٤-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:

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

مما تقدم يمكن تعريف الشبيكة المقلوبة على إنها عدد غير محدود من نقاط مرتبة بانتظام وبشكل دوري في فضاء ذات ثلاثة أبعاد ، وان طول المتجه بين نقطة الأصل و أي نقطة في الشبيكة المقلوبة تتناسب عكسيا مع المسافة البينية d_{hkL} .

الشبيكة المقلوبة هي في فضاء فورير وبعبارة ادق في فضاء كمية الحركة (الزخم) $\vec{p} = \hbar k$ او فضاء متجه الموجة $\vec{k}$.

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:

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

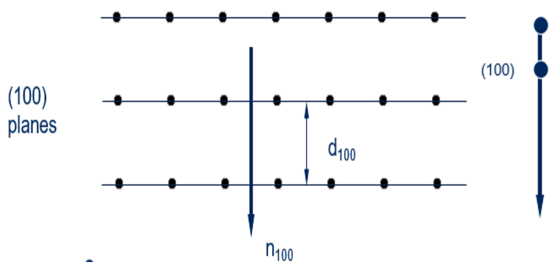
A يمثل معامل مقياس الرسم و قيمته بين 1 و 2π

==

٥-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-نعيّن 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:

$$\boldsymbol{A} = \frac{\mathbf{1}}{\boldsymbol{d_{100}}} \qquad \textbf{and} \qquad \boldsymbol{B} = \frac{\mathbf{1}}{\boldsymbol{d_{010}}}$$

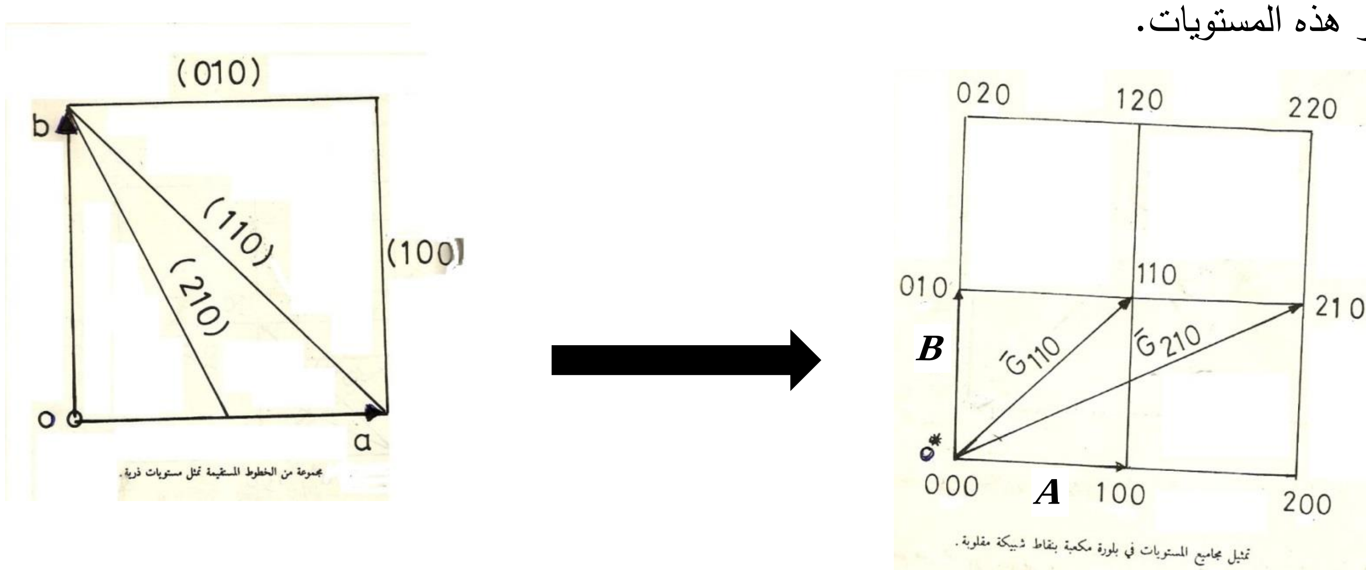
٥-نثبت نقاط تقاطعات الاعمدة مع المستويات حيث انها ستمثل نقاط الشبيكة المقلوبة.

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:

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

==

<u>مثال:</u> 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.



==

<u>٦–خواص الشبيكة المقلوبة</u>

١–للشبيكة المقلوبة متجهات أساسية مثل الشبيكة الحقيقية واحداثيات أي نقطة في فضاء الشبيكة المقلوبة تعطى بالعلاقة:

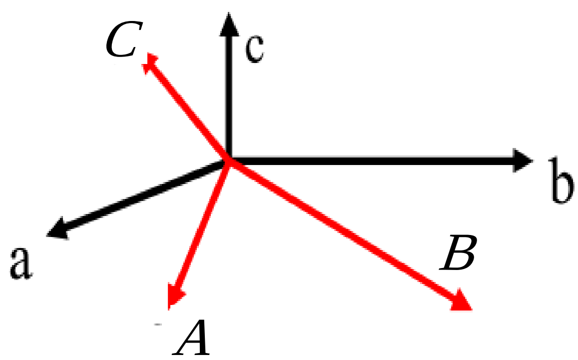
$$\vec{G} = \nu_1\vec{A} + \nu_2\vec{B} + \nu_3\vec{C}$$

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: $\vec{G}_{hkl} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}$ 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 الخلية البدائية 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 البدائية 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:

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

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

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

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

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:

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

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

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

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

==

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

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

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

<u>واجب 2</u>: جد متجهات الشبيكة المقلوبة لشبيكة متجهاتها الأساسية الحقيقية هي: $\vec{a} = 2\hat{\imath}$, $\vec{b} = \hat{\imath} + 2\hat{\jmath}$, $\vec{c} = \hat{k}$

والزوايا الأساسية $\alpha = \beta = \gamma = 90^o = \frac{\pi}{2}$