بسم الله الرحمن الرحيم

الفصل الثاني: الحيود في البلورات Crystal diffraction

قانون براك

الحزم الساقطة: (الاشعة السينية ، النيوترنات ، الالكترونات)

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

الشبيكة المقلوبة

عامل تركيب الشبيكة

منحت جائزة نوبل في الفيزياء عام 1915 الى ويليم هنري براك الاب وويلم لورانز براك الابن

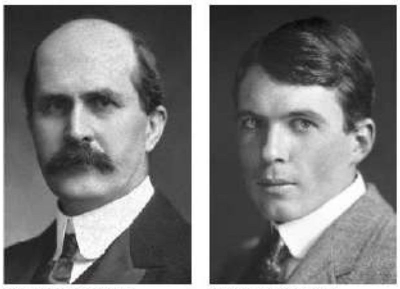


Photo from the Nobel Foundation archive.
Sir William Henry Bragg

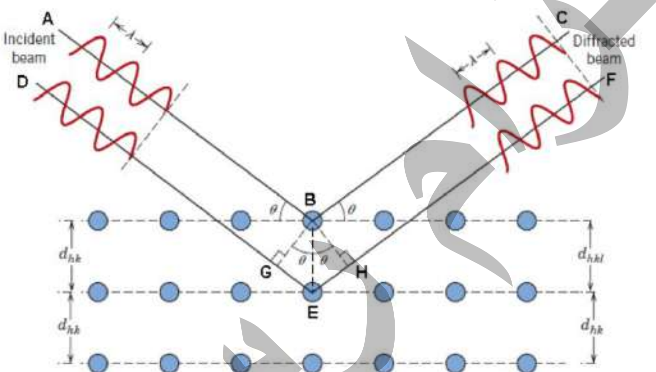
Photo from the Nobel Foundation archive.
William Lawrence Bragg

قانون براك:

تمكن العالم ويليم لورنس براك (الابن) عام 1913 عندما كان طالب بحث في جامعة كامبريج 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 تنفصل 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

$GE + EH = n\lambda$ ------------ الفرق بين المسارين (1)

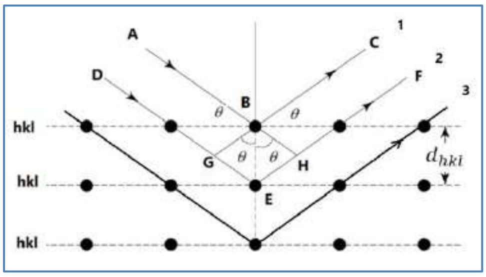
بما ان الذرات في داخل البلورة تصطف في مجاميع متميزة من المستويات المتوازية ذات الاحداثيات (hkl)والتي تنفصل عن بعضها بمسافة d_{hkl}، لذلك: $BE = d_{hkl}$

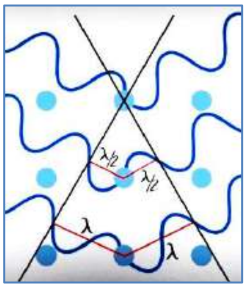
$GE = d_{hkl} \sin\theta$ ------------ من المثلث BGE (2)

$EH = d_{hkl} \sin\theta$ ------------ ايضاً من المثلث BHE (3)

$d_{hkl} \sin\theta + d_{hkl} \sin\theta = n\lambda$ نعوض 3&2 في 1

$\therefore \ \mathbf{2d_{hkl} \sin\theta = n\lambda}$ ------------------------ **قانون براك**





❖ مرتبة الحيود (n=1,2,3,.......) تعني انه لطول موجة معين ولقيمة معينة من d هنالك قيم متعددة لزوايا السقوط θ_1وθ_2 و θ_3 تحقق الحيود .

❖ فرق المسار بين 1و 2 هو λ و فرق المسار بين 1 و 3هو 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) ---------------------------- $\lambda \leq 2d_{hkl}$

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

حيث ان قيمة $(\sin\theta)$ لا يمكن ان تزيد عن الواحد في اي حال من الاحوال.

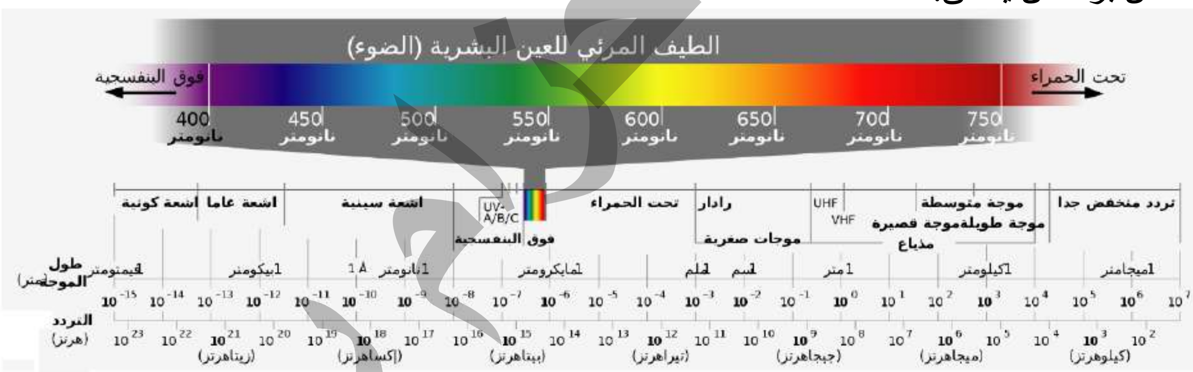
وفي حالة الحيود من الرتبة الاولى n=1 سوف يكون $\lambda \leq 2d_{hkl}$

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 Å لذلك لا يمكن استعمال الضوء المرئي او الاشعة فوق البنفسجية لان انعاس براك لن يتحقق.



❖ الاشعة الساقطة D&A تسقط بزاوية θ اما الاشعة المنعكسة (الاشعة المُستطيرة او الاشعة المُحادة) مثل C&F فتنعكس (تستطيراو 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

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

وفي حالة الحيود من الرتبة الاولى n=1 سوف يكون $\lambda \leq 2d_{hkl}$

اي ان شرط الحيود سيكون متحقق لذلك يمكن استعمال الاشعة السينية لدراسة الحيود في المعادن.

الحزم الساقطة: (الاشعة السينية ، النيوترنات ، الالكترونات)

هنالك التباس حاصل لدى البعض عند استعمال مصطلحات الحيود والاستطارة او التشتت. تتطلب دراسة التركيب البلوري استعمال اشعاع ذي طول موجي مساوٍ 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 الالكترون).

- **الاستطارة غير المرنة (التشتت غير المرن) :** اذا فقد الجسيم او الفوتون المتشتت (المنحرف عن مساره) قسماً 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 تتصرف بصفة مرايا وتولد انعكاسا 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 تتصرف هذه الجسيمات في الوسط بصفتها مراكز للاشعاع, وكل منها تُشتت 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 للأستطارة وهو يمثل استطارة متشاكهة او متآلفة 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

υ يمثل تردد الفوتون

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

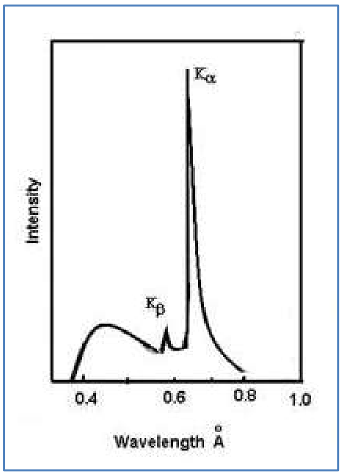
h ثابت بلانك　　$h=6.626\times10^{-34}$ J.sec

c سرعة الضوء　　$c=3\times10^{8}\ \frac{m}{sec}$

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

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.

- يتم انتاج الاشعة السينية من خلال اصطدام الكترونات سريعة جدا بهدف معدني مثل النحاس cu والكوبلت co أو المولدينيوم Mo او الفضة. اي اننا بحاجة الى
  1- هدف معدني مثل النحاس او الكوبلت
  2- فرق جهد معجل للالكترونات
  3- مصدر لتوليد الالكترونات
- عند اصطدام الالكترونات السريعة بهدف معدني يحصل آنياً عمليتان متباينتان:
  1- العملية الاولى تباطؤ الالكترونات وانحرافها بسبب الشحنات النووية في الهدف التي تسبب انبعاث اشعاع عبارة عن فوتونات ذات اطوال موجية مختلفة ويدعى بالطيف المستمر.
  2- والعملية الثانية يتم من خلالها تفاعل او اصطدام غير مرن بين الالكترونات الساقطة والكترونات لباب ذرات الهدف المعدني (الكترونات القشرة الداخلية لذرات الهدف المعدني اي الالكترونات الموجودة في ذرات الهدف المعدني القريبة من النواة). حيث تتولد خطوط طيف حادة ذات شدة عالية تسمى بالطيف الخطي ويكون مركباً فوق الطيف المستمر.



- الطول الموجي للاشعة السينية : الخطوط الحادة البراقة (الطيف الخطي) هي تمثل فوتونات ذات طول موجي لكل خط منها حيث يتولد من انتقال الكترون من قشرة shell بعيدة عن النواة الى قشرة قريبة منها. فعند انتقال الكترون من القشرة L الى القشرة K سمي الخط الحاد K_α . عند انتقال الكترون من القشرة M الى القشرة K سمي الخط الحاد K_β .

