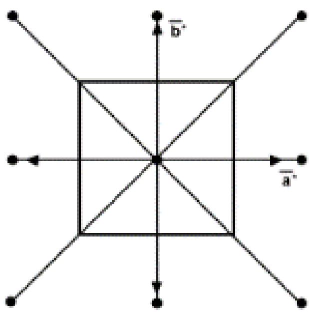
٧-مناطق بريليون Brillion Zones

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 الخلية البدائية للشبيكة المقلوبة في حالة المكعب البسيط *SC* (بالاستفادة من المثال السابق في ص٥٩) :

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

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

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

==

منطقة بريليون الأولى لشبيكة المكعب البسيط

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

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

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

==

<u>مثال:</u> 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:

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

<u>الحل:</u> (لايجاد المتجهات الأساسية للشبيكة المقلوبة لحالة شبيكة متمركزة الجسم *BCC* نتبع نفس خطوات المثال السابق لحالة *BCC* في ص٥٩) 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: $\vec{G} = \nu_1\vec{A} + \nu_2\vec{B} + \nu_3\vec{C}$

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

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

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

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

وبذلك تحدد منطقة بريليون الأولى لهذه الحالة بـ 12 متجه.

==

<u>مثال:</u> 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:

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

<u>الحل:</u> كما مر سابقا نجد ان المتجهات الاساسية للشبيكة المقلوبة هي

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

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

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

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

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

==

<u>٨–الحيود في الشبيكة المقلوبة</u>

نظرية الحيود بينت بأن الشبكة البلورية والموجات (الكترونات، بروتونات، فوتونات ....) 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 فورييه ، 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 $\frac{2\pi}{d}$ ونسميه هنا بالمتجهة $\vec{G}$ اي ان: $\vec{G} = \frac{2\pi}{d}$ ، ومن الطبيعي فإن هذا المتجه بشكل عام هومتجه 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 :

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

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

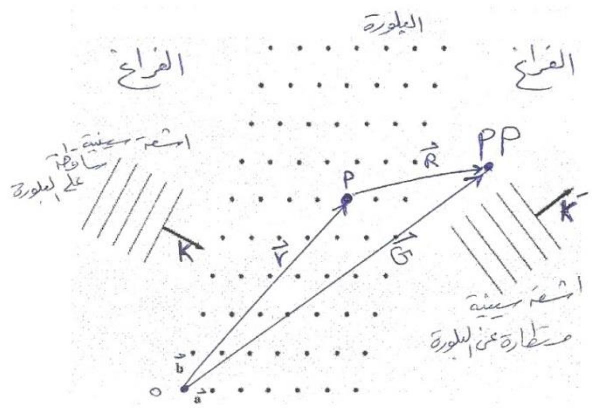
==

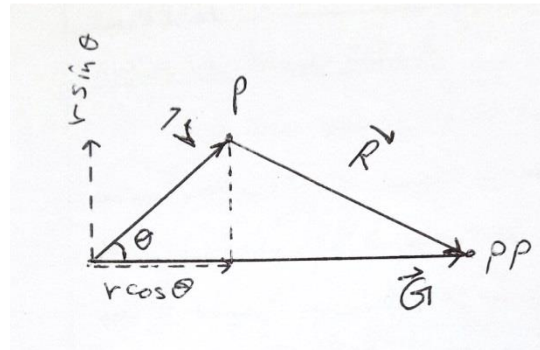
٩-اشتقاق لاوي لسعة الموجة المستطيرة (المُحادة)

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، 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:

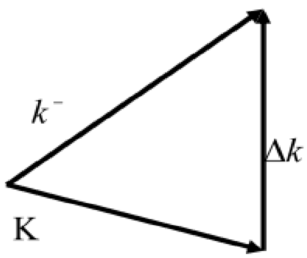
$$\boldsymbol{P.F. = e^{i\,\vec{K}\cdot\vec{r}}\, e^{i\,\vec{K}\cdot\vec{G}} e^{-i\,\vec{K}\,r\,\cos\theta}}$$

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: $K\,r\ \cos\theta = \acute{K}\,r\ \cos\theta = \vec{K'}\cdot\vec{r}$

ونعوضها في علاقة عامل الطور الكلي فنحصل على:

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

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



و لايجاد محصلة سعة الموجة المستطارة عن كل نقطية 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 :

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

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

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

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

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

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

ومن خصائص الشبيكة المقلوبة (الصفحة رقم ٥٨ 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:

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

==

١٠-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.