$\theta_{222} = sin^{-1}\left(\frac{1.5\times10^{-10}}{2\times5\times10^{-10}}\sqrt{2^2+2^2+2^2}\right) = sin^{-1}\left(\frac{1.5}{10}\sqrt{12}\right)$$

$$= sin^{-1}(0.52) = 31.3^o$$

للاستفادة: ممكن حساب المسافة البينية و مقارنتها بالطول الموجي.

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \Rightarrow\ d_{222} = \frac{5}{\sqrt{2^2+2^2+2^2}} = \frac{5}{\sqrt{12}} = 1.44\ A^o$$

حيث شرط الحيود متحققاً $\lambda(=1.5) < 2d_{222}(=2.88)$

٥-حيود الالكترونات

لقد اشرنا سابقا بان هناك أنواعا أخرى من الحزم إضافة الى الاشعة السينية استخدمت لفحص التركيب البلوري مثل: الحزم الالكترونية والحزم النيوترونية. ومن متطلبات الحزم المستخدمة لدراسة البلورات:

أولا: يجب ان يكون لها خاصية موجية وذلك لتداخل الحزم الحايدة بصورة متشاكهة وإعطاء معلومات عن تركيب المادة.

ثانيا: ان الطول الموجي للحزمة المستخدمة يجب ان يكون مقاربا من طول ثابت الشبيكة للبلورة.

والحزمة الالكترونية تملك هاتين الخاصيتين. فعند سقوط الحزمة الالكترونية على البلورة فانها تعاني انعكاس براك وتطبق عليها نفس القوانين المطبقة للاشعة السينية.

الالكترونات تمتلك خاصية موجية وان طاقتها تتناسب عكسيا مع مربع طول موجتها وفق العلاقة:

$$E = \frac{h^2}{2m_e\lambda^2}$$

حيث m_e كتلة الالكترون المستقر ويمكن كتابة المعادلة بالشكل التالي: $\lambda = \frac{12}{\sqrt{E(eV)}}$

ان التفاعل المسؤول عن استطارة الالكترونات هو التفاعل الناتج بين الالكترونات والمجال الموجود حول كل ذرة داخل المادة الصلبة، ومنشأ المجال حول الذرة هو نواة الذرة او الالكترونات المدارية. وبما ان الالكترونات جسيمات مشحونة فانها تتفاعل بشدة مع المواد وتخترقها مسافة قصيرة نسبيا داخل سطح المادة وهذا يجعل دراسة تركيب المواد الصلبة بواسطة الحزمة الالكترونية مقتصرا على سطح المعادن والاغشية الرقيقة مثل:

١-دراسة سطوح المعادن او السبائك في الصناعات.

٢-دراسة العناصر الخفيفة العالقة على سطوح المعادن الثقيلة مثل الاوكسجين والهيدروجين على سطح النيكل وغيرها.

٣-دراسة الاهتزازات الحرارية للذرات في سطوح المعادن.

٤-دراسة التاكل والتقشيط وتأكسد سطوح المعادن واشباه الموصلات.

٦-حيود النيوترونات:

يتم الحصول على النيوترونات الحرارية ذات موجة أحادية التردد عادة في قناة من اقنية المفاعل النووي لأغراض دراسات الحيود. وطاقة النيوترون تتناسب عكسيا مع مربع طول موجته وفق العلاقة:

$$E = \frac{h^2}{2m_n\lambda_d^2}$$

حيث m_n كتلة النيوترون المستقر ويمكن كتابة المعادلة بشكل الوحدات مختبرية: $\lambda = \frac{0.28}{\sqrt{E(eV)}}$

ويستخدم جهاز يسمى المحيد النيوتروني *Neutron Diffraction* لدراسة الحيود في البلورات.

يفضل دراسة البلورات بواسطة حيود النيوترونات على دراستها بواسطة الاشعة السينية للأسباب الاتية:

١-يمكن دراسة الجزيئات الخفيفة مثل الهيدروجين بواسطة حيود النيوترونات بدقة كبيرة، بينما تكون دراسة هذه العناصر الخفيفة بالأشعة السينية مفتقرة الى الدقة بسبب قلة الالكترونات في مدارها الخارجي.

٢-من خلال دراسة الحيود بالنيوترونات بالامكان التمييز بين النظائر المختلفة الموجودة في تركيب الصلب بينما لا يمكن تمييز ذلك بالأشعة السينية.

٣-من اهم تطبيقات حيود النيوترونات، هي دراسة الخواص المغناطيسية للمواد الصلبة المغناطيسية وبدرجة كبيرة من الدقة حيث يمتلك النيوترون خاصية البرم وكذلك الالكترونات لها برما مغناطيسيا، وعليه تستطيع النيوترونات الاستطارة مغناطيسيا. لذا يمكن استخدامها للكشف عن نوع المغناطيسية في البلورات.

٤-حيود النيوترونات يعطي معلومات ادق من الاشعة السينية عند استخدامها لدراسة اهتزاز الشبيكة للبلورات.

ان الصعوبة التي ترافق تقنية حيود النيوترونات هي، حاجتها الى وجود مفاعلات نووية والتي من الصعوبة توفرها في كثير من المختبرات. وكذلك وبسبب كون النيوترونات جسيمات متعادلة فان الكشف عنها اصعب من الالكترونات والاشعة السينية.

==========

٧-الشبيكة المقلوبة Reciprocal Lattice

عندما ننظر الى البلورة بطريقة مباشرة فاننا نشاهد البنية البلورية الحقيقية، وهذا يختلف عما نحصل عليه من الاشعة السينية المنعكسة (المحادة/ المشتتة) حيث تستقبل هذه الاشعة على لوح تصوير فوتوغرافي بعد حيودها من البلورة و تعطي صورة عبارة عن بقع او نقاط تمثل الشبيكة المقلوبة. اي ان:

الصورة المجهرية للبلورة = بُنية الشبيكة الحقيقة

صورة نموذج الحيود من البلورة = بُنية الشبيكة المقلوبة

الشبيكة المقلوبة: هي من المفاهيم الاساسية في علم البلورات و تستخدم للتعبير عن كل الظواهر التي تنتج من تفاعل الموجات مع المواد الصلبة البلورية، مثل الحيود و الاستطارة و نظرية الحزم وغيرها.

في تجربة حيود براغ للاشعة السينية ان الاشعة تنعكس من المستويات الواقعة ضمن مجموعة ما من المستويات البلورية المتوازية ومن الصعب تعقب مصدر كل استطارة من اي مستوٍ حدثت، لذلك يستخدم مفهوم الشبيكة المقلوبة لإظهار كل مجموعة متوازية من المستويات بدلالة نقطة واحدة (تسمى نقطة الشبيكة المقلوبة) تمثل العمود على تلك المستويات و**طول هذا العمود يساوي مقلوب المسافة البينية** بين تلك المستويات. وبالتالي يمكن مقارنة نموذج الفلم الفوتوغرافي ذي البقع السوداء مع النموذج النظري للشبيكة المقلوبة والذي هو عبارة عن تحويلات فورير للشبيكة الحقيقة.

تعتمد تحويلات فورير على نقاط او موجات تعيد نفسها بشكل دوري، وبما ان المستويات البلورية المتوازية تعيد نفسها بشكل دوري بمسافة بينية d، لذلك كتابة دالة فورير لأي مستوٍ بالشكل التالي:

$$F(r) = F(r + d)$$

وكما هو معلوم، ان دالة فورير تتكون من مركبتين : $\sin(\alpha\, r)$ و $\cos(\alpha\, r)$، لذلك يمكن كتابة دالة فورير بالشكل $e^{i\,\alpha\, r}$ حيث ان $\alpha = \frac{2\,\pi\, n}{d}$ و n عدد صحيح. فالشكل النهائي لدالة فورير للشبيكة المقلوبة:

$$F(r) = \int f(r) e^{i\frac{2\,\pi\, n}{d} r} dr$$

في الحقيقة ان تسمية الشبيكة المقلوبة كما وضحناها في اعلاه، ايضا تظهر هنا حيث نرى ان d يظهر بصورة مقلوبة (في المقام) في المعادلة اعلاه. و بما ان بعد اي نقطة من نقاط الشبيكة المقلوبة يُمثل بمقلوب المسافة d ، لذا فانه يعتبر متجها و يطلق عيه متجه الشبيكة المقلوبة ويعرف كالاتي:

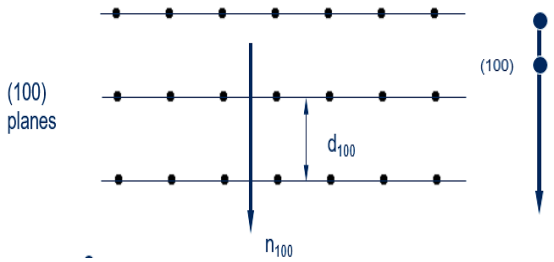
$$\vec{G} = \frac{A}{d_{hkl}}$$

A يمثل معامل مقياس الرسم و قيمته بين 1 و 2π

==========

٨-طريقة بناء الشبيكة المقلوبة

ان كل مجموعة من المستويات المتوازية في البلورة تمثّل بمتجهات من نقطة الاصل للشبيكة المقلوبة وكل متجه يكون عمودياً على المستويات التي يمثلها و ان قيمة المتجه هذا تساوي مقلوب المسافة البينية بين تلك المستويات، اي ان النقاط الواقعة في نهايات المتجهات العمودية تشكّل نقاط الشبيكة المقلوبة.