اي ان هناك احتمالاً لانتقال الكترونين مختلفين من القشرة L الى القشرة K ويحصل من ذلك ظهور خطين مختلفين يمثلان فوتونين مختلفين للطاقة (او الطول الموجي) يسميان $K_{\alpha1}$ و $K_{\alpha2}$

- اذا كان الهدف نحاس Cu

$K_{\alpha1} = 1.5405$ Å , $K_{\alpha2} = 1.5443$ Å

- اذا كان الهدف مولبيدنيوم Mo

$K_{\alpha1} = 0.7093$ Å , $K_{\alpha1} = 0.7135$ Å

- يمكن حساب اقصر طول موجي λ_{swl} في الطيف المستمر باستخدام علاقة انشتاين حيث تكون طاقة فوتونات الاشعة السينية المنبعثة من الهدف المعدني اكبر ما يمكن ولا تزيد عن اقصى طاقة تمتلكها الاشعة الكاثودية (الالكترونات) المصطدمة بالهدف، ولما كانت طاقة الاشعة الكاثودية تحدد بالجهد الكهربائي (V_{max}) المسلطة عبر انبوبة الاشعة السينية (بين الكاثود ، وهو مصدر توليد الالكترونات والهدف المعدني)

$$E_{max}=eV_{max}= h\upsilon_{swl}=\frac{hc}{\lambda_{swl}}$$

$$\lambda_{swl} = \frac{hc}{eV_{max}} = \frac{12400}{V_{max}\,(volt)} \text{ Å}$$

عندما يتعرض الكترون في بلورة الى اشعة سينية احادية الموجة او احادية الطاقة monochromatic اي الى أحد الخطوط الحادة للاشعة السينية. يجبر متجه المجال الكهربائي لهذه الاشعة الالكترون على الاهتزاز بتردد مساوٍ لتردد الفوتونات المؤثرة فيه. ونتيجة لتعجيل الالكترون يطلق اشعاعاً في جميع الاتجاهات بتردد واحد ويسمى اشعاع الحيود وتسمى العملية بالحيود المرنة لتساوي تردد الفوتون المؤثر في الالكترون مع تردد الفوتون المنبعث من الالكترون.

2. الالكترونات :

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

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

ان ظاهرة الحيود الالكتروني هي في الاســـاس اثبات لوجود موجات ترافق الالكترونات بموجب نظرية ديبرولي ولكن مـا يميز الالكترون عن الفوتون او النيوترون امتلاكه للشـــحنة 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 مشـابه للاشـعة السـينية في دراسـة التركيب البلوري بل **ينحصر استخدامه في هدفين اساسيين هما :**

1- دراسة سطوح البلورات.
2- دراسة الاغشية الرقيقة

3.النيوترونات :

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

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

ان شـحنة النيوترون متعادلة ولكنه يمتلك عزما مغناطيسـياً بسـبب عدم تطابق مركزي الشـحنة الموجبة والسالبة التي يحملها.

ولذلك يستخدم:

1- في دراســة التركيب البلوري للبلورات المغناطيســية حيث يتفاعل النيوترون بســبب عزمه المغناطيســي هو والكترونات هذه البلورات ((ويكون ذروات peaks اضــافية تســمى الذروات المغناطيســية ومنها يمكن دراســة طريقة توزيع العزوم المغناطيســية للالكترونات)) فضـلاً عن تفاعله هو ونوى الذرات.
اما في البلورات غير المغناطيسـية, حيث تصـبح محصـلة العزم المغناطيسـي 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 Å باتجاه البلورة بزاوية 20.3° مع المستوى الذري.

$2d \sin\theta = n\lambda$ $\qquad$ $\lambda = 1.54$ Å

$2d \sin 20.3° = 1 * 1.54$ $\qquad$ $\theta = 20.3°$

$$d = \frac{1.54}{2\sin 20.3°} = \frac{1.54}{2\times 0.3469} = 2.22\ \text{Å}$$

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

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

$\lambda = 0.58$ Å $\qquad$ & $\theta = 9.5°$

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

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

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

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

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

V= $a^3 = 0.52^3$

مثال: احسب زاوية براك للمستويات (111) لبلورة مكعب ثابت الشبيكة لها a=3.57 Å تم اسقاط اشعة سينية عليها بطول موجي 0.54 Å .

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

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

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

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

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

$$\theta = 7°\ 32'$$

مثال: يتبلور الرصــاص بشــكل مكعب متمركز الأوجه FCC، ثابت الشــبيكة له a=4.93 Å . احســب زاوية براك للمستويات (111) و (110) اذا سقطت على البلورة اشعة سينية بطول موجي 0.152 nm .

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

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

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

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

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

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

مثال: اوجد قيمة ثابت الشــبيكة a لبلورة مكعبة اذا كان الطول الموجي للاشــعة الســينية المســتخدمة يساوي 1.54 Å وزاوية براك $11.1°$ للرتبة الأولى للمستوي (110) .

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

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

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

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

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

$$a = \frac{1.54\ \text{Å}}{2\sin(11.1)}\sqrt{1^2+1^2+0^2}$$ للمستوي (110)

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

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

الجواب:

$$d = 1.181\ \text{Å}$$
$$\lambda = 1.540\ \text{Å}$$

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

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

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

ومن الجدير بالذكر ان n يجب ان تكون عدد صحيح integer وهنا نلاحظ بان اقصى 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 شبيكة BCC . عند استخدم إشعاع أحادي اللون (احادي الطول الموجي) 0.0711 نانومتر. علماً ان نصف القطر الذري (r) = 0.1249 نانومتر.

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

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

$$2d_{310}\sin\theta = n\lambda$$

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

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

$\boldsymbol{\theta = Bragg\ angle}$ زاوية براك

$\boldsymbol{2\theta = Diffraction\ angle}$ 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) .

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

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

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

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

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 0.0711 = λ نانومتر ، احسب (أ) المسافة البينية d (فسحة السطوح) لهذه المجموعة من المستويات، و (ب) نصف القطر الذري لذرة الروديوم.

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

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

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

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

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

<u>واجب بيتي:</u>

يتبلور الكاربون بتركيبين هما الماس، للماس تركيب fcc وثابت الشبكية له a=3.57 Å . اذا علمت ان كثافة الماس $3510\ Kg/m^3$ ، فاحسب عدد ذرات الكاربون في خلية الوحدة للماس، علماً بأن الوزن الجزئي للكاربون هو (12.01).

الجواب: خلية الماس تحوي 8 ذرات

1- يتبلور النحاس بتركيب fcc فاذا 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 اذا كانت زاوية براك $\theta = 30^\circ$ لرتبة الانعكاس الأولى n=1 للمستوي (111) . اذا كان الطول الموجي للاشعة السينية المستخدمة يساوي 2 Å .

<u>الطرق التجريبية للحيود: (طريقة لاوي ، طريقة البلورة الدوارة ، طريقة المسحوق)</u>

توجد اكثر من عشر طرائق تجريبية مختلفة في دراسة التماثل والتركيب البلوري وغيرها من الامور المتعلقة بعلم البلورات من حيود الاشعة السينية وان 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 وايزينبرك

ولكن هناك ثلاث طرق رئيسية متميزة عن بعضها البعض ومصممة أساساً بموجب الكميات الرئيسية وهي λ , θ اي انه في كل طريقة للحيود يجب ان يكون هناك ربط مناسب بين هذه الكميات للحصول على تداخل تقوية للاشعة المنعكسة ، حيث ان سقوط اشعة سينية ذات أطوال موجية معينة عل بلورة بزاوية سقوط ما لا يعني بالضرورة حصول حيود من تلك البلورة. ان اية طريقة لحيود الاشعة 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 فسحة 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 وتنبعث 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:

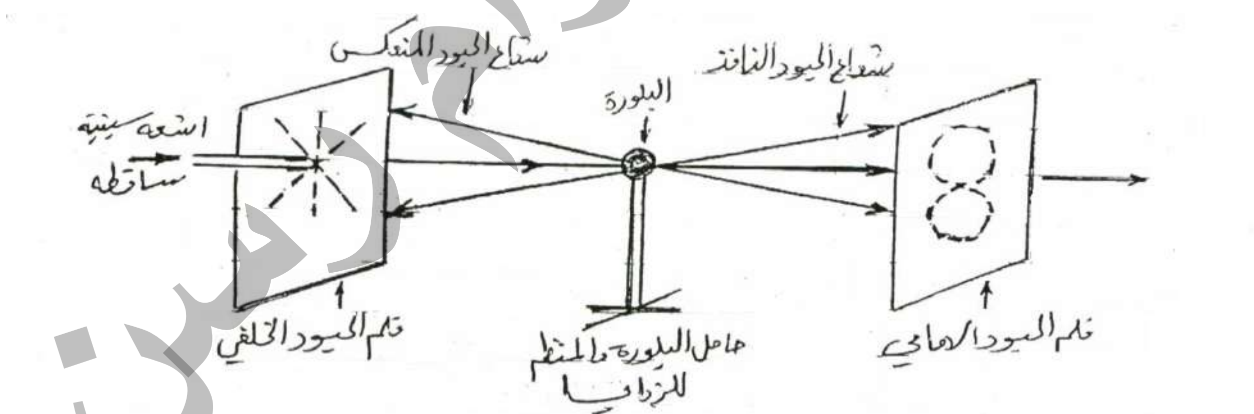
✓ اما البقع المتكونة عل اللوح الفوتوغرافي لبلورة معروف تركيبها البلوري فيمكن الاستدلال منها على تماثل البلورة والاتجاهات البلورية الموازية والعمودية على اتجاه سقوط الاشعة.

