

بسم الله الرحمن الرحيم

الفصل الثاني: الحيود في البلورات Crystal diffraction

قانون براك

الحزم الساقطة: (الاشعة السينية ، النيوترونات ، الالكترونات)
الطرق التجريبية للحيود: (طريقة لاي، طريقة البلورة الدوارة، طريقة المسحوق)
الشبيكة المقلوبة
عامل تركيب الشبيكة

منحت جائزة نوبل في الفيزياء عام 1915 الى
ويليم هنري براك الاب وويليم لورانس براك الابن

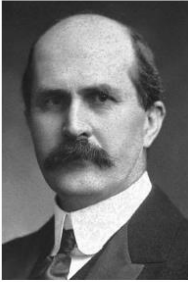


Photo from the Nobel
Foundation archive.
Sir William Henry
Bragg

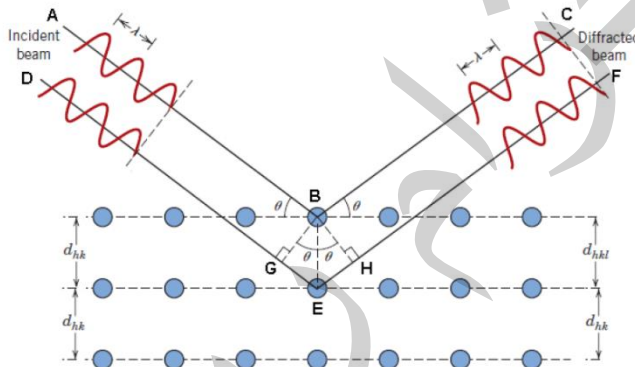


Photo from the Nobel
Foundation archive.
William Lawrence
Bragg

قانون براك:

تمكن العالم ويليم لورنس براك (الابن) عام 1913 عندما كان طالب بحث في جامعة كامبريدج من ايجاد علاقة رياضية لتعيين المسافة بين المستويات البلورية باستخدام الاشعة السينية. اعتمد براك على حقيقة ان الذرات في داخل البلورة تصطف في مجاميع متميزة من المستويات المتوازية ذات الاحداثيات (hkl) والتي تتفصل عن بعضها بمسافة d_{hkl} .
عند سقوط حزمة من الاشعة السينية بزاوية θ على هذه المستويات فأنها تستطير في جميع الاتجاهات داخل البلورة. كما في الشكل.

يبين الشكل ان الاشعة المنعكسة عن تلك المستويات وبنفس زاوية السقوط θ . والاشعة الساقطة والمنعكسة لها نفس الطور in phase.



ان مسار الموجة في اتجاه DEF الذي ينعكس في E هو اطول من مسار الموجة في اتجاه ABC الذي ينعكس في B.
فاذا كانت هاتين المجموعتين من الموجات في نفس الطور فان الفرق بين المسارين يجب ان يكون عددا صحيحاً من الاطوال الموجية $n\lambda$ حيث n يساوي عدداً صحيحاً $n = 1, 2, 3, \dots$ ويسمى مرتبة الحيود.

لإيجاد الفرق بين المسارين نرسم BG عمودي على DE ونرسم BH عمودي على EF.

$$AB=DG$$

$$BC=HF$$

$$GE + EH = n\lambda$$

$$\text{الفرق بين المسارين} \quad (1)$$

بما ان الذرات في داخل البلورة تصطف في مجاميع متميزة من المستويات المتوازية ذات الاحداثيات (hkl) والتي تتفصل عن بعضها بمسافة d_{hkl} ، لذلك:

$$BE = d_{hkl}$$

$$GE = d_{hkl} \sin \theta$$

$$\text{من المثلث BGE} \quad (2)$$

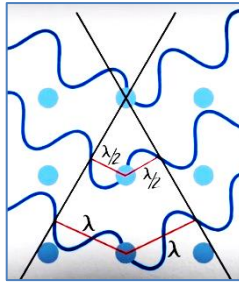
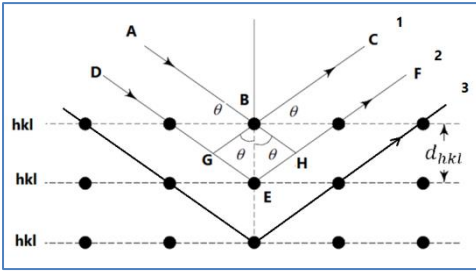
$$EH = d_{hkl} \sin \theta$$

$$\text{ايضاً من المثلث BHE} \quad (3)$$

$$d_{hkl} \sin \theta + d_{hkl} \sin \theta = n\lambda$$

نعوض 2 و 3 في 1

$$\therefore 2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda \quad \text{قانون براك}$$



❖ مرتبة الحيود ($n=1,2,3,\dots$) تعني انه لطول موجة معين ولقيمة معينة من d هنالك قيم متعددة لزوايا السقوط θ_1 و θ_2 و θ_3 تحقق الحيود.

❖ فرق المسار بين 1 و 2 هو λ و فرق المسار بين 1 و 3 هو 2λ وهكذا لبقية المسارات.

❖ ان انعكاس براك يمكن ان يحدث فقط عندما يكون الطول الموجي λ في معادلة براك (قانون براك) المستخدم للحصول على انعكاس من مستوي ما (hkl) اصغر او مساوي لضعف المسافة البينية بين مستويين d_{hkl} متعاقبين في البلورة , اي ان:

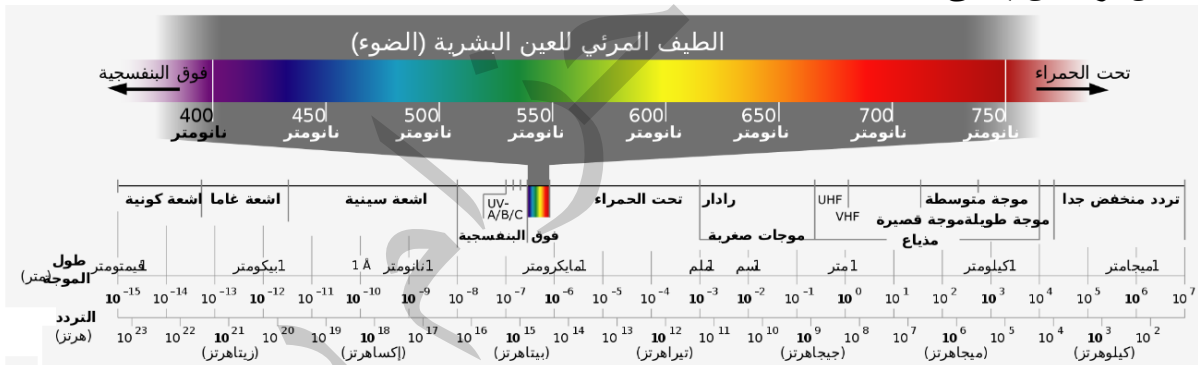
الشرط اللازم للانعكاس (شرط الحيود) ----- $\lambda \leq 2d_{hkl}$

$$2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda \quad \dots \dots \quad \frac{n\lambda}{2d_{hkl}} = \sin \theta \leq 1 \quad \dots \dots \quad n\lambda \leq 2d_{hkl}$$

حيث ان قيمة ($\sin \theta$) لا يمكن ان تزيد عن الواحد في اي حال من الاحوال.
وفي حالة الحيود من الرتبة الاولى $n=1$ سوف يكون
اما $n=0$ فهو للحزمة غير المُحادة.

(س) لا يمكن استعمال الضوء المرئي او الاشعة فوق البنفسجية لدراسة الحيود في البلورات؟
الجواب:

بما ان شرط الحيود في قانون براك لأية زاوية $\lambda \leq 2d_{hkl}$. وبما ان قيمة d للكثير من البلورات بحدود (3) أنجستروم وعليه فان $2d=6 \text{ \AA}$ لذلك لا يمكن استعمال الضوء المرئي او الاشعة فوق البنفسجية لان انعكاس براك لن يتحقق.



❖ الاشعة الساقطة D&A تسقط بزاوية θ اما الاشعة المنعكسة (الاشعة المُستطيرة او الاشعة المُحادة) مثل C&F فتعكس (تستطير او تعاني من الحيود) بزاوية θ (الشرط اللازم تحقيقه).

(س) لماذا يمكن استعمال الاشعة السينية لدراسة الحيود في المعادن؟
الجواب:

المسافات البينية للمستويات الذرية في البناء البلوري d لمعظم المعادن تساوي طول الموجة للأشعة السينية λ من حيث المقدار. وبما ان شرط الحيود في قانون براك لأية زاوية $\lambda \leq 2d_{hkl}$. وحيث ان قيمة ($\sin \theta$) لا يمكن ان تزيد عن الواحد في اي حال من الاحوال

$$2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda \quad \dots \dots \quad \frac{n\lambda}{2d_{hkl}} = \sin \theta \leq 1 \quad \dots \dots \quad n\lambda \leq 2d_{hkl}$$

وفي حالة الحيود من الرتبة الاولى $n=1$ سوف يكون
اي ان شرط الحيود سيكون متحقق لذلك يمكن استعمال الاشعة السينية لدراسة الحيود في المعادن.

الحزم الساقطة: (الاشعة السينية ، النيوترونات ، الالكترونات)

هنالك التباس حاصل لدى البعض عند استعمال مصطلحات الحيود والاستطارة او التشتت. تتطلب دراسة التركيب البلوري استعمال اشعاع ذي طول موجي مساو او اقصر من المسافات البينية بين الذرات ($\lambda \leq 2d_{hkl}$) ويتم ذلك من خلال الحيود diffraction وفي بعض الاحيان تدعى العملية بالتشتت او الاستطارة scattering .

الاستطارة: هي انحراف اي شعاع عن مساره نتيجة تفاعله مع المادة، (اي تغير اتجاه جسيم او فوتون عند تفاعله مع النواة او الالكترونات).

• **الاستطارة غير المرنة (التشتت غير المرن):** اذا فقد الجسيم او الفوتون المتشتت (المنحرف عن مساره) جزءاً من طاقته.

• **الاستطارة المرنة (التشتت المرن):** اذا لم يحدث تغير في الطاقة للجسيم او الفوتون المتشتت. ان مرور شعاع ضوئي في وسط مادي يسبب استطارة ذلك الشعاع ويتم ذلك بعمليتين منفردتين ومختلفتين الاولى (انعكاس عشوائي) والعملية الثانية هي **الحيود** او الانعطاف.

➡ **الانعكاس العشوائي:** يحدث عند مرور الشعاع في وسط مادي، حيث ان جسيمات صغيرة معلقة في الوسط المادي تنصرف بصفة مرآيا وتولد انعكاساً عشوائياً بسبب توجيهها العشوائي بالنسبة لاتجاه الشعاع الساقط عليها وان الانعكاس العشوائي يحدث عندما تكون ابعاد الجسيم العاكس كبيرة مقارنة بالطول الموجي للضوء.

➡ **الحيود:** ويحدث عند مرور الشعاع في وسط مادي، عند وجود جسيمات في الوسط المادي اصغر من الطول الموجي للضوء الساقط. وبسبب ظاهرة الحيود تنصرف هذه الجسيمات في الوسط بصفتها مراكز للاشعاع، وكل منها تشتت الضوء في جميع الاتجاهات.

ان ظاهرة الحيود هي حالة خاصة للتداخل تحصل بسبب الطبيعة الموجية للضوء ولكل الجسيمات التي ترافق حركتها موجات مثل الالكترونات والنيوترونات. يمكن القول ان الحيود هو حالة خاصة للاستطارة وهو يمثل استطارة متشاكهة او متألفة coherent scattering بغض النظر عن كونها مصحوبة بتغير طاقة الشعاع (انتقال الطاقة بين الشعاع والوسط المادي) او عدم تغيرها.

الحزم المستعملة في الحيود:

توجد ثلاث انواع اساسية من الجسيمات الموجية المتباينة الطاقة (او الاطوال الموجية) الي يمكن استعمالها في تجارب الحيود. وهي:

- فوتونات الاشعة السينية
- النيوترونات
- الالكترونات

1. فوتونات الاشعة السينية

حسب علاقة انشتاين

ν يمثل تردد الفوتون

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J.sec}$$

h ثابت بلانك

$$c = 3 \times 10^8 \frac{m}{sec}$$

c سرعة الضوء

$$\lambda(\text{\AA}) \approx \frac{12.4}{E(kev)}$$

وهذا يعني ان فوتوناً ذا طول موجي 1 انكستروم له طاقة حوالي (12400 ev) . ان الاشعة السينية هي موجات كهرومغناطيسية ذات اطوال موجية محددة تقع بين الاشعة فوق البنفسجية واشعاعات كاما حيث لا تزيد اطوالها الموجية عن بضعة انكسترومات ولهذا يفضل استخدامها في معظم تجارب الحيود البلوري.