لذلك، سنوضح طريقة بناء الشبيكة المقلوبة في بعدين وكالاتي:

١-نرسم شبيكة حقيقية مستوية ونحدد وحدة الخلية.

٢-نرسم من نقطة الاصل خطوط عمودية على جانبي وحدة الخلية لتعيين المتجهات الاساسية.

٣-نعّين المسافة العمودية من نقطة الاصل الى نهاية اوجه وحدة الخلية d_{100} و d_{010}

٤-ناخذ مقلوب المسافات العمودية للحصول على المتجهات الاساسية للشبيكة المقلوبة، اي ان:

$$A = \frac{1}{d_{100}} \quad \text{and} \quad B = \frac{1}{d_{010}}$$

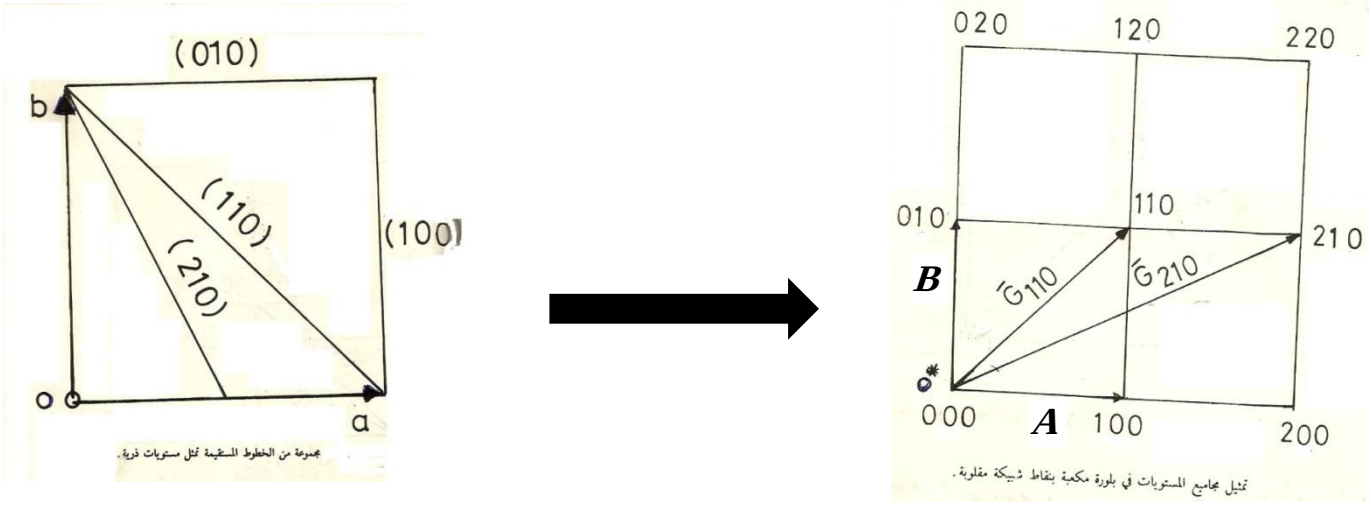
٥-نثبت نقاط تقاطعات الاعمدة مع المستويات حيث انها ستمثل نقاط الشبيكة المقلوبة.

في الشبيكة المقلوبة يتم استخدام فضاء الطور (فضاء متجه الموجه) $\vec{K}$ بدلاً من الطول الموجي λ ، لان الطول الموجي كمية عددية ولا يملك خواص المتجهات. و ان ابعاد متجه الموجه هي مقلوب الطول الموجي و كما يلي:

$$|\vec{K}| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

==========

مثال: يبين الشكل التخطيطي التالي مجموعة الخطوط المستقيمة التي تمثل مستويات (تابعة لخلية مكعبة ذات احداثيات (210) ,(110) ,(010), (100) مرسومة في بعدين. عيّن مواقع نقاط الشبيكة المقلوبة التي تناظر هذه المستويات.



٩-خواص الشبيكة المقلوبة

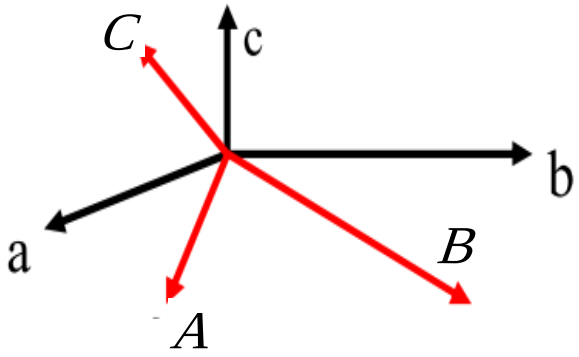
١-للشبيكة المقلوبة متجهات أساسية مثل الشبيكة الحقيقية واحداثيات أي نقطة في فضاء الشبيكة المقلوبة تعطى بالعلاقة: $\vec{G} = \nu_1\vec{A} + \nu_2\vec{B} + \nu_3\vec{C}$

حيث $\vec{A},\vec{B},\vec{C}$ المتجهات الأساسية للشبيكة المقلوبة و ν_1,ν_2,ν_3 اعداد صحيحة . وان $\vec{G}$ هو متجه الانتقال في الشبيكة المقلوبة، وحيث ان متجه الانتقال هو عمودي على المستويات (hkl) في الشبيكة الحقيقية فيمكن كتابته بالشكل: $\vec{\boldsymbol{G}}_{\boldsymbol{hkl}} = \boldsymbol{h}\vec{\boldsymbol{A}} + \boldsymbol{k}\vec{\boldsymbol{B}} + \boldsymbol{l}\vec{\boldsymbol{C}}$ حيث (h, k, l) موقع نقطة في الشبيكة المقلوبة بدلالة معاملات ميلر.

٢-ناتج ضرب متجهات الشبيكة المقلوبة بمتجهات الشبيكة الحقيقية يعطي النتائج الاتية:

$$\vec{A}.\vec{a} = 2\pi \qquad \vec{A}.\vec{b} = 0 \qquad A.\vec{c} = 0$$
$$\vec{B}.\vec{b} = 2\pi \qquad \vec{B}.\vec{a} = 0 \qquad \vec{B}.\vec{c} = 0$$
$$\vec{C}.\vec{c} = 2\pi \qquad \vec{C}.\vec{a} = 0 \qquad \vec{C}.\vec{b} = 0$$

ويلاحظ من هذه العلاقات ان المتجه A عمودي على المستوي $(\vec{b}\times\vec{c})$ وكذلك المتجه B عمودي على المستوي $(\vec{c}\times\vec{a})$ والمتجه C عمودي على المستوي $(\vec{a}\times\vec{b})$. وكما موضح بالشكل التالي:



٣-ترتبط متجهات الشبيكة المقلوبة A,B,C مع متجهات الشبيكة الحقيقية a,b,c بما يلي:

$$\vec{A} = 2\pi\frac{\vec{b}\times\vec{c}}{\vec{a}.(\vec{b}\times\vec{c})} \qquad \vec{B} = 2\pi\frac{\vec{c}\times\vec{a}}{\vec{b}.(\vec{c}\times\vec{a})} \qquad \vec{C} = 2\pi\frac{\vec{a}\times\vec{b}}{\vec{c}.(\vec{a}\times\vec{b})}$$

حيث ان المقادير $\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})$, $\vec{b}\cdot(\vec{c}\times\vec{a})$, $\vec{c}\cdot(\vec{a}\times\vec{b})$ تمثل حجم الخلية البدائية للشبيكة الحقيقية. والمتجهات $\vec{A},\vec{B},\vec{C}$ لها وحدات مقلوب وحدات الطول.

٤-تدعى الشبيكة اللانهائية المبنية من المتجهات الأساسية $\vec{A},\vec{B},\vec{C}$ بالشبيكة المقلوبة ويدعى متوازي السطوح المقام على هذه المتجهات بالخلية البدائية للشبيكة المقلوبة.

