

## الفصل الثالث: الحيود في البلورات

### 1- المقدمة

في هذا الفصل سنتناول كيفية التعرف على التركيب البلوري للمواد الصلبة ودراسة الترتيب الذري في الشبكة البلورية باستعمال مفاهيم الحيود في البلورات. من الممكن فهم التركيب البلوري للمواد الصلبة بدراسة نمط الحيود لحزمة من الأشعة الساقطة على البلورة. يحدث حيود الأشعة فقط في اتجاهات محددة تماما مثلما يحدث للضوء بواسطة محزوز الحيود. قياس اتجاهات الحيود وشدة الأشعة المشتتة المقابلة يمكن الحصول على معلومات إضافية تفيد في دراسة التركيب البلوري المسبب لهذا الحيود. تستخدم ثلاثة أنواع من حزم الأشعة في تجارب الحيود هي: الأشعة السينية -X-ray، وحزمة النيوترونات Neutron beam وحزمة الإلكترونات Electrons beam. تكون المعالجة الرياضية للأنواع الثلاثة متشابهة تقريبا ولذلك سوف نفحص بالتفصيل حالة الأشعة السينية فقط. بعد مناقشة مختصرة لتوليد وخصائص الأشعة السينية، سنقدم استنتاجا مختصرا لقانون براغ لتشتت الأشعة بواسطة المستويات البلورية. سنناقش أيضا تشتت الأشعة بواسطة الذرة وبواسطة البلورة. في هذا السياق سوف نناقش الشبكة الإنقلابية ومختلف الطرق العملية لدراسة التركيب البلوري. كما سوف نلقى الضوء على حيود النيوترونات والإلكترونات وإظهار خصائص كل منهما. وأخيرًا، سوف ندرس الأسس النظرية لتحديد التركيب البنائي للسائل ودالة التوزيع الزاوي التي تتعين بواسطة ما يسمى بمعامل تركيب البناء.

## 2- لأشعة المستخدمة لدراسة التركيب البلوري:

## Used rays in studying crystal structure

لكي تكون الأشعة مناسبة لدراسة التركيب البلوري للمادة في الحالة الصلبة يجب أن يكون الطول الموجي للأشعة مساويا تقريبا للمسافة بين الذرات. وحيث أن المسافة بين ذرات المادة الصلبة تكون في حدود  $10^{-8}$  cm فإن الأشعة التي بواسطتها يمكن الحصول على معلومات مهمة عن التركيب البنائي للمادة يجب أن يكون لها طول موجي في المرتبة نفسها ( $10^{-8}$  cm). عند سقوط بعض أنواع الإشعاعات على المادة الصلبة فإنها تنتشت بواسطة المستويات الذرية للمادة وتحيد عن مسارها وتتداخل معا مكونة نموذج حيود (Diffraction pattern) يحمل في طياته معلومات عن التركيب البنائي للمادة. يمكن استخراج هذه المعلومات والحصول على تفاصيل التركيب البنائي للمادة المتبلورة عن طريق تحليل نماذج الحيود الجيدة للأشعة داخل هذه المادة. يمكن استخدام العديد من أنواع الفوتونات في تجارب الحيود لدراسة التركيب البنائي للمادة المتبلورة منها: الأشعة السينية، النيوترونات والإلكترونات. بالرغم من أن هذه الأنواع تختلف فيما بينها في الطاقة) وبالتالي في الطول الموجي(، إلا أن المعالجة الرياضية للأنواع الثلاثة تكون متشابهة تقريبا. تعتمد زوايا حيود الفوتونات في المادة، بصورة أساسية، على كل من التركيب البنائي للمادة المسببة للحيود و الطول الموجي للفوتونات المستخدمة. تتعين طاقة فوتون الأشعة السينية طبقا لطولها الموجي من العلاقة:

$$E = hv = h \frac{c}{\lambda} \quad (3-1)$$

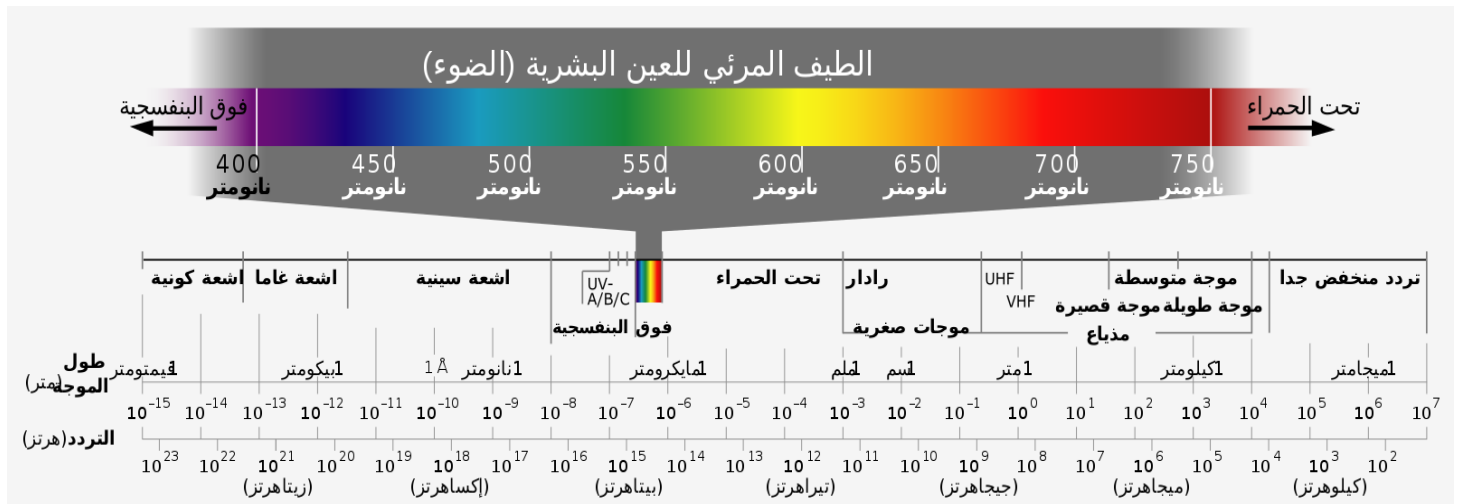
حيث h ثابت بلانك (  $6.62 \times 10^{-24}$  J.s )،  $\nu$  تردد الموجة،  $\lambda$  الطول الموجي، c سرعة الضوء (  $3 \times 10^8$  m.s<sup>-1</sup> ) ومن هذه العلاقة يمكن كتابة الطول الموجي للأشعة السينية على العلاقة:

$$\lambda(\text{\AA}) = \frac{12.4}{E(\text{keV})} \quad (3-2)$$

يتضح من هذه العلاقة أن طاقة فوتون الأشعة التي تكون في حدود 10-50 keV يعطى طول موجي في حدود 0.4-1.2 Å. يوضح الشكل (3-1) موقع الأشعة السينية في طيف الإشعاع الكهرومغناطيسي. في هذا الطيف بسبب غياب القيم الدقيقة للحدود العلوية والسفلية لمناطق الموجات الكهرومغناطيسية المختلفة فإن الحدود بين المناطق تكون اختيارية. تصلح أشعة النيوترونات المعجلة في دراسة التركيب البنائي لبعض أنواع المواد الصلبة وذلك بسبب عزمها المغناطيسي، الأمر الذي يجعلها تتفاعل بشدة مع الكتلونات الذرات التي تكون المادة. ترتبط طاقة النيوترون المتحرك بسرعة كبيرة بطول موجات دي برولي المصاحبة له طبقا للعلاقة،

$$E = \frac{h^2}{2M_n \lambda_d^2} \quad (3-3)$$

حيث  $M_n$  كتلة النيوترون ( $1.675 \times 10^{-24}$  gm).



