الحيود في البلورات Diffraction in Crystals

يتم التعامل مع الجسيمات المادية وفق فرضية ديبرولي على أنها ذات طبيعة ثنائية (مزدوجة) موجة-جسيم ويتحدد طول الموجة المرافقة للجسيم وفق العلاقة التالية:

$$\lambda = \frac{h}{p} \qquad (1)$$

إن شرط حيود الأمواج (الأشعة) أثناء اختراقها للتركيب البلوري أن تكون أطوال أمواجها من مرتبة المسافة $\vec{a}\ \vec{b}\ \vec{c}$ بين الذرات في البلورة أي من مرتبة أطوال المتجهات الأولية،عندها يمكننا أن نجد حزما موجية تحيد باتجاهات مختلفة عن اتجاه الحزمة الداخلة إلى البلورة ومن خلال ذلك نستطيع تحديد التركيب البلوري ،ومن ثم الحصول على المسافة الوسطية بين الذرات ومجموعات التناظر وأمور أخرى متعددة سندرس أهمها.

الحزم الساقطة وقانون براك

1- الأشعة السينية

تعتبر الأشعة السينية المصدر الرئيس للمعلومات عن بنية البلورات وذلك لأنها تتمتع بطيف واسع من الأطوال الموجية) الأشعة البيضاء (تتناسب تماما مع كافة الأبعاد بين ذرية في الصلب حيث يمكن استخدام البلورات الحقيقية كشبكات حيود فضائية) فراغية (للأشعة السينية التي أطوال أمواجها من مرتبة الأبعاد الذرية.

وكما هو معلوم في حيود الضوء فان زاوية الحيود تتعلق بشكل رئيس بتغير البنية البلورية وبطول موجة الحزمة الضوئية الساقطة (حزمة الورود)على البلورة ، ولمعرفة طول موجة الحزمة يجب أن تكون طاقة الأشعة ذات أطوال موجية من مرتبة المسافة بين الذرات في البلورة ويتم معرفة ذلك وفقا لمعالجة الرياضية التالية:

تعطى طاقة الفوتون من خلال علاقة اينشتاين الاتية:

$$E = \hbar\omega = h\nu = \frac{h\,c}{\lambda} \quad \Rightarrow \quad \lambda = \frac{h\,c}{E} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(2)$$

تبين العلاقة (2) أن طول الموجة دالة لطاقة أشعة اكس لأن $hc = 1240 eV.nm$ ولحساب طول الموجة , بالأنكستروم حيث إنّ ($1Å = 10^{-10}\ m$) و($1ev= 1.602\times10^{-19}$ Joul) حيث تؤخذ الطاقة بوحدة الكيلو إلكترون فولت KeV ومنه تصبح العلاقة

$$\lambda = \frac{1240 eV.nm}{E(KeV)} = \frac{1.240}{E}\ Å$$

تستخدم ثلاثة أنواع من حزم الأشعة في تجارب الحيود هي :الأشعة السينية، وحزم النيوترونات وحزم الإلكترونات .تكون المعالجة الرياضية للأنواع الثلاثة متشابهة تقريبا ولذلك سوف نفحص بالتفصيل حالة الأشعة السينية فقط .بعد مناقشة مختصرة لتوليد وخصائص الأشعة السينية، سنقدم استنتاجا مختصرًا لقانون براغ لتشتت الأشعة بواسطة المستويات البلورية .سنناقش أيضا تشتت الأشعة بواسطة الذرة وبواسطة البلورة .فى هذا السياق سوف نناقش الشبيكة الإنقلابية ومختلف الطرق العملية لدراسة التركيب البلوري.

كما سوف نلقى الضوء على حيود النيوترونات والإلكترونات وإظهار خصائص كل منهما .وأخيرًا، سوف ندرس الأسس النظرية لتعيين التركيب البنائى للسائل ودالة التوزيع الزاوي التي تتعين بواسطة ما يسمى بمعامل تركيب البناء.

الأشعة المستخدمة لدراسة التركيب البلوري

لكي تكون الأشعة مناسبة لدراسة التركيب البلوري للمادة فى 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 البنائى للمادة يجب أن يكون لها طول موجي في المرتبة نفسها 10^{-8} cm .عند سقوط بعض أنواع الإشعاعات على المادة الصلبة فإنها تتشتت بواسطة المستويات الذرية للمادة وتحيد عن مسارها وتتداخل معا مكونة نموذج يحمل فى طياته معلومات عن التركيب البنائى للمادة .يمكن (Diffraction pattern) حيود استخراج هذه المعلومات والحصول على تفاصيل التركيب البنائى للمادة المتبلورة عن طريق تحليل نماذج الحيود الجيدة للأشعة داخل هذه المادة.

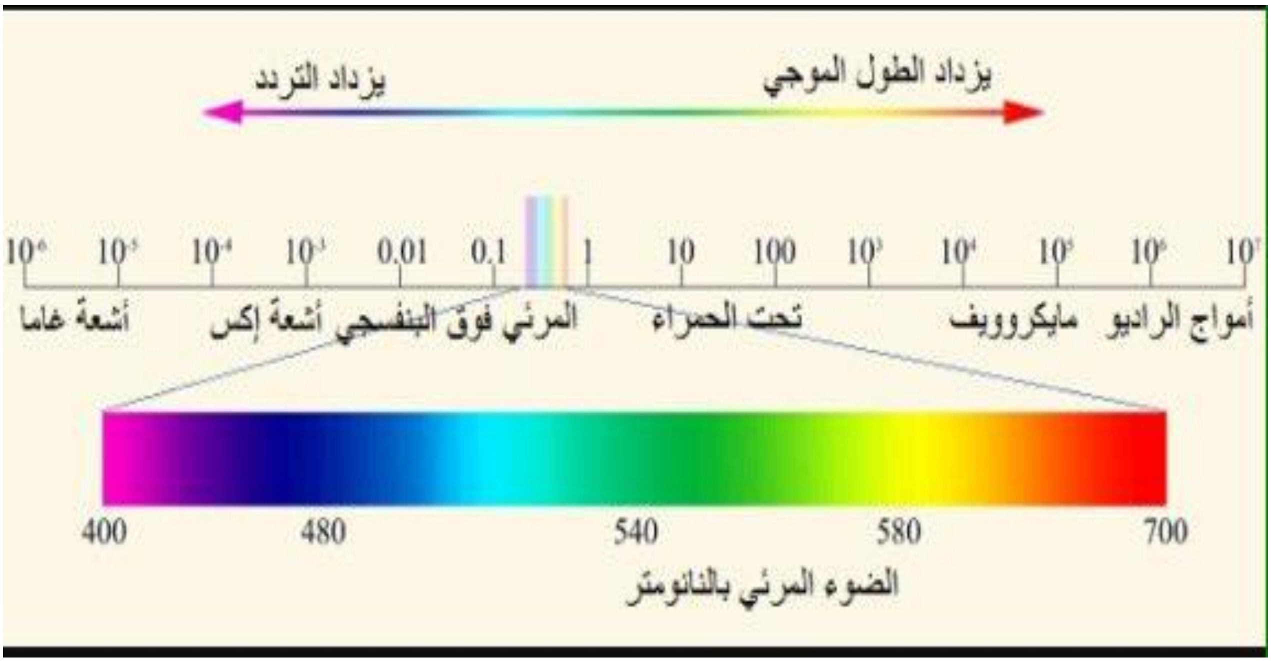
يمكن استخدام العديد من أنواع الفوتونات في تجارب الحيود لدراسة التركيب البنائى للمادة المتبلورة منها :الأشعة السينية، النيوترونات والإلكترونات .بالرغم من أن هذه الأنواع تختلف فيما بينها في الطاقة وبالتالي في الطول الموجي (إلا أن المعالجة الرياضية للأنواع الثلاثة تكون متشابهة تقريبا). تعتمد زوايا حيود الفوتونات فى المادة، بصورة أساسية، على كل من التركيب البنائى للمادة المسببة للحيود و الطول الموجى للفوتونات المستخدمة .تتعين طاقة فوتون الأشعة السينية طبقا لطولها الموجي من العلاقة:

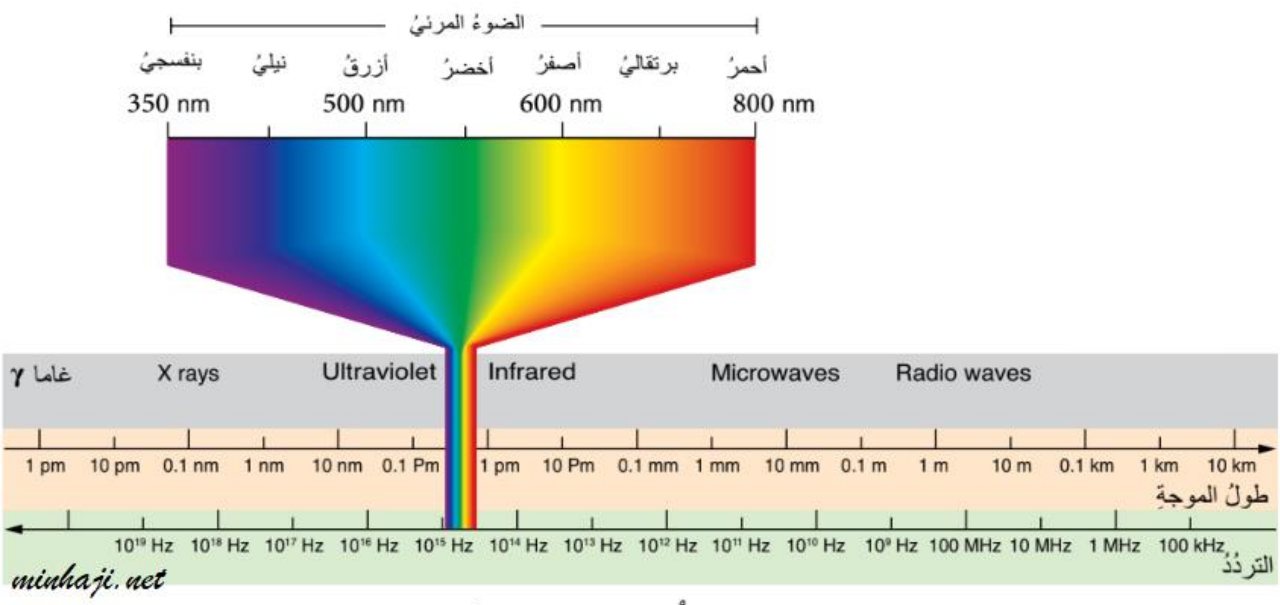
$$E = h\upsilon = \frac{hc}{\lambda},$$

حيث c هي سرعة الضوء $3*10^{8}$ m, ν تردد الموجة و h ثابت بلانك ($6.62*10^{-27}$ erg.sec) λ طول الموجة. ومن هذه العلاقة يمكن كتابة الطول الموجي للأشعة السينية على الصورة:

$$\lambda\ (\text{Å}) = \frac{12.4}{E(KeV)}$$

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 الاتي موقع الأشعة السينية في طيف الموجات الكهرومغناطيسية.





الطيفُ الكهرومغناطيسيُ

تصلح أشعة النيوترونات المعجلة في دراسة التركيب الدقيق لبعض أنواع المواد الصلبة وذلك بسبب عزمها المغناطيسي، الأمر الذي يجعلها تتفاعل بشدة مع الكترونات الذرات التي تكوّن المادة. ترتبط طاقة النيوترون المتحرك بسرعة كبيرة بطول موجات دى برولى المصاحبة له طبقا للعلاقة.

$$E = \frac{h^2}{2\, M_n\, \lambda^2}$$

حيث M_n كتلة النيوترون وتساوي ($1.675*10^{-24}$ g).

وبالتعويض عن كتلة النيوترون وثابت بلانك في هذه المعادلة يمكن الحصول على الطول الموجى في بالصيغة الاتية.

$$\lambda\,(\text{Å}) = \frac{0.28}{[E(eV)]^{\frac{1}{2}}}$$

يكون الطول الموجي للنيوترون الذي طاقته بحدود 0.08eV في حدود 1Å ويطلق على مثل هذه النيوترونات النيوترونات الحرارية.

تصلح الالكترونات المعجلة للاستخدام في تجارب الحيود وذلك بسبب شحنتها الكهربية، 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 دى برولى المصاحبة لها طبقا للعلاقة الاتية

$$E = \frac{h^2}{2\, M_n\ \lambda^2}$$

حيث m تمثل كتلة الالكترون ($9.1*10^{-34}$ g) . ويمكن كتابة معادلة الطول الموجي المصاحب للالكترون بالصيغة الاتية

$$\lambda\,(\text{Å}) = \frac{12}{[E(eV)]^{\frac{1}{2}}}$$

الحيود وقانون براغ DIFFRACTION AND BRAGG’S LAW

يتعين التركيب البلوري للمادة المتبلورة عادة بواسطة أحدى التقنيات المختلفة لحيود الأشعة السينية. كما يمكن الحصول على معلومات أضافية عن التركيب، أيضا، بواسطة حيود أنواع أخرى من الاشعاع مثل الأشعة الإلكترونية والأشعة النيوترونية. في جميع الحالات، يجب أن تكون الأطوال الموجية للإشعاع المستخدم في المدى من ($0.1 - 1$ Å) لأنه يجب أن تكون أقل من المسافة بين الذرات والتي يمكن للإشعاع أن يعطى معلومات عنها تكون مساوية للطول الموجي للإشعاع وفى الحالة الصلبة يكون متوسط المسافة بين ذرتين متجاورتين في الصلب في حدود (10^{-10} m) أي (1 Å) .