٥-عند تدوير البلورة بزاوية ما فان كلا الشبيكتين (الحقيقية والمقلوبة) تدوران معا بنفس الزاوية.

٦-يجب ملاحظة ان الشبيكة البلورية (العادية/الاعتيادية) الحقيقية هي شبيكة في الفضاء الحقيقي بينما الشبيكة المقلوبة هي في فضاء فورير وبعبارة ادق في فضاء كمية الحركة (الزخم) $\vec{p}=\hbar\vec{k}$ او فضاء متجه الموجة $\vec{k}$.

٧-حجم وحدة الخلية في الشبيكة المقلوبة:

$$\vec{A}.(\vec{B}\times\vec{C})=\frac{(2\pi)^3}{\vec{a}.(\vec{b}\times\vec{c})}=\frac{(2\pi)^3}{\Omega_0}$$

حيث (Ω_0) حجم الخلية في الشبكة العادية.

مثال : جد المتجهات الاساسية للشبيكة المقلوبة لشبيكة المكعب البسيط SC حيث ان:

$\vec{a}=\hat{\imath}a\,,\vec{b}=\hat{\jmath}a\,,\vec{c}=\hat{k}a$ تمثل المتجهات الأساسية. والزوايا الأساسية $\alpha=\beta=\gamma=\frac{\pi}{2}$

الحل:

$$\vec{A}=2\pi\frac{\vec{b}\times\vec{c}}{\vec{a}.(\vec{b}\times\vec{c})}\qquad \vec{B}=2\pi\frac{\vec{c}\times\vec{a}}{\vec{b}.(\vec{c}\times\vec{a})}\qquad \vec{C}=2\pi\frac{\vec{a}\times\vec{b}}{\vec{c}.(\vec{a}\times\vec{b})}$$

$$\vec{A}=2\pi\frac{a^2(\hat{\jmath}\times\hat{k})}{a^3(\hat{\imath}\cdot(\hat{\jmath}\times\hat{k}))}\ ,\quad \vec{B}=2\pi\frac{a^2(\hat{k}\times\hat{\imath})}{a^3(\hat{\jmath}\cdot(\hat{k}\times\hat{\imath}))}\ ,\quad \vec{C}=2\pi\frac{a^2(\hat{\imath}\times\hat{\jmath})}{a^3(\hat{k}\cdot(\hat{\imath}\times\hat{\jmath}))}$$

$$\vec{A}=2\pi\frac{\hat{\imath}}{a(\hat{\imath}\cdot\hat{\imath})}\ ,\qquad \vec{B}=2\pi\frac{\hat{\jmath}}{a(\hat{\jmath}\cdot\hat{\jmath})}\ ,\qquad \vec{C}=2\pi\frac{\hat{k}}{a(\hat{k}\cdot\hat{k})}$$

$$\boldsymbol{\vec{A}=\frac{2\pi}{a}\hat{\imath}}\quad,\quad \boldsymbol{\vec{B}=\frac{2\pi}{a}\hat{\jmath}}\quad,\quad \boldsymbol{\vec{C}=\frac{2\pi}{a}\hat{k}}\quad \textbf{,so,}\quad \boldsymbol{|\vec{A}|=|\vec{B}|=|\vec{C}|=\frac{2\pi}{a}}$$

مما سبق نستنتج ان وحدة الخلية في الشبيكة المقلوبة للمكعب البسيط هي مكعب بسيط أيضا طول ضلعه $\frac{2\pi}{a}$.

مثال : جد المتجهات الاساسية للشبيكة المقلوبة لشبيكة المكعب المتمركز الجسم BCC حيث ان:

$\vec{a}=\frac{a}{2}(\hat{\imath}+\hat{\jmath}-\hat{k})\ ,\ \vec{b}=\frac{a}{2}(-\hat{\imath}+\hat{\jmath}+\hat{k})\ ,\ \vec{c}=\frac{a}{2}(\hat{\imath}-\hat{\jmath}+\hat{k})$ تمثل المتجهات الأساسية. والزوايا الأساسية $\alpha=\beta=\gamma=90^o=\frac{\pi}{2}$

الحل:

$$\vec{A} = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a}.(\vec{b} \times \vec{c})}$$

$$\vec{b} \times \vec{c} = \frac{a}{2}(-\hat{\imath} + \hat{\jmath} + \hat{k}) \times \frac{a}{2}(\hat{\imath} - \hat{\jmath} + \hat{k}) = \frac{a^2}{4} \begin{vmatrix} \hat{\imath} & \hat{\jmath} & \hat{k} \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{vmatrix}$$

$$= \frac{a^2}{4}(2\hat{\imath} + 2\hat{\jmath}) = \frac{a^2}{2}(\hat{\imath} + \hat{\jmath})$$

$$\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c}) = \frac{a}{2}(\hat{\imath} + \hat{\jmath} - \hat{k}) \cdot \frac{a^2}{2}(\hat{\imath} + \hat{\jmath}) = \frac{a^3}{4}(1 + 1 + 0) = \frac{a^3}{2}$$

$$\Rightarrow \quad \vec{A} = 2\pi \frac{\frac{a^2}{2}(\hat{\imath} + \hat{\jmath})}{\frac{a^3}{2}} = \frac{2\pi}{a}(\hat{\imath} + \hat{\jmath})$$

By the same way, we get:

$$\vec{B} = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{b}.(\vec{c} \times \vec{a})} \qquad \Rightarrow \quad \vec{B} = 2\pi \frac{\frac{a^2}{2}(\hat{\jmath} + \hat{k})}{\frac{a^3}{2}} = \frac{2\pi}{a}(\hat{\jmath} + \hat{k})$$

$$\vec{C} = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{c}.(\vec{a} \times \vec{b})} \qquad \Rightarrow \quad \vec{C} = 2\pi \frac{\frac{a^2}{2}(\hat{\imath} + \hat{k})}{\frac{a^3}{2}} = \frac{2\pi}{a}(\hat{k} + \hat{\imath})$$

$$\Rightarrow \ |\vec{A}| = |\vec{B}| = |\vec{C}| = \frac{2\pi}{a}\sqrt{1^2 + 1^2} = \frac{2\sqrt{2}\ \pi}{a}$$

اي ان وحدة الخلية في الشبيكة المقلوبة للمكعب المتمركز الجسم هي ايضا مكعب ولكن متمركز الاوجه وطول ضلعه $\frac{2\sqrt{2}\ \pi}{a}$

واجب 1: اذا علمت ان المتجهات الاساسية للشبيكة ذات وحدة الخلية نوع المكعب متمركز الاوجه FCC تعطى بالعلاقات التالية: $\vec{a} = \frac{a}{2}(\hat{\imath} + \hat{\jmath})\ ,\ \vec{b} = \frac{a}{2}(\hat{\jmath} + \hat{k})\ ,\ \vec{c} = \frac{a}{2}(\hat{\imath} + \hat{k})$

اثبت ان المتجهات الاساسية للشبيكة المقلوبة لنفس نوع وحدة الخلية تعطى بما يلي:

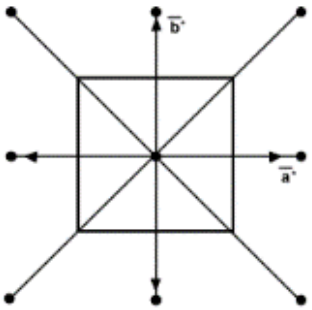
$$\vec{A} = \frac{2\pi}{a}(\hat{\imath} + \hat{\jmath} - \hat{k})\ ,\ \vec{B} = \frac{2\pi}{a}(-\hat{\imath} + \hat{\jmath} + \hat{k})\ ,\ \vec{C} = \frac{2\pi}{a}(\hat{\imath} - \hat{\jmath} + \hat{k})$$

واجب 2: جد متجهات الشبيكة المقلوبة لشبيكة متجهاتها الأساسية الحقيقية هي:

$$\vec{a} = 2\hat{\imath},\ \vec{b} = \hat{\imath} + 2\hat{\jmath}\ ,\ \vec{c} = \hat{k} \qquad \text{والزوايا الأساسية } \alpha = \beta = \gamma = 90^o = \frac{\pi}{2}$$

١٠-مناطق بريليون ***Brillion Zones***

ان الكثير من ظواهر فيزياء الحالة الصلبة تفسر بواسطة فضاء الشبيكة المقلوبة. بما ان الفضاء المقلوب كبيراً جداً، لذلك قام العالم بريليون بتقسيم هذا الفضاء الى مناطق تحيط احداها الاخرى و المنطقة الاولى تدعى منطقة بريليون الاولى و المنطقة المحيطة بالمنطقة الاولى تدعى منطقة بريليون الثانية وهكذا.