الشكل (3-1) طيف الإشعاع الكهرومغناطيسي.

وبالتعويض عن كتلة النيوترون وثابت بلانك في هذه المعادلة يمكن الحصول على الطول الموجي في العلاقة:

$$\lambda(\text{\AA}) = \frac{0.28}{\sqrt{E(eV)}} \quad (3-4)$$

ويكون الطول الموجي لنيوترون ذو الطاقة 0.08 eV في حدود 1 \text{\AA} ويطلق على مثل هذه النيوترونات أسم النيوترونات الحرارية.

تصلح الالكترونات المعجلة للاستخدام في تجارب الحيود وذلك بسبب شحنتها الكهربائية، الأمر الذي يجعلها تتفاعل بشدة مع ذرات المادة. وأيضا، بسبب شحنتها تكون مسافة الاختراق للالكترونات اقل منها في حالة الأشعة السينية ولذلك تستخدم الأشعة الالكترونية في دراسة التركيب البلوري لأغشية رقيقة من المواد أو دراسة أسطح البلورات السميكة. ترتبط طاقة الالكترونات المتحركة بسرعة كبيرة بطول موجات دي برولى المصاحبة لها طبقا للعلاقة،

$$E = \frac{h^2}{2m_e\lambda^2} \quad (3-5)$$

حيث  $m_e$  كتلة الالكترون ( $9.11 \times 10^{-28}$  gm) يمكن كتابة الطول الموجي المصاحب للإلكترون وفقا للعلاقة،

$$E = \frac{12}{\sqrt{E(eV)}} \quad (3-6)$$

### 3- حيود الأشعة السينية من ذرة: X-ray scattering from an atom

يمكن تقسيم عملية حيود الأشعة على مرحلتين (1) :حيود الأشعة بواسطة ذرات منفصلة، و (2) حيود بواسطة التداخل المتبادل بين الأشعة الحايمة .وحيث أن المرحلتين متميزتين بعضهما عن بعض، فمن الملائم معالجة كل منهما بشكل منفصل. لفهم ما يحدث، دعنا نتساءل لماذا تشتت الذرة الأشعة السينية؟ حسناً، كما نعلم تحاط أي ذرة بالإلكترونات التي تخضع للتعجيل تحت تأثير عمل المجال الكهربائي المرتبط بالشعاع. بما أن الشحنة المعجلة تبعث إشعاعاً، فإن الإلكترونات الذرية تبعث إشعاعاً أيضاً. في الحقيقة، تمتص الإلكترونات طاقة من الإشعاع الساقط عليها وتسبب تشتته في جميع الاتجاهات. وحيث أن الإلكترونات تشكل سحابة شحنة حول النواة، فإننا يجب أن نأخذ في الاعتبار فروق الطور بين الأشعة المنتشرة من المناطق المختلفة للسحابة الإلكترونية عند أخذ التشتت من الذرة ككل في الاعتبار. فيما يلي، سوف نبين كيف يتم ذلك . افترض إلكترون منفرد، كما هو مبين بالشكل (2-3) يسقط على إلكترون مجال موجة مستوية يعطى بالعلاقة،

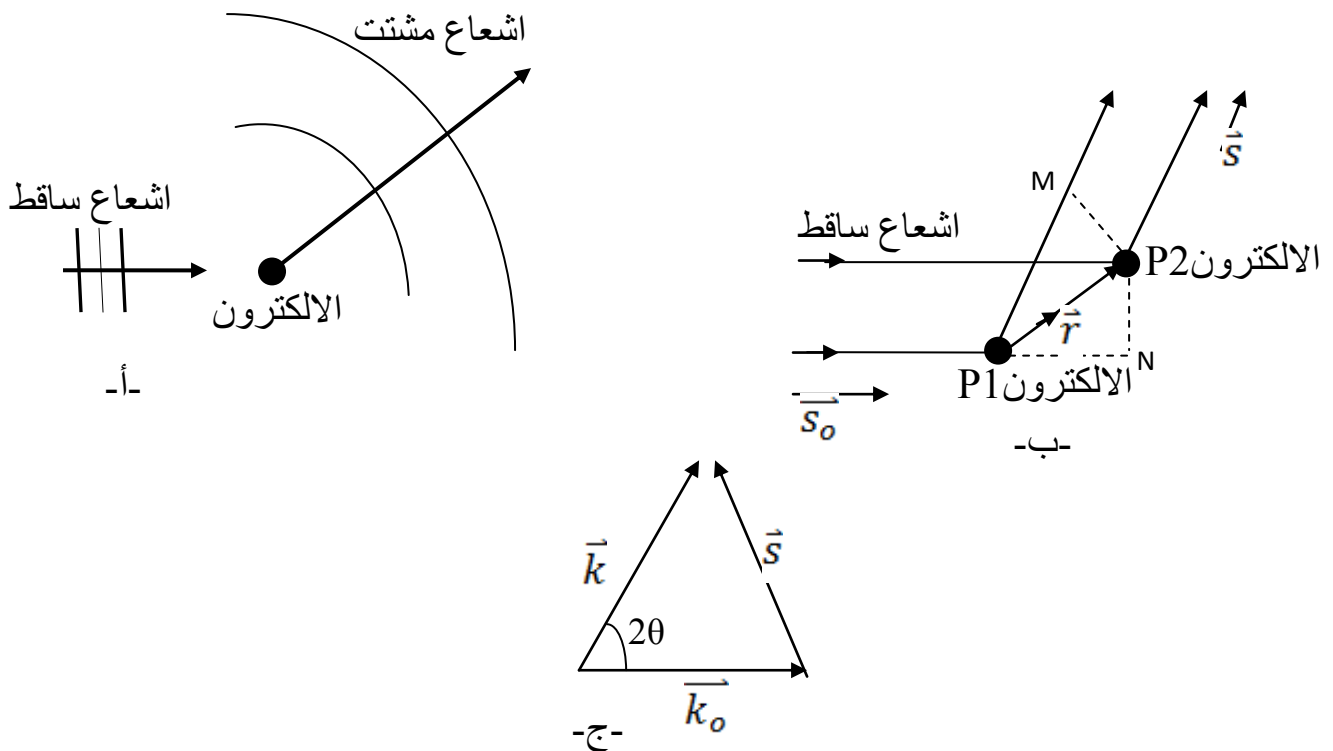
$$u = Ae^{i(\vec{k}_o \cdot \vec{r} - wt)} \quad (3-7)$$

حيث A سعة الموجة،  $\vec{k}_o = \frac{2\pi}{\lambda}$  متجه الموجة، و  $w$  التردد الزاوي. يكون المجال المشتت عبارة

عن موجة كروية خارجة تمثل بالمعادلة الآتية:

$$u' = f_e \frac{A}{D} e^{i(kD - wt)} \quad (3-8)$$

حيث  $f_e$  هو متغير يعرف بطول التشتت للإلكترون،  $D$  المسافة النصف قطرية من الإلكترون حتى النقطة التي عندها يتم حساب المجال. الكمية  $k$  هي العدد الموجي للموجة المشتتة ويكون لها نفس القيمة مثل  $\vec{k}_0$ . لاحظ أن سعة الموجة المشتتة تتناقص مع المسافة  $(1/D)$ .



الشكل (3-2) الحيود (أ) الكترون منفرد. (ب) الالكترونين اثنين. (ج) متجه الحيود.