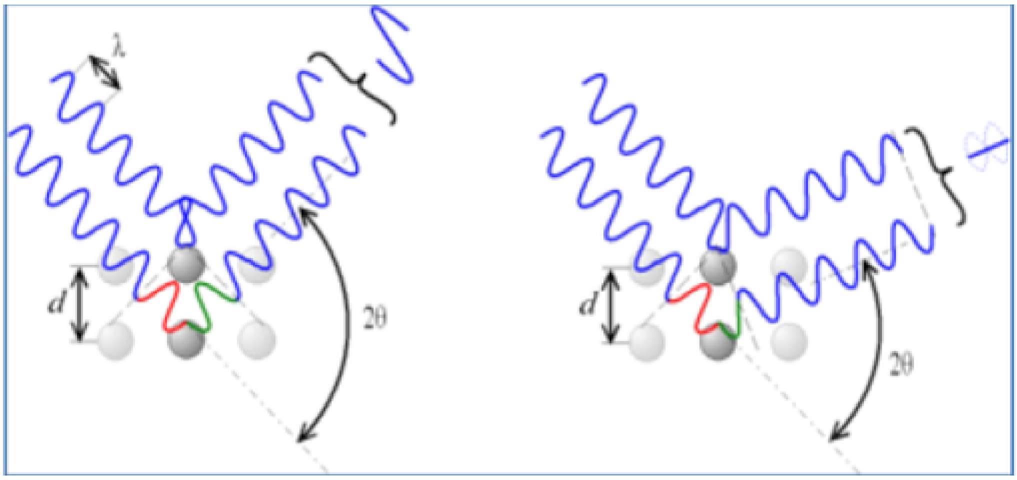
تحدث ظاهرة الحيود عندما تنحرف موجات الضوء نتيجة وجود عائق أمامها.فموجات الضوء ممكن أن تنحرف نتيجة وجود عائق ما أو أن تمر من خلال الشقوق إذا كان العائق أمامها شق، ونتيجة لهذا النسق من الإنحرافات فإنه سوف تظهر عدة مناطق من التداخلات البناءة، بينما إذا تداخلت موجتان ضوئيتان مع بعضها البعض فإن التداخلات الناتجة تكون اتلافية.

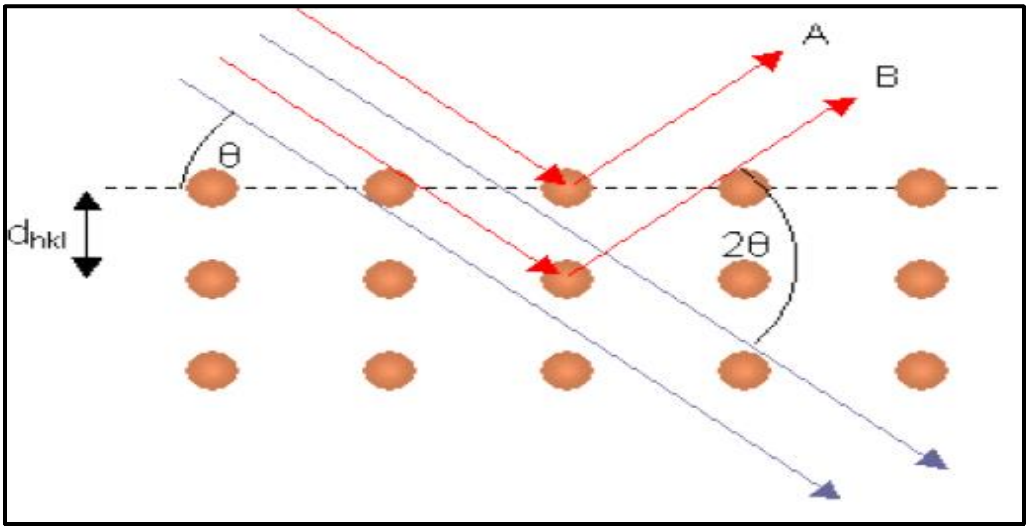
ينص قانون براغ على أن موجات الأشعة السينية التي تسقط على سطح بلورة ما تنعكس من المستويات الذرية المتوازية انعكاسا منتظماً ويحدث الحيود من المستويات المتوازية فقط عندما تتداخل حزم الأشعة السينية المنعكسة عن التركيب البلوري تداخلاً بناءً.

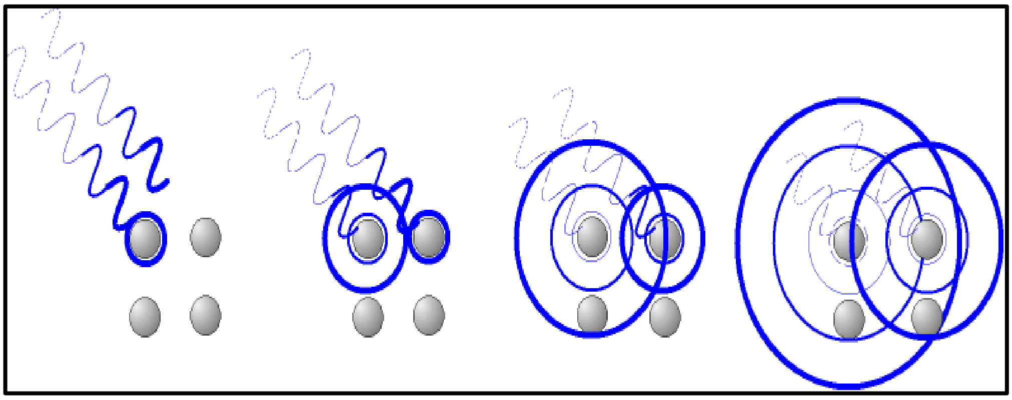
و وفقاً لقانون براغ، فعندما تسقط الأشعة على البلورة تنعكس الموجات عن أكثر من مستوى تفصلها عن بعضها مسافة **d** ، وحتّى عند التداخل المنعكس لهذه الموجات يكون التداخل بناءً، ويبقى بينها

طورٌ ثابتٌ، حيث يكون مسار كلّ موجةٍ مساوياً لعددٍ صحيح n من طول الموجة λ ، وفرق المسار بين الموجتين تنطبق عليه العلاقة:

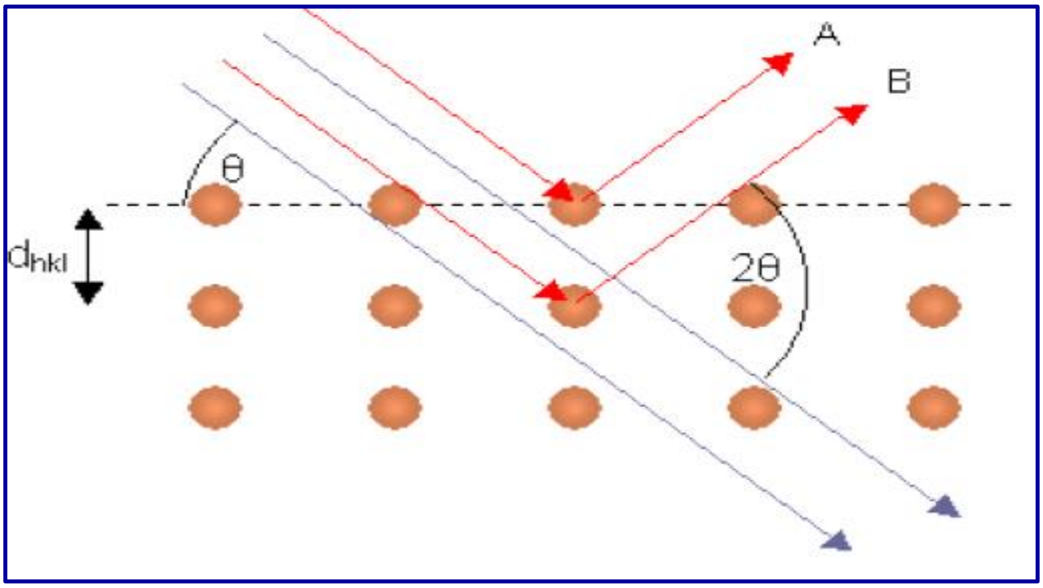
$$n\lambda = 2d\ sin\theta$$

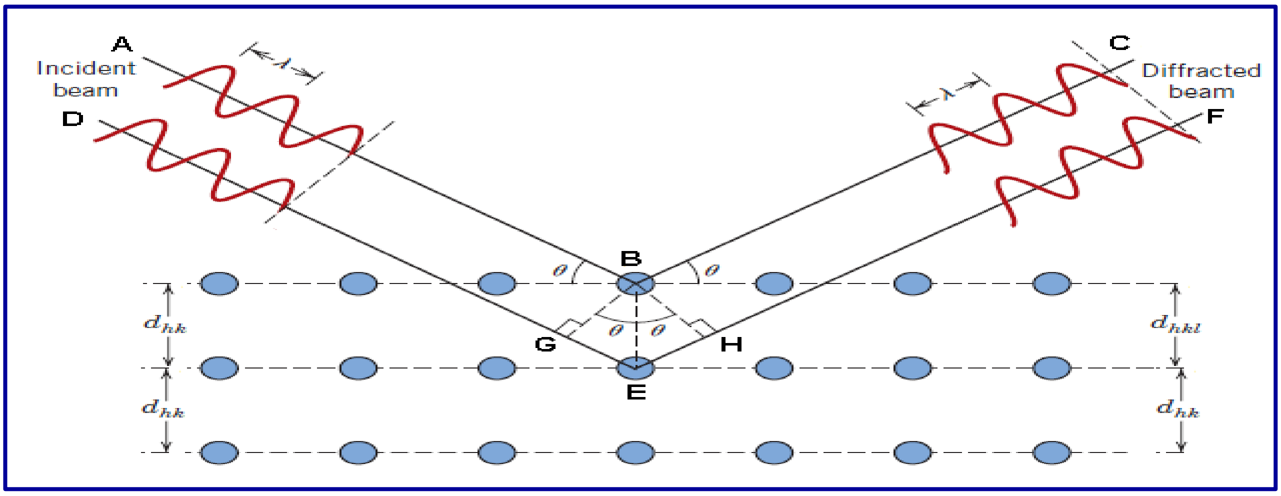






الحيود عن مستويين ذريين





من الملاحظ في الشكل الاخير اعلاه ان مسار الموجة في أتجاه DEF الذي ينعكس عند الذرة E هو أطول من مسار الموجه في أتجاه ABC الذي ينعكس عند الذرة B فأذا كانت هاتين الموجتين في الطور نفسه inphase فان الفرق بين المسارين DEF و ABC يجب ان يكون عددا صحيحا من مضاعفات طول الموجة $n\lambda$ حيث ان n يساوي عدد صحيح .... ,n=0,1,2,3,4 فلايجاد الفرق بين المسارين نرسم BG و BH

$$\Delta l = \underset{GE}{\rightarrow} + \underset{EH}{\rightarrow} = n\lambda$$

$$sin\theta = \frac{\left|\overrightarrow{GE}\right|}{d_{hkl}}$$

$$sin\theta = \frac{\left|\overrightarrow{EH}\right|}{d_{hkl}}$$

$$\Rightarrow \left|\overrightarrow{GE}\right| = \left|\overrightarrow{EH}\right| = d_{hkl}\ sin\theta$$

$$\Delta l = 2\left|\overrightarrow{EH}\right| = n\lambda$$

$$\Delta l = 2\left|\overrightarrow{EH}\right| = 2\ d_{hkl}\ sin\theta$$

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

العلاقة اعلاه تمثل قانون براغ لحيود الاشعة السينية.

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

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

ملاحظات على قانون براغ:

1- عندها n=1 فان الفرق في المسار $\boldsymbol{\Delta l = n\lambda}$ للشعاعين المنعكسين يساوي طول موجي واحد($\boldsymbol{\lambda}$) اي أنّ الانعكاس حدث من المستويين الاول و الثاني .وعندما n=2 فان الفرق في المسار للشعاعين $\boldsymbol{\Delta l = n\lambda}$ المنعكسين يساوي $\boldsymbol{2\lambda}$, اي ان الانعكاس حدث من المستويين الاول و الثالث, وهكذا ...

2- لطول موجي معين و قيمة محددة لـ d هنالك قيم محددة لزوايا السقوط $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \dots \dots$ وبالتالي زوايا الحيود التي تحقق شرط الحيود لبراغ من مراتب مختلفة .

3- إنّ المسافة البينية d_{hkl} للمستويات الذرية لأغلب المواد هي بحدود طول موجة الاشعة السينية , تقريبا 3Å أو أقل من ذلك .

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

سؤال: هل نستطيع استخدام الاشعة فوق البنفسجية بدلا عن الاشعة السينية لدراسة الحيود في البلورات ؟ ولماذا ؟

ج: لا يمكن استخدام الاشعة فوق البنفسجية لدراسة الحيود في البلورات .لأن الطول الموجي للاشعة فوق البنفسجية كبير جدا بحدود (500Å) ولا يحقق شرط براغ للحيود .وكذلك لا يمكن استعمال الضوء المرئي ايضا لأن الاطوال الموجية كبيرة جدا اذا ما قورنت بالمسافات بين السطوح d.

الطرق التجريبية لحيود الأشعة الأمواج Experimental methods in X-ray diffraction

في الفقرة الاتية سيتم شرح وتوضيح كيفية استعمال تقنيات حيود الاشعة السينية لتحقيق الاغراض

الاتية وفهم ماهية هذه الاليات:

أ- التعرف على التركيب للمواد المختلفة.

ب- تعيين ثابت الشبيكة.

ج- التعرف على المستويات و والاتجاهات في البلورة.