2. الالكترونات :

يتصرف الالكترون بوصفه جسيماً له كتلة ترافقه موجة طولها λ والعلاقة بين طاقة الالكترون والطول الموجي المرافق له:

$$\lambda (\text{\AA}) \approx \frac{12}{\sqrt{E(eV)}}$$

ان ظاهرة الحيود الالكتروني هي في الاساس اثبات لوجود موجات ترافق الالكترونات بموجب نظرية ديبرولي ولكن ما يميز الالكترون عن الفوتون او النيوترون امتلاكه للشحنة ويتفاعل بقوة مع المواد ويخترقها الى مسافات صغيرة نسبياً قد تصل الى بضع مئات من الانكسترومات قبل ان يعاني من تشتت مرن او غير مرن ولذلك لا يقوم الالكترون بدور مشابه للاشعة السينية في دراسة التركيب البلوري بل ينحصر استخدامه في هدفين اساسيين هما :

- 1- دراسة سطوح البلورات.
- 2- دراسة الاغشية الرقيقة

3. النيوترونات :

ترافق النيوترون موجة كما هو حال الالكترون. والعلاقة بين طاقة النيوترون وطول موجته λ المرافق له :

$$\lambda (\text{\AA}) \approx \frac{0.28}{\sqrt{E(eV)}}$$

ان شحنة النيوترون متعادلة ولكنه يمتلك عزماً مغناطيسياً بسبب عدم تطابق مركزي الشحنة الموجبة والسالبة التي يحملها. ولذلك يستخدم:

- 1- في دراسة التركيب البلوري للبلورات المغناطيسية حيث يتفاعل النيوترون بسبب عزمه المغناطيسي هو والكترونات هذه البلورات ((ويكون ذروات peaks اضافية تسمى الذروات المغناطيسية ومنها يمكن دراسة طريقة توزيع العزوم المغناطيسية للالكترونات)) فضلاً عن تفاعله هو ونوى الذرات.
- اما في البلورات غير المغناطيسية، حيث تصبح محصلة العزم المغناطيسي لجميع الكترونات الذرة صفراً، فان النيوترون يتفاعل ونوى الذرات فقط.
- 2- كذلك يستعمل في اكتشاف تراكيب بعض العناصر الخفيفة كالهيدروجين.
- 3- كما يمكن استعماله للتمييز بين العناصر المتجاورة في الجدول الدوري.
- 4- كما يمكن استعماله للتمييز بين نظائر العنصر الواحد .

امثلة على قانون براك

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad \&\&\&\& \quad 2d_{hkl} \sin \theta_{hkl} = n\lambda$$

مثال: حدد المسافة البينية d (فسحة السطوح) عند سقوط حزمة من الأشعة السينية ذات الطول الموجي $1.54 \text{ \AA}$ باتجاه البلورة بزاوية 20.3° مع المستوى الذري.

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

$$\lambda = 1.54 \text{ \AA}$$

$$2d \sin 20.3^\circ = 1 \times 1.54$$

$$\theta = 20.3^\circ$$

$$d = \frac{1.54}{2 \sin 20.3^\circ} = \frac{1.54}{2 \times 0.3469} = 2.22 \text{ \AA}$$

مثال: اشعة سينية بطول موجي $0.58 \text{ \AA}$ استخدمت لحساب d_{200} في بلورة نيكل. زاوية الانعكاس كانت 9.5° . ما هو حجم خلية الوحدة؟

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

$$\lambda = 0.58 \text{ \AA} \quad \& \quad \theta = 9.5^\circ$$

$$d_{200} = \frac{a}{\sqrt{2^2 + 0^2 + 0^2}} = \frac{a}{2} = 0.5a$$

$$2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda$$

$$2 \times d_{200} \times \sin 9.5^\circ = 1 \times 0.58$$

$$2 \times 0.5a \times 0.165 = 1 \times 0.58$$

$$a = \frac{0.58}{1.165} = 0.52 \text{ \AA}$$

$$V = a^3 = 0.52^3 (\text{\AA})^3$$

مثال: احسب زاوية براك للمستويات (111) لبلورة مكعب ثابت الشبكة لها $a = 3.57 \text{ \AA}$ تم اسقاط اشعة سينية عليها بطول موجي $0.54 \text{ \AA}$.

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

$$d_{111} = \frac{3.57}{\sqrt{(1)^2 + (1)^2 + (1)^2}} = 2.06 \text{ \AA}$$

$$2d_{111} \sin \theta = n\lambda$$

$$2 \times 2.06 \times \sin \theta = 1 \times 0.54$$

$$\sin \theta = \frac{1 \times 0.54}{2 \times 2.06} = 0.131$$

$$\theta = 7^\circ 32'$$

مثال: يتبلور الرصاص بشكل مكعب متمركز الأوجه FCC، ثابت الشبكة له $a=4.93 \text{ \AA}$. احسب زوايا براك للمستويات (111) و (110) اذا سقطت على البلورة اشعة سينية بطول موجي 0.152 nm .

$$2d_{hkl} \sin \theta_{hkl} = n\lambda$$

$$\sin \theta_{hkl} = \frac{n\lambda}{2d_{hkl}} \quad \theta_{hkl} = \sin^{-1} \left(\frac{n\lambda}{2d_{hkl}} \right)$$

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

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

$$\theta_{111} = \sin^{-1} \left(\frac{0.152 * 10^{-9}}{2 * 4.93 * 10^{-10}} \sqrt{1^2 + 1^2 + 1^2} \right) = 15.29^\circ$$

$$\theta_{110} = \sin^{-1} \left(\frac{0.152 * 10^{-9}}{2 * 4.93 * 10^{-10}} \sqrt{1^2 + 1^2 + 0^2} \right) = 12.59^\circ$$

مثال: اوجد قيمة ثابت الشبكة a لبلورة مكعبة اذا كان الطول الموجي للاشعة السينية المستخدمة يساوي $1.54 \text{ \AA}$ وزاوية براك 11.1° للترتبة الأولى للمستوي (110).

$$2d_{hkl} \sin \theta_{hkl} = n\lambda$$

$$d_{hkl} = \frac{n\lambda}{2 \sin(\theta_{hkl})}$$

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

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

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

$$a = \frac{1.54 \text{ \AA}}{2 \sin(11.1)} \sqrt{1^2 + 1^2 + 0^2}$$

$n=1$ للترتبة الأولى

(110) للمستوي

$$a = \frac{1.54 \text{ \AA}}{2 \sin(11.1)} \sqrt{2} = 5.656 \text{ \AA}$$

مثال: لبلورة مكعب BCC فسحة السطوح (المسافة البينية) (d) للمستويات (110) هي 1.181 Å . إذا كان الطول الموجي للأشعة السينية المستخدمة يساوي 1.54 Å . أثبت ان أقصى رتبة لانعكاس براك يمكن ان نجدها هي n=1 .

الجواب:

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

$$d = 1.181 \text{ Å}$$

$$\lambda = 1.540 \text{ Å}$$

$$n = \frac{2d \sin \theta}{\lambda}$$

$$= \frac{2 \times 1.181 \sin 90^\circ}{1.540} = 1.53$$

ومن الجدير بالذكر ان n يجب ان تكون عدد صحيح integer وهنا نلاحظ بان أقصى قيمة ممكنة n في هذه الحالة هو 1 .

مثال: اوجد زاوية الحيود المتوقعة (2θ) للانعكاس من الرتبة الأولى من مجموعة مستويات (310) للكروم الذي يمتلك شبكة BCC . عند استخدام إشعاع أحادي اللون (أحادي الطول الموجي) 0.0711 نانومتر. علماً أن نصف القطر الذري (r) = 0.1249 نانومتر.

$$a = \frac{4r}{\sqrt{3}} = \frac{(4)(0.1249 \text{ nm})}{\sqrt{3}} = 0.2884 \text{ nm}$$

$$d_{310} = \frac{a}{\sqrt{(3)^2 + (1)^2 + (0)^2}} = \frac{0.2884 \text{ nm}}{\sqrt{10}} = 0.0912 \text{ nm}$$

$$\sin \theta = \frac{n\lambda}{2d_{310}} = \frac{(1)(0.0711 \text{ nm})}{(2)(0.0912 \text{ nm})} = 0.390$$

$$\theta = \sin^{-1} 0.390 = 22.94^\circ$$

زاوية براك θ = Bragg angle

2θ = Diffraction angle زاوية الحيود

$$2\theta = (2)(22.94^\circ) = 45.88^\circ$$

مثال: باستخدام البيانات نجد ان الحديد - BCC - نصف القطر الذري له يساوي 0.1241 nm ، احسب المسافة البينية d (فسحة السطوح) لمجموعة المستويات (111) و (211) .

$$a = \frac{4r}{\sqrt{3}} = \frac{(4)(0.1241 \text{ nm})}{\sqrt{3}} = 0.2866 \text{ nm}$$

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

$$d_{111} = \frac{a}{\sqrt{(1)^2 + (1)^2 + (1)^2}} = \frac{0.2866 \text{ nm}}{\sqrt{3}} = 0.1655 \text{ nm}$$

$$d_{211} = \frac{a}{\sqrt{(2)^2 + (1)^2 + (1)^2}} = \frac{0.2866 \text{ nm}}{\sqrt{6}} = 0.1170 \text{ nm}$$

مثال: يحتوي الروديوم المعدني على تركيب بلوري FCC. إذا كانت زاوية الحيود لمجموعة المستويات (311) تحدث عند $2\theta = 36.12^\circ$ (انعكاس من الرتبة الأولى) عند استخدام إشعاع أحادي اللون بطول موجي $\lambda = 0.0711$ نانومتر ، احسب (أ) المسافة البينية d (فسحة السطوح) لهذه المجموعة من المستويات، و (ب) نصف القطر الذري لذرة الروديوم.

(a) $2\theta = \text{Diffraction angle} = 36.12^\circ$ $\theta = \text{Bragg angle} = \frac{36.12}{2} = 18.06^\circ$

$$d_{311} = \frac{n\lambda}{2 \sin \theta} = \frac{(1)(0.0711 \text{ nm})}{(2)(\sin 18.06^\circ)} = 0.1147 \text{ nm}$$

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

$$a = d_{311} \sqrt{(3)^2 + (1)^2 + (1)^2} = (0.1147 \text{ nm})(\sqrt{11}) = 0.3804 \text{ nm}$$

For FCC : $a = 2\sqrt{2} r$ $r = \frac{a}{2\sqrt{2}} = \frac{0.3804 \text{ nm}}{2\sqrt{2}} = 0.1345 \text{ nm}$

واجب بيتي:

يتبلور الكربون بتركيبتين هما الماس، للماس تركيب fcc وثابت الشبكية له $a = 3.57 \text{ \AA}$. إذا علمت أن كثافة الماس 3510 Kg/m^3 ، فاحسب عدد ذرات الكربون في خلية الوحدة للماس، علماً بأن الوزن الجزيئي للكربون هو (12.01).

الجواب: خلية الماس تحوي 8 ذرات

1- يتبلور النحاس بتركيب fcc فإذا كانت الكتلة الذرية تساوي 63.54 وحدة كتلة ذرية وكثافتها 8960 Kg/m^3 احسب اقصر مسافة بين ذرتي نحاس .

س) اوجد المسافة بين ذرتين a في بلورة مكعبة إذا كانت زاوية براك $\theta = 30^\circ$ لرتبة الانعكاس الأولى $n=1$ للمستوي (111). إذا كان الطول الموجي للأشعة السينية المستخدمة يساوي $2 \text{ \AA}$.

الطرق التجريبية للحيود: (طريقة لاوي ، طريقة البلورة الدوارة ، طريقة المسحوق)

توجد أكثر من عشر طرائق تجريبية مختلفة في دراسة التماثل والتركيب البلوري وغيرها من الأمور المتعلقة بعلم البلورات من حيود الأشعة السينية وأن معظم هذه الطرائق يمكن استخدامها في تجارب الحيود النيوتروني .

ومن هذه الطرق :

طريقة لاوي

طريقة البلورة الدوارة (تدوير البلورة)

طريقة المسحوق (ديباي – شيرر)

طريقة تذبذب البلورة وطريقة وايزنبرك

ولكن هناك ثلاث طرق رئيسية متميزة عن بعضها البعض ومصممة أساساً بموجب الكميات الرئيسية وهي λ , θ , أي أنه في كل طريقة للحيود يجب أن يكون هناك ربط مناسب بين هذه الكميات للحصول على تداخل تقوية للأشعة المنعكسة ، حيث أن سقوط أشعة سينية ذات أطوال موجية معينة على بلورة بزاوية سقوط ما لا يعني بالضرورة حصول حيود من تلك البلورة. إن أية طريقة لحيود الأشعة السينية تتضمن متغيراً واحداً فقط.