✓ 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 أخر 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 شبيكة او تركيب بلوري لبلورة غير معروفة التركيب؟

الجواب:

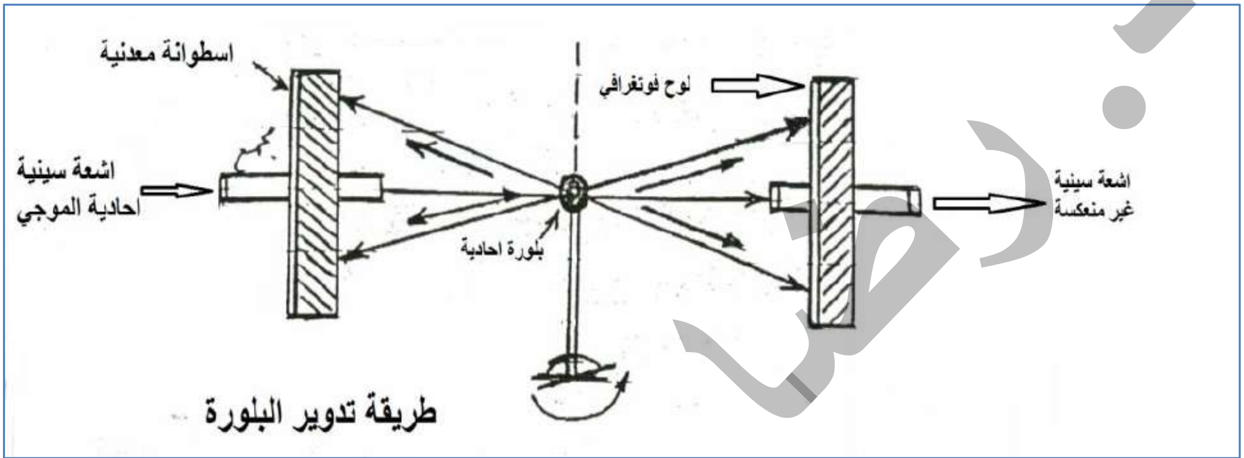
لا يمكن استخدام طريقة لاوي لتعيين احداثيات شبيكة او تركيب بلوري لبلورة غير معروفة التركيب بسبب المدى الواسع لقيم λ حيث ان البقعة الواحدة تمثل عدة انعكاسات اي يمكن لمجاميع من السطوح المتوازية ذات فسح متباينة ان تعكس آنياً عدة اطوال موجية لعدة قيم للرتبة. وبذلك يتعذر اعتبار شدة بقعة ما على الفلم ممثلة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

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

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 .

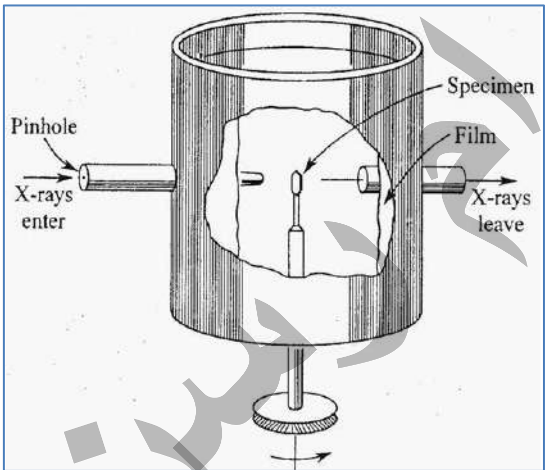
تستخدم طريقة تدوير البلورة للحالات التالية:

- يستفاد من طريقة تدوير البلورة لتعيين التركيب البلوري.
- تنحصر فائدتها في تعيين اطوال محاور شبيكة 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 .



طريقة تدوير البلورة

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 للاسطوانة 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 وfذلك فان (θ,λ) يحققان قانون براك

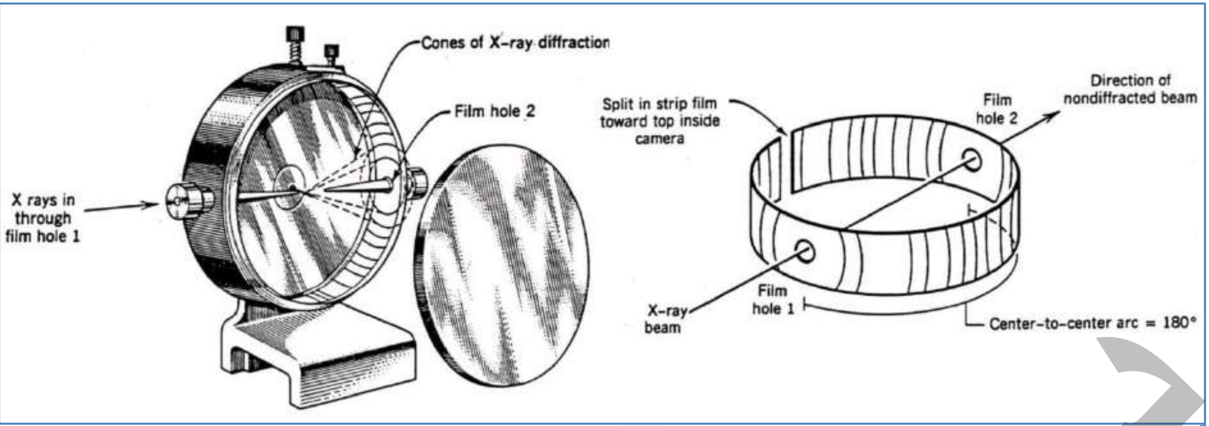
,وعند تحقيق قانون براك فان الحزمة الحايدة تنفذ من البلورة وهكذا تظهر البقع على الفلم لتسجيل نمط الحيود للاتجاهات المختلفة .

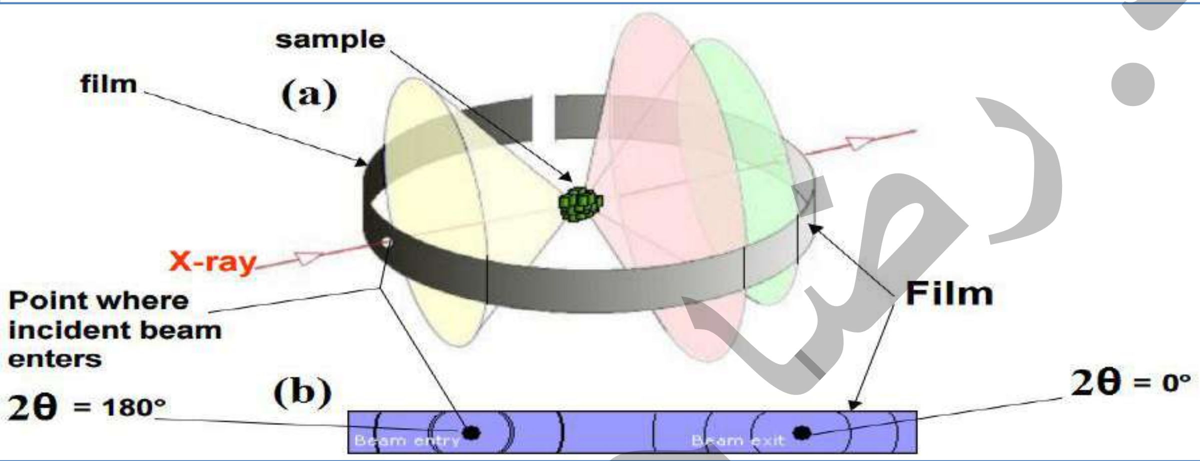
طريقة المسحوق (ديباي – شيرر) Powder method

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 الدوارة حول جميع المحاور الممكنة وليس حول محور واحد.

❖ وبما ان اتجاه الانعكاسات متساو في جميع الاتجاهات تقريبا لذا فان الحزمة المحادة تكون مخروطا محوره باتجاه الشعاع الساقط.

❖ يبين الشكل مخاريط من الشعاع المحاد. يبين الشكل نمط الحيود على غشاء تصويري مسطح. ان خط الحيود ذا الزاوية الصغيرة 2ɵ 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 نسبيا (الحجم 1 mm^3) من بعض المواد.
✓ هذه الطريقة مفيدة جدا في الحالات تعين ثوابت البلورة مثل ايجاد قيم (d) للسطوح المختلفة للمسحوق
✓ تستخدم في دراسة تغيير الطور للمواد

الشبيكة المقلوبة (Reciprocal lattice):

أن نظرية الشبيكة 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 والاستطاره وكذلك يمكن استعمال مفهوم الشبيكه المقلوبة في تفسير نظرية الحزم Band theory .