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

1- طريقة فون لاوي:

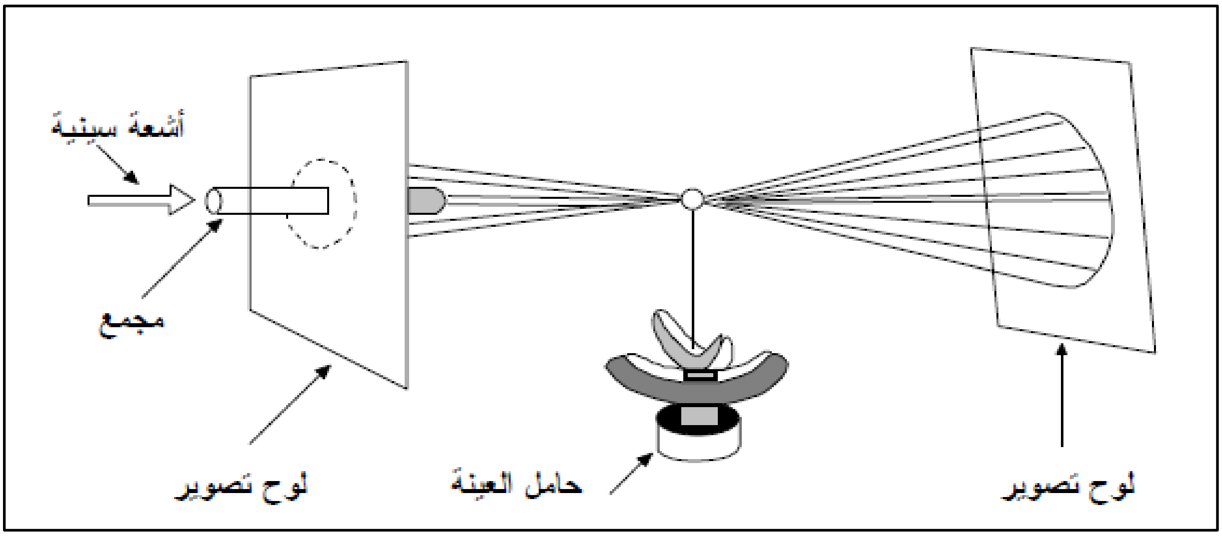
تُستخدم طريقة لاوى في تحديد تناظر واتجاه البلورات الأحادية المعروفة التركيب (بلورات صغيرة تزيد أبعادها عن 1mm) وذلك بتحليل نموذج حيود الأشعة السينية الناتج .تبنى فكرة عمل هذه

الطريقة على مبدأ ثبوت زاوية سقوط الأشعة السينية θ وتغير الطول الموجي λ لتحقيق قانون براغ المعروف. يتم ذلك عن طريق سقوط شعاع أبيض من الأشعة السينية على بلورة أحادية ساكنة (وبالتالي تكون θ لجميع مستويات البلورة) , وكما موضح بالشكل الاتي.

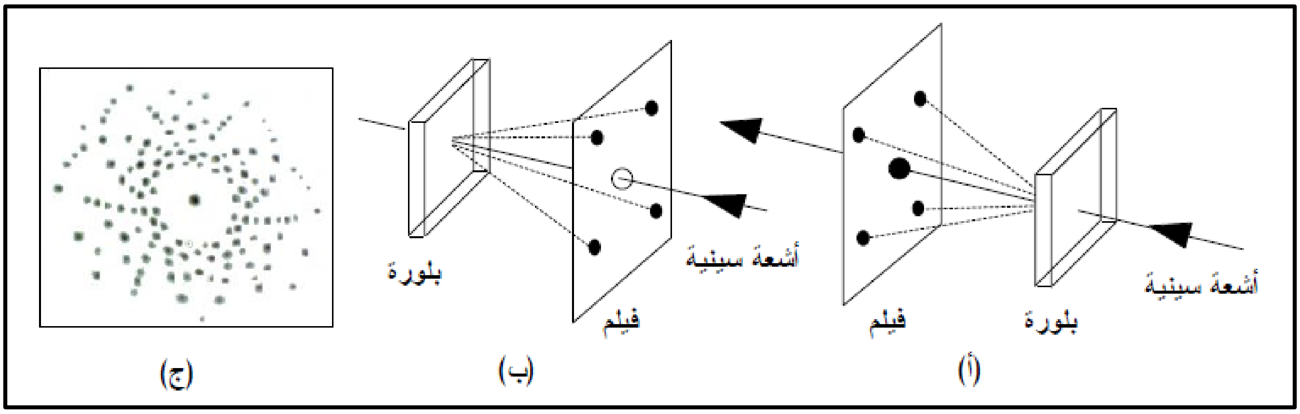
يتم تثبيت البلورة بحيث يكون لها توجيه ثابت بالنسبة لحزمة الأشعة الساقطة ويتم وضع لوح تصوير (فيلم) أمام البلورة بشكل عمودي على الأشعة الساقطة ولوح تصوير أخر خلفها ، يكون اللوح الأمامي مثقوباً من المنتصف لمرور الأشعة الساقطة.

كما نعلم، يتضمن الشعاع الأبيض من الأشعة السينية كل من الطيف الخطى والطيف المتصل المتولد بواسطة الأنبوب (وبذلك فإن البلورة تتعرض لمدى معين متصل من قيم الأطوال الموجية).

تقوم كل مجموعة من المستويات المتوازية بعكس(إحادة او حرف) فوتونات الأشعة السينية ذات طول موجي معين والتي تحقق قانون براغ لزاوية سقوط ثابتة. وكما في الشكل الاتي.



يمكن تسجيل حيود الأشعة بطريقة ملائمة بواسطة كاميرا بولارويد Polaroid camera أو بواسطة أي جهاز تصوير الكتروني .يمكن تحليل نماذج حيود الأشعة المشتتة النافذة أو الأشعة المشتتة المرتدة بالانعكاس من البلورة والتي يتم الحصول عليها على ألواح التصوير، كما هو مبين في الشكل الاتي الجزئين) أ (و) ب (على وجه الترتيب والتوالي.



حيود لاوى في: أ (نمط الأشعة النافذة)، ب (نمط الأشعة المرتدة بالانعكاس) , ج (نموذج تداخل أشعة نافذة).

تغطى حزمة الأشعة الساقطة مجالا مستمراً (متصلاً) كبيراً من الأطوال الموجية، لذلك فإن كل مجموعة مستويات بلورية (d_{hkl}) متوازية تنتخب من الحزمة الساقطة طول موجي معين يحقق قانون براغ وتعكسه بزاوية θ_{hkl}. ونتيجة انعكاسات كل مجاميع المستويات المتوازية يظهر نموذج الحيود والذي يكون على هيئة (بقع) على لوح التصوير موزعة بصورة تظهر توجه البلورة، كما هو مبين بالشكل السابق (ج). فلو كان للبلورة قيد الدراسة او الاختبار محور تناظر من الدرجة السادسة وموجه بحيث يوازى هذا المحور اتجاه الأشعة الساقطة فإن صورة التشتت يكون لها محور تناظر من الدرجة السادسة أيضا وعمودي على مستواها، كما يبين الشكل (ج).

تترتب البقع في نموذج حيود الأشعة النافذة(الشكل ج) على شكل قطوع ناقصة مارة بالبقعة المركزية .ينتج كل قطع ناقص عن التشتت الناتج من مستويات منطقة واحدة محورها [uvw] وأدلة ميلر لها تحقق المعادلة

$$hu + kv + lw = 0$$

أما البقع في نموذج حيود الأشعة المرتدة بالانعكاس فتتكون من قطوع زائدة لا تمر بالبقعة المركزية .

يتم تحليل وتعيين أدلة ميلر المقابلة لبقع الحيود باستخدام مخطط يسمى بناء أيوالد Euwald.

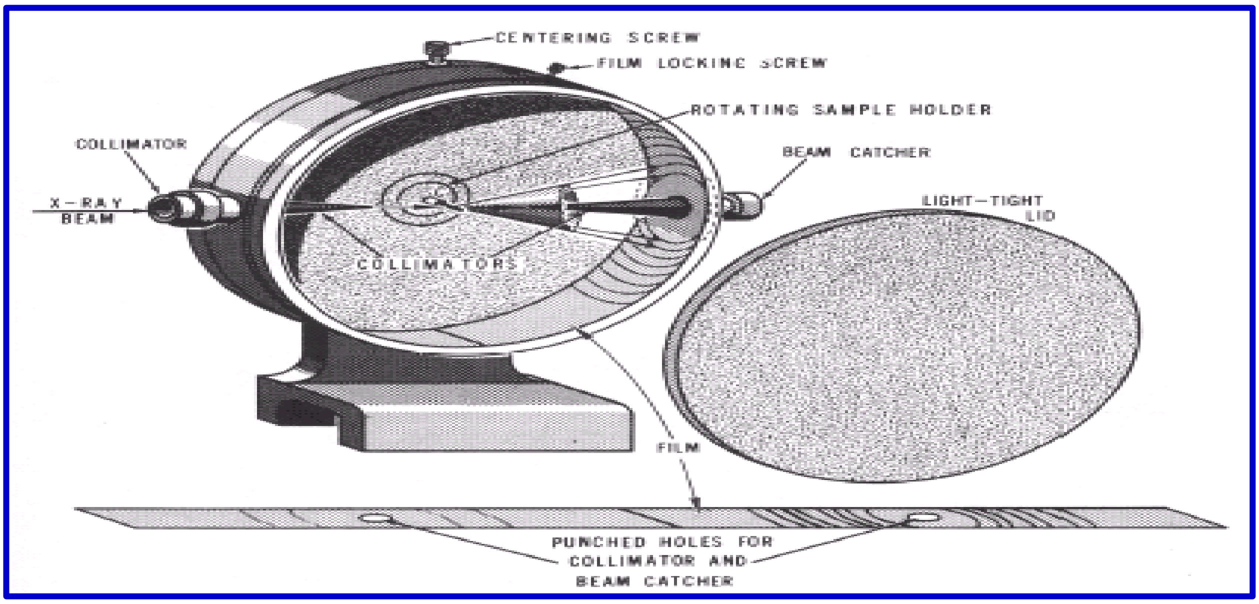
غالبا يفضل استخدام هذه التقنية في نمط الأشعة المرتدة بالانعكاس .لاحظ أنه يمكن بواسطة هذه الطريقة تعيين قيم θ المقابلة لكل انعكاس ولا يمكن تعيين قيم λ المقابلة وذلك بسبب تراكب الانعكاسات من الرتب المختلفة من مجموعة معينة من المستويات البلورية .ولهذا، لا يمكن استخدام هذه التقنية لتعيين ثابت الشبيكة، مثلاً .بالرغم مما سبق فإن لهذه الطريقة فائدة كبيرة في تحديد تناظر واتجاه البلورات المعروفة ا لتركيب والتعرف على مستويات أو اتجاهات بلورية معينة، كما تستخدم أحيانا في تحديد التشوهات والعيوب التي تنشأ عند المعالجة الحرارية أو الميكانيكية للبلورات.

2- طريقة المسحوق POWDER METHOD

تسمى هذه الطريقة أيضا طريقة ديباى-شيرر Deby-Scherrer وهما أول من صنعا آلة تصوير للحيود وتحمل نفس الاسم .يعتمد أسلوب العمل في هذه الطريقة على استخدام ضوء أحادى اللون الطول الموجي ثابت وزاوية سقوط متغيرة.

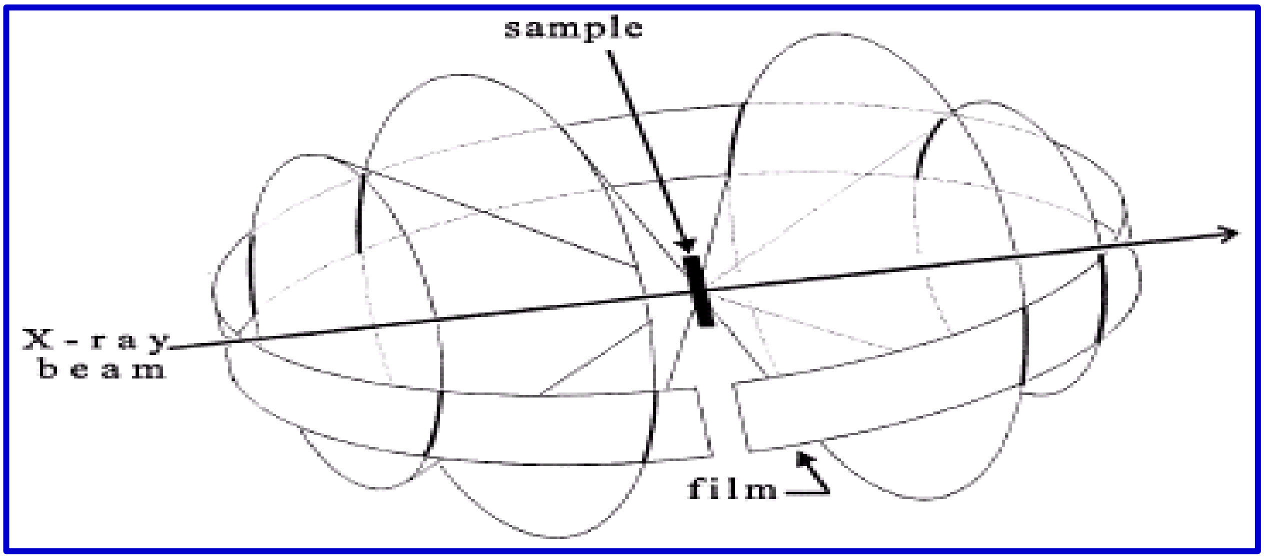
يتم طحن العينة لتتحول إلى مسحوق ناعم(بلورات صغيرة) وتعبأ في كبسولة رفيعة (أنبوبة شعرية من مادة ليس لها تأثير على الحيود ولا يتجاوز قطرها 1mm).