تعرّف منطقة بريليون الاولى: هي اصغر حجم في الفضاء المقلوب يحيط بنقطة واحدة من نقاط الشبيكة المقلوبة بحيث تكون النقطة متمركزة في داخل هذا الحجم (انظر الشكل المجاور). ويحاط هذا الحجم بمجموعة من الخطوط العمودية على منتصف المسافات الرابطة بين هذه النقطة المتمركزة بالنقاط الشبيكية المجاورة. وبذلك فان منطقة بريليون الاولى في الشبيكة المقلوبة تقابل خلية ويكنر – سيتز في الشبيكة الحقيقة. وحجم منطقة بريليون الاولى يمثل حجم الخلية الاولية في الفضاء المقلوب. ويكون حجم الخلية الاولية في الفضاء الانقلابي هو حجم خلية بريليون:

$$\boldsymbol{V_p = \vec{A} \cdot (\vec{B} \times \vec{C})}$$

لايجاد حجم وحدة الخلية للشبيكة المقلوبة في حالة المكعب البسيط ***SC*** (بالاستفادة من المثال السابق في ص٦٤) :

$$\vec{A} = \frac{2\pi}{a}\hat{\imath}\ ,\vec{B} = \frac{2\pi}{a}\hat{\jmath}\quad ,\vec{C} = \frac{2\pi}{a}\hat{k}$$

$$V_p = \vec{A} \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 \hat{\imath} \cdot (\hat{\jmath} \times \hat{k}) = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 (\hat{\imath} \cdot \hat{\imath}) = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$$

وهذه تمثل مكعب طول ضلعه $\frac{2\pi}{a}$ وحجمه $\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$

المنطقة الأولى هي المنطقة المحددة بالمستويات المنصفة للمتجهات الأساسية. أي ان منطقة بريليون الأولى تحاط بالمستويات الستة المنصفة للمتجهات $\vec{A}, \vec{B}, \vec{C}$

$$\pm\frac{1}{2}\vec{A}=\pm\frac{\pi}{a}\,\hat{\imath}\ ,\qquad \pm\frac{1}{2}\,\vec{B}=\pm\frac{\pi}{a}\,\hat{\jmath}\quad ,\quad \pm\frac{1}{2}\,\vec{C}=\pm\frac{\pi}{a}\,\hat{k}$$

وهي منطقة مكعبة طول ضلعها $\frac{2\pi}{a}$ وحجمها $\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$.

==========

مثال: جد المتجهات الانتقالية الأساسية للشبيكة المقلوبة لحالة شبيكة متمركزة الجسم *BCC* ثم حدد ثابت الشبيكة وحدود مناطق بريليون، ثم جد متجه الشبيكة المقلوبة $\vec{G}$. اذا كانت المتجهات الأساسية في الشبيكة الحقيقية هي:

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

الحل: (لايجاد المتجهات الأساسية للشبيكة المقلوبة لحالة شبيكة متمركزة الجسم *BCC* نتبع نفس خطوات المثال السابق لحالة *BCC* في ص٦٥) وعليه،

$$\vec{A}=\frac{2\pi}{a}(\hat{\imath}+\hat{\jmath})\ ,\ \vec{B}=\frac{2\pi}{a}(\hat{\jmath}+\hat{k})\ ,\ \vec{C}=\frac{2\pi}{a}(\hat{\imath}+\hat{k})$$

حجم الخلية في الشبيكة المقلوبة: $V_p=\vec{A}\cdot(\vec{B}\times\vec{C})$

$$\vec{B}\times\vec{C}=\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2\begin{vmatrix}\hat{\imath}&\hat{\jmath}&\hat{k}\\0&1&1\\1&0&1\end{vmatrix}=\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2(\hat{\imath}+\hat{\jmath}-\hat{k})$$

$$V_p=\vec{A}\cdot(\vec{B}\times\vec{C})=\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3(\hat{\imath}+\hat{\jmath})\cdot(\hat{\imath}+\hat{\jmath}-\hat{k})=\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3(1+1+0)=\ 2\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$$

(من المتجهات الأساسية نلاحظ: الشبيكة المقلوبة لمكعب متمركز الجسم *BCC* هي شبيكة من نوع مكعب متمركز الأوجه *FCC*) طول ضلعه $\sqrt{2}\frac{2\pi}{a}$ وحجمه $2\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$ وهو حجم منطقة بريليون الأولى V_{BZ}

اما متجه الانتقال لهذه الشبيكة المقلوبة فهو: $\vec{G}=\nu_1\vec{A}+\nu_2\vec{B}+\nu_3\vec{C}$

$$\vec{G}=\frac{2\pi}{a}\Big(\nu_1(\hat{\imath}+\hat{\jmath})+\nu_2(\hat{\jmath}+\hat{k})+\nu_3(\hat{\imath}+\hat{k})\Big)$$

$$\vec{G}=\frac{2\pi}{a}\Big(\hat{\imath}(\nu_1+\nu_3)+\hat{\jmath}(\nu_1+\nu_2)+\hat{k}(\nu_2+\nu_3)\Big)$$

المنطقة الأولى لبريليون هي المستويات المنصفة للمتجهات الاساسية. وان المتجهات التي تحدد منطقة بريليون الأولى هي:

$$\pm\tfrac{1}{2}\vec{A}=\frac{\pi}{a}(\pm\hat{\imath}\pm\hat{\jmath})\ ,\ \pm\ \tfrac{1}{2}\vec{B}=\frac{\pi}{a}(\pm\hat{\jmath}\pm\hat{k})\ ,\ \pm\tfrac{1}{2}\vec{C}=\frac{\pi}{a}(\pm\hat{\imath}\pm\hat{k})$$

وبذلك تحدد منطقة بريليون الأولى لهذه الحالة بـ 12 متجه.

مثال: جد المتجهات الانتقالية الأساسية للشبيكة المقلوبة لحالة شبيكة متمركزة الاوجه *FCC* ثم حدد ثابت الشبيكة وحدود مناطق بريليون، ثم جد متجه الشبيكة المقلوبة $\vec{G}$. اذاكانت المتجهات الأساسية في الشبيكة الحقيقية هي:

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

الحل: كما مر سابقا نجد ان المتجهات الاساسية للشبيكة المقلوبة هي

$$\vec{A} = \frac{2\pi}{a}(\hat{\imath} + \hat{\jmath} - \hat{k}) \ , \ \vec{B} = \frac{2\pi}{a}(-\hat{\imath} + \hat{\jmath} + \hat{k}) \ , \ \vec{C} = \frac{2\pi}{a}(\hat{\imath} - \hat{\jmath} + \hat{k})$$

ويكون حجم الخلية الأولية في الشبيكة المقلوبة مساوي لحجم منطقة بريليون الأولى

$$V_{BZ} = \vec{A} \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 (\hat{\imath} + \hat{\jmath} - \hat{k}) \cdot (2\hat{\imath} + 2\hat{\jmath} + 0\hat{k})$$

$$= \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 (2 + 2 + 0) = \ 4\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$$

اما المستويات التي تحدد منطقة بريليون الأولى فهي المستويات التي تنصف المتجهات *A,B,C* وهي اقصر متجهات الشبيكة المقلوبة.

==========

١١-الحيود في الشبيكة المقلوبة

نظرية الحيود بينت بأن الشبيكة البلورية والموجات (موجات: الالكترونات، البروتونات، الفوتونات .....) يتفاعلان مع بعضهما بنفس طريقة تفاعل الموجات مع بعضها البعض .ومن المفيد أن نفكر بالشبيكة البلورية كاضطراب شبه موجي، وأن نستخدم فضاء متجهة الموجة بدلا من طول الموجة التي لا تمتلك خواص المتجه، وبالتحديد جبهة انتشار الموجة حيث أن المتجهات يمكن تحليلها إلى مركباتها الفضائية، حيث أن قيمة متجهة الموجة تعطى بالعلاقة: $k = \frac{A}{\lambda}$ (*A* اما ان تساوي 1 او تساوي 2π) والتي تبين أن أبعادها مقلوب طول، فنحن ملزمين وفقا للتصورالجديد أن ننتقل من فضاء الشبكة العادية إلى فضاء متجهة الموجة $\vec{k}$، أو ما يسمى بفضاء فوريه ، وهذا الفضاء يمكننا من تعريف الشبيكة المقلوبة (كما مر سابقاً في موضوع الشبيكة المقلوبة).