في تجارب الحيود هنالك ثلاث طرق شائعة جداً هي :-

الطريقة	λ	θ
طريقة لاوي	متغير	ثابتة
طريقة تدوير البلورة	ثابت	متغير جزئياً
طريقة المسحوق	ثابت	متغيرة

1- طريقة لاوي : Laue method

تعد طريقة لاوي من اقدم الطرق المستخدمة في حيود الاشعة السينية حيث تثبت بلورة احادية في مسار حزمة من الاشعة السينية ذات أطوال موجية مختلفة كما موضح في الشكل أدناه .

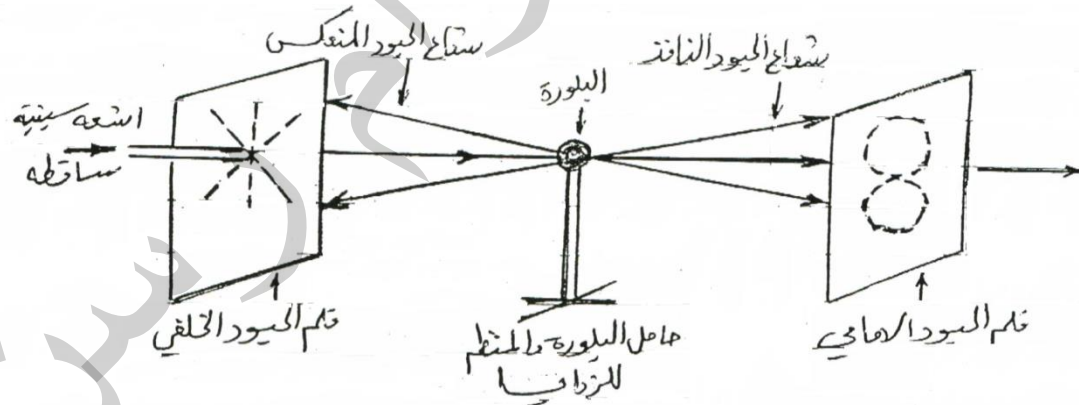
ان كل مجموعة من مجاميع السطوح في البلورة لها فسخة d خاصة بها وتحدث زاوية خاصة مع اتجاه الاشعة السينية الساقطة على البلورة ولذلك تختار كل مجموعة متوازية من السطوح أحد الاطوال الموجية المناسبة لها, اي التي تحقق قانون براك ويحدث الحيود وتتبع أشعة الحيود من البلورة لتسقط على اللوح الفوتوغرافي مكونة نقاط على ذلك اللوح (spots).

- يمكن وضع اللوح الفوتوغرافي بين مصدر الاشعة السينية والبلورة وتدعى هذه الحالة الحيود الخلفي (الانعكاس الخلفي). أو يوضع في جهة نفوذ الاشعة السينية وتدعى هذه الحالة بالحيود الامامي.
- الكونيوميتر هو حامل البلورة المنظم للزوايا يتضمن قوسين متعامدين بعضهما على بعض لغرض امالة البلورة قليلاً لتوجيه البلورة باتجاه الاشعة السينية الساقطة وتنجز هذه العملية قبل تعريض البلورة للاشعة.

- تستخدم طريقة لاوي للحالات التالية:

- ✓ اما البقع المتكونة على اللوح الفوتوغرافي لبلورة معروف تركيبها البلوري فيمكن الاستدلال منها على تماثل البلورة والاتجاهات البلورية الموازية والعمودية على اتجاه سقوط الاشعة.
- ✓ وكذلك الاستدلال على عيوب البلورة الحاصلة نتيجة التأثيرات الحرارية والميكانيكية على البلورة .
- ✓ اذا كان اتجاه الشعاع الساقط على البلورة هو محور تماثل ما فان تشكيلة بقع الحيود المتكونة على اللوح الفوتوغرافي سوف تُظهر ذلك التماثل.
- ✓ وعلى الرغم من عدم امكانية تحديد القيمة العددية لحجم وحدة الخلية (خلية الوحدة) في طريقة لاوي الا انه يمكن تحديد شكل تلك الخلية .

ان الاشعة السينية المستخدمة في هذه الطريقة يجب ان تكون ذات طيف مستمر ومن ناحية آخر يفضل ان تكون المسافة بين اللوح الفوتوغرافي والبلورة (3-5cm) حيث ان ذلك يقلل من الفترة



الزمنية اللازمة للتجربة ويزيد من عدد البقع المرئية على اللوح .

س1/ هل يمكن استخدام طريقة لاوي لتعيين احداثيات شبكية او تركيب بلوري لبلورة غير معروفة التركيب؟

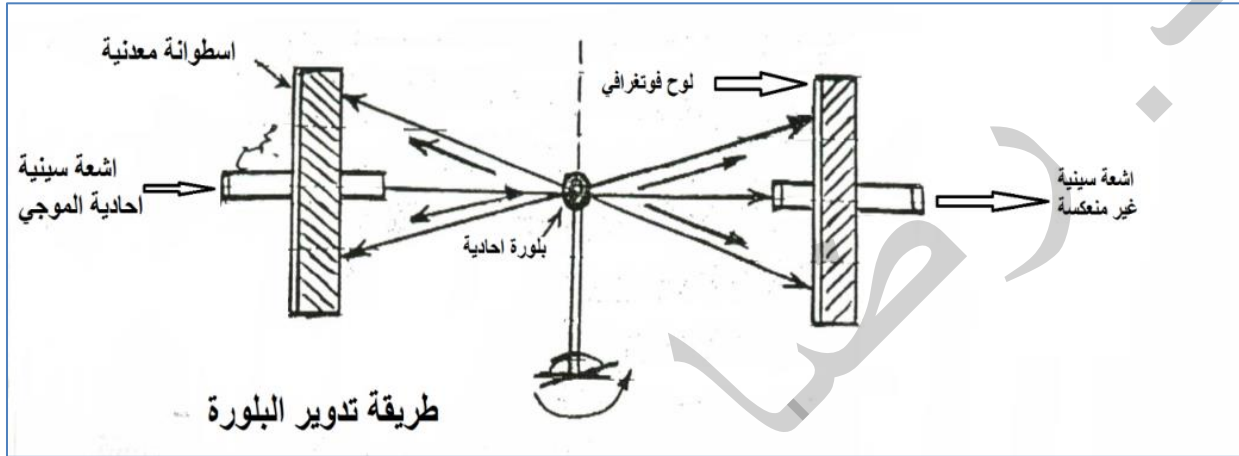
الجواب:

لا يمكن استخدام طريقة لاوي لتعيين احداثيات شبكية او تركيب بلوري لبلورة غير معروفة التركيب بسبب المدى الواسع لقيم λ حيث ان البقعة الواحدة تمثل عدة انعكاسات اي يمكن لمجاميع من السطوح المتوازية ذات فسخ متباينة ان تعكس أنياً عدة اطوال موجية لعدة قيم للرتبة. وبذلك يتعذر اعتبار شدة بقعة ما على الفيلم ممثلة لشدة انعكاس لسطح معين (hkl) ذات فسخة معينة.

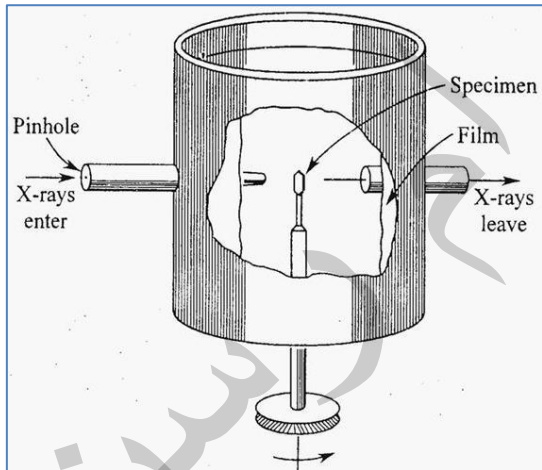
2- طريقة البلورة الدوارة (طريقة تدوير البلورة): Rotating Crystal Method

في هذه الطريقة يسمح لبلورة احادية بالدوران المستمر حول محور ثابت عمودي على اتجاه سقوط الاشعة السينية ذات طول موجي أحادي monochromatic وبذلك تتغير زاوية براك (θ) بوصفها دالة على الزمن والشكل ادناه يوضح جهاز التصوير المستخدم في هذه الطريقة . تستخدم طريقة تدوير البلورة للحالات التالية:

- يستفاد من طريقة تدوير البلورة لتعيين التركيب البلوري.
- تنحصر فائدتها في تعيين اطوال محاور شبكية بلورة معروفة التماثل.
- واذا كان التركيب البلوري معلوم فيمكن استخدام هذه الطريقة لمعرفة كون البلورة أحادية ام لا.
- يمكن بهذه الطريقة تحديد شكل وحجم وحدة الخلية وترتيب الذرات داخل الخلية .



ان مبدا عمل هذه الطريقة يمكن ان يوضح من خلال ما يلي :-



❖ الشكل التخطيطي يوضح الاجزاء الرئيسية حيث توضع البلورة المطلوب دراستها عادة على محور قابل للدوران ويكون حجمها (1mm^3) ويلصق الفلم على السطح الداخلي للأسطوانة المتحدة المركز مع محور الدوران .

❖ توجه حزمة احادية التردد في خطوط متوازية وتسقط على البلورة التي يمكنها الدوران اذا تطلب ذلك حيث يتم الحصول عل شرط الحيود وذلك فان (θ, λ) يحققان قانون براك

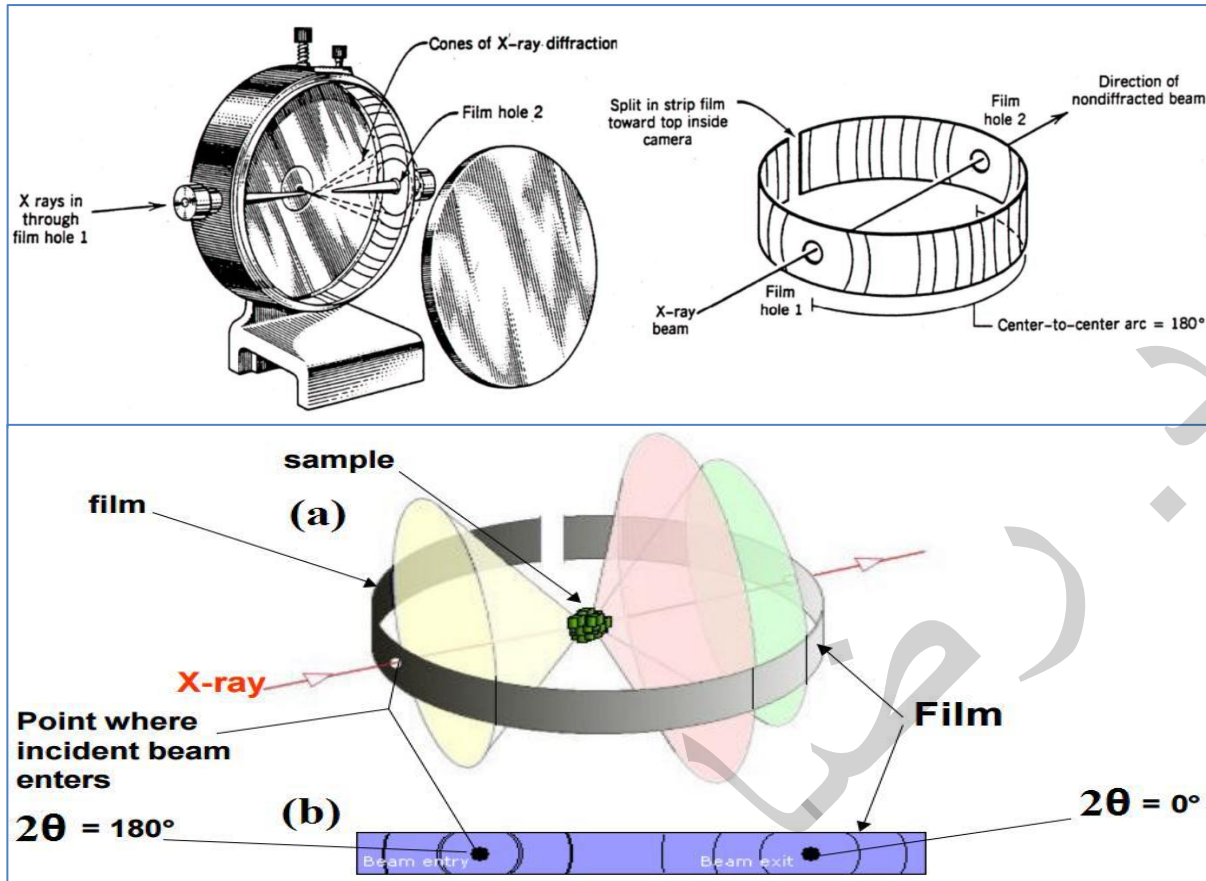
، وعند تحقيق قانون براك فان الحزمة الحائدة تنفذ من البلورة وهكذا تظهر البقع على الفلم لتسجيل نمط الحيود للاتجاهات المختلفة .