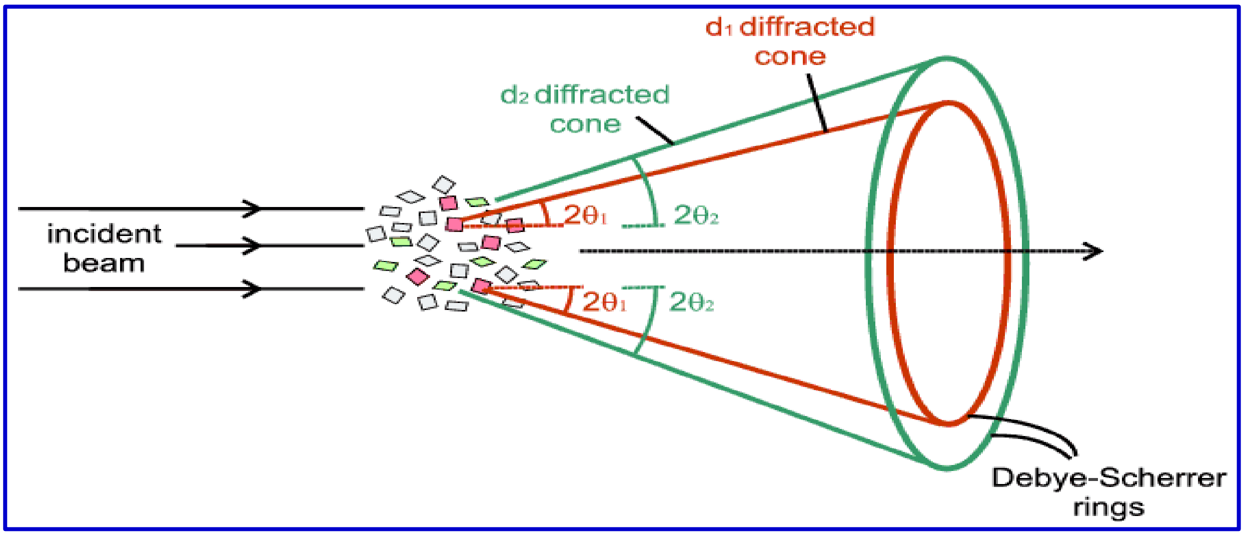
توضع الكبسولة رأسيا في مركز كاميرا ديباى-شيرر التي تحتوى على لوح تصوير بداخلها ويتم تعريض البلورة لأشعة سينية أحادية اللون، كما هو مبين بالشكل الاتي.

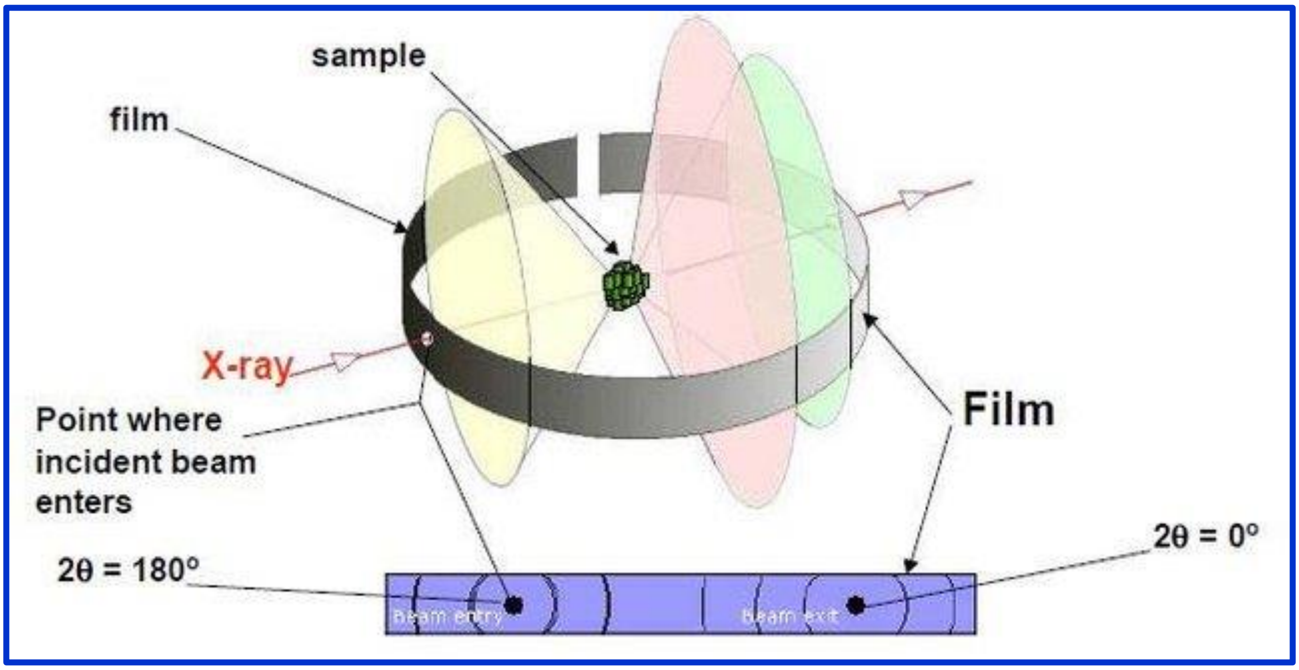


ولما كان المسحوق يحتوى على بلورات صغيرة موجهه عشوائيا، لذلك تكون كل مستويات الحيود متاحة ويتكون عدد كبير من الأشكال المخروطية من الأشعة المشتتة يكون لكل منها نصف زاوية المخروط 2θ, أو ضعف زاوية براغ لحيود الأشعة على مستويات بلورية معينة.

والسبب في ظهور الأشكال المخروطية من الأشعة المشتتة هو أن المستويات موضوع البحث (الموجودة خلال وفرة من الحبيبات ذات التوجيه العشوائي) تبعث على أن يكون التشتت في أي اتجاه حول الشعاع الساقط متاح ما دام الشعاع الساقط يكون زاوية براغ مناسبة مع هذه المستويات، وهكذا يوجد تماثل دوراني للأشعة المشتتة حول اتجاه الشعاع الساقط، كما هو موضح بالشكل الاتي , تكون زوايا براغ صغيرة للمستويات ذات المسافات البينية الكبيرة وعند العكس فالعكس صحيح .







بعد إجراء الحيود لوقت كافي يظهر لوح التصوير بعد تظهيره (تحميضه) نموذج حيود كالمبين في الشكل الاتي . يقابل كل قمة حيود (كل خط أسود) على لوح التصوير تداخل بناء عند مستويات لها مسافة بينية d_{hkl}. الآن، تكمن المشكلة في تعيين أدلة ميلر (hkl), لخطوط الحيود.

من قانون براغ نجد أن:

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

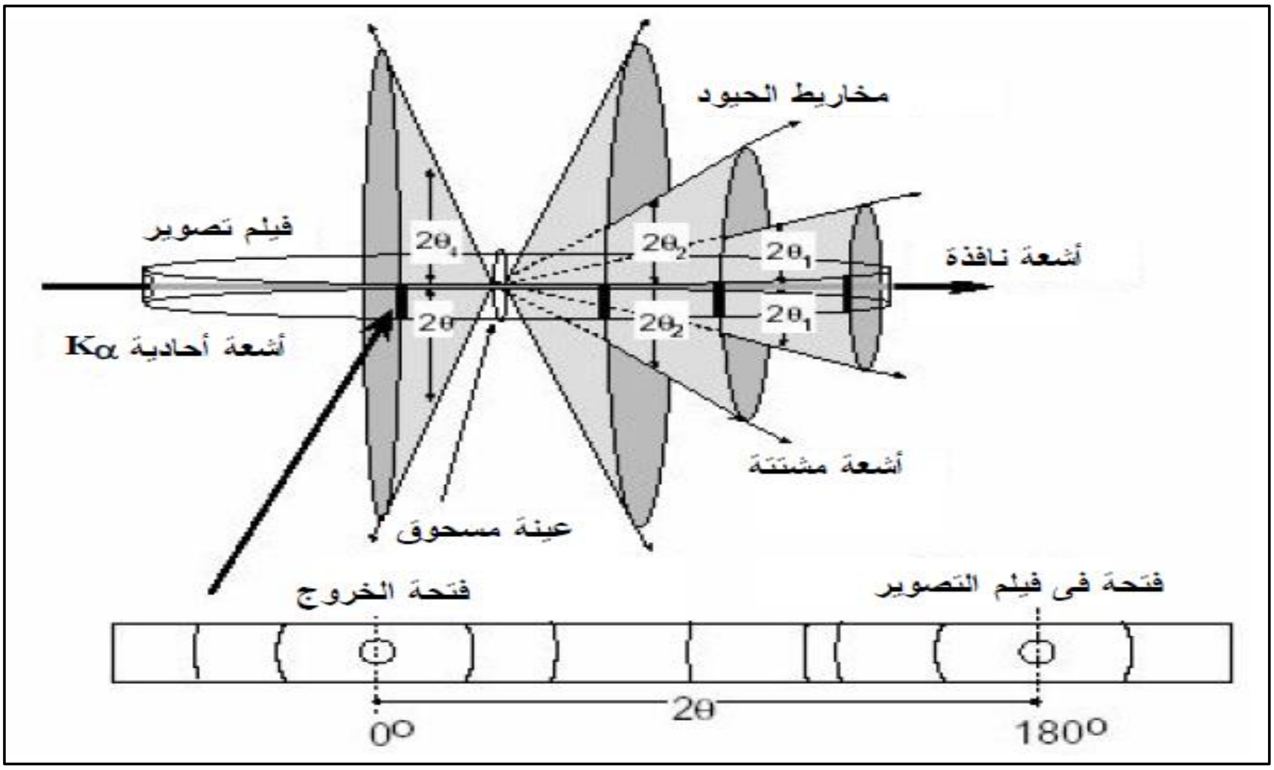
$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

$$\lambda^2 = 4d_{hkl}^2\, \sin^2\theta$$

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

بالتعويض وإعادة الترتيب نحصل على المعادلة الاتية

$$\frac{\sin^2\theta}{(h^2+k^2+l^2)} = \frac{\lambda^2}{4a^2} = Constant$$

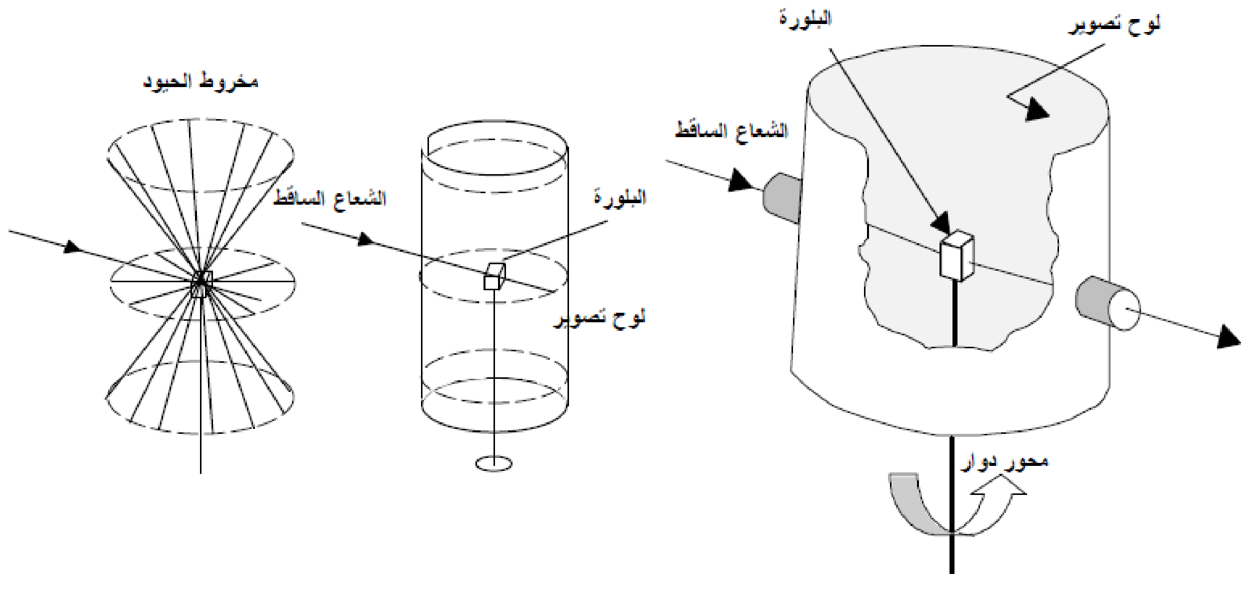


وطبقا لذلك، نجد أن هذه العلاقة تتحقق لكل الخطوط (θ) الموجودة، أي أن،

$$\frac{\sin^2\theta_1}{(h^2+k^2+l^2)_1}=\frac{\sin^2\theta_2}{(h^2+k^2+l^2)_2}=\frac{\sin^2\theta_3}{(h^2+k^2+l^2)_3}=Constant$$

طريقة البلورة الدوارة ROTATING CRYSTAL METHOD

تستخدم في هذه الطريقة بلورة صغيرة (أبعادها في حدود 1mm) أحادية على محور رأسي عمودي على حزمة أشعة سينية أحادية اللون طولها الموجي (λ) ويدور حول نفسه بسرعة زاوية (ω) توضع البلورة بحيث يكون احد محاورها (وليكن a) موازيا لمحور الدوران يثبت على السطح الداخلي لغرفة التشتت الاسطوانية لوح تصوير ليستقبل الأشعة المشتتة كما هو مبين بالشكل في أدناه (أ) عند سقوط الأشعة السينية على البلورة تنعكس من المستويات المتوازية مكونة مخاريط حيود أعلى وأسفل خط الاستواء، كما هو مبين في ادناه (ب) ومكونة نموذج حيود على لوح التصوير عبارة عن بقع، كما هو مبين في الشكل (أ).