أن الذرات في البلورة تكون مرتبة بشكل دوري وخصوصا عند الانتقال من مستوي بلوري إلى آخر، وعليه يمكننا اعتبار الجهد الدوري للبلورة كموجة ساكنة طول موجتها λ يساوي المسافة بين المستويات البلورية d ومتجه تلك الموجة $\vec{K}$ يكون عمودياً على المستويات البلورية وقيمته $\vec{K} = \frac{2\pi}{\lambda}$ ولا ننسى المتجهة $\vec{G} = \frac{2\pi}{d}$ ، متجه الشبيكة المقلوبة.

و لكي يتم الحيود وفق شرط براغ يجب أن تكون الطاقة محفوظة قبل وبعد التفاعل أو ما يسمى بالتفاعل المرن. أن الطاقة بدلالة متجه الموجة تعطى بالعلاقة: (من التعاريف الاساسية، اشتق العلاقة التالية للطاقة)

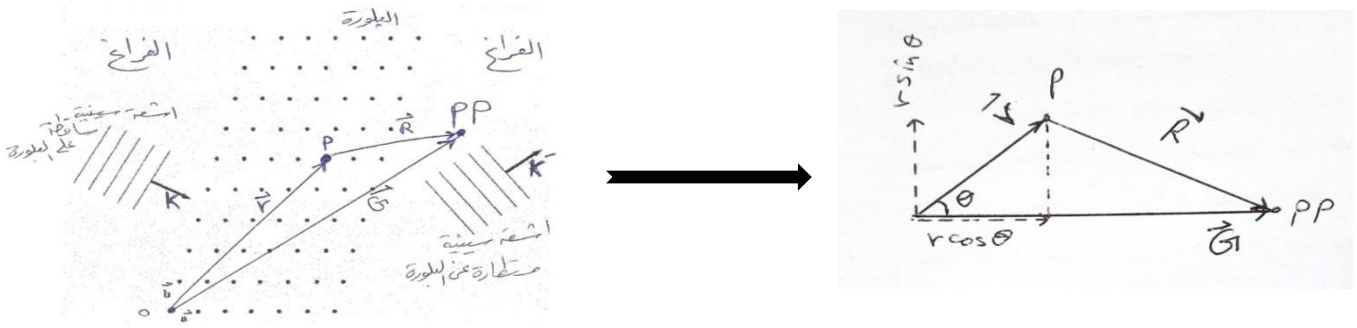
$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$$

وهذه الطاقة هي نفسها قبل وبعد التفاعل فذلك يعني أن القيمة العددية لمتجه الموجة $\vec{k}$ لا يتغير، ولكن الذي يتغير هو الاتجاه فقط.

١٢-اشتقاق لاوي لسعة الموجة المستطيرة (المُحادة)

قام العالم لاوي بأيجاد اتجاهات الموجة المستطيرة الخارجة من البلورة بالنسبة الى الموجة الساقطة كما يلي:

إفتَرضَ ان التفاعل بين الاشعة الساقطة والبلورة هو من النوع الخطي أي ان، $\acute{\omega} = \omega$ حيث ω تردد الموجة الساقطة $\acute{\omega}$ تردد الموجة الحائدة و $\omega = ck$ حيث c سرعة الضوء في الفراغ و k العدد الموجي بهذا يكون $\acute{k} = k$. ولايجاد الموجة الحائدة $\vec{\acute{k}}$ بدلالة الموجة الساقطة $\vec{k}$ والمتجهات الأساسية $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ للشبيكة البلورية الحقيقة، نفرض ان النقطة P هي نقطة شبيكية في الشبيكة الحقيقية ومعرفة بالمتجه: $\vec{r} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}$ الذي ينطلق من نقطة الأصل O حيث n_1, n_2, n_3 اعداد صحيحة، كما في الشكل التالي:



احدى مركبات المجال الكهربائي للموجه الساقطة على البلورة في النقطة P تعطى بالعلاقة: $\boldsymbol{E(\vec{r}) = A\, e^{i\,(\vec{K}\cdot\vec{r}-\omega\, t)}}$ ، حيث A تمثل سعة الموجة و t تمثل زمن تاثير الاشعاع على البلورة. فاذا فرضنا ان t=0 عند لحظة سقوط الاشعة، فأن:

$$\boldsymbol{E(\vec{r}) = A\, e^{i\,\vec{K}\cdot\vec{r}}}$$

ان سعة الموجة المستطارة من النقطة P (داخل البلورة) والمارة بالنقطة PP (خارج البلورة) تتضمن على:

عامل الطور $e^{i\,\vec{K}\cdot\vec{r}}$ للموجة الساقطة على P ، وعامل الطور للموجة المستطارة عند PP هو $e^{i\,\vec{K}\cdot\vec{R}}$ ، وعليه فأن عامل الطور الكلي عند النقطة PP يعطى بالعلاقة:

$$\boldsymbol{Phase\ Factor = e^{i\,\vec{K}\cdot\vec{r}}\, e^{i\,\vec{K}\cdot\vec{R}}}$$

ومن الشكل اعلاه نحصل على: $R = G - r\ \cos(\theta_{rG})$ ، ونعوضها في العلاقة اعلاه:

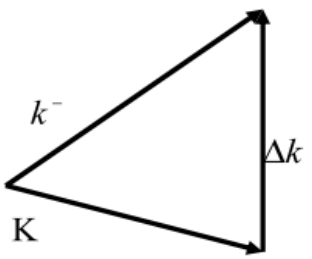
$$\boldsymbol{P.F. = e^{i\,\vec{K}\cdot\vec{r}}\, e^{i\,\vec{K}\cdot\vec{G}} e^{-i\,\vec{K}\,r\,\cos\theta}}$$

باعتبار ان استجابة البلورة للاشعاع هي استجابة خطية ، اي ان التردد الزاوي للموجة المستطارة $\acute{\omega}$ يساوي التردد الزاوي للموجة الساقطة ω اي ان: K=K' ، لذلك فأن: $K\,r\,\cos\theta = \acute{K}\,r\,\cos\theta = \overrightarrow{K'}\cdot\vec{r}$

ونعوضها في علاقة عامل الطور الكلي فنحصل على:

$$\boldsymbol{P.F. = e^{i\,\vec{K}\cdot\vec{r}}\, e^{i\,\vec{K}\cdot\vec{G}} e^{-i\,\overrightarrow{K'}\cdot\vec{r}} = e^{i\,\vec{K}\cdot\vec{G}}\ e^{-i\left(\overrightarrow{K'}-\vec{K}\right)\cdot\vec{r}}\ = e^{i\,\vec{K}\cdot\vec{G}}\ e^{-i\,\overrightarrow{\Delta K}\cdot\vec{r}}}$$

حيث ان $\boldsymbol{\overrightarrow{\Delta K} = \overrightarrow{K'} - \vec{K} = \vec{G}}$ يمثل فرق المسار، وهو التغير الحاصل في متجه الموجة المستطارة والموجة الساقطة يساوي متجة الانتقال في فضاء الطور (وهو شرط الحيود في الشبيكة المقلوبة)، وكما موضح بالشكل التالي:



و لايجاد محصلة سعة الموجة المستطارة عن كل نقطة شبيكية وعند النقطة PP ، فيجب جمع معاملات الطور للموجات المستطارة (علاقة عامل الطور الكلي)

بعد اهمال الحد الثابت ($e^{i\vec{K}\cdot\vec{G}}$)، وهكذا فان محصلة سعة الموجات تكتب كما يلي:

$$\vec{\Omega} = \sum_{n_1 n_2 n_3} e^{-i\,\overrightarrow{\Delta K}\cdot\vec{r}}$$

حيث ان: $\vec{r} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}$ ، لذا فأننا نكتب صيغة سعة الموجات بالشكل التالي:

$$\vec{\Omega} = \sum_{n_1} e^{-i(n_1\vec{a}\cdot\overrightarrow{\Delta K})} \sum_{n_2} e^{-i(n_2\vec{b}\cdot\overrightarrow{\Delta K})} \sum_{n_3} e^{-i(n_3\vec{c}\cdot\overrightarrow{\Delta K})}$$

للحصول على اعظم قيمة لـ $\vec{\Omega}$ يجب ان يكون المجموع لعوامل الطور اكبر ما يمكن، وهذا يصح فقط عندما:

$$\vec{r}_{n_1 n_2 n_3}\cdot\overrightarrow{\Delta k} = 2\pi\varepsilon \quad \text{,or,} \quad \vec{r}_{n_1 n_2 n_3}\cdot\vec{G} = 2\pi\varepsilon$$