طريقة المسحوق (ديباي - شيرر) Powder method

في هذه الطريقة نستخدم مسحوق البلورة الذي يجب ان يكون متجانساً من ناحية خلط المسحوق وحجم الحبيبات المكونة له ، ان هذا المسحوق المتجانس من الحبيبات او البلورات الصغيرة له القابلية عند تعرضه للاشعة السينية الاحادية الموجة ان يعكس بعدة قيم لزاوية براك (θ) .

ولغرض توضيح هذه الطريقة نبين ما يلي :-

❖ تسحق البلورة بشكل جيد الى ان تصبح على هيئة حبيبات دقيقة جداً اي على شكل مسحوق يوضع على مسار الاشعة السينية ذات التردد الأحادي.



- ❖ كل حبة من حبيبات المسحوق يمكن اعتبارها بلورة صغيرة جداً ذات اتجاه عشوائي بالنسبة للاشعة الساقطة.
- ❖ بما ان هناك عدداً كبيراً من هذه الحبيبات في مسار الاشعة الساقطة فيكون هناك احتمال كبير من توافق وضع أحد الحبيبات أو عدد منها مع زاوية سقوط الاشعة بحيث يتحقق قانون براك وبذلك تحدث ظاهرة الحيود.
- ❖ ان نمط الحيود الذي يتم الحصول عليه بهذه الطريقة مطابقاً للحيود الذي نحصل عليه من البلورة النورية حول جميع المحاور الممكنة وليس حول محور واحد.
- ❖ وبما ان اتجاه الانعكاسات متساو في جميع الاتجاهات تقريبا لذا فان الحزمة المحادة تكون مخروطاً محوره باتجاه الشعاع الساقط.
- ❖ يبين الشكل مخاريط من الشعاع المحاد. يبين الشكل نمط الحيود على غشاء تصويري مسطح. ان خط الحيود ذا الزاوية الصغيرة 2θ يعود الى مستويات متوازية ذات أكبر مسافة بينية d_{hkl} وتكون لها أكبر قيمة عندما تكون قيمة $h^2 + k^2 + l^2$ اصغر ما يمكن.

تستخدم طريقة المسحوق للحالات التالية:

- ✓ تستعمل بشكل واسع في حقل فحص المعادن، في دراسة مكونات السبائك ونسب تلك المكونات.
- ✓ وتستخدم عند عدم إمكانية الحصول على بلورة أحادية كبيرة نسبياً (الحجم 1 mm^3) من بعض المواد.
- ✓ هذه الطريقة مفيدة جداً في الحالات تعين ثوابت البلورة مثل إيجاد قيم d للسطوح المختلفة للمسحوق
- ✓ تستخدم في دراسة تغيير الطور للمواد

الشبكة المقلوبة (Reciprocal lattice):

أن نظرية الشبكة المقلوبة تعد من المفاهيم الأساسية في علم البلورات وفي فيزياء الحالة الصلبة بحيث يمكن استخدامها للتعبير عن كل الظواهر التي تنتج من تفاعل الموجات في المواد الصلبة مثل الحيود والاستطارة وكذلك يمكن استعمال مفهوم الشبكة المقلوبة في تفسير نظرية الحزم Band theory .

أن حيود الاشعة السينية تنتج من أستطارتها من الذرات الواقعة ضمن اي مجموعة من المستويات المتوازية في البلورة ، فعليه من الصعب عمليا تعقب معرفة مصدر كل استطاره وذلك بسبب التداخل بين المستويات في البلورة ولمعرفة مصدر كل استطاره يمكن استخدام الشبكة المقلوبة واطهار كل مجموعة من المستويات في البلورة بدلالة نقطة يطلق عليها بنقطة الشبكة المقلوبة.

ان ظهور البقع السوداء على الفلم الفوتوغرافي ينتج في الحقيقة عن استطارة الاشعة السينية من الذرات الواقعة في مجموعة من المستويات المتوازية. ولتشخيص هذه البقع السوداء ومصدرها من المستويات يجب علينا مقارنة نموذج البقع السوداء على الفلم مع النموذج النظري للشبكة المقلوبة والذي يعد مكافئاً لشكل وصورة نموذج الحيود (البقع السوداء) التي تظهر على الفلم الفوتوغرافي.

تعد الشبكة المقلوبة من الناحية الرياضية عبارة عن تحويلات فوريير (Fourier Transformation) للشبكة الحقيقية. تعتمد تحويلات فوريير على نقاط أو موجات تعيد نفسها بشكل دوري. وبما أن المستويات البلورية في اي مجموعة من المستويات المتوازية تعيد نفسها بشكل دوري بمسافة d فعليه يمكن تطبيق نظرية تحويلات فوريير هنا وكذلك يمكن كتابة دالة فوريير بالشكل:

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

وقد أستطاع فوريير أن يجزء هذه الدالة الى مركبتين الاولى تدعى بالمركبة الجيبية $\sin(ar)$ والثانية تدعى بمركبة جيبية تمام $\cos(ar)$ ويمكن كتابة الدالة بالصيغة $\exp[i(ar)]$. حيث $\alpha = \frac{2\pi n}{d}$ وتمثل n عددا صحيحا و d يمثل المسافة البينية بين المستويات؟

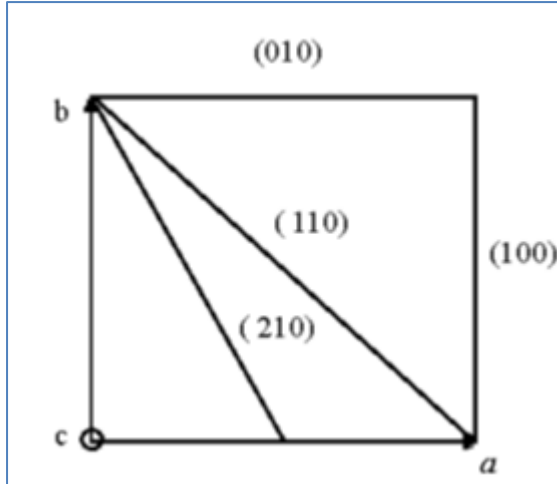
أن الدالة النهائية والتي لها علاقة بالشبكة المقلوبة هي:

$$F(r) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(n) \exp\left(\frac{2\pi n i r}{d}\right) dr$$

في الحقيقة جاءت تسمية الشبكة المقلوبة من خلال المعادلة اعلاه حيث نرى ان المسافة d بين المستويات تظهر في المعادلة بصورة مقلوبة.

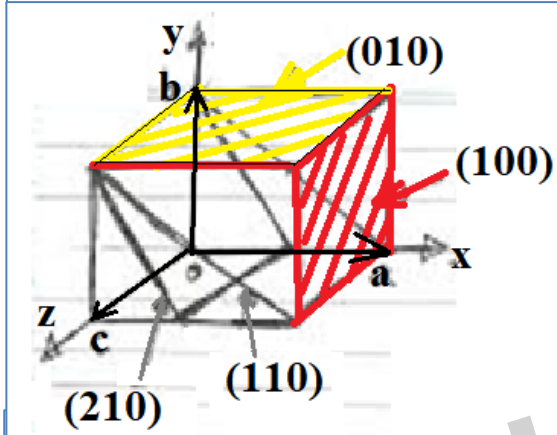
ان مقلوب المسافة هو الذي يعين موقع نقطة في الشبكة المقلوبة. وعليه يعد من الناحية الرياضية متجهاً. يطلق عليه متجه الشبكة المقلوبة ($\vec{G}$) ويكتب رياضياً بالصيغة التالية: $|\vec{G}| = \frac{A}{d_{hkl}}$ حيث A يمثل عامل مقياس الرسم وقيمه اما 1 او 2π . في فيزياء الحالة الصلبة سوف نستخدم $A = 2\pi$.

طريقة بناء الشبكة المقلوبة:



كل مجموعة من المستويات المتوازية في بلورة تمثل بمتجهات من نقطة الأصل لشبكة مقلوبة، وكل متجه عمودي على تلك المجموعة من المستويات التي يمثلها وان طولها يتناسب عكسياً مع المسافة البينية d لتلك المجموعة من المستويات. وبعبارة أخرى ان النقاط الواقعة عند نهايات تلك المتجهات العمودية تشكل نقاط الشبكة المقلوبة للبلورة.

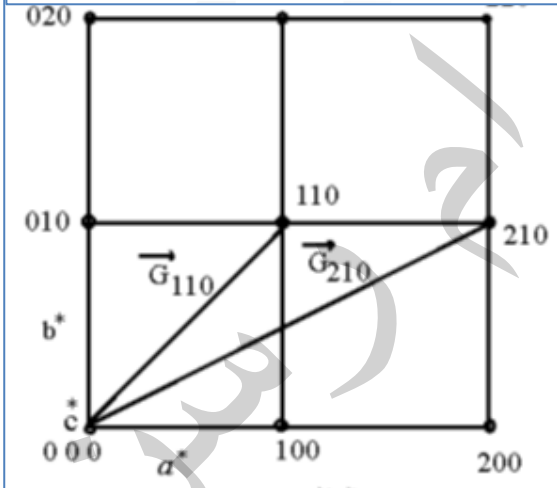
الشكل التالي يبين مجموعة الخطوط المستقيمة التي تمثل مستويات ذات إحداثيات (010) و (100) و (110) و (210) مرسومة في بعدين. وتعود هذه المستويات لخلية مكعبة.



فلكي يتم تعيين مواقع نقاط الشبكة المقلوبة التي تناظر هذه المستويات نتبع الخطوات التالية:

- أرسم من نقط الأصل المشتركة 0 إحداثيات البلورة.
- جد قيمة $\frac{1}{d_{hkl}}$ لكل مجموعة من المستويات المتوازية.
- أرسم من نقطة الأصل عمودي على المستوي ثم ضع نقطة على العمود تبعد عن نقطة الأصل $\frac{1}{d_{hkl}}$.

ويبين الشكل مجموعة من النقاط التي تمثل المستويات والتي يطلق عليها بمقلوب الشبكة .



ان اتجاه وطول المتجه الذي يربط نقطة الأصل باية نقطة يميز توجيهه وفسحة تلك المجموعة من السطوح التي تمثلها النقطة. ان مثل هذا المتجه يسمى بمتجه الشبكة المقلوبة $|\vec{G}| = A \frac{1}{d_{hkl}}$ ، حيث A هو عامل مقياس الرسم وقيمتها إما 1 او 2π .

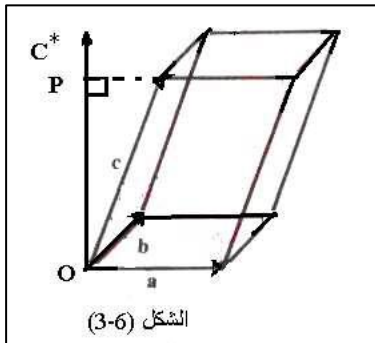
وسوف نستخدم في فيزياء الحالة الصلبة $A = 2\pi$

$$|\vec{G}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$$

الشبكة المقلوبة: هي عدد غير محدود من نقاط مرتبه بنظام وبشكل دوري في فضاء ثلاثي الابعاد. بحيث ان طول المتجه بين نقطة الأصل واي نقطة في الشبكة المقلوبة تتناسب عكسياً مع المسافة البينية d في مجموعة من المستويات المتوازية في شبكة حقيقية. تقاس أطوال المتجهات في الشبكة المقلوبة بمقلوب وحدات المتجهات في الشبكة المباشرة (الحقيقية) : (cm - 1) أو (m - 1) أو (Å - 1) .

ملاحظة : الكمية المتجه تكتب بلون غامق او يوضع فوقها سهم.

متجهات الشبكة المقلوبة Reciprocal lattice vectors



الشكل (3-6)

يمكن تحديد الشبكة المباشرة (الحقيقية) في فضاء حقيقي

بالمحاور الأساسية $\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$ ، وب نفس الطريقة يمكن تحديد الشبكة المقلوبة بمحاور أساسية أخرى. تعرف المتجهات الأساسية للشبكة المقلوبة بدلالة المتجهات الأساسية للشبكة $\vec{a}^*$ $\vec{b}^*$ $\vec{c}^*$ وتقرأ $\vec{a}$ - star $\vec{b}$ - star $\vec{c}$ - star و $\vec{c}$.