افتراض الآن أن الحزمة الساقطة تؤثر على إلكترونين اثنين، كما هو موضح بالشكل (3-

2ب). في هذه الحالة، يبث كلا الإلكترونين موجات كروية ويكون المجال المشتت الملاحظ عند

نقطة بعيدة عبارة عن مجموع المجالات الجزئية، حيث يجب أخذ فرق الطور في الاعتبار. فإن

$$u' = f_e \frac{A}{D} [e^{ikD} + e^{i(kD+\delta)}] \quad (3-9)$$

حيث  $\delta$  مقدار تأخير الموجة المشتتة بواسطة الإلكترون رقم 1 عن الموجة المشتتة بواسطة الإلكترون رقم 2 (تم حذف عامل الزمن بغرض الإيجاز، ولكنه موجود ضمناً، كما تم اعتبار أن المسافة D إلى نقطة المجال كبيرة وإلا فإن المقام D لا يكون واحداً بالنسبة للإلكترونين). يسهل هذا الشرط الحسابات كما يوضح لماذا يوضع الكاشف (عادة على مسافة كبيرة من البلورة) بالرجوع للشكل (3-2) يمكن كتابة

$$\delta = \frac{2\pi}{\lambda} (\overline{P1N} - \overline{P1M}) = (\vec{r} \cdot \vec{s} - \vec{r} \cdot \vec{s}_o)k \quad (3-10)$$

حيث  $\vec{r}$  متجه نصف القطر للإلكترون 2 نسبة إلى الإلكترون 1 و  $\vec{s}$  و  $\vec{s}_o$  هما متجهات الوحدة لاتجاهات السقوط والتشتت على التوالي. يمكن كتابة  $\delta$  من الآن فصاعداً بالعلاقة

$$\delta = \vec{s} \cdot \vec{r} \quad (3-11)$$

حيث يعرف متجه التشتت على النحو التالي،

$$\vec{s} = k(\vec{s} - \vec{s}_o) = \vec{k} - \vec{k}_o \quad (3-12)$$

كما يتبين من الشكل (3-2ج) يمكن كتابة مقدار متجه التشتت على الصورة،

$$s = 2k \sin \theta \quad (3-13)$$

حيث  $\theta$  نصف زاوية التشتت. بالتعويض عن  $\delta$  من المعادلة (3-11) في (3-9) نجد

$$u' = f_e \frac{A}{D} e^{ikD} [1 + e^{i(\vec{s} \cdot \vec{r})}] \quad (3-14)$$

في استنتاجنا هذا، اخترنا نقطة اصل المحاور عند الإلكترون 1 ويمكننا الآن اختيار نقطة أصل أكثر ملائمة عند أي نقطة اختيارية، وبهذا الأسلوب نعالج كلا الإلكترونين على قدم وساق وبالتالي، يكون التعبير الرياضي للمجال المشتت الناتج على العلاقة

$$u' = f_e \frac{A}{D} e^{ikD} [e^{i(\vec{s} \cdot \vec{r}_1)} + e^{i(\vec{s} \cdot \vec{r}_2)}] \quad (3-15)$$

حيث  $\vec{r}_1$  و  $\vec{r}_2$  متجهات الموضع للإلكترونين بالنسبة إلى نقطة الأصل الجديدة. المعادلة (3-14) عبارة عن حالة خاصة من المعادلة (3-15)، حيث  $\vec{r}_1 = 0$  بمعنى أن نقطة الأصل كانت مختارة عند الإلكترون 1، كما تم توضيحه من قبل. يمكن تعميم المعادلة (3-15) لأي عدد من الأجسام المشتتة (الإلكترونات) على النحو التالي

$$u' = f_e \frac{A}{D} e^{ikD} \sum e^{i(\vec{s} \cdot \vec{r}_1)} \quad (3-16)$$

حيث  $\vec{r}_1$  هو متجه الموضع للإلكترون رقم 1، ويتم إجراء المجموع على جميع الإلكترونات. وبالمثل، كما في حالة الإلكترون المنفرد، المعادلة (3-8) يمكن الحصول على طول التشتت للنظام ككل بالمجموع التالي

$$f = f_e \sum e^{i(\vec{s} \cdot \vec{r}_1)} \quad (3-17)$$



تفيد المعادلة السابقة أن الطول الكلي للتشتت عبارة عن مجموع أطوال التشتت الفردية مع اخذ الأطوار في الاعتبار كما ينبغي. تتناسب شدة الحزمة المشتتة مع مربع مقدار المجال ولهذا،

$$I \sim |f|^2 = f_e^2 \left| \sum e^{i\vec{s} \cdot \vec{r}_1} \right|^2 \quad (3-18)$$

المعادلتين (3-17) و (3-18) التي حصلنا عليهما تمثلان تساؤلات مهمة في معالجة عمليات التشتت والحيود ومع ذلك سوف نستخدمهما هذه المرة وفي الصفحات التالية مرة أخرى. يمكننا أن نشير باختصار إلى سمة مهمة من سمات التشتت وهي خاصية الترابط المصاحبة لعملية التشتت. تعنى هذه الخاصية أن الأجسام المشتتة تحافظ على علاقات طوريه محددة فيما بينها، وبناءً على ذلك، يمكننا التحدث عن التداخل بين الأشعة الجزء  $\theta$  على الجانب الآخر، إذا تذبذبت الأجسام المشتتة بشكل عشوائي، أو غير مترابط، فإن الأشعة الجزء  $\theta$  لا تتداخل، وستكون شدة الأشعة عند الكاشف عبارة عن مجموع الأشعة الجزئية، أي أن

$$I \sim N f_e^2 \quad (3-19)$$

حيث N عدد الأجسام المشتتة. لاحظ الفرق الملحوظ بين هذه النتيجة وبين التشتت المترابط في المعادلة (3-18). من الجدير بالذكر أن طول تشتت الإلكترون معروف جيداً، ويمكن إيجاده في أي كتاب كهرومغناطيسية وعلى كل حال تكتب قيمة طول تشتت الإلكترون على العلاقة،

$$f_e = \left\{ \frac{(1 + \cos^2 2\theta)}{2} \right\}^{\frac{1}{2}} r_e \quad (3-20)$$

حيث  $r_e$  تسمى نصف قطر الإلكترون التقليدي وله قيمة في حدود  $10^{-15}$  m.

يمكننا الآن تطبيق هذه النتائج على حالة ذرة منفردة. عند محاولة تطبيق المعادلة (3-17) (حيث يظهر المجموع على الإلكترونات (نلاحظ انه ليس للإلكترونات) مواضع محددة بل على هيئة سحابة شحنة متصلة تنتشر على امتداد حجم الذرة. ولذلك يجب تحويل المجموع المنفرد إلى التكامل المقابل، وهذا يؤدي إلى

$$f_e \sum e^{i(\vec{s} \cdot \vec{r}_1)} = f_e \int \rho(\vec{r}) e^{i(\vec{s} \cdot \vec{r}_1)} d^3 r \quad (3-21)$$

حيث  $\rho(\vec{r})$  هي كثافة السحابة الإلكترونية لوحدة الحجم، ويكون التكامل على مجمل الحجم الذري يعرف عامل التشتت الذري  $f_a$  بأنه عبارة عن التكامل الموجود في المعادلة السابقة، أي أن

$$f_a = \int d^3 r \rho(\vec{r}) e^{i(\vec{s} \cdot \vec{r}_1)} \quad (3-22)$$

(لاحظ أن  $f_a$  كمية ليس لها أبعاد). يمكن تبسيط التكامل السابق وذلك باعتبار  $\rho(\vec{r})$  متماثلة كروياً حول النواة، لأنه حينئذ يمكن إجراء التكامل على الجزء الزاوي من عنصر الحجم. ويكون التعبير الناتج هو

$$f_a = \int_0^R 4\pi r^2 \rho(\vec{r}) \frac{\sin sr}{sr} dr \quad (3-23)$$

حيث  $R$  نصف قطر الذرة (وتوضع النواة عند المركز). كما يتبين من المعادلة (3-23) فإن عامل التشتت  $f_a$  يعتمد على زاوية التشتت (تذكر ان  $s = 2k \sin \theta$ )، ويأتي هذا من وجود عامل