حيث ε عدد صحيح ، لذا فأن: $(n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c})\cdot\overrightarrow{\Delta k} = 2\pi\varepsilon$ وهذا يعني ان :

$$n_1\vec{a}\cdot\overrightarrow{\Delta k} = 2\pi\varepsilon \quad , \quad n_2\vec{b}\cdot\overrightarrow{\Delta k} = 2\pi\varepsilon \quad , \quad n_3\vec{c}\cdot\overrightarrow{\Delta k} = 2\pi\varepsilon$$

ويمكن حذف الاعداد الصحيحة من المعادلات أعلاه وتوحيدها برمز اخر بحيث المعادلة تصبح بالشكل التالي:

$$\vec{a}\cdot\overrightarrow{\Delta k} = 2\pi\nu_1 \quad , \vec{b}\cdot\overrightarrow{\Delta k} = 2\pi\nu_2 \quad , \vec{c}\cdot\overrightarrow{\Delta k} = 2\pi\nu_3$$

حيث ν_1, ν_2, ν_3 اعداد صحيحة. **<u>وهذه هي معادلات لاوي للنهايات العضمى للحيود.</u>**

من الضروري معرفة الحل الامثل لمعادلات لاوي ومواصفات $\overrightarrow{\Delta k}$ لكي نحصل على عملية الحيود للاشعة السينية. ويكون حل معادلات لاوي سهلا اذا كانت المحاور الأساسية $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ في البلورة متعامدة مع بعضها كما هو الحال في الانظمة البلورية المكعبة و الرباعية والمعينية القائمة، وبذلك تصبح معادلات لاوي بالشكل:

$$\overrightarrow{\Delta k} = \hat{\imath}\frac{\nu_1}{a} + \hat{\jmath}\frac{\nu_2}{b} + \hat{k}\frac{\nu_3}{c}$$

حيث ان $\hat{k}, \hat{\jmath}, \hat{\imath}$ تمثل الوحدات الاتجاهية باتجاه المحاور البلورية $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$.

وهكذا نرى الحاجة للتعامل مع الشبيكة المقلوبة حيث ابعاد المتجهات في الشبيكة المقلوبة (فضاء k) هي مقلوب الطول في الفضاء الحقيقي (الشبيكة الحقيقة). ولاثبات ذلك نستخدم المفاهيم السابقة وكما يلي:

ان النقطة في الشبيكة الحقيقية يعبر عنها بالمتجه $\vec{r} = (n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c})$ ، والنقطة في الشبيكة المقلوبة يعبر عنها بالمتجه $\vec{G} = \nu_1\vec{A} + \nu_2\vec{B} + \nu_3\vec{C}$ و عليه فأن:

$$\vec{r}\cdot\vec{G} = (n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c})\cdot(\nu_1\vec{A} + \nu_2\vec{B} + \nu_3\vec{C})$$
$$= n_1\nu_1(\vec{a}\cdot\vec{A}) + n_2\nu_2(\vec{b}\cdot\vec{B}) + n_3\nu_3(\vec{c}\cdot\vec{C})$$

ومن خصائص الشبيكة المقلوبة (الصفحة رقم ٦٣ النقطة رقم ٢) نجد ان:

$$\vec{r}\cdot\vec{G} = n_1\nu_1(2\pi) + n_2\nu_2(2\pi) + n_3\nu_3(2\pi)$$
$$= 2\pi(n_1\nu_1 + n_2\nu_2 + n_3\nu_3) = 2\pi\varepsilon$$

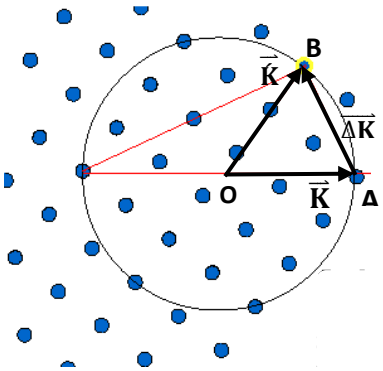
وهكذا فعندما $\vec{r}\cdot\vec{G} = 2\pi\varepsilon$ ، فان $\vec{G}$ يحقق شرط الحيود في الشبيكة المقلوبة $\vec{G} = \overrightarrow{\Delta k}$ ، حيث ان:

$$n_1\nu_1 + n_2\nu_2 + n_3\nu_3 = \varepsilon$$

==========

١٣-كرة ايوالد لتفسير ظاهرة الحيود

ربط العالم ايوالد فكرة الشبيكة المقلوبة مع فكرة كرة الانعكاس والتي اطلق عليها كرة ايوالد لتفسير النتائج التجريبية لحيود الاشعة السينية من المستويات البلورية ، حيث يمكن معرفة المستوي الذي يعمل على استطارة الاشعة السينية من معرفة اتجاه وقيمة الطول الموجي للاشعة الساقطة.



ويمكن رسم كرة ايوالد كما يلي:

١-نحدد الطول الموجي λ للموجة الساقطة واتجاهه.

٢-نعين نقطة اصل O لفضاء الشبيكة المقلوبة .

٣-نرسم متجه طوله $\frac{1}{\lambda}$ واتجاهه باتجاه الاشعة الساقطة، وليكن $\overrightarrow{OA}$

٤-نرسم دائرة نصف قطرها $\overrightarrow{OA}$ ومركزها يقع عند نقطة الأصل O على شرط ان يمر محيط الدائرة بعدد من نقاط الشبيكة المقلوبة. حيث ان كل نقطة تقع على سطح الكرة تحقق شرط الحيود.

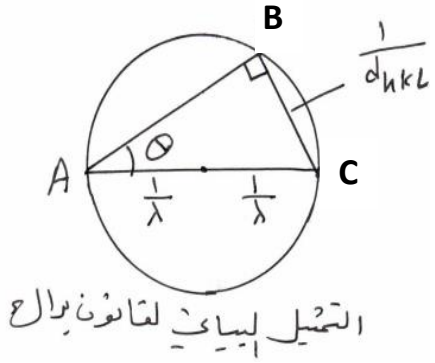
$\vec{\mathbf{K}}$ متجه الموجة الساقطة ، $\vec{\acute{\mathbf{K}}}$ متجه الموجة الحائدة ، $\vec{\acute{\mathbf{K}}} - \vec{\mathbf{K}} = \overrightarrow{\Delta\mathbf{K}} = \vec{\boldsymbol{G}}$ ، $\vec{\boldsymbol{G}}$ متجه الانتقال في الشبيكة المقلوبة، ويمكن كتابة K' كالاتي: $\vec{\acute{\mathbf{K}}} = \vec{\boldsymbol{G}} + \vec{\mathbf{K}}$ وبتربيع الطرفين:

$$\vec{\mathbf{K}}\cdot\vec{\mathbf{K}} = (\vec{\boldsymbol{G}}+\vec{\mathbf{K}})\cdot(\vec{\boldsymbol{G}}+\vec{\mathbf{K}}) \quad \Rightarrow \quad \left|\vec{\mathbf{K}}\right|^2 = \left|\vec{\boldsymbol{G}}\right|^2 + \left|\vec{\boldsymbol{K}}\right|^2 + 2\vec{\boldsymbol{G}}\cdot\vec{\mathbf{K}}$$

وبما ان $\left|\vec{\mathbf{K}}\right| = \left|\vec{\mathbf{K}}\right|$ (كلاهما نصف قطر) ، لذا فان:

$$\left|\vec{\boldsymbol{G}}\right|^2 + 2\vec{\boldsymbol{G}}\cdot\vec{\mathbf{K}} = \mathbf{0}$$ **<u>وهي معادلة براغ في الشبيكة المقلوبة</u>**

مما سبق يمكن استنتاج معادلة حيود براغ للشبيكة الحقيقية كما يلي: بما ان شرط الحيود في الشبيكة المقلوبة هو: $\overrightarrow{\Delta\mathbf{K}} = \vec{\boldsymbol{G}} = \frac{1}{d_{hkl}}$ و $\vec{\mathbf{K}} = \frac{\mathbf{1}}{\boldsymbol{\lambda}}$ ، ومن القوانين الهندسية فان المثلث ABC قائم الزاوية في B،



وعليه:

$$\sin\theta = \frac{\overline{BC}}{\overline{AC}} = \frac{1/d_{hkl}}{2/\lambda} \qquad \Rightarrow \qquad \lambda = 2d_{hkl}\sin\theta$$

س/ اثبت ان معادلة براغ في الشبيكة المقلوبة تكافئ معادلة براغ في الشبيكة الحقيقية.