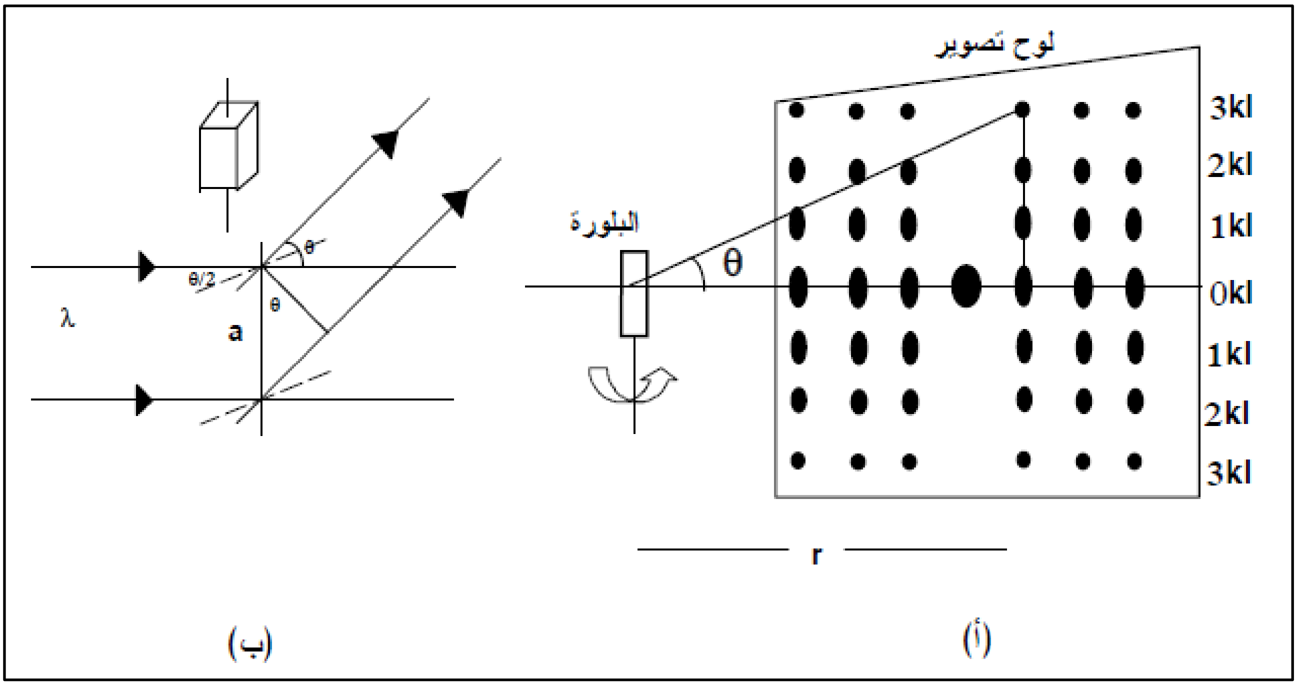
ب- الاشعة المنعكسة على لوح التصوير

أ- غرفة التشتت

عند تغير زاوية السقوط $(\boldsymbol{\theta})$ مع الدوران فإن الأشعة تنعكس على كل مجاميع المستويات البلورية المتوازية والتي تصنع فرق في مسار الأشعة مساويا للمقدار $\boldsymbol{a\ sin\theta}$ مع ملاحظة أن $(\boldsymbol{\lambda})$ ثابتة وكل من $(\boldsymbol{\theta})$ و $(\boldsymbol{d_{hkl}})$ متغيرة حيث توجد $(\boldsymbol{d_{hkl}})$ لكل زاوية انعكاس.

على العموم, تعكس كل المستويات الموازية لمحور الدوران (والتي تشكل منطقة) الأشعة على لوح التصوير الاسطواني في مستوى الاستواء الاوسط، أما المستويات العاكسة الأخرى فإنها تعطى انعكاسات في مستويات تقع تحت أو فوق مستوى الاستواء, كما يبين الجزء (أ) من الشكل الاتي, بفرض أن الزاوية بين الشعاع الساقط والمستوى العاكس هي $(\frac{\theta}{2})$ فإن الشعاع المنعكس والذي يعطى بقعة ما على لوح التصوير يصنع زاوية مقدارها (ϕ) مع اتجاه الأشعة الساقطة , حيث أن $(\ \phi = 90 - \theta\ )$ كما يتضح من الشكل الاتي. تنتج الانعكاسات عند خط الطبقة الاولى من المستويات {hkl}, حيث $\lambda = a\ cos_1\theta$ على فرض $n = 1$, تنتج الانعكاسات عند خط الطبقة الثانية من المستويات {2kl}, حيث $2\lambda = a\ cos_2\theta$, وهكذا. إذا كان بعد الطبقة الاولى عن خط الاستواء هو h وكان نصف قطر الغرفة هو r فإنّ $tan\theta = \frac{h}{r}$ وحيث أن $n\lambda = a\ sin\theta$ فإنه يمكن الحصول على الفاصل a . بقياس شدة إضاءة كل بقعة وتحديد المستوى البلوري (hkl) الذي حدث منه الانعكاس (طبقا لقانون براغ)، فإنه يمكن حساب التركيب البلوري.

أجريت بعض التعديلات على هذه الطريقة لتقليل احتمال تطابق النقط الناتجة عن الانعكاس من أكثر من مستوى بلوري وذلك بجعل البلورة تتذبذب حول المحور الرأسي في حدود بضع درجات وبذلك يقل عدد مستويات الانعكاس.



الشبيكة المقلوبة

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

تبين نظرية الحيود أن الشبيكة البلورية والأمواج (الكترونات،بروتونات،فوتونات.......) يتفاعلان مع بعضهما بنفس طريقة تفاعل الأمواج مع بعضها البعض. ومن المفيد أن نفكر بالشبيكة البلورية كاضطراب شبه موجي ،وأن نستخدم فضاء متجه الموجة بدلا من طول الموجة التي لا تمتلك خواص المتجه،وبالتحديد جهة انتشار الموجة حيث أن المتجه يمكن تحليله إلى مركباته الفضائية.وبما أن قيمة λ متجه الموجة يعطى بالعلاقة $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ والتي تبين أن أبعادها مقلوب وحدات طول، فنحن ملزمين وفقا للتصور الجديد أن ننتقل من فضاء الشبيكة العادية إلى فضاء متجه الموجة $\underset{K}{\rightarrow}$ ، أو ما يسمى بفضاء فورييه ، وهذا الفضاء يمكننا من تعريف الشبكة المقلوبة.وبما أن الأيونات في البلورة تكون مرتبة بشكل دوري وخصوصا عند الانتقال من مستوي بلوري إلى آخر, فإنه يمكننا اعتبار

الجهد الدوري للأيونات كموجة تكون ساكنة (واقفة) طول موجتها يساوي المسافة بين المستويات البلورية (d) ومتجه الموجة تلك عمودي على المستويات البلورية وقيمته $\frac{2\pi}{d}$ ونسميه هنا بالمتجه $\underset{G}{\rightarrow}$ ومن الطبيعي فإن هذه المتجه بشكله العام له متجه الشبيكة المقلوبة.

هي عبارة عن فكرة مفيدة وشاملة تنسب إلى العالم كبس تستخدم للتعبير عن الظواهر التي تنتج من تفاعل الموجات في البلورة، ويدعى فضاء الشبيكة المقلوبة بالفضاء المقلوب أو فضاء فورير Forier وتعرف الشبيكة المقلوبة في فضاء فورير بأنها عدد غير محدود من نقاط مرتبة بنظام دوري في فضاء ثلاثي الأبعاد بحيث إن المسافة ب ن هذه النق ط تتناسب عك يا مع المسافة للمجاميع المختلفة من السطوح في شبيكة اعتيادية (حقيقية).
يمكن التعبير عن شرط حيود الأشعة السنية في البلورة بطريقة أفضل وذلك باستخدام الشبيكة المقلوبة .إن الشبيكة المقلوبة هي لفظ شائع الاستعمال في تحليل التركيب بالأشعة السينية.
إن المتجهات الأساسية للشبيكة المقلوبة $(\vec{A}\,.\vec{B}.\vec{C})$, تعرف بدلالة المتجهات الأساسية للشبيكة الحقيقية $(\vec{a}\,.\vec{b}.\vec{c})$ ويرتبطان بالعلاقة الاتية

$$\begin{bmatrix} \vec{A}.\vec{a} = 2\pi & \vec{B}.\vec{a} = 0 & \vec{C}.\vec{a} = 0 \\ \vec{A}.\vec{b} = 0 & \vec{B}.\vec{b} = 2\pi & \vec{C}.\vec{b} = 0 \\ \vec{A}.\vec{c} = 0 & \vec{B}.\vec{c} = 0 & \vec{C}.\vec{c} = 2\pi \end{bmatrix}$$

نلاحظ من العمود الأول في المعادلة أن المتجه $(\vec{A})$ **عمودي على المستوي** $(\vec{b}\,X\,\vec{c})$ ، **وكذلك المتجه** $(\vec{B})$ **عمود ي على المستوي**$(\vec{c}\,X\,\vec{a})$ **وأن المتجه** $(\vec{C})$ عمودي على المستوى $(\vec{a}\,X\,\vec{b})$ **.**

فلكي تتحقق العلاقة $\vec{A}.\vec{a} = 2\pi$ في العمود الاول من المعادلة اعلاه يمكن استعمال المعادلة الاتية

$$\vec{A} = 2\pi\ \frac{\vec{b}\,X\,\vec{c}}{\vec{a}.\vec{b}X\,\vec{c}}$$

$$\vec{B} = 2\pi\ \frac{\vec{c}\,X\,\vec{a}}{\vec{a}.\vec{b}X\,\vec{c}}$$

$$\vec{C} = 2\pi\ \frac{\vec{a}\,X\,\vec{b}}{\vec{a}.\vec{b}X\,\vec{c}}$$

حيث تمثل العلاقة $\vec{a}.\vec{b}X\ \vec{c}$ حجم الخلية البدائية في الفضاء الاعتيادي. أمّا حجم الخلية البدائية في الشبيكة المقلوبة

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

ملاحظة: المتجهات $(\overrightarrow{A}, \vec{B}, \vec{C})$ ستكون متعامدة إذا كانت المتجهات $(\overrightarrow{a}, \vec{b}, \vec{c})$ متعامدة أيضا.

يمكن القول بأن كل تركيب بلوري له شبيكتان مهمتان هما الشبيكة البلورية والشبيكة المقلوبة،إن صورة الحيود للبلورة ماهي إلا خريطة للشبيكة المقلوبة كما هو الحال بالنسبة للصورة المجهرية التي ما هي إلا خريطة للشبيكة الحقيقية ويمكن توضيح الكيفية التي تنشأ بها الشبيكة المقلوبة وكما يأتي:

عند تدوير البلورة بزاوية معينة فان كلا من الشبيكتين الحقيقية والمقلوبة تدوران بالزاوية نفسها،والجدير بالملاحظة إن أبعاد المتجهات في الشبيكة المقلوبة هي مقلوب الطول، إن الشبيكة البلورية هي شبيكة في الفضاء الحقيقي Real Space. بينما المقلوبة هي شبيكة في فضاء متجه الموجة K- Space حيث أنّ $K = \frac{2\pi}{\lambda}$.

إن النقطة في الشبيكة الحقيقية يعبر عنها بدلالة $(\overrightarrow{a}, \vec{b}, \vec{c})$ وبالمتجه حيث أنّ

$$\vec{\rho} = g\vec{a} + k\vec{b} + f\vec{c}$$

وبنفس الطريقة يمكن تعريف أي نقطة في الشبيكة المقلوبة بدلالة المتجهات $(\overrightarrow{A}, \vec{B}, \vec{C})$ وبمتجه الشبيكة المقلوبة كما يلي:

$$\vec{G} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}$$

حيث أنّ h,k,l أعدادا صحيحة ،إن لكل نقط في الشبيكة المقلوبة معنى معين،ولكن النقاط المعرفة بواسطة المتجه $\vec{G}$ لها أهمية خاصة , ولنرى أهمية المتجه $\vec{G}$ نجري الضرب غير الاتجاهي وكما يأتي

$$\vec{G}.\vec{\rho} = \left(h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}\ \right).\left(g\vec{a} + k\vec{b} + f\vec{c}\ \right) = 2m\pi$$

حيث أن m عدد صحيح, وعليه فأن شرط الحيود ف الشبيكة المقلوبة هو

$$\vec{G}.\vec{\rho} = 2m\pi$$

بناء الشبيكة المقلوبة

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

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

أستطاع فورير أن يجزء هذه الدالة الى مركبتين الاولى تدعى بالمركبة الجيبية $\sin(\alpha r)$ والثانية تدعى بمركبة جيب تمام $\cos(\alpha r)$. ويمكن كتابة الداله بالصيغة $\exp(I(\alpha r))$ حيث أن $\alpha = \frac{2\pi n}{d}$

وتمثل (n) عددا صحيحا بينما (d) تمثل المسافة البينية بين المستويات.