لاشتقاق العلاقة بين [المتجهات الأساسية للشبكة الحقيقية (المباشرة)

$\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$] وبين [متجهات الشبكة المقلوبة $\vec{a}^*$ $\vec{b}^*$ $\vec{c}^*$ (الشبكة في الفضاء المقلوب - الفضاء المعكوس - فضاء فورير)]، نفرض لدينا خلية من نظام ثلاثي الميل Triclinic ذات محاور أساسية $\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$ كما في الشكل:

ان حجم الخلية يساوي مساحة القاعدة في الارتفاع. وان ارتفاع الخلية يساوي op ويعادل d_{hkl} والعلاقة

$$\frac{\text{المساحة}}{\text{الحجم}} = \frac{1}{d_{hkl}} \quad \text{بين المساحة والحجم تعطى بالصيغة:}$$

حجم خلية الوحدة في الشبكة البلورية العادية (الحقيقية - المباشرة) $\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}$ يمكن إعادة كتابة المعادلة السابقة $(|\vec{G}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}})$ بدلالة متجه الشبكة المقلوبة :

$$\vec{a} \dots \vec{b} \dots \times \dots \vec{c} \dots \times \dots \vec{a} \dots \times \dots \vec{b} \quad \text{البسط يمثل}$$

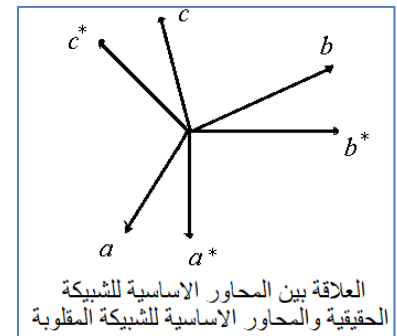
$$\begin{aligned} \vec{G}_{100} &= 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \dots \dots \vec{a}^* = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \quad \text{-----} \quad \vec{a}^* \perp \vec{b} \times \vec{c} \\ \vec{G}_{010} &= 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \dots \dots \vec{b}^* = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \quad \text{-----} \quad \vec{b}^* \perp \vec{c} \times \vec{a} \\ \vec{G}_{001} &= 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \dots \dots \vec{c}^* = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \quad \text{-----} \quad \vec{c}^* \perp \vec{a} \times \vec{b} \end{aligned}$$

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

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

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

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



العلاقة بين المحاور الأساسية للشبكة الحقيقية والمحاور الأساسية للشبكة المقلوبة

ان تحديد مواقع نقاط الشبكة الحقيقية بواسطة المتجهات الانتقالية البدائية $\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$ وبهذا يكون المتجه الانتقالي الشبكي $\vec{T}$ لاي نقطة يعرف :

$$\vec{T} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}$$

وب نفس الطريقة يمكن تعريف موقع أي نقطة في الشبكة المقلوبة بمتجه الشبكة المقلوبة $\vec{G}_{hkl}$ بدلالة اعداد صحيحة hkl لمحاور الشبكة المقلوبة $\vec{a}^*$ $\vec{b}^*$ $\vec{c}^*$

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

كما نلاحظ ان حجم خلية الوحدة المقلوبة V^* يتناسب عكسياً مع حجم خلية الوحدة العادية V

$$\mathbf{v}^* = \vec{\mathbf{a}}^* \cdot \vec{\mathbf{b}}^* \times \vec{\mathbf{c}}^* \quad \& \quad \mathbf{v} = \vec{\mathbf{a}} \cdot \vec{\mathbf{b}} \times \vec{\mathbf{c}} \quad \& \quad V^* \propto \frac{1}{V} \quad \& \quad \vec{\mathbf{a}}^* \cdot \vec{\mathbf{b}}^* \times \vec{\mathbf{c}}^* \propto \frac{1}{\vec{\mathbf{a}} \cdot \vec{\mathbf{b}} \times \vec{\mathbf{c}}}$$

أي ان لكل بلورة شبيكتين ترافقانهما وهما الشبكة البلورية (الحقيقية- المباشرة) والشبكة المقلوبة. وعندما نستقبل الاشعة السينية بعد حيودها عبر البلورة فاننا نحصل على صورة تعتبر مسحا للشبكة المقلوبة وخصائصها.

أي اننا اذا تخيلنا اننا ننظر مباشرة الى البلورة لنبحث عن ترتيب الذرات فيها ، فان هذا يُعد تعاملاً مع البنية البلورية الفعلية (الحقيقية - المباشرة) بينما نموذج الحيود يعتبر خريطة لمقلوب الشبكة للبلورة. أي ان الصورة التي نحصل عليها بالميكروسكوب الالكتروني هي خريطة للتركيب البلوري الحقيقي. وبالمقابل صورة الفلم الفوتوغرافي للاشعة السينية بعد الحيود هي صورة للشبكة المقلوبة.

شرط الحيود لأقصى شدة :-

لغرض الحصول على اقصى شدة للموجة المستطيرة من سطح في بلورة ما يجب ان تتحقق معادلات لاوي الثلاثة والتي صيغتها بدلالة المتغير الاتجاهي لمتجه الموجة $\vec{\Delta K}$ وان q , r , s هي اعداد صحيحة .

$$\left. \begin{aligned} \vec{a} \cdot \vec{\Delta K} &= 2\pi q \\ \vec{b} \cdot \vec{\Delta K} &= 2\pi r \\ \vec{c} \cdot \vec{\Delta K} &= 2\pi s \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots \text{معادلات لاوي}$$

وتتحقق هذه المعادلات الثلاثة أنياً اذا كان التغير الاتجاهي لمتجه جبهة الموجة $\vec{\Delta K}$ مساوياً لمتجه الشبكة المقلوبة $\vec{G}_{hkl}$ وبذلك لحصول على اقصى شدة .

$$\vec{\Delta K} = \vec{G}_{hkl}$$

$$\vec{k} - \vec{k} = ha^* + kb^* + lc^*$$

ان المعادلة اعلاه تعني ان المتجهين متساويين في القيمة والاتجاه (اطوالهما متساوية واحداهما يوازي الآخر وان كليهما متعامدان على السطح hkl في البلورة) . وللحصول على المعادلة اعلاه نعمل على تكافؤ شرط براك ولاوي يمكن اثبات ذلك كما يلي :

$$\vec{k} = \text{متجه الموجة الساقطة} \quad \vec{k} = \text{متجه الموجة المستطيرة}$$

$$|\vec{k} - \vec{k}| = |\vec{\Delta K}| = |\vec{G}_{hkl}|$$

قيمة مطلقة تساوي الاطوال .

البناء الهندسي لكرة ايوالد:

- استطاع العالم ايوالد ربط فكرة الشبكة المقلوبة مع فكرة كرة الانعكاس التي أطلق عليها بكرة ايوالد لتفسير النتائج التجريبية لحيود الاشعة السينية.
- يمكن معرفة المستوي الذي يعمل على استقطار الاشعة السينية من معرفة اتجاه وقيمة الطول الموجي للأشعة الساقطة.
- نفرض ان النقاط المرسومة في الشكل تمثل نقاط في الشبكة المقلوبة. نرسم متجه CO في اتجاه سقوط الاشعة السينية على ان يكون طوله يساوي $\left(\frac{1}{\lambda}\right)$ حيث λ تمثل الطول الموجي للأشعة السينية الساقطة ويمر بنقطة في الشبكة المقلوبة مثل O.

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{d_{hkl}} \hat{n}$$

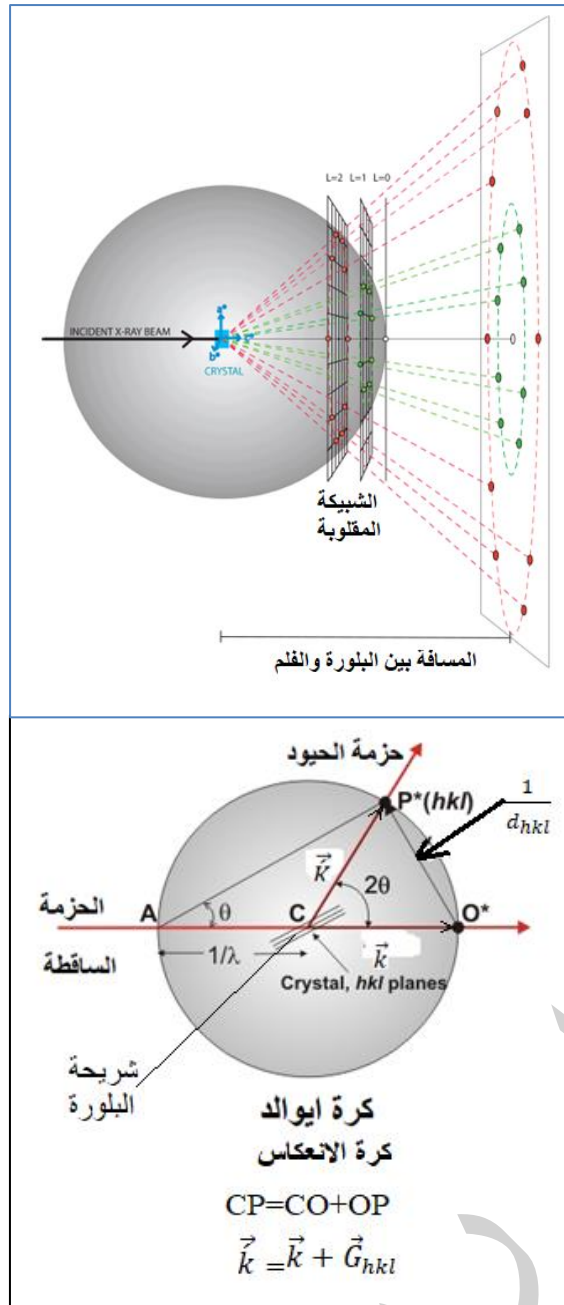
$$2d_{hkl} \sin \theta_{hkl} = n\lambda$$

$$\sin \theta_{hkl} = \frac{\lambda}{2d_{hkl}} = \frac{(1/d_{hkl})}{(2/\lambda)}$$

- الان إذا رسم مثلث قائم الزاوية في دائرة سيكون قطرها وتراً له والمثلث سيكون قائم الزاوية، فإذا كان قطر الدائرة $\frac{2}{\lambda}$ وأحد الساقين المتعامدين للمثلث $\frac{1}{d_{hkl}}$ كانت الزاوية التي تقابل هذا الساق هي θ كما في الشكل.

من التمثيل البياني لقانون براك نستطيع ان نحدد حيود الاشعة السينية فقط في نقطة معينة وكما يلي:

- 1- نضع شريحة بلورة في الموقع C
- 2- نسقط عليها اشعة سينية طولها الموجي λ . من نقطة A تنحرف الاشعة بزاوية θ الى النقطة P وبذلك يكون PA زاوية θ مع الشعاع الساقط على البلورة. بحيث OP عمودي على سطح البلورة وكذلك على AP وان الزاوية PCO هي 2θ ولهذا يكون الشعاع CP باتجاه الحزمة المنعكسة، حيث ان الشكل اعلاه يمثل قانون براك بدلالة مفاهيم الشبكة المقلوبة حيث يتحقق قانون براك.



$$G = OP = \frac{1}{d_{hkl}} = \frac{\vec{G}}{2\pi}$$

$$k = CO = \frac{1}{\lambda} \quad \vec{k} = CP$$

$$\vec{k} = \text{متجه الموجة المستطيرة}$$

$$\vec{k} = \text{متجه الموجة الساقطة} \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = \text{متجه الموجة}$$

يحدث انعكاس براك إذا مرت كرة ايوالد (كرة الانعكاس) باي نقطة أخرى في الشبكة المقلوبة، مثل النقطة P التي تتصل بالنقطة O بواسطة متجه الشبكة المقلوبة $\vec{G}$ ويكون اتجاه الشعاع المنعكس (المستطير) هو $\vec{k}$. $\vec{G}_{hkl} = \Delta \vec{k}$

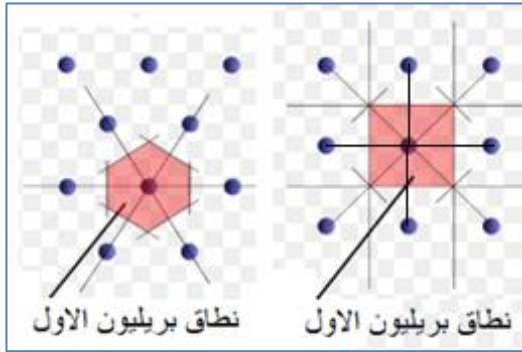
$$\vec{k} = \vec{k} + \vec{G}_{hkl}$$

بترتيب طرفي المعادلة (1) وللحيود المرن $\vec{k} = \vec{k}$ (لا تغير بالطاقة)

$$\vec{k}^2 = (\vec{G}_{hkl} + \vec{k})^2 = G_{hkl}^2 + 2\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{k} + \vec{k}^2$$

$$G_{hkl}^2 + 2\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{k} = 0 \quad \text{معادلة براك للشبكة المقلوبة}$$

$$2d_{hkl} \sin \theta_{hkl} = n\lambda \quad \text{والمعادلة الأخيرة تكافئ معادلة براك في الشبكة الحقيقية}$$



مناطق بريليون Brillouin zones:

المنطقة المحيطة بنقطة شبكية مقلوبة (الشبكية المعكوسة) في الفضاء المقلوب (فضاء فورير أو فضاء متجه الموجة k) تسمى منطقة أو نطاق بريليون الأول. نطاق بريليون الأول: هو أصغر حجم للحيز المحيط أو المتمركز حول إحدى نقاط الشبكة المقلوبة والمحددة بمجموعة من السطوح التي تكون منصفة وعمودية على اتجاهات الشبكة المقلوبة التي تربط تلك النقطة بالنقاط المجاورة بها كما في الشكل.