أن حيود الاشعه السينيه تنتج من أستطارتها من الذرات الواقعة ضمن اي مجموعة من المستويات المتوازية في البلوره ، فعليه من الصعب عمليا تعقب معرفة مصدر كل استطاره وذلك بسبب التداخل بين المستويات في البلوره ولمعرفة مصدر كل استطاره يمكن استخدام الشبيكة المقلوبة واظهار كل مجموعة من المستويات في البلوره بدلالة نقطة يطلق عليها بنقطة الشبيكة 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 للشبيكة المقلوبة والذي يعد مكافئاً لشكل وصورة نموذج الحيود (البقع السوداء) التي تظهر على الفلم الفوتوغرافي.
تعد الشبيكة المقلوبة من الناحية الرياضية عبارة عن تحويلات فورير (Fourier Tansformation) للشبيكة الحقيقية. تعتمد تحويلات فورير 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 فورير هنا وكذلك يمكن كتابة دالة فورير بالشكل:

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

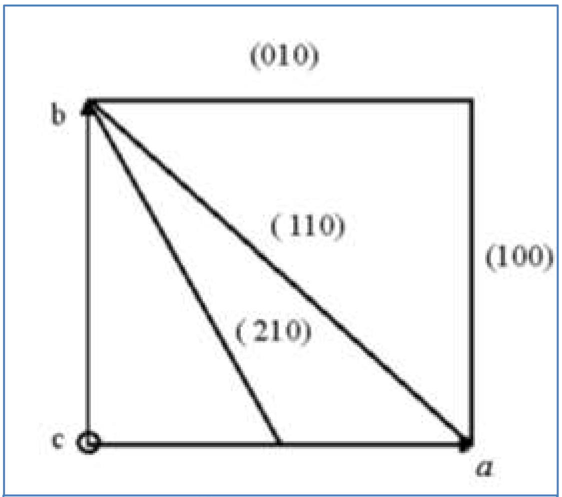
وقد أستطاع فورير أن يجزء هذه الداله الى مركبتين الاولى تدعى بالمركبه الجيبية $\sin(\alpha r)$ والثانية تدعى بمركبه جيبي تمام $\cos(\alpha r)$ ويمكن كتابة الداله بالصيغة$\exp[i(\alpha r)]$. حيث $\alpha = \frac{2\pi n}{d}$
وتمثل n عددا صحيحا و d يمثل المسافة البينية بين المستويات؟

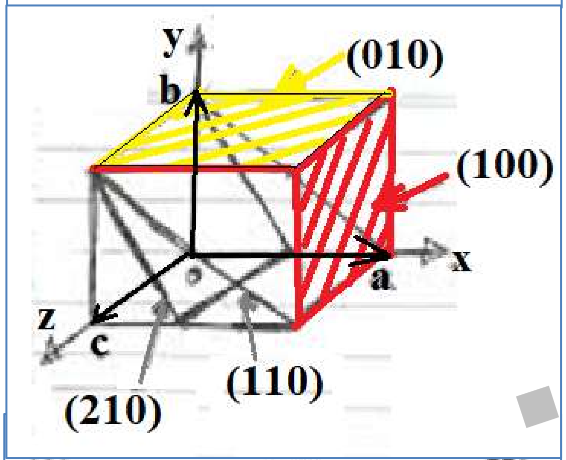
أن الداله النهائية والتي لها علاقة بالشبيكة المقلوبه هي:

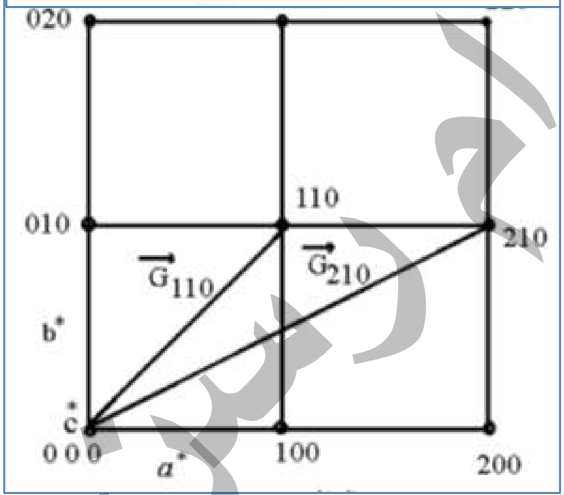
$$F(r) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(n) \exp\left(\frac{2\pi n i r}{d}\right) dr$$

في الحقيقة جاءت تسمية الشبيكة 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 الشبيكة المقلوبة$(\vec{G})$ ويكتب رياضياً بالصيغة التالية: $|\vec{G}| = \frac{A}{d_{hkl}}$ حيث A يمثل عامل مقياس الرسم وقيمته اما 1 او 2π. في فيزياء الحالة الصلبة سوف نستخدم $A = 2\pi$.







<u>طريقة بناء الشبيكة المقلوبة:</u>

كل مجموعة من المستويات المتوازية في بلورة تُمثل بمتجهات من نقطة الأصل لشبيكة 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 الشبيكة المقلوبة لبلورة.

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

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

- أرسم من نقط الاصل المشتركة 0 إحداثيات البلورة.
- جد قيمة $\frac{1}{d_{hkl}}$ لكل مجموعة من المستويات المتوازية.
- أرسم من نقطة الاصل 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 الشبيكة .

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

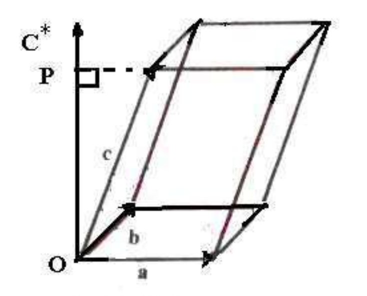
وسوف نستخدم في فيزياء الحالة الصلبة $A = 2\pi$

أي ان متجه الشبيكة المقلوبة هو $$|\vec{G}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$$

<u>الشبيكة المقلوبة:</u> هي عدد غير محدود من نقاط مرتبه بنظام وبشكل دوري في فضاء ثلاثي الابعاد. بحيث ان طول المتجه بين نقطة الأصل واي نقطة في الشبيكة المقلوبة تتناسب عكسياً مع المسافة البينية d في مجموعة من المستويات المتوازية في شبيكة حقيقية. تقاس أطوال المتجهات في الشبيكة المقلوبة بمقلوب وحدات المتجهات في الشبيكة المباشره (الحقيقية) : (cm^{-1}) أو (m^{-1}) أو ($Å^{-1}$) .

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

Reciprocal lattice vectors متجهات الشبيكة المقلوبة



الشكل (3-6)

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

لاشتقاق العلاقة بين [المتجهات الأساسية للشبيكة الحقيقية (المباشرة) $\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$] وبين [متجهات الشبيكة المقلوبة $\vec{a^*}$ $\vec{c^*}$ $\vec{b^*}$ (الشبيكة 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 بين المساحة والحجم تعطى بالصيغة: $\frac{1}{d_{hkl}} = \frac{Area \text{ المساحة}}{Volume \text{ الحجم}}$

حجم خلية الوحدة في الشبيكة البلورية العادية (الحقيقية – المباشرة) $\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}$

يمكن إعادة كتابة المعادلة السابقة $\left(|\vec{G}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}}\right)$ بدلالة متجه الشبيكة المقلوبة :

البسط يمثل $\vec{b} \;..\times..\; \vec{a} \;....\; \times ... \vec{c} \;..\times...\; \vec{b} \;....\; \vec{a}$

$$\underbrace{\vec{b}\times\vec{c}}_{\vec{a^*}} \qquad \underbrace{\vec{c}\times\vec{a}}_{\vec{b^*}} \qquad \underbrace{\vec{a}\times\vec{b}}_{\vec{c^*}}$$

$$\overrightarrow{G_{100}} = 2\pi\frac{\vec{b}\times\vec{c}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}} \quad ...... \quad \vec{a^*} = 2\pi\frac{\vec{b}\times\vec{c}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}} \quad --------- \quad \vec{a^*} \perp b\times c$$

$$\overrightarrow{G_{010}} = 2\pi\frac{\vec{c}\times\vec{a}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}} \quad ...... \quad \vec{b^*} = 2\pi\frac{\vec{c}\times\vec{a}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}} \quad --------- \quad \vec{b^*} \perp c\times a$$

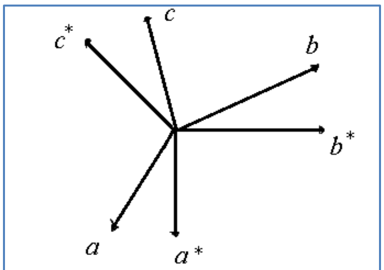
$$\overrightarrow{G_{001}} = 2\pi\frac{\vec{a}\times\vec{b}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}} \quad ...... \quad \vec{c^*} = 2\pi\frac{\vec{a}\times\vec{b}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}} \quad --------- \quad \vec{c^*} \perp a\times b$$

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

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

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

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



العلاقة بين المحاور الاساسية للشبيكة الحقيقية والمحاور الاساسية للشبيكة المقلوبة

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

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

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

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

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

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

أي ان لكل بلورة شبيكتين ترافقانها وهما الشبيكة البلورية (الحقيقية- المباشرة) والشبيكة المقلوبة. وعندما نستقبل الاشعة السينية بعد حيودها عَبر البلورة فاننا نحصل على صورة تعتبر مسحاً للشبيكة المقلوبة وخصائصها.
أي اننا اذا تخيلنا اننا ننظر مباشـــرة الى البلورة لنبحث عن ترتيب الذرات فيها ، فان هذا يُعد تعاملا مع البنية البلورية الفعلية (الحقيقية - المباشرة) بينما نموذج الحيود يعتبر خريطة لمقلوب الشبيكة للبلورة.
أي ان الصــورة التي نحصــل عليها بالميكرســكوب الالكتروني هي خريطة للتركيب البلوري الحقيقي. وبالمقابل صورة الفلم الفوتوغرافي للاشعة السينية بعد الحيود هي صورة للشبيكة المقلوبة.