أن الدالة النهائية والتي لها علاقة بالشبيكة المقلوبة هي

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

ومن هنا جاءت تسمية الشبيكة المقلوبة حيث نرى أن المسافة (d) بين المستويات تظهر في هذه المعادلة بصورة مقلوبة أن مقلوب المسافة هو الذي يعين موقع نقطة في الشبيكة المقلوبة. وعليه يعد من الناحية (الرياضية) متجهاً. أن مثل هذا المتجه يطل ق عليه بمتجه الشبيكة المقلوبة ويرم ز له (G) الذي يساوي مقلوب المسافة ويكتب رياضياً.

$$|G_{hkl}| = \frac{A}{d_{hkl}}$$

حيث A يمثل عامل مقياس الرسم

لذا تعرف الشبيكة المقلوبة بأنها عدد غير محدود من نقاط مرتبة بنظام دوري في فضاء ثلاثي الابعاد بحيث أن الفسح بين هذه النقاط تتناسب عكسيا مع الفسح (المسافة البينية) للمجاميع من السطوح في شبيكة اعتياديه او مباشرة

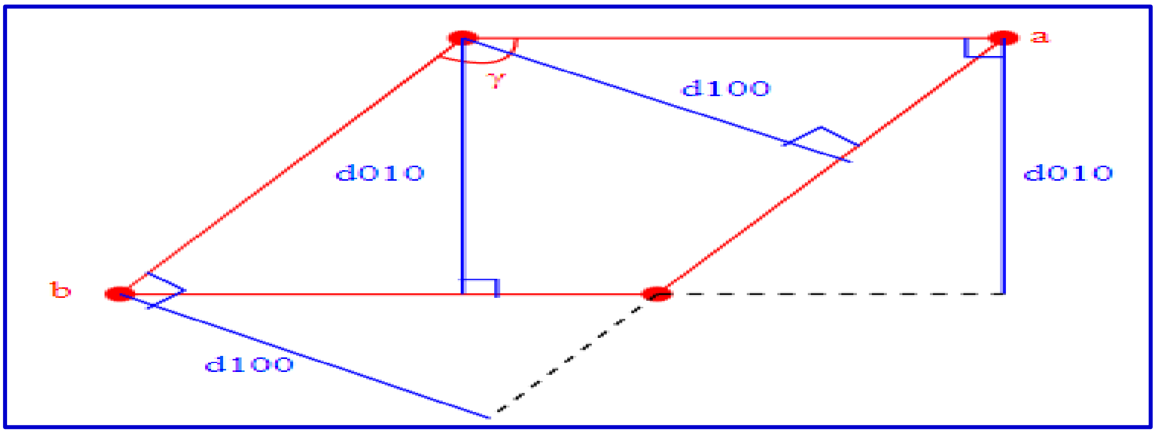
طريقة بناء الشبيكة المقلوبة Construction of reciprocal lattice

أن كل مجموعة من المستويات المتوازية في بلورة تمثل بمتجهات في نقطة الأصل لشبيكة مقلوبة ما. ويكون كل متجه عمودياً على تلك المجموعة من المستويات التي يمثلها وأن طوله يتناسب

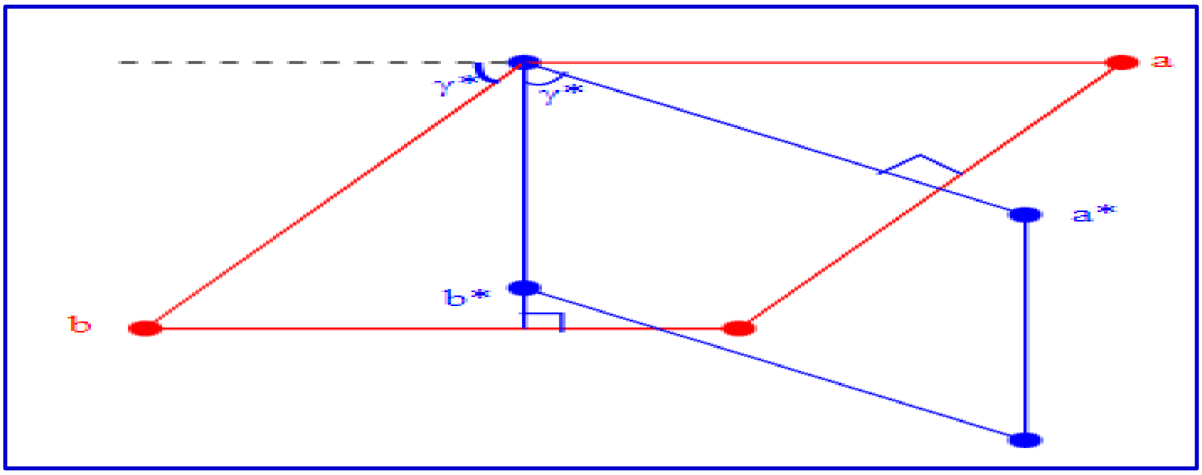
عكسياً مع المسافة البينية (d) لتلك المجموعة من المستويات . وبعبارة آخرى أن النقاط الواقعة عند نهايات تلك المتجهات العمودية تشكل الشبيكة المقلوبة للبلورة . يبين الشكل مجموعة الخطوط المستقيمة التي تمثل مستويات ذات أحداثيات

لإنشاء شبيكة مقلوبة نتبع الخطوات الاتية :

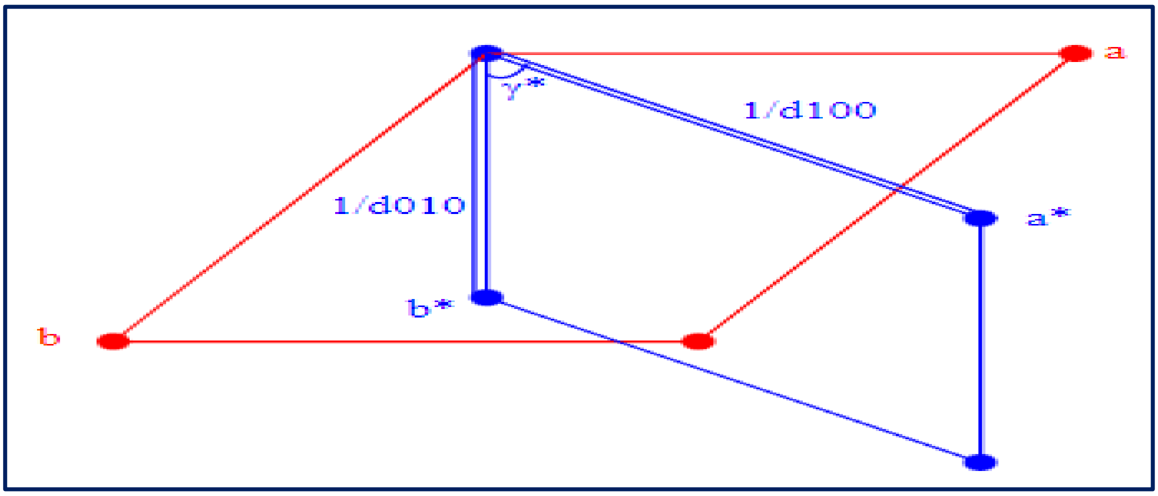
1- نختار خلية وحدة حقيقية في ثنائية الابعاد متجهيها الأوليين $\vec{a}$ و $\vec{b}$ والزاوية بينهما γ والأبعاد d حيث أنّ المتجه d_{100} عمودي على السطح (100) و المتجه d_{010} عمودي على السطح (010) وكما موضح في الشكل الاتي:



2- ننشئ عمود على $\vec{a}$ ثم عمود على $\vec{b}$ فنحصل على خلية الوحدة المقلوبة بالمتجهات $\vec{a}^*$ و $\vec{b}^*$ والزاوية بينهما γ^* . وكما في الشكل الاتي:



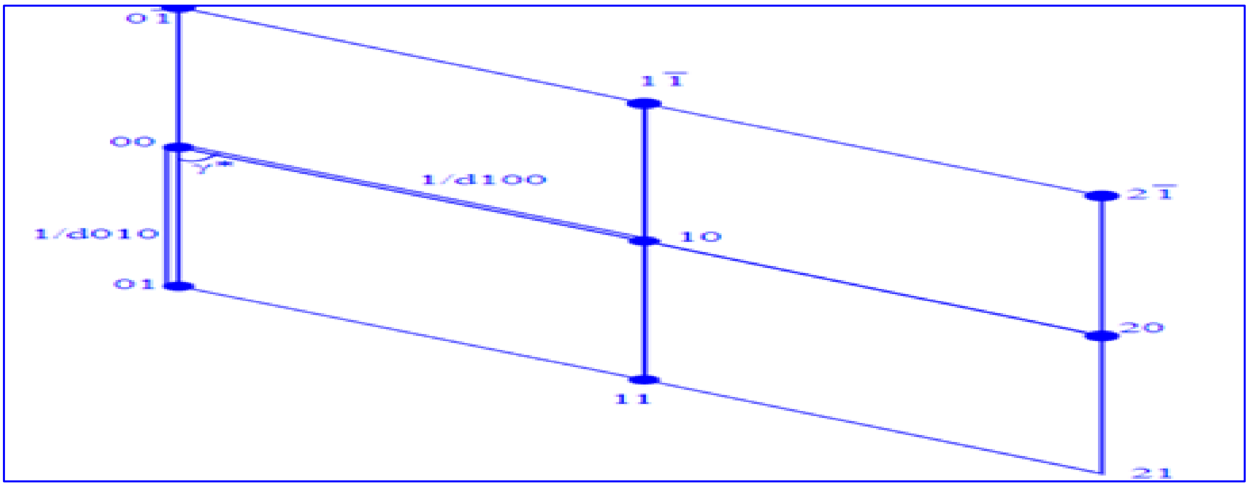
3- نحدد الأبعاد للشبيكة المقلوبة بمقلوب d لكل منهما. حيث أنّ ثوابت الشبيكة المقلوبة $\vec{a}^*$ و $\vec{b}^*$ تساوي مقلوب المسافات البينية للشبيكة الاعتيادية $(1/d)$.



ملاحظة: لا يتم رسم شبيكة الفضاء الاعتيادي والشبيكة المقلوبة على نفس المقياس.

4- الشكل العام للشبيكة المقلوبة الناتجة مع معاملات ميلريكون كما في الشكل الاتي.

يمكن لخلية الوحدة المقلوبة (وحدة الخلية للشبيكة المقلوبة) أن تتكرر تمامًا مثل خلية الوحدة الحقيقية.



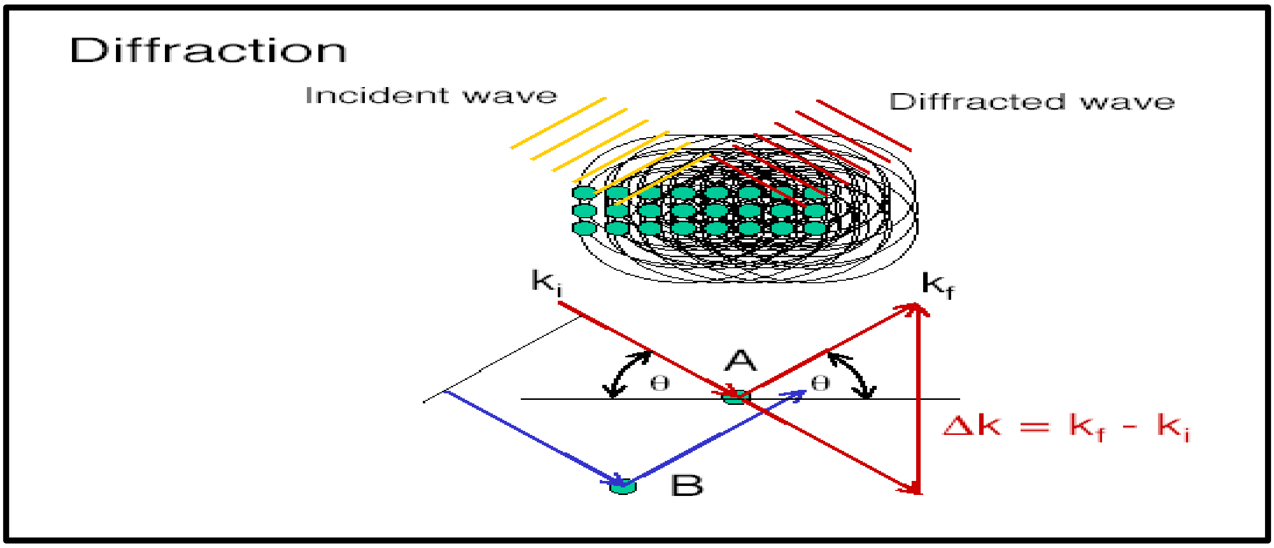
الحيود في الشبكة المقلوبة:

لكي يتم الحيود **وفق شرط براغ** يجب أن تكون الطاقة محفوظة قبل وبعد التفاعل أو ما يسمى بالتفاعل المرن وبما أن الطاقة بدلالة متجهة الموجة تعطى بالعلاقة:

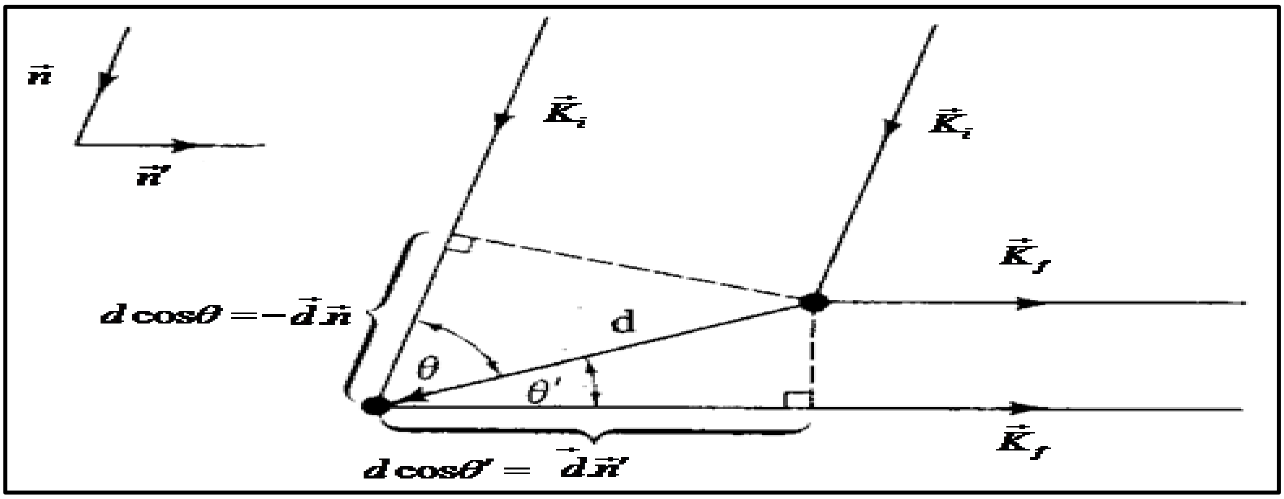
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