لتحديد نطاق بريليون الأول حول نقطة شبكية مقلوبة:

- 1- نربط النقطة بجميع النقاط المجاورة لها بمتجهات.
- 2- نرسم خطوط مستقيمة (سطوح) بشكل عمودي على هذه المتجهات من نقاط المنتصف.
- 3- ان أصغر مساحة محصورة بالمستقيمات (السطوح) المرسومة تدعى بنطاق بريليون الأول وحجم منطقة بريليون يعطى:

$$V^* = V_{BZ} = \vec{a}^* \cdot \vec{b}^* \times \vec{c}^* = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

حيث ان V هو حجم خلية الوحدة الأولية للشبكية الحقيقية أو المباشرة.

ويمكن تعريف منطقة بريليون بانها خلية ويكنر سيتز البدائية في الشبكية المقلوبة.

منطقة بريليون تعطي تفسير هندسي لشروط الحيود متمثلة بالمعادلة $G^2_{hke} + 2\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{k} = 0$

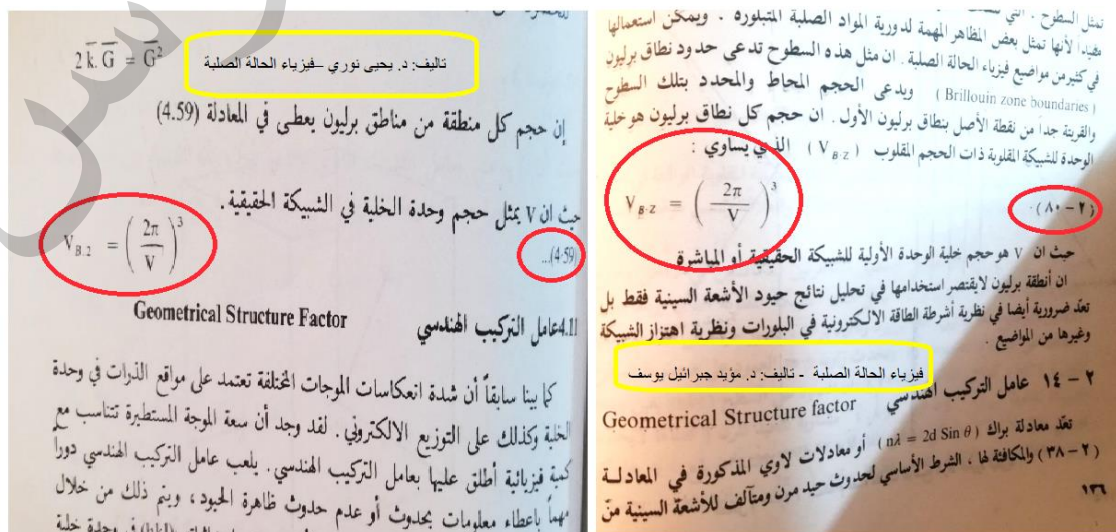
للحصول على شرط الحيود $G^2_{hke} = 2\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{k}$

ملاحظة: تصحيح الخطأ في المصادر المعتمدة لمادة فيزياء الحالة الصلبة:

المصادر

- فيزياء الحالة الصلبة --- تأليف: د. يحيى نوري الجمال
- صفحة 155 معادلة 4-59
- فيزياء الحالة الصلبة ----- تأليف: د. مؤيد جبرائيل يوسف
- صفحة 136 معادلة 2-80

الخطأ: $V_{BZ} = \left(\frac{2\pi}{V}\right)^3$ الصحيح: $V_{BZ} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$ أو $V_{BZ} = \frac{(2\pi)^3}{V}$



مثال: اوجد المتجهات الأساسية للشبكة المقلوبة لشبكة مكعب بسيط SC ؟

مثال: اثبت ان الشبكة المقلوبة لشبكة مكعب بسيط هي ايضاً شبكة مكعب بسيط طول ضلعه $\frac{2\pi}{a}$

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

$$\vec{a}^* = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \quad \vec{b}^* = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \quad \vec{c}^* = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}$$

$$V = |\vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c}| = |a\hat{x} \times a\hat{y} \cdot a\hat{z}| = |a^2 \hat{z} \cdot a\hat{z}| = |a^3|$$

$$\vec{a}^* = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} = \frac{2\pi}{a^3} (\vec{b} \times \vec{c}) = \frac{2\pi}{a^3} (a\hat{y} \times a\hat{z}) = \frac{2\pi a^2}{a^3} (\hat{y} \times \hat{z}) = \frac{2\pi}{a} \hat{x}$$

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{a} \hat{x}$$

$$\vec{b}^* = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} = \frac{2\pi}{a^3} (\vec{c} \times \vec{a}) = \frac{2\pi}{a^3} (a\hat{z} \times a\hat{x}) = \frac{2\pi a^2}{a^3} (\hat{z} \times \hat{x}) = \frac{2\pi}{a} \hat{y}$$

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

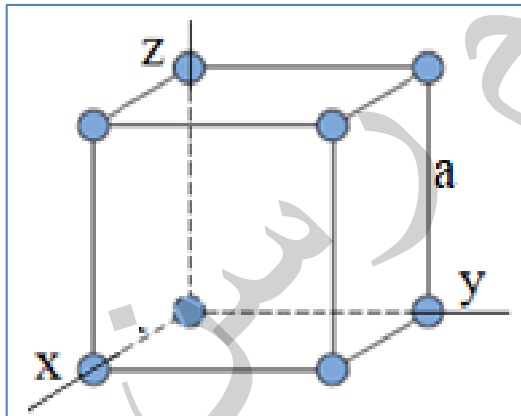
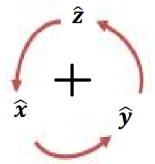
$$\vec{c}^* = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} = \frac{2\pi}{a^3} (\vec{a} \times \vec{b}) = \frac{2\pi}{a^3} (a\hat{x} \times a\hat{y}) = \frac{2\pi a^2}{a^3} (\hat{x} \times \hat{y}) = \frac{2\pi}{a} \hat{z}$$

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

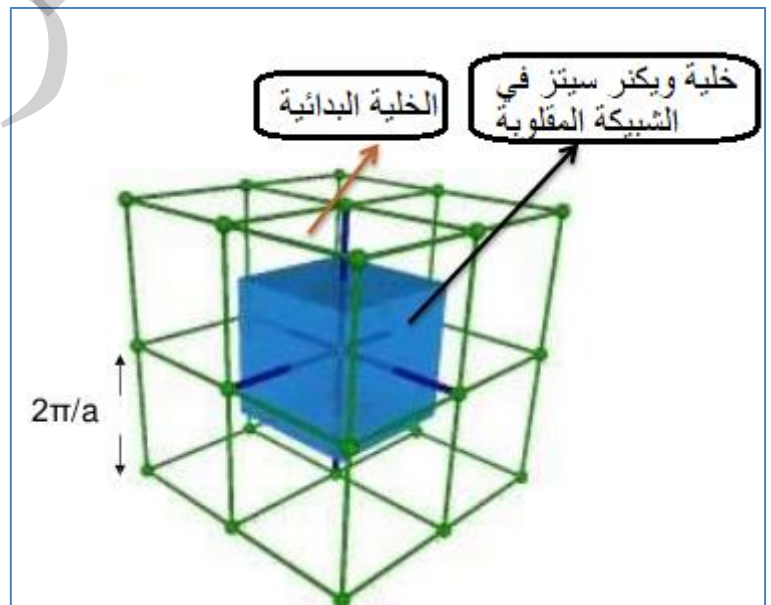
$$\vec{G}_{hkl} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

$$\vec{G}_{hkl} = h \frac{2\pi}{a} \hat{x} + k \frac{2\pi}{a} \hat{y} + l \frac{2\pi}{a} \hat{z} \quad \dots \quad \vec{G}_{hkl} = \frac{2\pi}{a} (h\hat{x} + k\hat{y} + l\hat{z})$$

$$V^* = V_{BZ} = \vec{a}^* \cdot \vec{b}^* \times \vec{c}^* = \frac{2\pi}{a} \hat{x} \cdot \frac{2\pi}{a} \hat{y} \times \frac{2\pi}{a} \hat{z} = \frac{2\pi}{a} \hat{x} \cdot \frac{4\pi^2}{a^2} \hat{x} = \frac{(2\pi)^3}{a^3} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 = \frac{(2\pi)^3}{V}$$



الشبكة البلورية (الحقيقية او المباشرة)



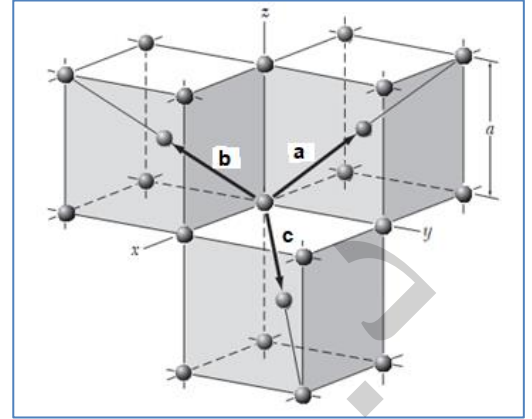
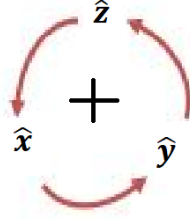
الشبكة المقلوبة (الشبكة المعكوسة)

مثال: اوجد المتجهات الأساسية للشبيكة المقلوبة لمكعب متمركز الجسم BCC ؟
مثال: اثبت ان الشبيكة المقلوبة لمكعب BCC هي شبيكة مكعب FCC ؟

$$\vec{a} = \frac{1}{2}a(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{b} = \frac{1}{2}a(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{c} = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$



$$V = |\vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c}| = \frac{1}{2}a^3 \quad \text{تم اثباتها في الفصل الأول}$$

$$\vec{a}^* = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \quad \vec{b}^* = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \quad \vec{c}^* = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}$$

$$\vec{a}^* = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} = \frac{2\pi}{\frac{1}{2}a^3} (\vec{b} \times \vec{c}) = \frac{4\pi}{a^3} (\vec{b} \times \vec{c})$$

$$\vec{b} = \frac{a}{2}\hat{x} - \frac{a}{2}\hat{y} + \frac{a}{2}\hat{z} \quad \vec{c} = \frac{a}{2}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{y} - \frac{a}{2}\hat{z}$$

$$(\vec{b} \times \vec{c}) = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} \end{vmatrix}$$

$$(\vec{b} \times \vec{c}) = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} \end{vmatrix}$$

$$\vec{b} \times \vec{c} = \left(\frac{a^2}{4} - \frac{a^2}{4} \right) \hat{x} + \left(\frac{a^2}{4} + \frac{a^2}{4} \right) \hat{y} + \left(\frac{a^2}{4} + \frac{a^2}{4} \right) \hat{z} = \frac{a^2}{2} \hat{y} + \frac{a^2}{2} \hat{z}$$

$$\vec{a}^* = \frac{4\pi}{a^3} (\vec{b} \times \vec{c}) = \frac{4\pi}{a^3} \left(\frac{a^2}{2} (\hat{y} + \hat{z}) \right) = \frac{2\pi}{a} (\hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{a} (\hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{b}^* = \frac{2\pi}{a} (\hat{x} + \hat{z}) \quad \vec{c}^* = \frac{2\pi}{a} (\hat{x} + \hat{y})$$

وبنفس الطريقة يمكن اثبات

المتجهات الانتقالية الأساسية للشبيكة المقلوبة $(\vec{a}^* \vec{b}^* \vec{c}^*)$ هنا تمثل شبيكة مكعب FCC

مثال: اوجد المتجهات الأساسية للشبيكة المقلوبة لمكعب متمركز الوجة FCC ؟
مثال: اثبت ان الشبيكة المقلوبة لمكعب FCC هي شبيكة مكعب BCC ؟

$$\vec{a} = \frac{1}{2}a(\hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{b} = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{z})$$