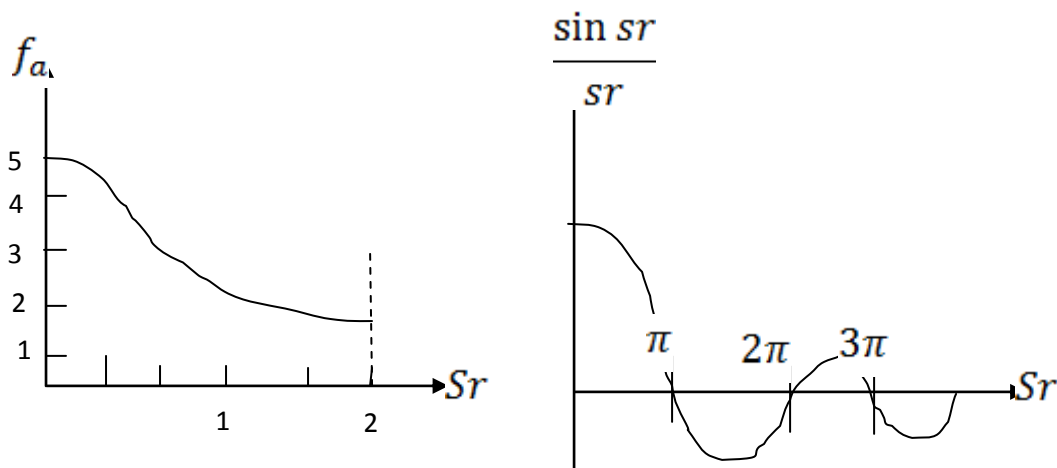
التذبذب  $\left(\frac{\sin sr}{sr}\right)$  في الكمية المطلوب تكاملها. يتناسب الطول الموجي للتذبذب عكسياً مع  $s$  ويزداد بسرعة التذبذب، بمعنى كلما كان الطول الموجي أقصر فإن  $f_a$  يتناقص، نتيجة التداخل بين حزم الأشعة المشتتة بواسطة المناطق المختلفة من سحابة الشحنة. وحيث أن  $s = 2k \sin \theta$  المعادلة (3-13) نجد أن  $s$  تزداد بزيادة زاوية التشتت  $2\theta$  ويؤدي هذا إلى تقليل عامل التشتت  $f_a$ . لكي نتابع تقدير  $f_a$  فإنه من الضروري معرفة كثافة الإلكترون  $\rho(\vec{r})$  في الذرة قيد الدراسة. يوجد اتجاه واحد خاص يمكن تقدير  $f_a$  له في الحال يسمى الاتجاه الأمامي. في هذه الحالة  $\theta = 0$  و  $s = 0$  وبالتالي يختزل عامل التذبذب  $\frac{\sin sr}{sr}$  إلى الواحد الصحيح عندما  $sr=0$  و تصبح المعادلة (3-23)

$$f_a = \int_0^R 4\pi r^2 \rho(\vec{r}) dr \quad (3-24)$$

وببساطة، فإن التكامل يساوي العدد الكلي للإلكترونات في الذرة، أي العدد الذري  $Z$  ويمكننا كتابة المعادلة السابقة على الصورة،

$$f_a(\theta = 0) = z \quad (3-25)$$

وهكذا بالنسبة للكربون نجد أن  $f_a(\theta = 0) = 6$  وهذا يتفق مع الشكل (3-3).



الشكل (3-3) (أ) عامل التذبذب  $\frac{\sin sr}{sr}$ . (ب) عامل الحيود الذري للذرة.

#### 4- حيود الأشعة السينية في البلورة: X-ray scattering from a crystal

بالطبع، هدفنا في هذا الباب هو فحص الحيود من البلورة لذا سنكمل تطبيق المعادلة (3-17) في هذه الحالة. بالمثل كما في الحالة الذرية، يعرف عامل التشتت البلوري،  $f_a$ ، على النحو

$$f_{cr} = \sum_l e^{i\vec{s} \cdot \vec{r}_l} \quad (3-26)$$

حيث يمتد المجموع في هذه المعادلة ليشمل كل الالكترونات الموجودة في البلورة. للاستفادة من عامل التشتت الذري الذي نوقش من قبل، سوف نجزي المجموع (3-26) إلى قسمين. أولاً نقوم بإجراء المجموع على كل الالكترونات الموجودة في الذرة المنفردة، ثم نجرى الجمع على كل الذرات الموجودة في الشبكة. يعادل هذا المجموع المزدوج المجموع على كل الالكترونات الموجودة في البلورة، كما هو مطلوب في المعادلة (3-26). وحيث أن المجموع الأول من المجاميع السابقة يعبر عن عامل التشتت الذري، فإنه يمكن كتابة المعادلة (3-26) على النحو

$$f_{cr} = \sum_l e^{i\vec{s} \cdot \vec{R}_l} \quad (3-27)$$

حيث  $\vec{R}$  موضع الذرة رقم  $l$ .

من الملائم الآن، إعادة كتابة المعادلة (3-27) كحاصل ضرب عاملين اثنين: أحدهما يشمل المجموع على خلية الوحدة والآخر يشمل المجموع على كل خلايا الوحدة في البلورة. وهكذا يتم تعريف عامل البناء الهندسي  $F$  على النحو التالي

$$F = \sum_j f_{aj} e^{i\vec{s} \cdot \vec{\delta}_l} \quad (3-28)$$

حيث يكون المجموع على كل الذرات الموجودة في خلية الوحدة ويكون  $\vec{\delta}_l$  هو الموضع النسبي للذرة  $j$ . بالمثل، يمكن تعريف عامل التركيب البنائي للشبيكة  $S$  على النحو

$$S = \sum_j e^{i\vec{s} \cdot \vec{R}_l^{(c)}} \quad (3-29)$$

حيث يمتد المجموع على كل خلايا الوحدة في البلورة والمتجه  $\vec{R}_l^{(c)}$  يمثل موضع الخلية رقم  $l$  في

البلورة. وللتعبير عن  $f_{cr}$  بدلالة  $F$  و  $S$  نعود إلى المعادلة (3-27) ونكتب  $\vec{R}_l = \vec{R}_l^{(c)} + \vec{\delta}_j$  ثم

نستخدم المعادلتين (3-28) و (3-29). تكون النتيجة

$$f_{cr} = FS \quad (3-30)$$

لاحظ أن عامل الشبيكة  $S$  يعتمد فقط على النظام البلوري الضمني، بينما يعتمد  $F$  على الشكل

الهندسي بالإضافة إلى محتويات خلية الوحدة. في الحالة الخاصة، حيث تحتوى خلية الوحدة على

ذرة واحدة يصبح العامل  $F$  مساويا للعامل  $f_a$ . في الحقيقة، نجد تحليل العوامل  $f_{cr}$  المبينة في

المعادلة (3-30) يستحق بعض التأكيد: لقد قمنا باستخلاص الخصائص البنائية للشبيكة، المتضمنة

في  $S$ ، تماما من الخصائص الذرية المتضمنة في  $F$ . وتم اللجوء إلى تبسيط كبير في المعالجة،

ويمكننا الآن معالجة هذين العاملين بشكل مستقل. وحيث أن العامل  $F$  يتضمن المجموع على بضع

عوامل ذرية فقط، فإنه يمكن بسهولة تقديره بدلالة العوامل الذرية لذلك الآن، سوف سنركز على تقدير عامل التركيب البنائي للشبيكة  $S$ .