وهذه الطاقة هي نفسها قبل وبعد التفاعل فذلك يعني أن القيمة العددية لمتجه الموجة $\vec{k}$ لا تتغير،ولكن الذي يتغير هو الاتجاه فقط ووفق نظام جمع المتجهات نجد من خلال الشكل الاتي العلاقة التالية:

$$\Delta\vec{k} = \vec{k}_f - \vec{k}_i$$



ووفق **شرط فون لاوي** لحيود الأشعة السينية فان حزمة من الأشعة ذات متجه موجة K_i تسقط على ذرتين من الشبكة البعد بينهما d إحدى أبعاد المتجهات الأولية وتعاني انعكاسا بمتجه موجة K_f, وكما يبين الشكل الاتي:



ومن هندسة الشكل نجد العلاقة التالية لفرق المسار بين الأشعة الواردة والمنعكسة بإتباع عملية الضرب القياسي للمتجهات حيث على الشكل متجهتا الوحدة كل على حدة:

$$d\cos\theta + d\cos\theta' = d.(\vec{n}' - n)$$

ووفقا لشرط التداخل البناء فإن فرق المسير يجب أن يساوي عدد صحيح من طول الموجة أي

$$\vec{d}.(\vec{n}' - n) = m\lambda$$

بضرب الاخيرة بـ طرفي العلاقة بـ $(\frac{2\pi}{\lambda})$ نحصل على العلاقة الآتية

$$\vec{d}.\left((\vec{n}'\frac{2\pi}{\lambda}) - (n\frac{2\pi}{\lambda})\right) = 2\pi m$$

$$\vec{d} = \vec{k}_f - \vec{k}_i = 2\pi m$$

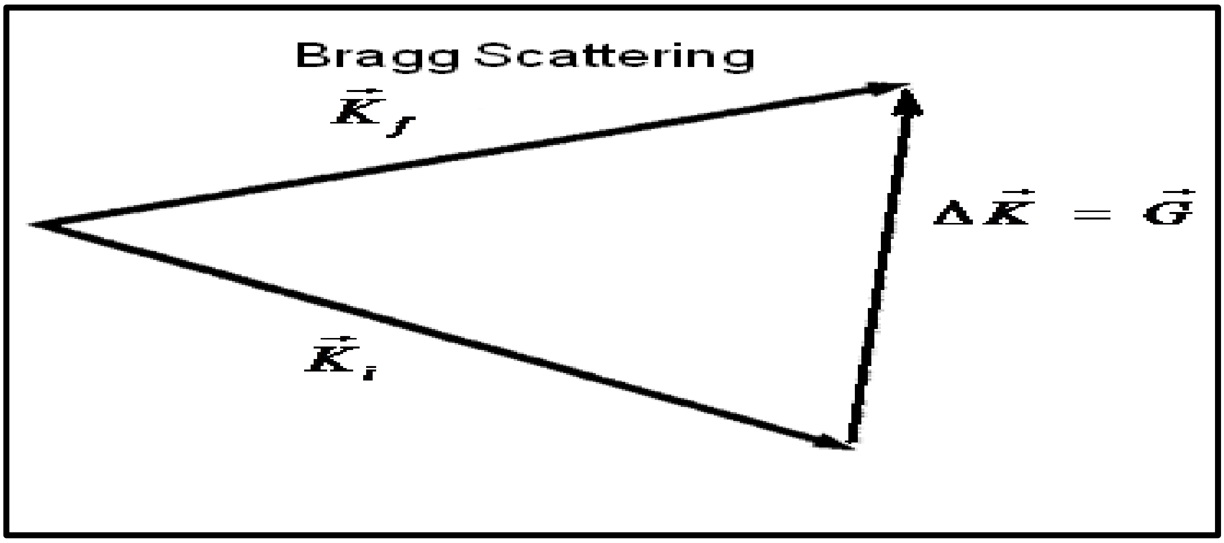
$$\vec{d} = \Delta\vec{k} = 2\pi m$$

تبين العلاقة الاخيرة شرط لاوي للحيود وأن قيمة $\Delta\vec{k}$ يمثل مقلوب طول وقد وجد بالطرق الهندسية أن هذا الطول هو بالتحديد قيمة متجه الشبكة المقلوبة أي أنه عندما

$$|\Delta\vec{k}| = \frac{2\pi}{d} = |\vec{G}|$$

ومما سبق نضع الآن شرط براغ للحيود حيث يبين الشكل الاتي شرط الحيود وفق المعادلة التالية

$$\vec{k}_f = \vec{k}_i + G$$



نربع طرفي العلاقة الاخيرة فنجد ان

$$K_f^2 = K_i^2 + G^2 + 2\vec{k}_i.\vec{G}$$

وعدديا كما سبق شرحه فإن

$$K_f = K_i = K$$

ومنه تصبح العلاقة الأخيرة كما يأتي

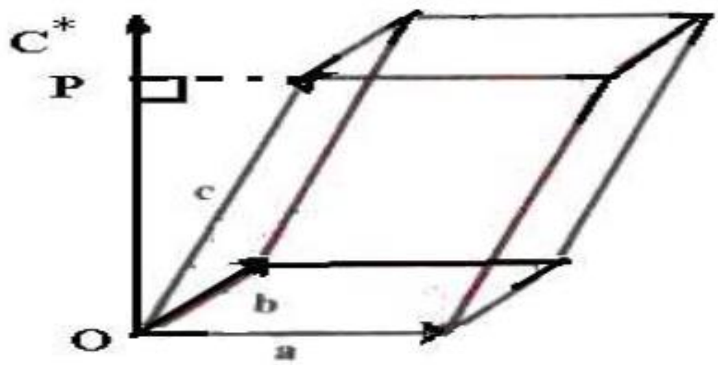
$$\boxed{G^2 + 2\vec{k}_i . \vec{G} = 0}$$

تمثل المعادلة الاخيرة شرط الحيود قي الشبيكة المقلوبة أو معادلة براغ في الشبكة المقلوبة.

متجهات الشبيكة المقلوبة Reciprocal lattice vectors

يمكن تحديد الشبيكة المباشرة (الحقيقية) في فضاء حقيقي بالمحاور $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ الاساسية وبنفس الطريقة يمكن تحديد الشبيكة المقلوبة بمحاور أساسية أخرى ، تعرف المتجهات الاساسية للشبيكة المقلوبة $\overrightarrow{a^*}$, $\overrightarrow{b^*}, \overrightarrow{c^*}$ بدلالة المتجهات الاساسية للشبيكة الحقيقية.

ولاجل أشتقاق العلاقة بين المتجهات الاساسية للشبيكة الحقيقية و متجهات الشبيكة المقلوبة ، نفرض لدينا وحدة خلية في نظام ثلاثي الميل ذات محاورأساسية $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ والمبينة في بالشكل الاتي. إن حجم هذه الخلية يساوي مساحة القاعدة التي اضلاعها $\vec{b}, \vec{c}$ مضروبا في ارتفاع الخلية الذي يمثل op ويعادل d_{001}. إنّ العلاقة بين المساحة والحجم يمكن ان تكتب بالصيغة الاتية



$$\frac{Area}{Volume} = \frac{1}{d_{001}}$$

وبموجب الجبر الاتجاهي يمكن تمثيل العمود على السطح بوحدة قيمة $\vec{n}$ وعليه يمكن كتابة متجه الشبيكة المقلوبة $\vec{G}$ كالاتي:

$$\vec{G} = A \frac{1}{d_{hkl}} \vec{n}$$

أما مساحة القاعدة فيمكن التعبير عنها بالضرب الاتجاهي لضلعيها ، أما الحجم فيعبر عنه بحاصل ضرب المتجهات $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$, فتصبح المعادلة بالصيغة الاتية

$$\frac{2\pi}{d_{001}}\,\vec{n} = \frac{\vec{a}x\vec{b}}{\vec{a}.\,\vec{b}x\vec{c}}$$

$$\overrightarrow{G_{001}} = 2\pi\,\frac{\vec{a}x\vec{b}}{\vec{a}.\,\vec{b}x\vec{c}}$$

وبنفس الطريقة يمكن التعبير عن $\overrightarrow{G_{100}}$ و $\overrightarrow{G_{010}}$ اي أن:

$$\overrightarrow{G_{100}} = 2\pi\,\frac{\vec{b}x\vec{c}}{\vec{a}.\,\vec{b}x\vec{c}}$$

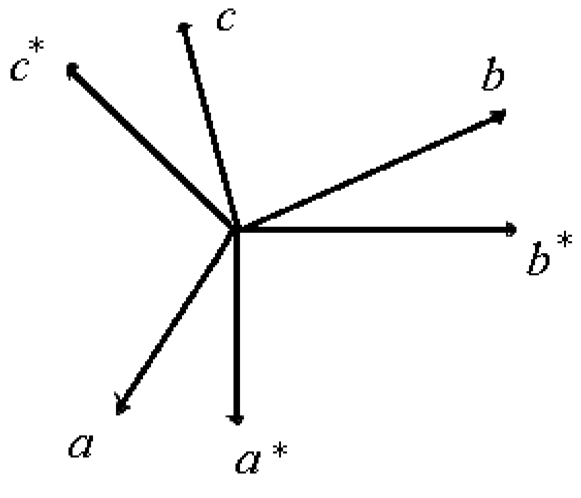
$$\overrightarrow{G_{010}} = 2\pi\,\frac{\vec{c}x\vec{a}}{\vec{a}.\,\vec{b}x\vec{c}}$$

وقد جرت العادة التعبير عن $\overrightarrow{G_{100}}$ بـ $\overrightarrow{a^*}$ وعن $\overrightarrow{G_{010}}$ بـ $\overrightarrow{b^*}$ وعن $\overrightarrow{G_{001}}$ بـ $\overrightarrow{c^*}$

فعليه يمكن أن نعيد الصياغة

$$\left[\begin{aligned} \overrightarrow{a^*} &= 2\pi\,\frac{\vec{b}x\vec{c}}{\vec{a}.\vec{b}x\vec{c}} \\ \overrightarrow{b^*} &= 2\pi\,\frac{\vec{c}x\vec{a}}{\vec{a}.\vec{b}x\vec{c}} \\ \overrightarrow{c^*} &= 2\pi\,\frac{\vec{a}x\vec{b}}{\vec{a}.\vec{b}x\vec{c}} \end{aligned}\right]$$

ومن المعادلة الاخيرة نجد أنّ $\overrightarrow{a^*}$ عمودي على $\vec{b},\vec{c}$ و $\overrightarrow{b^*}$ عمودي على $\vec{a},\vec{c}$ واخيرا $\overrightarrow{c^*}$ عمودي على $\vec{a},\vec{b}$, زكما موضح في الشكل الاتي:



ويمكن أن نستنتج العلاقات الرياضية المهمة جدا في الشبكة المقلوبة وهي

$$\overrightarrow{a^*}.\vec{a} = 2\pi \qquad \overrightarrow{a^*}.\vec{b} = 0 \quad \overrightarrow{a^*}.\vec{c} = 0$$

$$\overrightarrow{b^*}.\vec{b} = 2\pi \qquad \overrightarrow{b^*}.\vec{a} = 0 \quad \overrightarrow{b^*}.\vec{c} = 0$$

$$\overrightarrow{c^*}.\vec{c} = 2\pi \qquad \overrightarrow{c^*}.\vec{a} = 0 \quad \overrightarrow{c^*}.\vec{b} = 0$$

إنّ تحديد مواقع نقاط الشبكة الحقيقية بواسطة المتجهات الانتقالية البدائية $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ وبهذا يكون المتجه الانتقالي الشبيكي لأي نقطة يعرف بـ

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

وبنفس الطريقة يمكن تعريف موقع اي نقطة في الشبيكة المقلوبة بمتجه الشبيكة المقلوبة $\overrightarrow{G_{hkl}}$ بدلالة اعداد صحيحة (hkl) لمحاور الشبيكة المقلوبة $\overrightarrow{a^*}\ , \overrightarrow{b^*}, \overrightarrow{c^*}$ أي أنّ

$$\overrightarrow{G_{hkl}} = h\overrightarrow{a^*} + k\overrightarrow{b^*} + l\overrightarrow{c^*}$$

هذا يعني ان الوصول الى نقطة ما في الشبيكة المقلوبة مثل *(hkl)* يتطلب (h) من الوحدات على طول $\overrightarrow{a^*}$ و(k) من الوحدات على طول $\overrightarrow{b^*}$ و (l) من الوحدات على طول $\overrightarrow{c^*}$

ولايجاد محاور شبيكة البلوره في الفضاء الحقيقي بدلالة محاور شبيكتها المقلوبه نفترض مقلوب احد محاور الشبيكة وليكن $\overrightarrow{a^*}$ وكما يأتي

$$\overrightarrow{(a^*)^*} = 2\pi\ \frac{\overrightarrow{b^*}x\overrightarrow{c^*}}{\overrightarrow{a^*}\ .\ \overrightarrow{b^*}x\overrightarrow{c^*}}$$

وبالتعويض عن قيمة (2π) بما يساويها $\overrightarrow{a^*}.\vec{a}$ فبالامكان كتابة المعادلة الاخيرة كالاتي

$$\overrightarrow{(a^*)^*} = \vec{a}\ \frac{\overrightarrow{a^*}.\ \overrightarrow{b^*}x\overrightarrow{c^*}}{\overrightarrow{a^*}\ .\ \overrightarrow{b^*}x\overrightarrow{c^*}}$$

وبالاختصار بين البسط والمقام في الطرف الايمن تصبح المعادلة الاخيرة كما يأتي

$$\overrightarrow{(a^*)^*} = \vec{a}$$

وبالنتيجة نحصل على المعادلات الاتي والتي تخص جميع ثوابت الشبيكة

$$\overrightarrow{(\boldsymbol{a}^*)^*} = \vec{\boldsymbol{a}} = 2\pi \; \frac{\overrightarrow{\boldsymbol{b}^*} x \overrightarrow{\boldsymbol{c}^*}}{\overrightarrow{\boldsymbol{a}^*} \,.\, \overrightarrow{\boldsymbol{b}^*} x \overrightarrow{\boldsymbol{c}^*}}$$

$$\overrightarrow{(\boldsymbol{b}^*)^*} = \vec{\boldsymbol{b}} = 2\pi \; \frac{\overrightarrow{\boldsymbol{c}^*} x \overrightarrow{\boldsymbol{a}^*}}{\overrightarrow{\boldsymbol{a}^*} \,.\, \overrightarrow{\boldsymbol{b}^*} x \overrightarrow{\boldsymbol{c}^*}}$$

$$\overrightarrow{(\boldsymbol{c}^*)^*} = \vec{\boldsymbol{a}} = 2\pi \; \frac{\overrightarrow{\boldsymbol{a}^*} x \overrightarrow{\boldsymbol{b}^*}}{\overrightarrow{\boldsymbol{a}^*} \,.\, \overrightarrow{\boldsymbol{b}^*} x \overrightarrow{\boldsymbol{c}^*}}$$

عامل التركيب الهندسي The Lattice Structure Factor

يطلق على كفاءة الذرة الواحدة في تشتيت الأشعة السينية عامل الاستطارة الذرية *Atomic scattering factor* وهو عبارة عن النسبة بين سعة الموجة المتشتتة من قبل ذرة واحدة إلى سعة الموجة المتشتتة من قبل إلكترون واحد من الذرة. إن اشتقاق صيغة للتعبير عن شدة الأشعة المنعكسة من المستويات الذرية المختلفة يستوجب جمع سعات الأشعة المحادة او المستطارة من قبل جميع الذرات في وحدة الخلية .