شرط الحيود لأقصى شدة :-

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

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

وتتحقق هذه المعادلات الثلاثة آنياً اذا كان التغير الاتجاهي لمتجه جبهة الموجة $\Delta\vec{K}$ مســـاوياً لمتجه الشبكية المقلوبة $\mathbf{G_{hkl}}$ وبذلك لحصول على اقصى شدة .

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

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

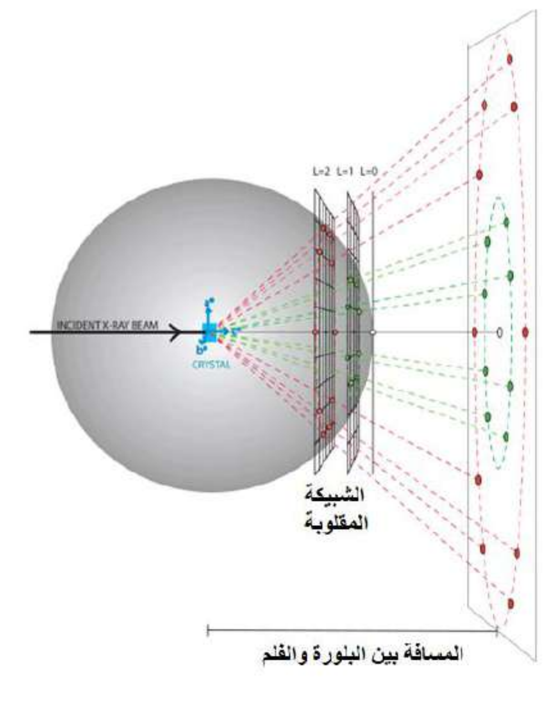
ان المعادلة اعلاه تعني ان المتجهين متســاويين في القيمة والاتجاه (اطوالهما متســاوية واحداهما يوازي الآخر وان كليهما متعامدان على الســطح hkl في البلورة) . وللحصـــول على المعادلة اعلاه نعمل على تكافؤ شرط براك ولاوي يمكن اثبات ذلك كما يلي :

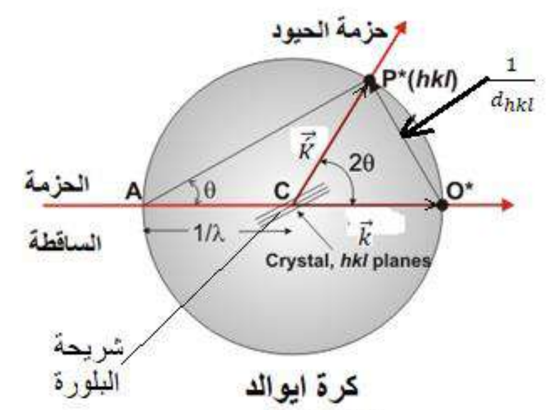
$\vec{k}$ = متجه الموجة الساقطة　　　$\vec{k}'$= متجه الموجة المستطيرة

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

قيمة مطلقة تساوي الاطوال .

البناء الهندسي لكرة ايوالد:





كرة ايوالد

كرة الانعكاس

CP=CO+OP

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

- استطاع العالم ايوالد ربط فكرة الشبيكة المقلوبة مع فكرة كرة الانعكاس التي أطلق عليها بكرة ايوالد لتفسير النتائج التجريبية لحيود الاشعة السينية.
- يمكن معرفة المستوي الذي يعمل على استطارة الاشعة السينية من معرفة اتجاه وقيمة الطول الموجي للأشعة الساقطة.
- نفرض ان النقاط المرسومة في الشكل تمثل نقاط في الشبيكة 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 الشبيكة 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، فاذا 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 يُكون 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 الشبيكة المقلوبة حيث يتحقق قانون براك.

$$G = OP = \frac{1}{d_{hkl}} = \frac{G}{2\pi} \qquad k = CO = \frac{1}{\lambda} \qquad k' = CP$$

متجه الموجة $= k = \frac{2\pi}{\lambda}$ $\qquad$ $\vec{k}$ = متجه الموجة الساقطة $\qquad$ $\vec{k'}$= متجه الموجة المستطيرة

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

$$\vec{G}_{hkl} = \Delta\vec{k} \qquad \vec{k'} = \vec{k} + \vec{G}_{hkl}$$

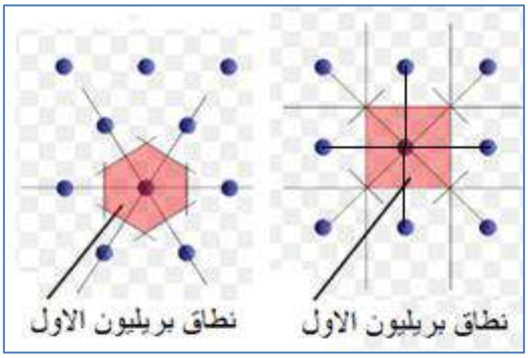
بتربيع طرفي المعادلة (1) وللحيود المرن $\vec{k'} = \vec{k}$ (لا تغير بالطاقة)

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

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

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

مناطق بريليون Brillouin zones:



المنطقة المحيطة بنقطة شبيكة مقلوبة (الشبيكة المعكوسة) في الفضاء المقلوب (فضاء فورير او فضاء متجه الموجة **k**) تسمى منطقة او نطاق بريليون الأول.

نطاق بريليون الأول: هو أصغر حجم للحيز المحيط او المتمركز حول احدى نقاط الشبيكة المقلوبة والمحددة بمجموعة من السطوح التي تكون منصفة وعمودية على متجهات الشبيكة المقلوبة التي تربط تلك النقطة بالنقاط المجاورة بها كما في الشكل.

لتحديد نطاق بريليون الاول حول نقطة شبيكة 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:

$$\mathrm{V}^* = \mathbf{V}_{BZ} = \overrightarrow{\boldsymbol{a}^*} \cdot \overrightarrow{\boldsymbol{b}^*} \times \overrightarrow{\boldsymbol{c}^*} = \frac{(2\pi)^3}{\mathbf{V}}$$

حيث ان V هو حجم خلية الوحدة الاولية للشبيكة الحقيقية او المباشرة.

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

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

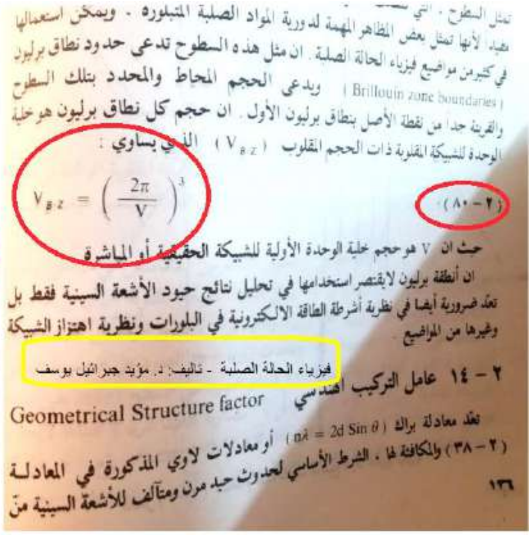
للحصول على شرط الحيود $\mathbf{G^2{}_{hke}} = 2\vec{\boldsymbol{G}}_{\boldsymbol{hkl}}.\,\vec{\boldsymbol{k}}$

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: $\mathrm{V_{BZ}} = \left(\frac{2\pi}{\mathrm{V}}\right)^3$ الصح: $\mathbf{V_{BZ}} = \frac{(2\pi)^3}{\mathbf{V}}$ او $\mathbf{V_{BZ}} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$


تمثل السطوح ، التي ... لدورية المواد الصلبة المتبلوره . ويمكن استعمالها
مفيدا لأنها تمثل بعض الظاهر المهمة في كثير من مواضيع فيزياء الحالة الصلبة . ان مثل هذه السطوح تدعى حدود نطاق برليون (Brillouin zone boundaries) ويدعى الحجم المحاط والمحدد بتلك السطوح والقريبة جدا من نقطة الأصل بنطاق برليون الأول . ان حجم كل نطاق برليون هو حجم خلية الوحدة للشبيكة المقلوبة ذات الحجم المقلوب (V_{BZ}) الذي يساوي :

$$V_{BZ} = \left(\frac{2\pi}{V}\right)^3 \quad (٢-٨٠)$$

حيث ان V هو حجم خلية الوحدة الأولية للشبيكة الحقيقية أو المباشرة

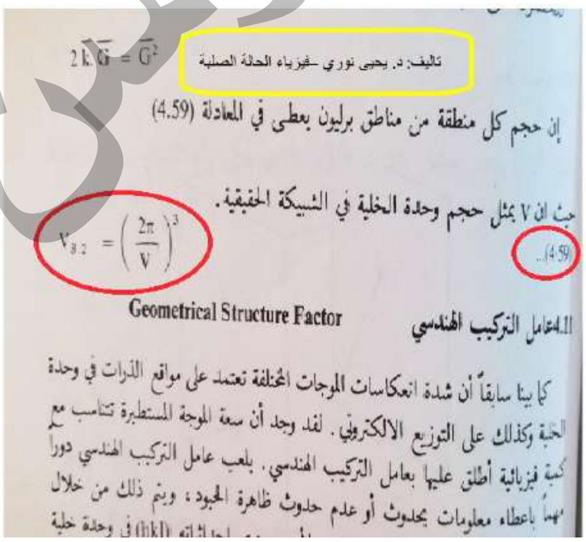
ان أنطقة برليون لايقتصر استخدامها في تحليل نتائج حيود الأشعة السينية فقط بل تعد ضرورية أيضا في نظرية أشرطة الطاقة الالكترونية في البلورات ونظرية اهتزاز الشبيكة وغيرها من المواضيع .