### 5- عامل التركيب الاساس للشبيكة: The lattice structure factor

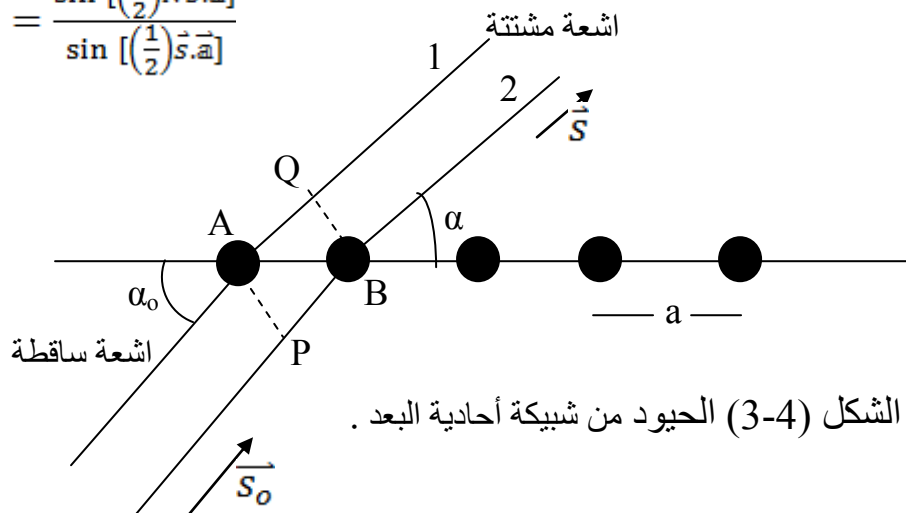
في مناقشة حيود الأشعة السينية، يعتبر عامل التركيب الاساس للشبيكة،  $S$ ، والمعروف بالمعادلة (3-29)، ذو أهمية حيوية. سنفحص الآن اعتماد هذا العامل على عامل الحيود،  $S$ ، وسنعين قيم  $S$  التي عندها لا يغيب  $S$  من المجموعة المنفصلة والتي تتعلق بقانون براغ.

سنبدأ الفحص بأبسط الحالات الممكنة وهي حيود حزمة من الأشعة بواسطة شبيكة في بعد واحد تتكون من ذرة واحدة، كما هو موضح في الشكل (3-4). بفرض أننا نرسم لمتجه الأساس بالرمز  $\vec{a}$ ، فإنه يمكن كتابة عامل التركيب البنائي على الصورة،

$$S = \sum_{l=1}^N e^{i\vec{s} \cdot l\vec{a}} \quad (3-31)$$

حيث وضعنا  $\vec{R}_l^c = l\vec{a}$  و  $N$  هو العدد الكلي للذرات. المتسلسلة في المعادلة (3-31) هي متوالية هندسية وتكون النسبة المشتركة لها  $e^{i\vec{s} \cdot l\vec{a}}$  ويمكن تقديرها بسهولة، حيث تكون النتيجة هي،

$$S = \frac{\sin \left[ \left( \frac{1}{2} \right) N \vec{s} \cdot \vec{a} \right]}{\sin \left[ \left( \frac{1}{2} \right) \vec{s} \cdot \vec{a} \right]} \quad (3-32)$$



نود الآن أن نرى كيف تعتمد هذه الدالة على متجه التشتت  $\vec{s}$ . كما نرى من المعادلة (3-32)  $s$  هي نسبة الدالتين المتذبذبتين اللتين لهما فترة مشتركة  $\vec{s} \cdot \vec{a} = 2\pi$ ، لكن، السبب ان  $N$  أكبر بكثير من الوحدة في أي حالة عملية، فإن بسط الكسر يتذبذب بسرعة أكثر بكثير من تذبذب مقام الكسر. على أية حال، لاحظ انه للقيمة المعينة  $\vec{s} \cdot \vec{a} = 0$  يختفي كل من بسط ومقام الكسر في آن واحد، لكن القيمة المحددة لـ  $S^2$  تكون مساوية للعدد  $N$  وتكون عدد كبير جداً. بالمثل فإن قيمة  $S^2$  عند  $\vec{s} \cdot \vec{a} = 2\pi$  تكون مساوية لـ  $N^2$ ، وذلك طبقاً لدورية  $S^2$  المذكورة من قبل. تم رسم الدالة  $S^2$  مع  $\vec{s} \cdot \vec{a}$  في المدى  $0 \leq \vec{s} \cdot \vec{a} \leq 2\pi$  في الشكل (3-5). توجد لهذه الدالة قيمة عظمى أولية عند  $\vec{s} \cdot \vec{a} = 0$  و أخرى عند  $\vec{s} \cdot \vec{a} = 2\pi$  مفصولة بقمم ثانوية متداخلة تنتج من التذبذب السريع لبسط الكسر الموجود في المعادلة (3-32)، يمكن إهمال القمم الثانوية لصغر سعتها واعتبار الدالة  $S^2$  غير منتهية بالقرب من القمم الرئيسية. أضف إلى ذلك، انه يمكن توضيح أن اتساع كل قمة رئيسية يتناقص بسرعة مع زيادة  $N$ ، ويتلاشى الاتساع عندما تؤول  $N$  إلى مالا نهاية. ولهذا، تكون  $S^2$  غير منتهية فقط عند القيم المعطاة بالتحديد من  $\vec{s} \cdot \vec{a} = 0, 2\pi$  ولكن بسبب أن  $S^2$  دورية (زمنها الدوري  $2\pi$ ) فإنها تكون محددة عند كل القيم

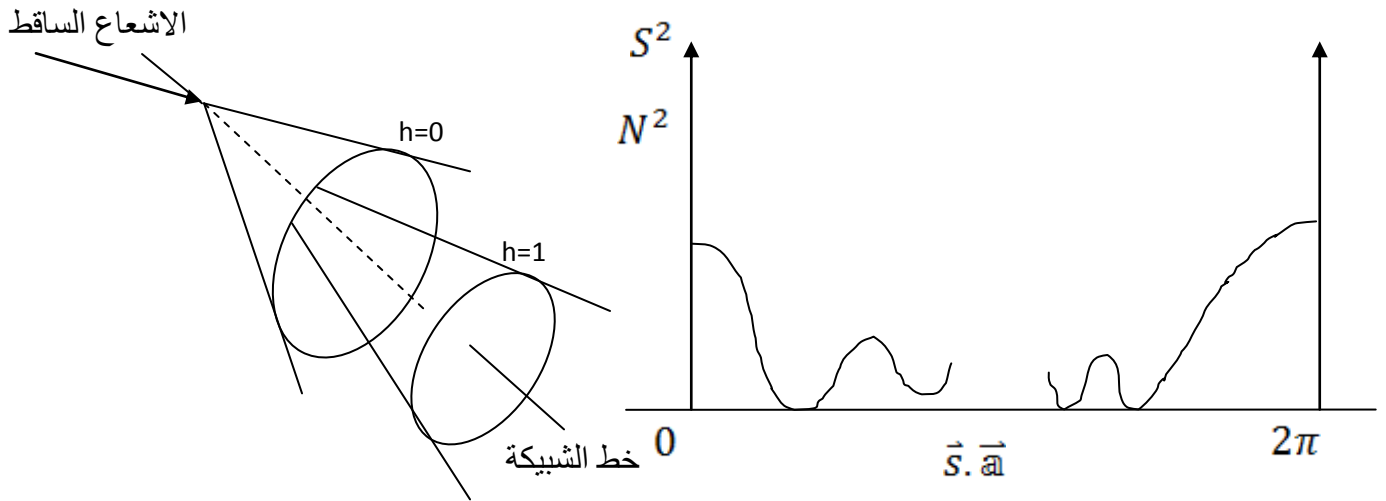
$$\vec{s} \cdot \vec{a} = 2\pi h \quad (3-33)$$