ويطلق على محصلة جمع سعات الموجات المحادة من قبل الذرات في وحدة الخلية تسمية عامل التركيب Structure Factor والذي يمثل النسبة بين سعة الموجة المتشتتة من قبل جميع الذرات في وحدة الخلية الى سعة الموجة المتشتتة من قبل الكترون واحد. ان عامل التركيب عبارة عن دالة رياضية تصف سعة وطور الموجة ويلعب دورا مهما بإعطاء معلومات بحدوث او عدم حدوث ظاهرة الحيود , ويتم ذلك من خلال حساب عامل التركيب الهندسي S_{hkl} لأي مستوي إحداثياته (hkl) في وحدة خلية معروفة مواقع الذرات فيها مثل (FCC, BCC, SC) .

في فيزياء الحالة الصلبة وعلم البلورات ، فإن عامل التركيب يمثل وصف رياضي لكيفية تشتيت المادة للإشعاع الساقط عليها. فعامل التركيب يعتبر أداة في تفسير أنماط الحيود (أنماط التداخل) التي تم الحصول عليها في تجارب حيود الأشعة السينية والإلكترون والنيوترون.

إنّ عامل التركيب F_{hkl} هو نتيجة كل الموجات المنتشرة في اتجاه انعكاس hkl بواسطة عدد n من الذرات الموجودة في خلية الوحدة. لذلك يجب أن يأخذ تعبيرها الرياضي في الاعتبار التشتت من كل ذرة موجودة فيه.حيث يتم تحديد العامل من خلال أنواع الذرة ومواقعها في خلية وحدة.

- اذن يتم تحديد سعة الموجة الناتجة من خلال نسبة السعات

Type equation here.

يعطى عامل التركيب الهندسي لشبيكة معينة بالعلاقة الاتية

$$F_{hkl} = \sum_{i=1}^{N} f_i \, e^{i\varphi_j} = f_i e^{2\pi i(hu_i + kv_i + lw_i)}$$

يتم تحديد سعة الموجة الناتجة من خلال نسبة السعات:

$$|F_{hkl}| = \frac{\text{سعةالموجةالمستطارة بواسطة جميع ذرات وحدة الخلية}}{\text{سعةالموجةالمستطارة بواسطة الكترون حر}}$$

شدة الموجة المنحرفة تتناسب طرديا مع السعة $I \propto |F_{hkl}|^2$

بعض العلاقات الرياضية مطلوبة في حساب عامل التركيب الهندسي.

$$e^{\pi i} = e^{3\pi i} = e^{5\pi i} = \ldots = -1$$

$$e^{2\pi i} = e^{4\pi i} = e^{6\pi i} = \ldots = +1$$

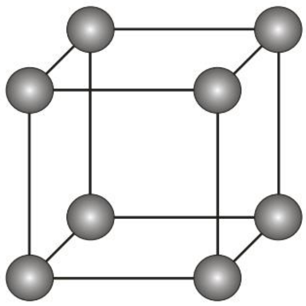
$e^{n\pi i} = (-1)^n$, where n is any integer

$e^{n\pi i} = e^{-n\pi i}$, where n is any integer

$$e^{ix} + e^{-ix} = 2\cos x$$

س/ احسب عامل التركيب الهندسي للتركيب البسيط (SC) ؟

بما ان التركيب البسيط يحتوي على نقطة شبيكة واحدة هي 000



$$F_{hkl} = \sum_{i=1}^{N} f_i\, e^{i\varphi_j} = f_i e^{2\pi i(hu_i+kv_i+lw_i)}$$

$$F_{hkl} = f e^{i[2\pi(h0+k0+l0)]} = f e^{0} = f$$

$$I \propto |F^2| = f$$

هذا يعني ان F لاتعتمد على متسوى التشتت (hkl) .

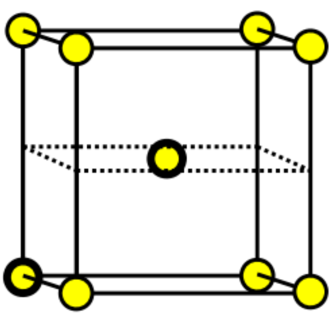
بغض النظر عن إحداثيات الذرة أو مؤشرات المستوى التي تستبدلها في معادلة عامل التركيب الهندسي للبلورات المكعبة البسيطة، فإن الحل يكون دائمًا غير صفري . وبالتالي، يُسمح بجميع الانعكاسات للتراكيب المكعبة البسيطة (البدائية).

س/ احسب عامل التركيب الهندسي للتركيب (BCC) ؟

بما ان التركيب BCC يحتوي على نقطتين شبيكة هما

000 و $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$

$$F_{hkl} = \sum_{i=1}^{N} f_i\, e^{i\varphi_j} = f_i e^{2\pi i(hu_i+kv_i+lw_i)}$$



$$F_{hkl} = f e^{i[2\pi(h0+k0+l0)]} + f e^{i\left[2\pi\left(\frac{h}{2}+\frac{k}{2}+\frac{l}{2}\right)\right]} = f\left(1+e^{i\pi(h+k+l)}\right)$$

اذا كانت مجموع معاملات ملير زوجي $(h+k+l)$ فأن $F_{hkl} \neq 0$ يوجد انعكاس

اذا كانت مجموع معاملات ملير فردي $(h+k+l)$ فأن $F_{hkl}=0$ **لا يوجد انعكاس**

مثال/ اذا اعتبر التركيب البلوري من نوع ممتركز الجسم يحتوي على المستويات (220),(210),(200),(111),(110),(100) وتحتوي على نوع واحد من الذرات اذا سقطت الاشعة السينية على هذه البلورة ففي اي من هذه المستويات سيحدث الانعكاس؟

الحل

بما ان التركيب BCC يحتوي على نقطتي شبيكة هي

$$000\ \frac{1}{2}\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$$

$$F_{hkl}=\sum_{i=1}^{N} f_i\, e^{i\varphi_j}=f_i e^{2\pi i(hu_i+kv_i+lw_i)}$$

$$F_{hkl}=f e^{i[2\pi(h0+k0+l0)]}+f e^{i\left[2\pi\left(\frac{h}{2}+\frac{k}{2}+\frac{l}{2}\right)\right]}$$
$$=f\left(1+e^{i\pi(h+k+l)}\right)$$

اذا كانت مجموع معاملات ملير زوجي $(h+k+l)$ فأن $F_{hkl}\neq 0$ **يوجد انعكاس**

اذا كانت مجموع معاملات ملير فردي $(h+k+l)$ فأن $F_{hkl}=0$ **لا يوجد انعكاس**

المستويات	$(h+k+l)$	I	الملاحظة
(100)	فردي	0	لا يوجد انعكاس
(110)	زوجي	2f	يوجد انعكاس
(111)	فردي	0	لا يوجد انعكاس
(200)	زوجي	2f	يوجد انعكاس
(210)	فردي	0	لا يوجد انعكاس
(220)	زوجي	2f	يوجد انعكاس

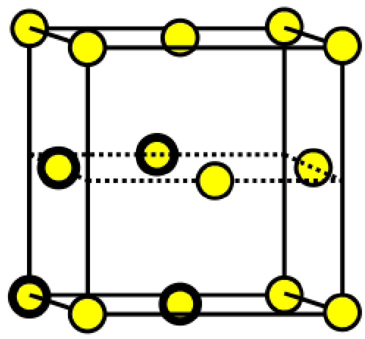
س/ احسب عامل التركيب الهندسي للتركيب (FCC) ؟

بما ان التركيب FCC يحتوي على اربع نقاط شبيكة هي

$$000 \quad \frac{1}{2}\frac{1}{2}0 \quad \frac{1}{2}0\frac{1}{2} \quad 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$$

$$F_{hkl} = \sum_{i=1}^{N} f_i\, e^{i\varphi_j} = f_i e^{2\pi i(hu_i+kv_i+lw_i)}$$

$$F_{hkl} = f e^{i[2\pi(h0+k0+l0)]} + f e^{i\left[2\pi\left(\frac{h}{2}+\frac{k}{2}+l0\right)\right]} + f e^{i\left[2\pi\left(\frac{h}{2}+k0+\frac{l}{2}\right)\right]+} + f e^{i\left[2\pi\left(h0+\frac{k}{2}+\frac{l}{2}\right)\right]+}$$
$$= f\left(1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)}\right)$$



اذاكانت معاملات ملير (hkl) كلها قيم زوجية او فردية فتكون الحدود$(h+k)$ و $(h+l)$ و $(k+l)$ اعلاه لها قيمة تساوي واحد وبذلك يكون $F = 4\mathrm{f}$ و $I \propto |F^2| = 16\mathrm{f}^2$

اذاكانت معاملات ملير (hkl) خليط من قيم زوجية و فردية فتكون الحدود$(h+k)$ و $(h+l)$ و $(k+l)$ هو (-1) وبذلك يكون $F = 0$ و $F^2 = 0$ وبعبارة اخرى لايحدث انعكاس عند المستوي (021)

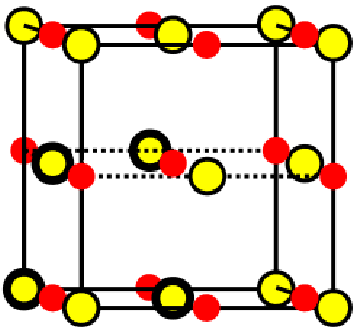
مثال: تركيبا بلوريا متمركز الوجه يحتوي على المستويات

(100),(110),(111), (112),(200),(210),(220) بين اين منها يحدث عنده انعكاس.

المستويات	(hkl)	I	الملاحظة
(100)	مختلط	0	لا يحدث انعكاس
(110)	مختلط	0	لا يحدث انعكاس
(111)	فردي	4f	يحدث انعكاس
(200)	زوجي	4f	يحدث انعكاس
(210)	مختلط	0	لايحدث انعكاس
(220)	زوجي	4f	يحدث انعكاس
(112)	مختلط	0	لايحدث انعكاس

س/ احسب عامل التركيب الهندسي للتركيب (NaCl) ؟

بما ان التركيب FCC



فأن مواقع Na هي

$$000, \quad \frac{1}{2}\frac{1}{2}0, \quad \frac{1}{2}0\frac{1}{2}, \quad 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$$

اما مواقع Cl

$$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}, \quad 00\frac{1}{2}, \quad 0\frac{1}{2}0, \quad \frac{1}{2}00$$

نجد عامل التركيب الهندسي Na

$$F_{hkl} = \sum_{i=1}^{N} f_i\, e^{i\varphi_j} = f_i e^{2\pi i(hu_i+kv_i+lw_i)}$$

$$F_{hkl} = f_{Na[}e^{i[2\pi(h0+k0+l0)]} + e^{i\left[2\pi\left(\frac{h}{2}+\frac{k}{2}+l0\right)\right]} + e^{i\left[2\pi\left(\frac{h}{2}+k0+\frac{l}{2}\right)\right]} + e^{i\left[2\pi\left(h0+\frac{k}{2}+\frac{l}{2}\right)\right]]} = f_{Na[}\left(1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)}\right)$$

نجد عامل التركيب الهندسي Cl

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

$$F_{hkl} = f_{Na[}\left(1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)}\right) + f_{Cl}\left(e^{i\pi(h+k+l)} + e^{i\pi(l)} + e^{i\pi(k)} + e^{i\pi(h)}\right)$$

$$F_{hkl} = [f_{Na} + f_{Cl}e^{i\pi(h+k+l)}][\left(1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)}\right)]$$

اذا كانت (hkl) كلها عددا زوجيا نحصل على اعظم شدة

$$F_{hkl} = 4(f_{Na} + f_{Cl})$$

$$I \propto |F_{hkl}|^2 = 16(f_{Na} + f_{Cl})^2$$

اما اذا كانت (hkl) عددا فرديا نحصل على اقل شدة

$$F_{hkl} = 4(f_{Na} - f_{Cl})$$

$$I \propto |F_{hkl}|^2 = 16(f_{Na} - f_{Cl})^2$$