فيزياء الحالة الصلبة - تاليف: د. مؤيد جبرائيل يوسف

٢ - ١٤ عامل التركيب الهندسي Geometrical Structure factor

تعد معادلة براك ($n\lambda = 2d \sin\theta$) أو معادلات لاوي المذكورة في المعادلة (٢-٣٨) والمكافئة لها . الشرط الأساسي لحدوث حيد مرن ومتآلف للأشعة السينية من

١٣٦


$2\vec{k}.\vec{G} = \vec{G}^2$

تاليف: د. يحيى نوري –فيزياء الحالة الصلبة

إن حجم كل منطقة من مناطق برليون يعطى في المعادلة (4.59)

$$V_{BZ} = \left(\frac{2\pi}{V}\right)^3 \quad ..(4.59)$$

حيث ان V يمثل حجم وحدة الخلية في الشبيكة الحقيقية.

4.11 العامل التركيب الهندسي Geometrical Structure Factor

كما بينا سابقاً أن شدة انعكاسات الموجات المختلفة تعتمد على مواقع الذرات في وحدة الخلية وكذلك على التوزيع الالكتروني. لقد وجد أن سعة الموجة المستطيرة تتناسب مع كمية فيزيائية أطلق عليها بعامل التركيب الهندسي. يلعب عامل التركيب الهندسي دوراً مهماً باعطاء معلومات بحدوث أو عدم حدوث ظاهرة الحيود؛ ويتم ذلك من خلال ... (hkl) في وحدة خلية

مثال: اوجد المتجهات الأساسية للشبيكة المقلوبة لشبيكة مكعب بسيط SC ؟

مثال: اثبت ان الشبيكة المقلوبة لشبيكة مكعب بسيط هي ايضاً شبيكة مكعب بسيط طول ضلعه $\frac{2\pi}{a}$

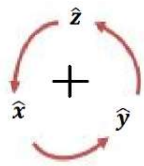
$$\vec{a} = a\hat{x} \qquad \vec{b} = a\hat{y} \qquad \vec{c} = a\hat{z}$$

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

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

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

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



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

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

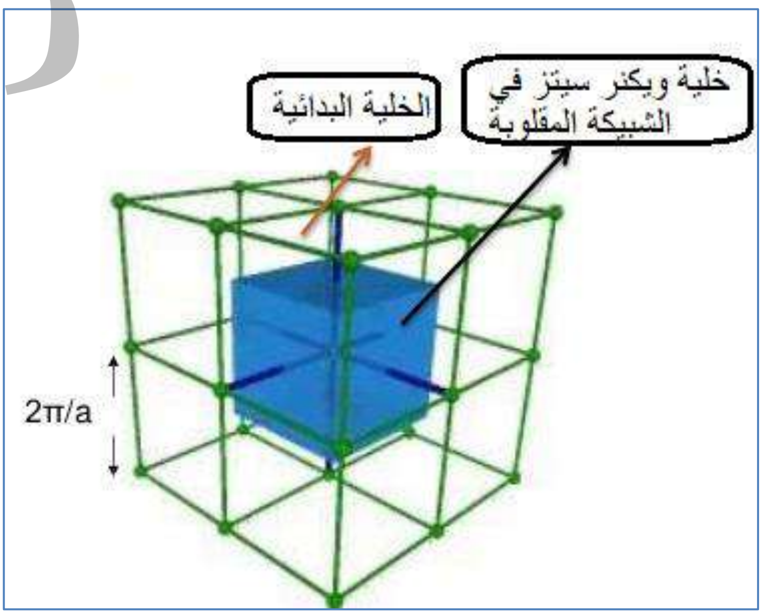
$$\vec{c^*} = 2\pi\frac{\vec{a}\times\vec{b}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}} = \frac{2\pi}{a^3}(\vec{a}\times\vec{b}) = \frac{2\pi}{a^3}(a\hat{x}\times a\hat{y}) = \frac{2\pi a^2}{a^3}(\hat{x}\times\hat{y}) = \frac{2\pi}{a}\hat{z}$$

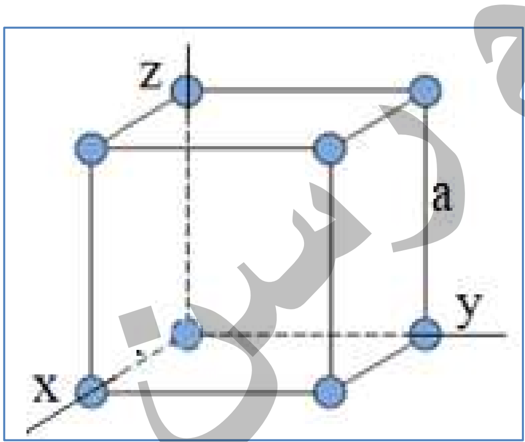
$$\vec{c^*} = \frac{2\pi}{a}\hat{z}$$

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

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

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



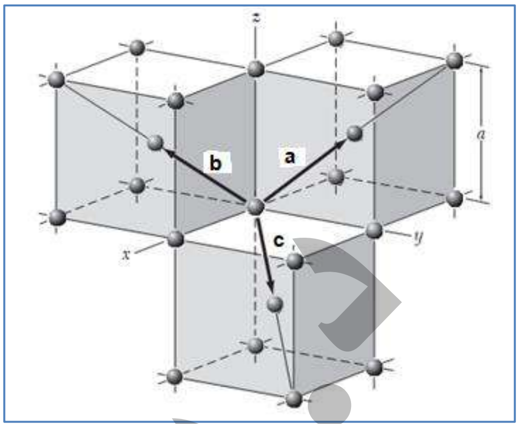


الشبيكة المقلوبة (الشبيكة المعكوسة)

الشبيكة البلورية (الحقيقية او المباشرة)

مثال: اوجد المتجهات الأساسية للشبيكة المقلوبة لشبيكة مكعب متمركز الجسم BCC ؟

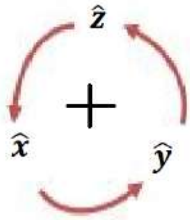
مثال: اثبت ان الشبيكة المقلوبة لمكعب BCC هي شبيكة مكعب FCC ؟



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

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

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

وبنفس الطريقة يمكن اثبات

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

انتهى الجواب

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

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

المتجهات الانتقالية الأساسية لشبيكة مكعب BCC

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

حجم خلية الوحدة في الشبيكة الحقيقية $V = |\vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c}| = \frac{1}{2}a^3$

والمتجهات الانتقالية للشبيكة المقلوبة لها ستكون شبيكة مقلوبة لمكعب FCC

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

<u>ســـؤال :</u> اثبت ان حجم خلية الوحدة المقلوبة V^* شـــبيكة مقلوبة FCC

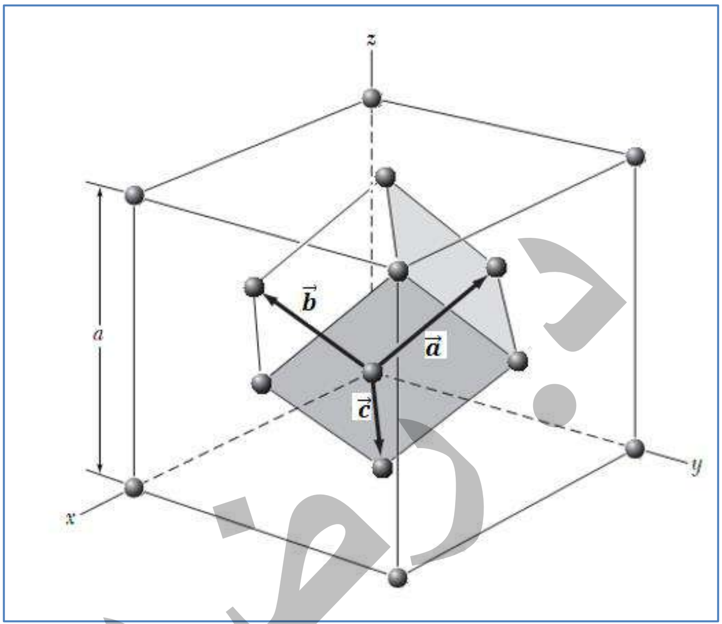
$$V^* = \vec{a^*} \cdot \vec{b^*} \times \vec{c^*} = 2\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$$