حيث  $h$  هو اي عدد صحيح. عند هذه القيم فإن  $S^2$  تساوي  $N^2$  وبالتالي فإن  $S=N$ . تعين المعادلة (3-33) كل الاتجاهات التي لا تكون فيها قيم  $S$  صفرية، وبالتالي الاتجاهات التي يحدث فيها

التشتت. ويظهر من هذه المعادلة المعنى الفيزيائي بشكل مباشر. بالرجوع إلى تعريف المتجه  $\vec{S}$  والإشارة إلى الشكل (3-4) نحصل على

$$\vec{S} \cdot \vec{a} = \frac{2\pi}{\lambda} (\vec{S} - \vec{S}_o) \cdot \vec{a} = \frac{2\pi}{\lambda} (\overline{AQ} - \overline{PB})$$

وهذا هو فرق الطور بين الأشعة المتتالية المشتتة. هكذا، فإن المعادلة (3-33) هي شرط التداخل البناء، بمعنى أن عامل تشتت الشبكة يبقى في هذه الاتجاهات.



الشكل (3-5) قمم الحيود (أ). مخروط الحيود للمرتبة الأولى  $h=0$  والثانية  $h=1$ .

في الحقيقة، لا يعين الشرط السابق (المعادلة (3-33)) اتجاه واحد لقيمة  $h$  المعطاة، ولكن يعين عدد لانهائي من الاتجاهات مكونة مخروطاً يقع محوره على امتداد خط الشبكة. لكي نرى ذلك، يمكننا كتابة المعادلة (3-33) على الصورة

$$\frac{2\pi a}{\lambda} (\cos\alpha - \cos\alpha_o) = 2\pi h \quad (3-34)$$



حيث  $\alpha_0$  الزاوية بين الحزمة الساقطة وخط الشبكة و  $\alpha$  الزاوية بين الحزمة الساقطة والحزمة المشتتة المقابلة. وهكذا عند قيم  $h$  و  $\alpha_0$  المعطاة فإن الحزمة تنتشت على امتداد كل الاتجاهات التي لها  $\alpha$  تحقق المعادلة (3-34). تكون هذه الاتجاهات مخروطا يقع محوره على امتداد الشبكة وزاوية رأسه تساوي  $2\alpha$ . الحالة  $h=0$  هي حالة خاصة، حيث أن المخروط في هذه الحالة يتضمن اتجاه التشتت الأمامي. يبين الشكل (3-5 ب) مخاريط التشتت المقابلة لعدة قيم من  $h$ . حتى الآن، في معالجتنا لعامل التركيب البنائي للشبكة، حصرنا أنفسنا في حالة الشبكة أحادية البعد. فيما يلي، سنمتد بالمعالجة إلى حالة حقيقية لشبكة ثلاثية الأبعاد. بالرجوع إلى المعادلة (3-29) والتعويض عن متجه الشبكة بالصورة،

$$\vec{R}(c) = l_1 \vec{a} + l_2 \vec{b} + l_3 \vec{c}$$

حيث  $\vec{a}$  و  $\vec{b}$  و  $\vec{c}$  متجهات الأساس، نجد أن طول متجه التركيب البنائي هو

$$S = \sum_{l_1 l_2 l_3} e^{i\vec{s} \cdot (l_1 \vec{a} + l_2 \vec{b} + l_3 \vec{c})} \quad (3-35)$$

حيث يمتد المجموع الثلاثي على كل خلايا الوحدة في الشبكة. يمكننا فصل هذا المجموع إلى ثلاثة مجاميع جزئية على النحو

$$S = \left( \sum_{l_1} e^{i\vec{s} \cdot l_1 \vec{a}} \right) \left( \sum_{l_2} e^{i\vec{s} \cdot l_2 \vec{b}} \right) \left( \sum_{l_3} e^{i\vec{s} \cdot l_3 \vec{c}} \right) \quad (3-36)$$

وبهذه الطريقة نحلل S إلى حاصل ضرب عوامل أحادية البعد وهذا يمكننا من استخدام النتائج التي طورناها سابقا. والشرط اللازم الآن للتداخل البناء هو أنه يجب أن يكون كل عامل من العوامل الثلاثة محددًا بشكل منفصل وهذا يعنى أن  $\vec{s}$  يجب أن يحقق المعادلات الثلاثة الآتية في آن واحد:

$$\vec{s} \cdot \vec{a} = h2\pi \quad \& \quad \vec{s} \cdot \vec{b} = k2\pi \quad \& \quad \vec{s} \cdot \vec{c} = l2\pi \quad (3-37)$$

حيث  $l, k, h$  اعداد صحيحة هي أي مجموعة من الإعداد الصحيحة. وعلى غرار المعادلة (3-33) نعيد كتابة هذه المعادلة بدلالة الزوايا التي يصنعها المتجه  $\vec{s}$  مع متجهات الأساس نحصل على

$$a(\cos\alpha - \cos\alpha_0) = h\lambda$$

$$a(\cos\beta - \cos\beta_0) = k\lambda \quad (3-38)$$

$$a(\cos\gamma - \cos\gamma_0) = l\lambda$$

حيث  $\alpha_0, \beta_0, \gamma_0$  هي الزوايا التي يصنعها الشعاع الساقط مع متجهات الأساس و  $\alpha, \beta, \gamma$  هي الزوايا المقابلة التي يصنعها الشعاع المشتت مع متجهات الأساس. تعرف المعادلات (3-37) و (3-38) بمعادلات لاوى (Laue) وهو اول فيزيائي قام باستنتاجها.

## 6- الشبكة المقلوبة: Reciprocal lattice

بفرض إننا ننظر إلى البلورة بطريقة مباشرة لنبحث عن ترتيب الذرات فيها فإننا نحصل على مسحا للبنية البلورية الفعلية وهذا المسح يختلف عما نحصل عليه من الأشعة السينية المشتتة. في حالة الأشعة السينية المشتتة نستقبل الأشعة بعد حيودها عبر البلورة وتكون الصورة التي نحصل عليها في هذه الحالة عبارة عن مسحا لما يسمى بالشبكة الانقلابية وخصائصها تسمى الشبكة الانقلابية مرافق الشبكة الفعلية في فضاء فوريير (Fourier space) الذي هو عبارة عن فضاء الزخم أو الاندفاع (Momentum space).