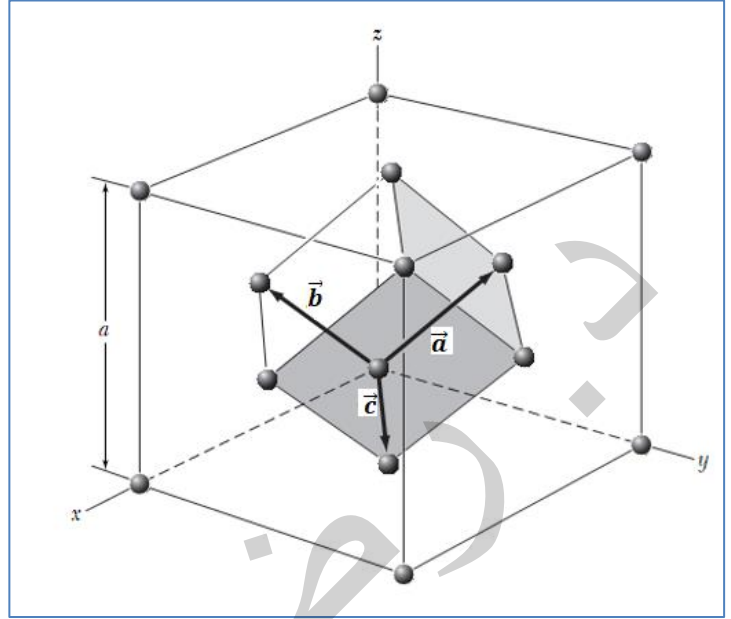
$$\vec{c} = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y})$$

$$V = |\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}| = \frac{1}{4}a^3$$

حجم الخلية الاولى لشبيكة مكعب متمركز الوجة تم اثباتها في الفصل الاول

$$\vec{a}^* = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \quad \vec{b}^* = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}$$

$$\vec{c}^* = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}$$



$$\vec{a}^* = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} = \frac{2\pi}{\frac{1}{4}a^3} (\vec{b} \times \vec{c}) = \frac{8\pi}{a^3} (\vec{b} \times \vec{c})$$

$$\vec{b} = \frac{a}{2}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{z} \quad \vec{c} = \frac{a}{2}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{y}$$

$$(\vec{b} \times \vec{c}) = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{a}{2} & 0 & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & 0 \end{vmatrix} \quad (\vec{b} \times \vec{c}) = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{a}{2} & 0 & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & 0 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{a}{2} & 0 & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & 0 \end{vmatrix}$$

$$\vec{b} \times \vec{c} = \left(0 - \frac{a^2}{4}\right)\hat{x} + \left(\frac{a^2}{4} - 0\right)\hat{y} + \left(\frac{a^2}{4} - 0\right)\hat{z}$$

$$= -\frac{a^2}{4}\hat{x} + \frac{a^2}{4}\hat{y} + \frac{a^2}{4}\hat{z} = \frac{a^2}{4}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{a}^* = \frac{8\pi}{a^3} (\vec{b} \times \vec{c}) = \frac{8\pi}{a^3} \left(\frac{a^2}{4}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})\right) = \frac{2\pi}{a}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{a}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$$

وبنفس الطريقة يمكن اثبات

$$\vec{b}^* = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}) \quad \vec{c}^* = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$

المتجهات الانتقالية الأساسية للشبيكة المقلوبة $(\vec{a}^* \vec{b}^* \vec{c}^*)$ هنا تمثل شبيكة مكعب BCC

مثال: برهن عل ان متجه الشبكة المقلوبة $\vec{G}_{hkl}$ يكون عمودياً على المستوي (hkl) ؟
 الجواب: لإثبات أن متجه الشبكة المقلوبة $\vec{G}_{hkl} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$ عمودي على المستوي (hkl) يكفي ان نثبت ان $\vec{G}_{hkl}$ عمودي على متجهين غير متوازيين في هذا المستوي. المستوي البلوري الذي معاملات ميلر له هي hkl هو مستوي يُعرف بالنقاط $\frac{a}{h}, \frac{b}{k}, \frac{c}{l}$.

يمكن ان نأخذ المتجهين $\left(\frac{\vec{a}}{h} - \frac{\vec{b}}{k}\right)$ and $\left(\frac{\vec{a}}{h} - \frac{\vec{c}}{l}\right)$ اللذان يقعان في هذا المستوي. فاذا كان حاصل الضرب العددي لهذين المتجهين مع متجه الشبكة المقلوبة $\vec{G}_{hkl}$ يساوي صفر، فان متجه الشبكة المقلوبة $\vec{G}_{hkl}$ يكون عمودياً على سطح البلورة (hkl) .

$$\vec{G} \cdot \left(\frac{\vec{a}}{h} - \frac{\vec{b}}{k}\right) = 0 \quad (\theta = 90) \rightarrow \cos\theta = 0 \rightarrow \vec{G} \perp (hkl)$$

$$\begin{aligned} \vec{G} \cdot \left(\frac{\vec{a}}{h} - \frac{\vec{b}}{k}\right) &= (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \cdot \left(\frac{\vec{a}}{h} - \frac{\vec{b}}{k}\right) \\ &= \frac{h}{h}(\vec{a}^* \cdot \vec{a}) - \frac{h}{k}(\vec{a}^* \cdot \vec{b}) + \frac{k}{h}(\vec{b}^* \cdot \vec{a}) - \frac{k}{k}(\vec{b}^* \cdot \vec{b}) + \frac{l}{h}(\vec{c}^* \cdot \vec{a}) \\ &\quad - \frac{l}{k}(\vec{c}^* \cdot \vec{b}) \end{aligned}$$

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

$$\therefore \vec{G} \cdot \left(\frac{\vec{a}}{h} - \frac{\vec{b}}{k}\right) = 0$$

$$\vec{G} \cdot \left(\frac{\vec{a}}{h} - \frac{\vec{c}}{l}\right) = 0 \quad \text{بنفس الطريقة}$$

أي ان متجه الشبكة المقلوبة $\vec{G}_{hkl}$ يكون عمودياً على سطح البلورة (hkl)
مثال: اثبت انه لشبكة مكعب بسيط $d^2 = \frac{a^2}{(h^2+k^2+l^2)}$ باستعمال أفكار الشبكة المقلوبة؟

$\vec{a} = a\hat{x}$	$\vec{b} = a\hat{y}$	$\vec{c} = a\hat{z}$
$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{a}\hat{x}$	$\vec{b}^* = \frac{2\pi}{a}\hat{y}$	$\vec{c}^* = \frac{2\pi}{a}\hat{z}$

$$\vec{G}_{hkl} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^* \quad \vec{G}_{hkl} = h\frac{2\pi}{a}\hat{x} + k\frac{2\pi}{a}\hat{y} + l\frac{2\pi}{a}\hat{z}$$

$$|\vec{G}| = \sqrt{\left(\frac{2\pi h}{a}\right)^2 + \left(\frac{2\pi k}{a}\right)^2 + \left(\frac{2\pi l}{a}\right)^2} = \frac{2\pi}{a} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$$

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|} = \frac{2\pi}{\frac{2\pi}{a} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

عامل التركيب الهندسي:

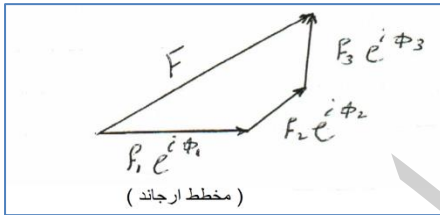
هو النسبة بين سعة الموجة المستطيرة من جميع الذرات الموجودة في خلية الوحدة من بلورة وسعة الموجة المستطيرة من الكتروون حر طليق عند تعرض كل منهما الى حزمة من الاشعة السينية الساقطة نفسها.

اما سبب تسميته بعامل التركيب الهندسي F_{hkl} فيعود الى انه يمثل محصلة سعة الموجات المستطيرة من الذرات المختلفة، التي تكون عادة متباينة الاطوار بسبب اختلاف مواضع الذرات داخل خلية الوحدة الصادرة عنها تلك الموجات، وفضلاً عن ذلك، قد تكون السعات متباينة في القيمة ايضاً نتيجة اختلاف أنواع الذرات في خلية الوحدة و ثم اختلاف العدد والتوزيع الالكتروني للأنواع المختلفة من الذرات مما يسبب تبايناً في قدرتها على التشتيت. وان الذرات تكون مختلفة في عدد الالكترونات المكونة لكل منها، يتسبب ذلك في قدرتها المختلفة على الاستطارة .

$$F_{(hkl)} = \sum_{n=1}^{n=N} f_n \exp[2\pi i(u_n h + v_n k + w_n l)]$$

ونلاحظ بان عامل التركيب الهندسي F_{hkl} كمية مركبة تحتوي حد حقيقي وحد خيالي وهو يعتمد على:

- 1- العدد الكلي للذرات N في وحدة الخلية.
 - 2- موقع كل ذرة من الذرات u_n, v_n, w_n في وحدة الخلية.
 - 3- قدرة او قابلية الاستطارة لكل ذرة من الذرات f_n في وحدة الخلية وهذه القابلية تعتمد على التوزيع الالكتروني لكل ذرة وعوامل أخرى.
- فرق الطور بين الحزمة المستطيرة من الذرة n وتلك الحزمة المستطيرة من الذرة الأولى الواقعة في نقطة أصل خلية الوحدة



$$\Phi_n = 2\pi i(u_n h + v_n k + w_n l)$$

حيث hkl دلائل ميلر و u_n, v_n, w_n احداثيات الذرات

$$F_{hkl} = \sum_{n=1}^{n=N} f_n e^{i\Phi_n}$$

$$F_{hkl} = f_1 + f_2 e^{i\Phi_2} + f_3 e^{i\Phi_3} + \dots + f_N e^{i\Phi_N}$$

f_n : قابلية الاستطارة حيث f_1 للذرة الاولى f_2 للذرة الثانية وان f_n يتمثل بالجمع الاتجاهي لسعة الموجات المستطيرة من جميع الذرات في خلية الوحدة ، كما في المخطط (مخطط ارجاند) لثلاث ذرات. وبما ان المعادلة تتضمن $e^{i\Phi}$ والذي يساوي

$$e^{i\Phi} = \cos \Phi + i \sin \Phi$$

اذن ستكون المعادلة (1)

$$F_{hkl} = \sum_{n=1}^{n=N} f_n \cos \Phi_n + \sum_{n=1}^{n=N} f_n i \sin \Phi$$

$$I \propto F^2_{(hkl)}$$

اذن الشدة تتناسب مع مربع السعة

ولحساب F نحتاج الى ما يلي :

- 1- عدد نقاط الشبكة في خلية الوحدة
- 2- نوع ذرات الأساس ومواقعها بالنسبة لنقطة الاصل
- 3- دلائل او معاملات ميلر للمستوي المراد حساب عامل التركيب له
- 4- قدرة تشتت كل ذرة من ذرات الأساس (أي معرفة عامل التشتت لكل نوع من ذرات وحدة الخلية).

$$e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$$

ملاحظة: تذكران:

$$e^{-i2\pi} = e^{i2\pi} = \cos 2\pi + i \sin 2\pi = 1 + 0 = 1 = e^{-i\pi} (\text{عدد زوجي}) = e^{i\pi} (\text{عدد زوجي})$$

$$e^{-i\pi} = e^{i\pi} = \cos \pi + i \sin \pi = -1 + 0 = -1 = e^{-i\pi} (\text{عدد فردي}) = e^{i\pi} (\text{عدد فردي})$$

مثال 1: حساب عامل التركيب الهندسي لشبكة مكعب بسيط (SC)

توجد نقطة شبكة واحدة في خلية الوحدة لشبكة مكعبة بسيطة (SC) وعندما يكون الأساس المرافق لهذه النقطة مكوناً من ذرة واحدة فقط، فإن موقع هذه الذرة سيكون في $u = v = w = 0$

$$\left\{ F_{(hkl)} = \sum_{n=1}^{n=N} f_n \exp[2\pi i(u_n h + v_n k + w_n l)] \right\}$$

$$F_{(hkl)} = f e^{2\pi i(u_n h + v_n k + w_n l)} = f e^{2\pi i(0h + 0k + 0l)} = f \quad \dots \dots \dots 1$$

$$I \propto |F_{hkl}|^2 = f^2$$

أي أن عامل التركيب لأي سطح (hkl) في شبكة (SC) يساوي قدرة استقطار الذرة الوحيدة في خلية الوحدة. وهذا يعني أن أي سطح يحقق قانون براك توجد له قيمة لشدة الموجة المستقطرة تتناسب مع مربع قدرة استقطار الذرة f^2 . ولما كانت f لأي سطح (hkl) تتناسب عكسياً مع $\frac{\sin \theta}{\lambda}$ أو طردياً مع d_{hkl} لذلك السطح. لذا سيكون هنالك انخفاض في قيم شدة الموجة المستقطرة من مستويات شبكة البلورة كلما ازدادت قيم دلائل ميلر للسطح المشتت للاشعة السينية. وفي الواقع لا توجد بلورات حقيقية ذات شبكة SC وبأساس مكون من ذرة واحدة. أي أن هذا المثال هو مثال خيالي غير واقعي.

مثال 2: احسب عامل التركيب لشبكة مكعب متمركز الجسم (BCC).