طبعا يجب اجراء الضرب الاتجاهي اولاًوبعدها يتم اكمال الضرب العددي

$$\vec{a^*} = \frac{2\pi}{a}(\hat{y} + \hat{z}) \quad \vec{b^*} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{z}) \quad \vec{c^*} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y})$$
$$V^* = \vec{a^*} \cdot \vec{b^*} \times \vec{c^*} = \left(\frac{2\pi}{a}\hat{y} + \frac{2\pi}{a}\hat{z}\right) \cdot \left(\frac{2\pi}{a}\hat{x} + \frac{2\pi}{a}\hat{z}\right) \times \left(\frac{2\pi}{a}\hat{x} + \frac{2\pi}{a}\hat{y}\right)$$
$$(\vec{b^*} \times \vec{c^*}) = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{2\pi}{a} & 0 & \frac{2\pi}{a} \\ \frac{2\pi}{a} & \frac{2\pi}{a} & 0 \end{vmatrix}$$
$$(\vec{b} \times \vec{c}) = \left|\begin{array}{ccc|ccc} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} & \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{2\pi}{a} & 0 & \frac{2\pi}{a} & \frac{2\pi}{a} & 0 & \frac{2\pi}{a} \\ \frac{2\pi}{a} & \frac{2\pi}{a} & 0 & \frac{2\pi}{a} & \frac{2\pi}{a} & 0 \end{array}\right.$$
$$\vec{b} \times \vec{c} = \left(0 - \frac{4\pi^2}{a^2}\right)\hat{x} + \left(\frac{4\pi^2}{a^2} - 0\right)\hat{y} + \left(\frac{4\pi^2}{a^2} - 0\right)\hat{z}$$
$$= \frac{-4\pi^2}{a^2}\hat{x} + \frac{4\pi^2}{a^2}\hat{y} + \frac{4\pi^2}{a^2}\hat{z}$$
$$V^* = \vec{a^*} \cdot \vec{b^*} \times \vec{c^*} = \left(\frac{2\pi}{a}\hat{y} + \frac{2\pi}{a}\hat{z}\right) \cdot \left(\frac{-4\pi^2}{a^2}\hat{x} + \frac{4\pi^2}{a^2}\hat{y} + \frac{4\pi^2}{a^2}\hat{z}\right)$$
$$V^* = \frac{8\pi^3}{a^3} + \frac{8\pi^3}{a^3} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 + \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 = 2\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$$

<u>مثال:</u> اوجد المتجهات الأساسية للشبيكة المقلوبة لشبيكة مكعب متمركز الاوجه FCC ؟

<u>مثال:</u> اثبت ان الشبيكة المقلوبة لمكعب FCC هي شبيكة مكعب BCC ؟



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

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

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

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

حجم الخلية الاولية لشبيكة مكعب متمركز الاوجه تم اثباتها في الفصل الاول

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

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

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

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

$$(\vec{b}\times\vec{c}) = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{a}{2} & 0 & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & 0 \end{vmatrix} \qquad (\vec{b}\times\vec{c}) = \left|\begin{matrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{a}{2} & 0 & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & 0 \end{matrix}\right|\begin{matrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{a}{2} & 0 & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & 0 \end{matrix}$$

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

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

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

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

وبنفس الطريقة يمكن اثبات

$$\overrightarrow{b^*} = \frac{2\pi}{\mathrm{a}}(\hat{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}}) \qquad \overrightarrow{c^*} = \frac{2\pi}{\mathrm{a}}(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{z}})$$

انتهى الجواب

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

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

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

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

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

المتجهات الانتقالية الأساسية لشبيكة مكعب FCC

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

$V = \left|\vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c}\right| = \frac{1}{4}a^3$ حجم خلية الوحدة في الشبيكة الحقيقية

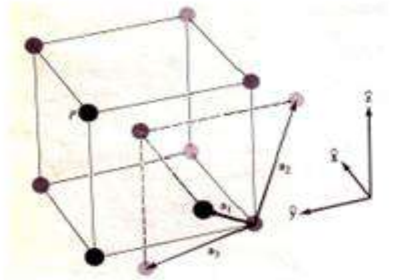
والمتجهات الانتقالية للشبيكة المقلوبة لها ستكون شبيكة مقلوبة لمكعب BCC

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

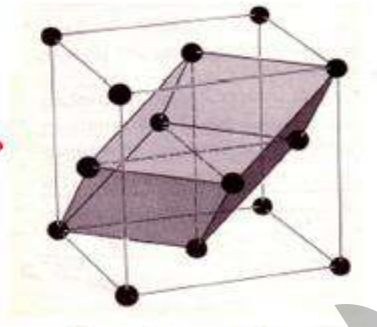
<u>سؤال H.W :</u> اثبت ان حجم خلية الوحدة المقلوبة V^* لشبيكة مقلوبة BCC

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

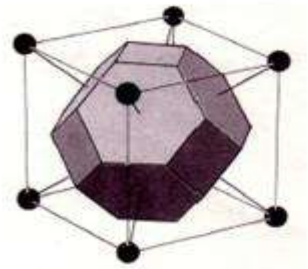
طبعا يجب اجراء الضرب الاتجاهي أولاً وبعدها يتم اكمال الضرب العددي



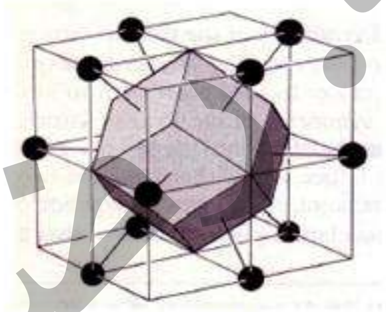
الشبيكة البلورية bcc
الشبيكة المباشرة الحقيقية



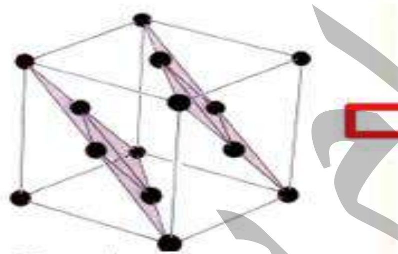
الشبيكة المقلوبة fcc



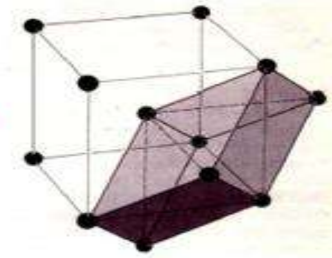
خلية ويكنر – سيتز
الشبيكة البلورية bcc
الشبيكة المباشرة الحقيقية



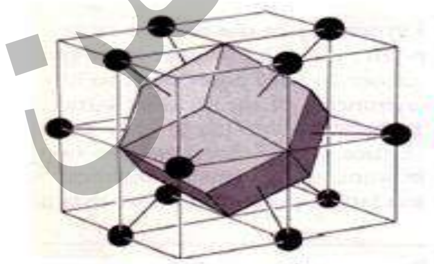
منطقة بريليون
في الشبيكة المقلوبة



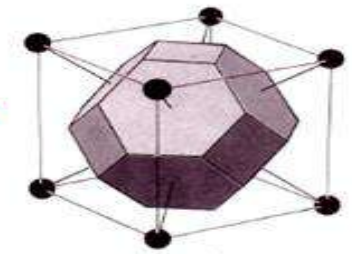
الشبيكة البلورية fcc
الشبيكة المباشرة الحقيقية



الشبيكة المقلوبة bcc



خلية ويكنر – سيتز
الشبيكة البلورية fcc
الشبيكة المباشرة الحقيقية



منطقة بريليون
في الشبيكة المقلوبة

مثال: ايجاد فسحة السطوح d_{hkl} (الفسحة البينية) باستعمال افكار الشبيكة المقلوبة ؟

يمكن ايجاد (d_{hke}) باستخدام مفاهيم الشبيكة المقلوبة مثل المعادلات :

$$\vec{G}_{hkl}=\left(\frac{2\pi}{d_{hkl}}\right)\vec{n}\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots 1 \qquad \vec{G}_{hkl}= ha^* + kb^* + lc^*\ldots\ldots 2$$

تمثل المعادلة 2 اي متجه في الشبيكة المقلوبة من نقطة الاصل الشبيكة الى النقطة (hkl) حيث مثلنا المستوي (hkl) بنقطة. اما المعادلة 1 فتمثل متجه الشبيكة المقلوبة حيث n وحدة متجه او متجه الوحدة. وباستخدام الضرب العددي للمعادلة 2 اي المتجه G_{hkl} بنفسه .

$$\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{G}_{hkl}= (ha^* + kb^*+ lc^*). (ha^* + kb^* +lc^*)$$
$$= hh\, a^*. a^* + hk\, a^*.b^* + hl\, a^*. c^* + \ldots$$
$$kh\, b^*. a^* + kk\, b^*. b^*+ kl\, b^*.c^* +$$
$$lh\, c^*. a^* + lk\, c^*. b^* + ll\, c^*.c^*$$

نستخدم العلاقة

$$a^*. b^* = a^*b^* \cos \gamma^*$$
$$b^*.c^* = b^* c^* \cos \alpha^*$$
$$c^*. a^* = c^* a^* \cos \beta^*$$

نرتب المعادلة ونستخدم المعادلة لنحصل على:

$$\mathbf{G^2_{hke} = h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2hka^* b^* \cos \gamma^*+ 2klb^* c^* \cos\alpha^* + 2lh\, c^* a^* \cos \beta^*}$$

ان المعادلة الاخيرة تمثل تعبيراً عاماً للنظام البلوري الثلاثي الميل والذي فيه لا تتساو الاضلاع ولا الزوايا. وايضاً **ينطبق على جميع الأنظمة البلورية الأخرى**.

$a^* = b^* = c^*$ والزوايا $\gamma^* = \alpha^* = \beta^* = 90^o$

$$G^2_{hkl} = h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2}$$

$$\& \ a^* = \frac{2\pi}{a} \quad \& \ |\vec{G}| = G = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$$

$$G^2_{hke} = (h^2 + k^2 + l^2)a^{*2}$$

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

$$\frac{4\pi 2}{d_{hkl}^2}= (h^2 + k^2 + l^2)\, \frac{4\pi 2}{a^2}$$

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

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

مثال: برهن عل ان متجه الشبيكة المقلوبة $\overrightarrow{G_{hkl}}$ يكون عمودياً على المستوي (hkl)؟

الجواب:

لإثبات أن متجه الشبكة المقلوبة $\overrightarrow{\boldsymbol{G}_{\boldsymbol{hkl}}} = h\overrightarrow{a^*} + k\overrightarrow{b^*} + l\overrightarrow{c^*}$ عمودي على المستوي (hkl).