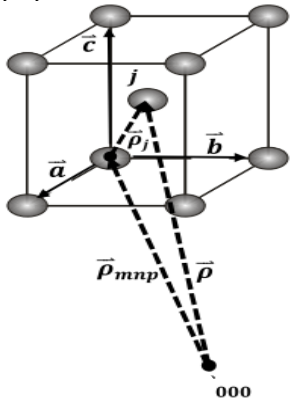
==========

١٤- عامل التركيب للاساس (عامل التركيب الهندسي) ***Structure factor Calculation***

من المعروف ان شدة الحزمة المستطارة تعتمد على:

- محتويات مركز الاستطارة (الأساس) أي على عدد الذرات الموجودة في الأساس
- موضع الذرة
- توزيع الالكترونات على هذه الذرة.

<u>ولايجاد علاقة رياضية بين شدة الحزمة المستطارة ومواقع الذرات داخل الأساس</u> ، نفرض ان وحدة خلية لبلورة معينة تحتوي على $\boldsymbol{S}$ من الذرات وان موقع الذرة الواحدة يعرف بالمتجه $\vec{\rho}_j$ من نقطة أصل وحدة الخلية الى الذرة j ، وحدة الخلية معرفة بالمتجه $\vec{\rho}_{mnp}$ المحدد من نقطة الأصل الرئيسية للبلورة 0,0,0 حيث ان:



$$\vec{\rho}_j = x_j\vec{a} + y_j\vec{b} + z_j\vec{c}$$

$$\vec{\rho}_{mnp} = \mathrm{m}\vec{a} + \mathrm{n}\vec{b} + \mathrm{p}\vec{c}$$

من المعلوم ان الالكترونات لا تتركز في نقطة واحدة بل تتوزع حول النواة لذا يمكن التعبير عن توزيع الالكترونات داخل البلورة بالشكل الاتي، فاذا كانت $n_j(\vec{\rho}-\vec{\rho}_j)$ يمثل مساهمة الذرة j بالكثافة الالكترونية

في نقطة معينة محددة بالمتجه $\vec{\rho}$ ، والكثافة الالكترونية الكلية الناتجة من مساهمة كل الذرات في الخلية تعطى:

$$n_j(\vec{\rho}) = \sum_{j=1}^{S} n_j(\vec{\rho} - \vec{\rho}_j)$$

وعندما يكون شرط الحيود متحقق $\overrightarrow{\Delta \mathbf{K}} = \vec{\boldsymbol{G}}$ يمكن تعريف **سعة الموجة المستطيرة** $\boldsymbol{F_G}$ لعدد N من وحدات الخلية داخل البلورة وفقا للعلاقة الاتية:

$$F_G = N \int dV\, n_j(\vec{\rho}) e^{-i\vec{G}\cdot\vec{\rho}}$$

حيث ان التكامل أعلاه على وحدة خلية واحدة ،وهو يمثل **عامل التركيب** $\boldsymbol{S_G}$ ويمكن كتابة المعادلة أعلاه،

$$F_G = NS_G$$

ومن تعريف $n_j(\vec{\rho})$ تصبح المعادلة،

$$F_G = N \int dV \sum_{j=1}^{S} n_j(\vec{\rho} - \vec{\rho}_j)\, e^{-i\vec{G}\cdot\vec{\rho}}$$

$$F_G = N \sum_{j=1}^{S} \int dV\, n_j(\vec{\rho} - \vec{\rho}_j) e^{-i\vec{G}\cdot\vec{\rho}}$$

نفرض ان: $\vec{R} = \vec{\rho} - \vec{\rho}_j$ ، فيمكن كتابة معادلة F_G بالشكل:

$$F_G = N \sum_{j=1}^{S} \int dV\, n_j(\vec{R}) e^{-i\vec{G}\cdot\vec{R}} e^{-i\vec{G}\cdot\vec{\rho}_j} = N \sum_{j=1}^{S} f_j\, e^{-i\vec{G}\cdot\vec{\rho}_j} = N\, S_G$$

ويعرف عامل التشكيل الذري *Atomic form factor*

$$f_j = \int dV\, n_j(\vec{R}) e^{-i\vec{G}\cdot\vec{R}}$$

هذا التكامل يكون على كل الفضاء للبلورة. وهكذا يمكن إعادة كتابة عامل التركيب للاساس وكما يلي:

$$S_G = \sum_{j=1}^{S} f_j e^{-i\vec{G}\cdot\vec{\rho}_j}$$

$$\vec{\rho}_j = x_j\vec{a} + y_j\vec{b} + z_j\vec{c} \qquad \vec{G} = \nu_1\vec{A} + \nu_2\vec{B} + \nu_3\vec{C}$$

$$\vec{\rho}_j \cdot \vec{G} = \left(x_j\vec{a} + y_j\vec{b} + z_j\vec{c}\right) \cdot \left(\nu_1\vec{A} + \nu_2\vec{B} + \nu_3\vec{C}\right)$$

باستخدام خصائص الشبيكة المقلوبة.

$$\vec{\rho}_j \cdot \vec{G} = 2\pi \left(x_j \nu_1 + y_j \nu_2 + z_j \nu_3 \right)$$

وعليه

$$\boldsymbol{S_G = \sum_{j=1}^{S} f_j e^{-i2\pi(x_j \nu_1 + y_j \nu_2 + z_j \nu_3)}}$$

وعليه تكون S_G بدلالة ν_1, ν_2, ν_3 ، $S_G = S_{\nu_1 \nu_2 \nu_3}$ ، و xj,yj,z_j احداثيات موقع الذرة في الخلية.

ملاحظة:

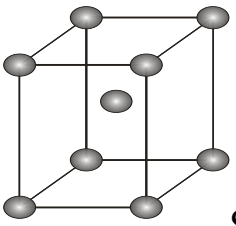
- لاتكون S_G بالضرورة مقدار حقيقي.
- سعة الاستطارة تحسب من العلاقة $F = S_G^* S_G$.
- عندما تكون $S_G = 0$ فان شدة الاستطارة تساوي صفر أيضا.
- $(\nu_1 \nu_2\ \nu_3) \equiv (hkl)$ حيث hkl هي معاملات ميلر
- فاذا تكلمنا عن ν_1, ν_2, ν_3 فاننا نتكلم عن اعداد ميلرواستخدمنا هذه الرموز لغرض التعميم.
- وأيضا متجه الانتقال في الشبيكة الحقيقية $\vec{T} \equiv \vec{\rho}_{mnp}$.

مثال 1: ان ابسط وحدات الخلية في البلورة هي تلك التي فيها ذرة واحدة ذات احداثيات *(0,0,0)*. جد عامل التركيب وشدة الاستطارة لها.

$$S_G = S_{\nu_1 \nu_2 \nu_3} = \sum_{j=1}^{1} f_{000} e^{-2\pi i\,(0\nu_1 + 0\nu_2 + 0\nu_3)} = f$$

شدة الاستطارة $S_G^2 = f f^* = f^2$

مثال 2: وحدة خلية مكعبة متمركزة الجسم *BCC* تحتوي على ذرتين من نوع واحد احداثياتهما:



$x_1 = y_1 = z_1 = 0$ و $x_2 = y_2 = z_2 = \frac{1}{2}$ احسب عامل التركيب.

الحل:

$$S_G = \sum_{j=1}^{2} f_j e^{-2\pi i(x_j \nu_1 + y_j \nu_2 + z_j \nu_3)}$$

$$= f_{000} e^{-2\pi i(0)} + f_{\frac{111}{222}} e^{-2\pi i\left(\frac{\nu_1}{2} + \frac{\nu_2}{2} + \frac{\nu_3}{2}\right)}$$

وبما ان هناك نوع واحد من الذرات فان، $f_{000} = f_{\frac{111}{222}} = f$

$$S_G = f(1 + e^{-\pi i(\nu_1+\nu_2+\nu_3)})$$

فاذا كان حاصل الجمع = عدد زوجي فان $S_G = f(1 + e^{-\pi i(even)})$

$$S_G = 2\,f \quad \leftrightarrow \quad |S_G|^2 = 4f^2$$

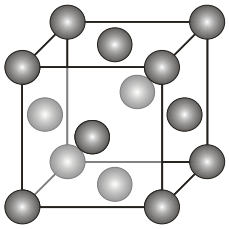
فاذا كان حاصل الجمع = عدد فردي فان $S_G = f\left(1 + e^{-\pi i(odd)}\right) = 0$

وهذا يعني انه لا تحدث عملية انعكاس $S_G^2 = 0$

<u>مثال 3:</u> وحدة خلية مكعبة متمركزة الاوجه *FCC* تحتوي على *4* ذرات من نوع واحد احداثياتهما:

$(0,0,0), \left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right), (\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$ احسب عامل التركيب وشدة الاستطارة.