ترتبط الشبكة الانقلابية بالشبكة الحقيقية ارتباطا وثيقا وتتحدد الشبكة الانقلابية تماما بتحديد متجهات الأساس لها والتي تعتمد على متجهات الأساس للشبكة البلورية الحقيقية. بفرض أنه لدينا شبكة حقيقية لها متجهات أساس  $\vec{a}$  و  $\vec{b}$  و  $\vec{c}$  فإنه يمكن تعريف متجهات الأساس للشبكة الانقلابية المرافقة  $\vec{a}^*$  و  $\vec{b}^*$  و  $\vec{c}^*$  طبقا للعلاقات الآتية:

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi(\vec{b} \times \vec{c})}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})} \quad \& \quad \vec{b}^* = \frac{2\pi(\vec{c} \times \vec{a})}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})} \quad \& \quad \vec{c}^* = \frac{2\pi(\vec{a} \times \vec{b})}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})} \quad (3-39)$$

حيث يمثل المقدار  $\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})$  حجم خلية الوحدة. يمكننا الآن استخدام هذه المتجهات  $\vec{a}^*$  و  $\vec{b}^*$  و  $\vec{c}^*$  الجديدة كمتجهات أساس للشبكة الجديدة (الانقلابية) ويمكن كتابة متجه الانتقال لها على الصورة:

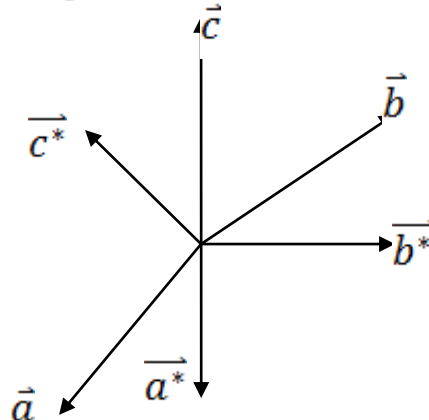
$$\vec{G}_n = n_1 \vec{a}^* + n_2 \vec{b}^* + n_3 \vec{c}^* \quad (3-40)$$

حيث  $n_1, n_2, n_3$  مجموعة من الأعداد الصحيحة. تعرف الشبكة السابقة (المعرفة المعادلات 3-39 و (3-40)) بالشبكة الانقلابية وتسمى المتجهات  $\vec{a}^*$  و  $\vec{b}^*$  و  $\vec{c}^*$  بمتجهات الأساس الانقلابية. لاحظ في هذه المعالجة يجب أن تكون خلية الوحدة خلية أولية. يبين الشكل (3-6) العلاقة بين متجهات الأساس الانقلابية ومتجهات الأساس الحقيقية. يكون المتجه  $\vec{a}^*$  عموديا على المستوى الذي يحتوي على المتجهات  $\vec{b}$  و  $\vec{c}$ . وبالمثل يكون المتجه  $\vec{b}^*$  عموديا على المستوى الذي يحتوي على المتجهات  $\vec{a}$  و  $\vec{c}$ . ويكون المتجه  $\vec{c}^*$  عموديا على المستوى الذي يحتوي على المتجهات  $\vec{a}$  و  $\vec{b}$ . أي انه إذا كونت المتجهات  $\vec{a}$  و  $\vec{b}$  و  $\vec{c}$  مجموعة متعامدة فإن المتجهات  $\vec{a}^*$  و  $\vec{b}^*$  و  $\vec{c}^*$  تكون مجموعة متعامدة أخرى أيضا بحيث يكون المتجه  $\vec{a}^*$  موازيا للمتجه  $\vec{a}$  و المتجه  $\vec{b}^*$  موازيا للمتجه  $\vec{b}$  وهكذا. ومن ذلك نستنتج الخواص التالية:

$$\vec{a}^* \cdot \vec{a} = 2\pi \quad \& \quad \vec{a}^* \cdot \vec{b} = \vec{a}^* \cdot \vec{c} = 0$$

$$\vec{b}^* \cdot \vec{b} = 2\pi \quad \& \quad \vec{b}^* \cdot \vec{a} = \vec{b}^* \cdot \vec{c} = 0 \quad (3-41)$$

$$\vec{c}^* \cdot \vec{c} = 2\pi \quad \& \quad \vec{c}^* \cdot \vec{a} = \vec{c}^* \cdot \vec{b} = 0$$



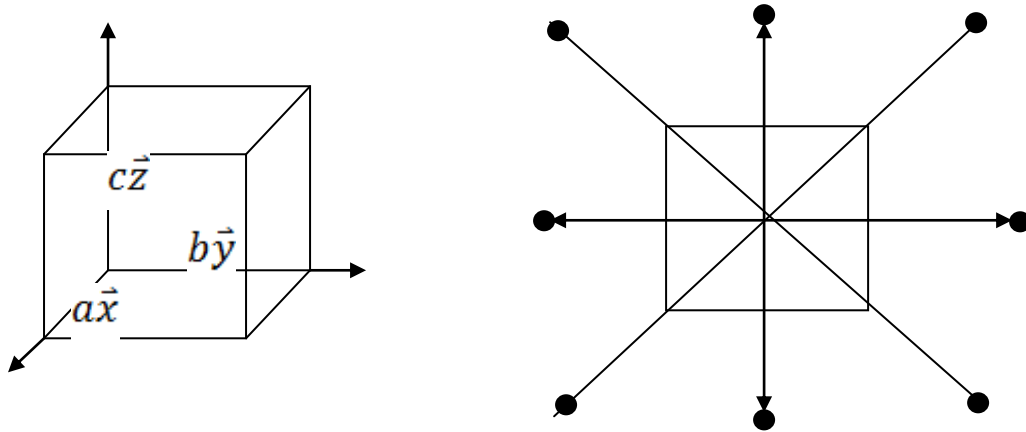
الشكل (3-6) متجهات الأساس للشبكة المقلوبة.

يمكن إثبات صحة المعادلة (3-41) بسهولة باستخدام المعادلة (3-39). لاحظ أن أبعاد الشبكة الحقيقية هي أبعاد طول، بينما تكون في الشبكة الإنقلابية مقلوب المسافة.

### 7- منطقة البريليون: Brilloun zone

تعرف خلية بريليون الاولى على أنها الخلية الموجودة في الفضاء الانقلابي والتي تقابل خلية ويكنر- سترز في الفضاء الحقيقي، ويمكن تعريفها أيضا بأنها الخلية التي يكون لها أقل حجم والمحتوية بين المستويات العمودية والمنصفة لمتجهات الخلية في الشبكة الإنقلابية، كما هو

موضح بالشكل (3-7).



الشكل (3-7) خلية بريليون الاولى في شبكة انقلابية ثنائية البعد..

### 8- منطقة البريليون الاولى للمكعب البسيط: Brilloun zone of simple cubic

لاستنتاج خلية بريليون الاولى للمكعب البسيط نكتب متجهات الانتقال الاولى للمكعب البسيط في الفضاء الحقيقي المبين في الشكل (3-8) على الصورة،

$$\vec{a}' = a\vec{x}, \quad \vec{b}' = b\vec{y}, \quad \vec{c}' = c\vec{z}$$

حيث  $\vec{x}$  و  $\vec{y}$  و  $\vec{z}$  هي متجهات الوحدة في الاتجاهات الثلاثة المتعامدة ويكون حجم الخلية في الفضاء الحقيقي هو

$$V_{cubic} = \vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c} = a\vec{x} \cdot b\vec{y} \times c\vec{z} = a\vec{x} \cdot a^2\vec{x} = a^3 \quad (3-42)$$

وكذلك تكون متجهات الانتقال الاولى في الشبكة الانقلابية هي:

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{V_c} \vec{b}' \times \vec{c}' = \frac{2\pi}{a^3} a\vec{y} \times a\vec{z} = \frac{2\pi}{a^3} a^2\vec{x} = \frac{2\pi}{a} \vec{x}$$

وكذلك بنفس الطريقة نحصل على

$$\vec{b}^* = \frac{2\pi}{a} \vec{y}$$

$$\vec{c}^* = \frac{2\pi}{a} \vec{z}$$

وبذلك تكون الخلية الانقلابية هي نفسها على شكل مكعب بسيط له ثابت خلية  $\frac{2\pi}{a}$  وتكون حدود