إذا كانت الذرتان متشابهتان يعني $f_2 = f_1$ ، متساوية $N=2$ $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$ 000

موقع الذرة الأولى $u_1 = 0 \quad v_1 = 0 \quad w_1 = 0$

وموقع الذرة الثانية $u_2 = \frac{1}{2} \quad v_2 = \frac{1}{2} \quad w_2 = \frac{1}{2}$

$$\left\{ F_{(hkl)} = \sum_{n=1}^{n=N} f_n \exp[2\pi i(u_n h + v_n k + w_n l)] \right\}$$

$$F_{(hkl)} = \sum_{n=1}^{n=2} f_n e^{2\pi i(u_n h + v_n k + w_n l)}$$

$$F_{(hkl)} = f \left[e^{2\pi i(0h + 0k + 0l)} + e^{2\pi i(\frac{1}{2}h + \frac{1}{2}k + \frac{1}{2}l)} \right]$$

$$F_{(hkl)} = f [1 + e^{\pi i(h+k+l)}] \quad \dots \dots \dots 2$$

عامل التركيب هنا يعتمد على الحد $e^{i\pi(h+k+l)}$ وكما يلي :-

(a) إذا كان $(h+k+l)$ مجموعهم عدد فردي

$$e^{-i\pi} = e^{i\pi} = \cos \pi + i \sin \pi = -1 + 0 = -1 = e^{-i\pi} \text{ (عدد فردي)} = e^{i\pi} \text{ (عدد فردي)}$$

وبالتعويض في معادلة 2 سيكون عامل التركيب :-

$$F_{(hkl)} = f [1 - 1] = 0$$

القاعدة ستكون هنا هي إذا كان $\{ (h+k+l) = \text{عدد فردي} \}$ فإن عامل التركيب: $\{ F_{hkl} = 0 \}$

$$I \propto |F_{hkl}|^2 = 0 \quad \text{انعكاس مفقود (غائب) -- والشدة ستكون:}$$

أما إذا كان مجموع $(h+k+l)$ هو عدد زوجي

$$e^{-i2\pi} = e^{i2\pi} = \cos 2\pi + i \sin 2\pi = 1 + 0 = 1 = e^{-i\pi} \text{ (عدد زوجي)} = e^{i\pi} \text{ (عدد زوجي)}$$

وعند التعويض بالمعادلة 2 سيكون عامل التركيب :-

$$F_{hkl} = f [1+1] = 2f$$

القاعدة: ستكون هنا هي اذا كان $\{h + k + l = \text{عدد زوجي}\}$ فان عامل التركيب: $\{F_{hkl} = 2f\}$
 انعكاس موجود (حاضر) -- والشدة ستكون: $I \propto |F_{hkl}|^2 = 4f^2$
 مناقشة المثال السابق لحساب عامل التركيب لشبيكة مكعب متمركز الجسم (BCC):
 هنالك مصطلح الانعكاس الغائب والانعكاس الحاضر من السطوح فمثلاً (100) و (111) فهي انعكاسات غائبة. اما (110) و (231) ومثيلاتهم هي انعكاسات حاضرة.

Planes المستويات	$(h + k + l)$	F_{hkl}	Notes الملاحظات
(100)	Odd فردي	0	absent reflection × انعكاس مفقود (غائب)
(110)	Even وزوجي	$2f$	present reflection انعكاس موجود (حاضر)
(111)	odd فردي	0	absent reflection × انعكاس مفقود (غائب)
(200)	even وزوجي	$2f$	present reflection انعكاس موجود (حاضر)
(210)	odd فردي	0	absent reflection × انعكاس مفقود (غائب)
(220)	even وزوجي	$2f$	Reflections present انعكاس موجود (حاضر)

ان بعض العناصر لها شبيكة bcc مثل الصوديوم والبوتاسيوم والباريوم والسييزيوم ولذلك لا يشمل طيف الحيود وفق القواعد المذكورة سابقاً خطوط او اشعة حيود من المستويات مثل (100) (300) (111) (113) (234) (010) (001)
 ان هذه الانعكاسات تحقق قانون براك ولكن سبب التلاشي والظهور يعتمد على فرق الطور حيث يكون تداخل تقوية (بناء) او تداخل اتلافي.

مثال 3: احسب عامل التركيب لشبكة مكعب متركز الجسم (BCC). اذا كانت الذرتان مختلفتان يعني $f_1 \neq f_2$ غير متساوية . خذ على سبيل المثال بلورة كلوريد السيزيوم CsCL
(س) احسب عامل التركيب لشبكة بلورة كلوريد السيزيوم CsCL ؟

قدرة التشتت $f_{cl} f_{cs}$ (مختلفة لان في Cs 54 الكترون اما في الكلور CL 18 الكترون)
احداثيات Cs هي في الموقع 000 واحداثيات ذرة cl هي في الموقع $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$

$$\left\{ F_{(hkl)} = \sum_{n=1}^{n=N} f_n \exp[2\pi i(u_n h + v_n k + w_n l)] \right\}$$

$$F_{(hkl)} = \sum_{n=1}^{n=2} f_n e^{2\pi i(u_n h + v_n k + w_n l)}$$

$$F_{(hkl)} = f_{cs} e^{2\pi i(0h+0k+0l)} + f_{cl} e^{2\pi i(\frac{1}{2}h+\frac{1}{2}k+\frac{1}{2}l)}$$

$$F_{(hkl)} = f_{cs} e^0 + f_{cl} e^{2\pi i(\frac{1}{2}h+\frac{1}{2}k+\frac{1}{2}l)}$$

$$F_{(hkl)} = f_{cs} + f_{cl} e^{\pi i(h+k+l)} \dots \dots \dots 3$$

لمناقشة المعادلة الاخيرة 3

a- اذا كان مجموع $(h+k+l)$ هو عدد صحيح فردي $\{h+k+l = \text{عدد فردي}\}$
وبذلك تصبح المعادلة 3 $F_{hkl} = f_{cs} - f_{cl}$
اقل شدة $I = (f_{cs} - f_{cl})^2$
 $e^{-i\pi} = e^{i\pi} = \cos \pi + i \sin \pi = -1 + 0 = -1 = e^{-i\pi} (\text{عدد فردي}) = e^{i\pi} (\text{عدد فردي})$
• حسب هذه المعادلة لهذه الحالة لا يكون فيها الانعكاس الغائب وانما ذو شدة قليلة (لا يكون اتلافي 100%).

b- اما اذا كان مجموع دلائل ميلر زوجي $\{h+k+l = \text{عدد زوجي}\}$
فستكون معادلة 3 $F_{hkl} = f_{cs} + f_{cl}$
اعظم شدة $I = (f_{cs} + f_{cl})^2$
 $e^{-i2\pi} = e^{i2\pi} = \cos 2\pi + i \sin 2\pi = 1 + 0 = 1 = e^{-i2\pi} (\text{عدد زوجي}) = e^{i2\pi} (\text{عدد زوجي})$
• وهذه الحالة المعادلة مجموع $(h+k+l)$ هو اعداد زوجية ويكون الشدة قوية (تداخل بناء).

مثال 4: احسب عامل التركيب لشبكة مكعب متمركز الواجهة F.C.C ؟ وان اساسها يمتلك ذرات متماثلة

(ذرات متشابهة) عند الاحداثيات u, v, w $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$, $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$, $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, $(0, 0, 0)$

أي ان قدرة التشتت $f_1 = f_2 = f_3 = f_4 = f$ $N=4$ الذرات متشابهة

$$\left\{ F_{hkl} = \sum_{n=1}^{n=N} f_n \exp[2\pi i(u_n h + v_n k + w_n l)] \right\}$$

$$F_{hkl} = \sum_{n=1}^{n=4} f_n e^{2\pi i(u_n h + v_n k + w_n l)}$$

$$F_{hkl} = f \left[e^{2\pi i(0h+0k+0l)} + e^{2\pi i(0h+\frac{1}{2}k+\frac{1}{2}l)} + e^{2\pi i(\frac{1}{2}h+0k+\frac{1}{2}l)} + e^{2\pi i(\frac{1}{2}h+\frac{1}{2}k+0l)} \right]$$

$$F_{hkl} = f \left[e^{2\pi i(0)} + e^{\pi i(k+l)} + e^{\pi i(h+l)} + e^{\pi i(h+k)} \right]$$

$$F_{hkl} = f \left[1 + e^{\pi i(k+l)} + e^{\pi i(h+l)} + e^{\pi i(h+k)} \right] \dots \dots \dots 4$$

القاعدة: اذا كان $\{ (h \& k \& l) = \text{متشابهة (كلها فردي او كلها زوجي)} \}$

فان عامل التركيب: $\{ F_{hkl} = 4f \}$ والشدة ستكون: $I \propto |F_{hkl}|^2 = 16f^2$

حيث انه اذا كانت $(h+k+l)$ كلها فردية أو كلها زوجية فان كل حد اسي سيعطي (1) وسيحصل على حيود من هذه الاسطح . لانه (زوجي+زوجي=زوجي) & (فردى+فردى=زوجى)

$$e^{-i2\pi} = e^{i2\pi} = \cos 2\pi + i \sin 2\pi = 1 + 0 = 1 = e^{-i\pi(\text{عدد زوجي})} = e^{i\pi(\text{عدد فردي})}$$

ومن امثلة هذه الاسطح : (111) ، (135) ، (200) ، (224) ، (406)

القاعدة: اذا كان $\{ (h \& k \& l) = \text{مختلطة (زوجى وفردى)} \}$

فان عامل التركيب: $\{ F_{hkl} = 0 \}$ والشدة ستكون: $I \propto |F_{hkl}|^2 = 0$

$$e^{-i\pi} = e^{i\pi} = \cos \pi + i \sin \pi = -1 + 0 = -1 = e^{-i\pi(\text{عدد فردي})} = e^{i\pi(\text{عدد زوجي})}$$

ومن امثلة هذه السطوح

(100) ، (110) ، (210) ، (221) ، (123) ، (234) ، (221)

فمثلاً للنحاس والذهب والنيكل والفضة شبكة fcc لذلك يكون طيف الحيود من بلورات هذه العناصر خالياً من الانعكاسات من مثل هذه المستويات.

Planes المستويات	$(h \& k \& l)$	F_{hkl}	Notes الملاحظات
(100)	مختلطة	0	<i>absent reflection</i> × انعكاس مفقود (غائب)
(110)	مختلطة	0	<i>absent reflection</i> × انعكاس مفقود (غائب)
(111)	متشابهة كلها فردي	$4f$	<i>Reflections present</i> انعكاس موجود (حاضر)
(200)	متشابهة كلها زوجي	$4f$	<i>present reflection</i> انعكاس موجود (حاضر)
(210)	مختلطة	0	<i>absent reflection</i> × انعكاس مفقود (غائب)
(220)	متشابهة كلها زوجي	$4f$	<i>Reflections present</i> انعكاس موجود (حاضر)

Table Miller Indices of the Diffracting Planes for BCC and FCC Lattices

Cubic planes {hkl}	$h^2 + k^2 + l^2$	Sum $\Sigma[h^2 + k^2 + l^2]$	Cubic diffracting planes {hkl}	
			FCC	BCC
{100}	$1^2 + 0^2 + 0^2$	1	...	110
{110}	$1^2 + 1^2 + 0^2$	2	...	200
{111}	$1^2 + 1^2 + 1^2$	3	...	211
{200}	$2^2 + 0^2 + 0^2$	4	...	220
{210}	$2^2 + 1^2 + 0^2$	5	...	310
{211}	$2^2 + 1^2 + 1^2$	6	...	...
...	...	7	...	...
{220}	$2^2 + 2^2 + 0^2$	8	...	...
{221}	$2^2 + 2^2 + 1^2$	9	...	...
{310}	$3^2 + 1^2 + 0^2$	10	...	...

$\mathbf{a} \times \mathbf{b}$

$\mathbf{b} \times \mathbf{a} = -\mathbf{a} \times \mathbf{b}$

Finding the direction of the cross product by the right-hand rule

$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = |\mathbf{a}| |\mathbf{b}| \cos(\theta)$

Where:
 $|\mathbf{a}|$ is the magnitude (length) of vector $\mathbf{a}$
 $|\mathbf{b}|$ is the magnitude (length) of vector $\mathbf{b}$
 θ is the angle between $\mathbf{a}$ and $\mathbf{b}$

$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_x b_x + a_y b_y$

$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = |\mathbf{a}| |\mathbf{b}| \cos(\theta)$

$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = |\mathbf{a}| |\mathbf{b}| \cos(\theta)$

Like shining a light to see where the shadow lies

$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = |\mathbf{a}| |\mathbf{b}| \cos(\theta)$

The dot or scalar product $\Rightarrow \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = |\mathbf{A}| |\mathbf{B}| \cos \Theta$

Where $|\mathbf{A}|$ and $|\mathbf{B}|$ represents the magnitudes of vectors $\mathbf{A}$ and $\mathbf{B}$ and Θ is the angle between vectors $\mathbf{A}$ and $\mathbf{B}$.

$\mathbf{A} = a_1 \mathbf{i} + a_2 \mathbf{j}$ and $\mathbf{B} = b_1 \mathbf{i} + b_2 \mathbf{j} \Rightarrow \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = a_1 b_1 + a_2 b_2$