<u>الحل</u>:



$$S_G = \sum_{j=1}^{4} f_j e^{-2\pi i(x_j\nu_1+y_j\nu_2+z_j\nu_3)}$$

$$= f_{000}e^{-2\pi i(0)} + f_{0\frac{11}{22}}e^{-2\pi i\left(\frac{\nu_2}{2}+\frac{\nu_3}{2}\right)} + f_{\frac{1}{2}0\frac{1}{2}}e^{-2\pi i\left(\frac{\nu_1}{2}+\frac{\nu_3}{2}\right)} + f_{\frac{11}{22}0}e^{-2\pi i\left(\frac{\nu_1}{2}+\frac{\nu_2}{2}\right)}$$

وبما ان هناك نوع واحد من الذرات فان، $f_{000} = f_{0\frac{11}{22}} = f_{\frac{1}{2}0\frac{1}{2}} = f_{\frac{11}{22}0} = f$

$$S_G = f(e^{-2\pi i(0)} + e^{-\pi i(\nu_2+\nu_3)} + e^{-\pi i(\nu_1+\nu_3)} + e^{-\pi i(\nu_1+\nu_2)})$$

فاذا كانت $\nu_2 + \nu_3 = \text{even}\,,\ \nu_1 + \nu_3 = \text{even}\,,\ \nu_1 + \nu_2 = \text{even}$

$$S_G = f(1 + 1 + 1 + 1) = 4f \qquad \Rightarrow \qquad S_G^2 = 16f^2$$

اما اذا كانت ν_1, ν_2, ν_3 من النوع المختلط زوجي وفردي فان عامل التركيب $S_G = 0$ وكذلك شدة الاستطارة. وهذا يعني عدم حدوث انعكاس. مثلا ν_1, ν_2 اعداد زوجية و ν_3 عدد فردي فان:

$$S_G = f(e^{-2\pi i(0)} + e^{-\pi i(odd)} + e^{-\pi i(\text{odd})} + e^{-\pi i(\text{even})})$$

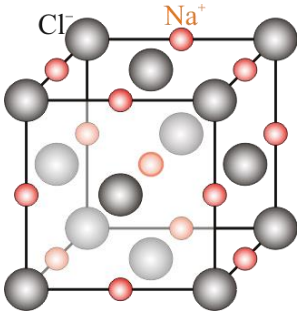
$$S_G = f(1 - 1 - 1 + 1) = 0$$

مثال 4: تركيب بلوري متمركز الأوجه FCC يحتوي على المستويات (100), (110), (111), (200), (112) (220), (210)، بين أي من هذه المستويات يحدث عنها انعكاس؟.

الحل: من المثال الخاص بوحدة خلية *FCC* وجدنا ان: لكي يحدث الانعكاس يجب ان يكون (ν_1, ν_2, ν_3) او (hkl) جميعها اعداد فردية odd او جميعها اعداد زوجية even . اذن تكون المستويات التي يحدث منها انعكاس هي: (220) ,(200) ,(111) فقط .

مثال 5: احسب عامل التركيب الأساسي و شدة الاستطارة لوحدة خلية بلورة كلوريد الصوديوم *NaCl* .

الحل: من المعروف ان وحدة خلية بلورة كلوريد الصوديوم عبارة عن مكعب متمركز الأوجه يحتوي على *4* ذرات *Na* و *4* ذرات *Cl* . ووحدة الخلية مكونة من مكعبين متمركزي الأوجه كل مكعب يحتوي على نوع واحد من الذرات (*Na* او *Cl*) هذين المكعبين مزاح احدهما عن الاخر بمقدار $\frac{1}{2}$ وحدة.



احداثيات المكعب الأول (*Na*): $(0,0,0), \left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$

احداثيات المكعب الثاني (*Cl*): $\left(\frac{1}{2},0,0\right), \left(0,\frac{1}{2},0\right), \left(0,0,\frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$

$$S_G = \sum_{j=1}^{8} f_j e^{-2\pi i(x_j\nu_1 + y_j\nu_2 + z_j\nu_3)}$$

$$= f_{Na}\left\{e^{-2\pi i(0)} + e^{-2\pi i\left(\frac{\nu_2}{2}+\frac{\nu_3}{2}\right)} + e^{-2\pi i\left(\frac{\nu_1}{2}+\frac{\nu_3}{2}\right)} + e^{-2\pi i\left(\frac{\nu_1}{2}+\frac{\nu_2}{2}\right)}\right\}$$

$$+ f_{Cl}\left\{e^{-2\pi i\left(\frac{\nu_1}{2}\right)} + e^{-2\pi i\left(\frac{\nu_2}{2}\right)} + e^{-2\pi i\left(\frac{\nu_3}{2}\right)} + e^{-2\pi i\left(\frac{\nu_1}{2}+\frac{\nu_2}{2}+\frac{\nu_3}{2}\right)}\right\}$$

$$= f_{Na}\left\{1 + e^{-\pi i(\nu_2+\nu_3)} + e^{-\pi i(\nu_1+\nu_3)} + e^{-\pi i(\nu_1+\nu_2)}\right\}$$

$$+ f_{Cl}\left\{e^{-\pi i(\nu_1)} + e^{-\pi i(\nu_2)} + e^{-\pi i(\nu_3)} + e^{-i\pi(\nu_1+\nu_2+\nu_3)}\right\}$$

قيمة S_G تعتمد على قيم ν_1, ν_2, ν_3 فيما اذا كانت فردية ام زوجية:

١- عندما تكون ν_1, ν_2, ν_3 كلها اعداد صحيحة فردية فان:

$$S_G = f_{Na}\{1+1+1+1\} + f_{Cl}\{-1-1-1-1\}$$

$$S_G = 4(f_{Na} - f_{Cl}) \qquad \Rightarrow \qquad S_G^2 = 16(f_{Na} - f_{Cl})^2$$

٢-عندما تكون ν_1, ν_2, ν_3 كلها اعداد صحيحة زوجية فان:

$$S_G = f_{Na}\{1+1+1+1\} + f_{Cl}\{1+1+1+1\}$$

$$S_G = 4(f_{Na} + f_{Cl}) \qquad \Rightarrow \qquad S_G^2 = 16(f_{Na} + f_{Cl})^2$$

بالمقارنة بين شدة الاستطارة في حالة الاعداد كلها الفردية odd وحالة الاعداد كلها الزوجية even نجد ان:

$$S_{odd}^2 = 16(f_{Na} - f_{Cl})^2 \qquad < \qquad S_{even}^2 = 16(f_{Na} + f_{Cl})^2$$

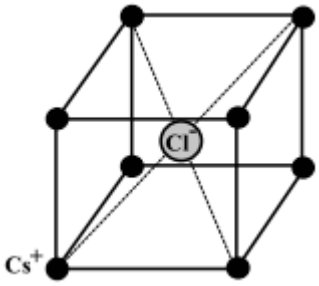
معنى ذلك ان الشدة في حالة الاعداد كلها الفردية مثل *(111),(311)* اضعف مما هي في حالة الاعداد كلها الزوجية مثل *(200),(222)*

٣-عندما تكون ν_1, ν_2, ν_3 اعداد صحيحة مختلطة زوجية وفردية مثلا: ν_1 فردي و ν_2, ν_3 زوجية لكلا الذرتين فان، $S_G = f_{Na}\{1+1-1-1\} + f_{Cl}\{-1+1+1-1\}$

$$S_G = 0 \qquad\qquad S_G^2 = 0$$

وهذا يعني عندما تكون ν_1, ν_2, ν_3 اعداد صحيحة مختلطة زوجية وفردية مثل(211),(100) لا يحدث انعكاس والشدة تساوي صفر.

مثال 6: احسب عامل التركيب الأساسي و شدة الاستطارة لوحدة خلية بلورة كلوريد السيزيوم *CsCl* وهي من نوع مكعب متمركز الجسم حيث توجد في كل وحدة خلية ايون سيزيوم موضوع عند (0,0,0) وايون كلور عند $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$.



الحل:

$$S_G = f_{Sc} e^{-2\pi i(0)} + f_{Cl} e^{-2\pi i\left(\frac{\nu_1}{2}+\frac{\nu_2}{2}+\frac{\nu_3}{2}\right)}$$

فاذا كان حاصل الجمع $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$ = عدد زوجي فان $S_G = f_{Sc} + f_{Cl} e^{-\pi i(even)} = \cdots$

$$|S_G|^2 = \cdots$$

فاذا كان حاصل الجمع $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$ = عدد فردي فان $S_G = f_{Sc} + f_{Cl} e^{-\pi i(odd)} = \cdots$

$$S_G^2 = \cdots$$

ناقش الحل ..... . وماذا ستكون نتائج الشدة وعامل التركيب في حالة كون $f_{Sc} = 3f_{Cl}$ ؟