منطقة بريليون الاولى هي المستويات العمودية في منتصف الاتجاهات الستة للشبكة الانقلابية

$$\pm \vec{a}^* = \pm \frac{2\pi}{a} \vec{x} \quad \text{و} \quad \pm \vec{b}^* = \pm \frac{2\pi}{a} \vec{y} \quad \text{و} \quad \pm \vec{c}^* = \pm \frac{2\pi}{a} \vec{z}$$

الذي يكون طوله  $\frac{2\pi}{a}$  ويكون حجمه  $\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$  ويكون هذا المكعب هو خلية بريليون الاولى للمكعب

البسيط. وبنفس الطريقة يمكن الحصول على  $\vec{b}^*$  و  $\vec{c}^*$ . يبين الجدول (3-1) العلاقات بين الفضاء

الحقيقي والفضاء الانقلابي لبعض الأنظمة البلورية المختلفة. المتغير  $V$  للنظام ثلاثي الميل يحتاج إلى حسابات معقدة هندسياً وذلك بسبب غياب الزوايا القائمة في البلورة وتم استنتاجه بواسطة جينكنز و سنيدر (Jenkins and Snyder) على الصورة الآتية،

$$V^* = \frac{1}{V} = a^*b^*c^*(1 - \cos^2\alpha^* - \cos^2\beta^* - \cos^2\gamma^* + 2\cos\alpha^*\cos\beta^*\cos\gamma^*)^{1/2}$$

الجدول (3-1) العلاقات بين الفضاء الحقيقي و الفضاء الانقلابي لبعض الأنظمة البلورية المختلفة.

النظام	$\vec{a}^*$	$\vec{b}^*$	$\vec{c}^*$
المكعب	$a^* = \frac{1}{a}$	$b^* = \frac{1}{b}$	$c^* = \frac{1}{c}$
السداسي	$a^* = \frac{1}{a\sin\gamma}$	$b^* = \frac{1}{b\sin\gamma}$	$c^* = \frac{1}{c}$
احادي الميل	$a^* = \frac{1}{a\sin\beta}$	$b^* = \frac{1}{b}$	$c^* = \frac{1}{c\sin\beta}$
ثلاثي الميل	$a^* = \frac{bc\sin\alpha}{V}$	$b^* = \frac{ac\sin\beta}{V}$	$c^* = \frac{abs\sin\gamma}{V}$

مثال 1: جد الخلية الإنقلابية للمكعبى المتمركز الجسم؟

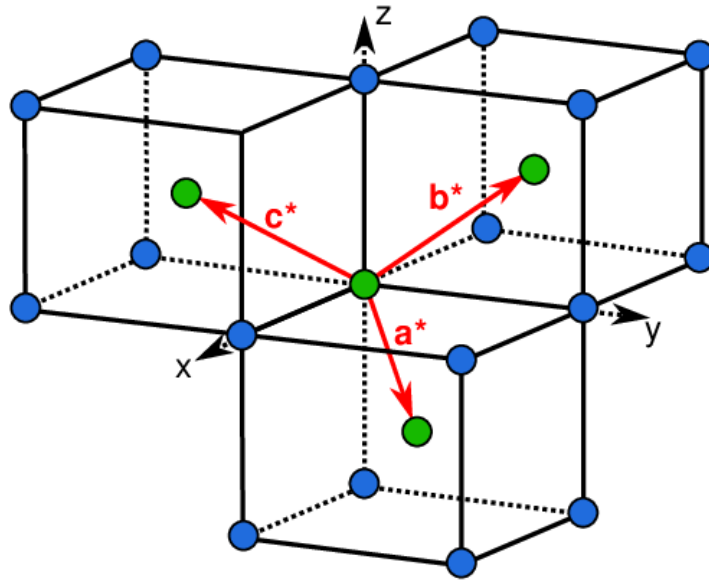
الحل: لاستنتاج خلية بريليون الاولى للمكعبى المتمركز الجسم نكتب متجهات الانتقال الاولى لهذا

المكعب في الفضاء الحقيقي المبين في الشكل (3-8) على الصورة

$$a' = \frac{1}{2}a(\hat{i} + \hat{j} - \hat{k}) \quad b' = \frac{1}{2}a(-\hat{i} + \hat{j} + \hat{k}) \quad c' = \frac{1}{2}a(\hat{i} - \hat{j} + \hat{k})$$

حيث  $a$  طول خلية الوحدة  $k, j, i$  هي وحدة المتجه في الاتجاهات الثلاثة المتعامدة ويكون حجم الخلية في الفضاء الحقيقي هو

$$V_c = \vec{a}' \cdot \vec{b}' \times \vec{c}' = \frac{a}{2} \cdot \frac{a}{2} \cdot \frac{a}{2} \begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{vmatrix} \frac{a^3}{8} \times 4 = \frac{a^3}{2}$$



الشكل (3-8) تعيين الخلية الانقلابية للمكعبى المتمركز الجسم.

وكذلك فإن متجهات الانتقال الأولية في الشبكة الانقلابية تكون على الصورة:

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{V_c} \vec{b}' \times \vec{c}' = \frac{2\pi}{a^3/2} \cdot \frac{a^2}{4} \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{vmatrix} = \frac{2\pi}{a^3} \cdot \frac{a^2}{4} \cdot (2\hat{i} + 2\hat{j}) = \frac{2\pi}{a} (\hat{i} + \hat{j})$$

وبالمثل نجد أن،



$$\vec{b}^* = \frac{2\pi}{V_c} \vec{c}' \times \vec{a}' = \frac{2\pi}{a} (\hat{j} + \hat{k}) \quad \vec{c}^* = \frac{2\pi}{V_c} \vec{a}' \times \vec{b}' = \frac{2\pi}{a} (\hat{i} + \hat{k})$$

وتكون  $\vec{a}^*$  و  $\vec{b}^*$  و  $\vec{c}^*$  هي المتجهات الاولية في الشبكة الانقلابية للمكعبى متمركز الجسم في

الشبكة الحقيقية ويكون حجم الخلية الاولية في الفضاء الانقلابي هو حجم خلية بريليون ويساوى

$$\vec{a}^* \cdot \vec{b}^* \times \vec{c}^* \text{ أي أن}$$

$$V_{BZ} = \frac{2\pi}{2} (\hat{i} + \hat{j}) \cdot \frac{2\pi}{a} (\hat{j} + \hat{k}) \times \frac{2\pi}{a} (\hat{i} + \hat{k})$$

$$V_{BZ} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 \begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 (2)$$

$$V_{BZ} = 16 \frac{\pi^3}{a^3}$$

ويكون المتجه العام للانتقال، G، في الشبكة الانقلابية هو

$$\vec{G}_n = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

حيث  $h$  و  $k$  و  $l$  تكون أعداد صحيحة. ولإيجاد خلية بريليون الاولى فإننا نأخذ كل الاتجاهات

الممكنة ونقيم المستوى العمودي عند منتصف المتجهات  $\frac{1}{2}\vec{a}^* = \frac{\pi}{a}(\pm\hat{i} \pm \hat{j})$

و  $\frac{1}{2}\vec{b}^* = \frac{\pi}{a}(\pm\hat{j} \pm \hat{k})$  و  $\frac{1}{2}\vec{c}^* = \frac{\pi}{a}(\pm\hat{i} \pm \hat{k})$  وبذلك يكون لدينا 12 متجه (أي 12 مستوى)

تحيط بنقطة شبكة واحدة وتكون محددة لخلية بريليون الاولى التي تحتوى على ذرة واحدة.