يكفي ان نثبت ان $\overrightarrow{G_{hkl}}$ 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 ناخذ 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 لهذيين المتجهين مع متجه الشبكة المقلوبة $\overrightarrow{G_{hkl}}$ يساوي صفر، فان متجه الشبكة المقلوبة $\overrightarrow{G_{hkl}}$ يكون عمودياً عل سطح البلورة (hkl)

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

$$\vec{\mathbf{G}} \cdot \left(\frac{\vec{a}}{h} - \frac{\vec{b}}{k}\right) = \left(h\overrightarrow{a^*} + k\overrightarrow{b^*} + l\overrightarrow{c^*}\right) \cdot \left(\frac{\vec{a}}{h} - \frac{\vec{b}}{k}\right)$$

$$= \frac{h}{h}(\overrightarrow{a^*} \cdot \vec{\boldsymbol{a}}) - \frac{h}{k}(\overrightarrow{a^*} \cdot \vec{b}) + \frac{k}{h}(\overrightarrow{b^*} \cdot \vec{a}) - \frac{k}{k}(\overrightarrow{b^*} \cdot \vec{b}) + \frac{l}{h}(\overrightarrow{c^*} \cdot \vec{a}) - \frac{l}{k}(\overrightarrow{c^*} \cdot \vec{b})$$

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

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

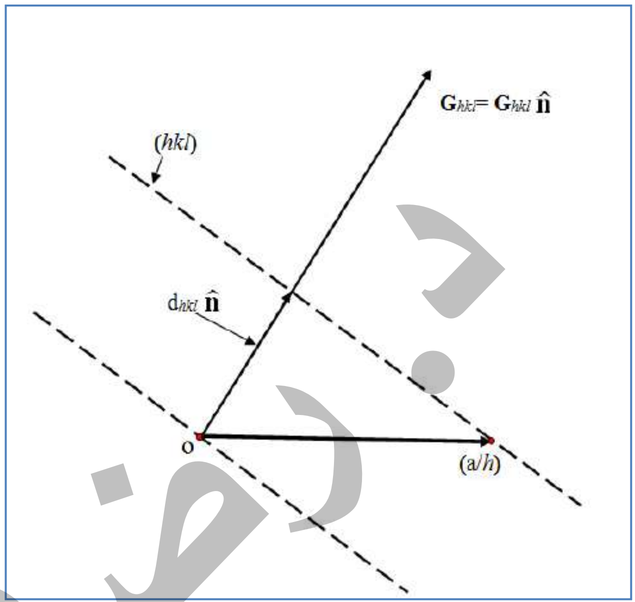
$\overrightarrow{\boldsymbol{a}^*} \cdot \vec{\boldsymbol{c}} = \boldsymbol{0}$ $\overrightarrow{\boldsymbol{b}^*} \cdot \vec{\boldsymbol{c}} = \boldsymbol{0}$ $\overrightarrow{\boldsymbol{c}^*} \cdot \vec{\boldsymbol{c}} = \boldsymbol{2\pi}$

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

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

أي ان متجه الشبكة المقلوبة $\overrightarrow{G_{hkl}}$ يكون عمودياً عل سطح البلورة (hkl)

مثال: اثبت أن فسحة السطوح (المسافة البينية) المسافة بين مستويين متوازيين متعاقبين في الشبيكة تساوي $d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|}$



اذا كان $\left(\hat{\mathbf{n}} = \frac{\vec{\mathbf{G}}}{|\vec{\mathbf{G}}|} = \frac{\overrightarrow{\mathbf{G}_{hkl}}}{|\overrightarrow{\mathbf{G}_{hkl}}|}\right)$ يمثل الوحدة العمودية على المستوي، الفسحة البينية $\left(\hat{\mathbf{n}} \cdot \frac{\vec{a}}{h}\right)$ كما في موضح في الشكل.

يمكن ان نلاحظ بان كلا من $\mathbf{G}_{hkl}$ والمتجه من نقطة الأصل باتجاه المستوي (hkl) يمكن ان نعبر عنها كمضاعفات لمتجه الوحدة $\hat{\mathbf{n}}$.

معادلة المستوي (hkl)

$$d_{hkl} = \vec{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{n}} = \frac{\vec{\mathbf{a}}}{h} \cdot \frac{\overrightarrow{\mathbf{G}_{hkl}}}{|\overrightarrow{\mathbf{G}_{hkl}}|} = \vec{\mathbf{r}} \cdot \frac{\overrightarrow{\mathbf{G}_{hkl}}}{|\overrightarrow{\mathbf{G}_{hkl}}|}$$

بالنسبة لاي متجه $\vec{r}$ مقداره اكبر من d_{hkl} والمتجه $(\vec{\boldsymbol{a}}/\mathrm{h})$ $\qquad \frac{a}{h}, \frac{b}{k}, \frac{c}{l}$

$$d_{hkl} = \frac{\vec{\mathbf{a}} \cdot \overrightarrow{\mathbf{G}_{hkl}}}{h|\overrightarrow{\mathbf{G}_{hkl}}|} = \frac{\vec{\mathbf{a}} \cdot \left(h\overrightarrow{a^*} + k\overrightarrow{b^*} + l\overrightarrow{c^*}\right)}{h|\overrightarrow{\mathbf{G}_{hkl}}|}$$

$$d_{hkl} = \frac{h(\vec{\boldsymbol{a}} \cdot \overrightarrow{a^*}) + k\left(\vec{\mathbf{a}} \cdot \overrightarrow{b^*}\right) + l(\vec{\mathbf{a}} \cdot \overrightarrow{c^*})}{h|\overrightarrow{\mathbf{G}_{hkl}}|} = \frac{h(\mathbf{2\pi}) + k(\mathbf{0}) + l(\mathbf{0})}{h|\overrightarrow{\mathbf{G}_{hkl}}|}$$

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

$$d_{hkl} = \frac{\mathbf{2\pi}}{|\overrightarrow{\mathbf{G}_{hkl}}|}$$

مثال: اثبت انه لشبيكة مكعب بسيط $d^2 = \frac{a^2}{(h^2+k^2+l^2)}$ باستعمال أفكار الشبيكة المقلوبة؟

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

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

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

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

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

مثال: اثبت ان حجم منطقة بريليون الأولى $\left\{\frac{(2\pi)^3}{V_c}\right\}$ حيث V_c يمثل حجم الخلية البدائية للبلورة.

علماً ان حجم متوازي السطوح البدائي في فضاء فورير Fourier space.

يمكن استعمال المتطابقة: $(\vec{c}\times\vec{a})\times(\vec{a}\times\vec{b}) = (\vec{c}\cdot\vec{a}\times\vec{b})\vec{a}$

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

$$V_{B.Z} = \vec{a^*}\cdot(\vec{b^*}\times\vec{c^*}) = \left(2\pi\frac{\vec{b}\times\vec{c}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}}\right)\cdot\left(2\pi\frac{\vec{c}\times\vec{a}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}}\right)\times\left(2\pi\frac{\vec{a}\times\vec{b}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}}\right)$$

$$V_{B.Z} = \left\{\frac{(2\pi)^3}{(\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c})^3}\right\}\left[(\vec{b}\times\vec{c})\cdot(\vec{c}\times\vec{a})\times(\vec{a}\times\vec{b})\right]$$

$$\because (\vec{c}\times\vec{a})\times(\vec{a}\times\vec{b}) = (\vec{c}\cdot\vec{a}\times\vec{b})\vec{a}.$$

$$V_{B.Z} = \left\{\frac{(2\pi)^3}{(\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c})^3}\right\}\left[(\vec{b}\times\vec{c})\cdot(\vec{c}\cdot\vec{a}\times\vec{b})\vec{a}\right]$$

$$\vec{a} \quad \vec{b} \quad \vec{c} \quad \vec{a} \quad \vec{b}$$

$$V_c = \vec{a}\cdot\vec{b}\times\vec{c} = \vec{b}\cdot\vec{c}\times\vec{a} = \vec{c}\cdot\vec{a}\times\vec{b}$$

(حجم الخلية البدائية وهي كمية عددية)

$$V_{B.Z} = \left\{\frac{(2\pi)^3}{\{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}\}^3}\right\}\left[(\vec{b}\times\vec{c})\cdot\vec{a}\,(\vec{c}\cdot\vec{a}\times\vec{b})\right] \qquad \& \quad (\vec{b}\times\vec{c})\cdot\vec{a} = \vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})$$

$$V_{B.Z} = \left\{\frac{(2\pi)^3}{\{\vec{a}\cdot\vec{b}\times\vec{c}\}^3}\right\}\left[\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})\,(\vec{c}\cdot\vec{a}\times\vec{b})\right]$$

$$V_{B.Z} = \frac{(2\pi)^3}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}}$$

عامل تركيب الشبيكة

التشتت من الذرات:

عملية الحيود يمكن ان تقسم الى مرحلتين:

المرحلة الأولى: هي التشتت بالذرات
المرحلة الثانية هي مرحلة التداخل بين الاشعة المتشتتة.
ان المرحلتين تتميز بعضها من بعض. حين تحاط كل ذرة بالإلكترونات فالمجال الكهربائي الذي يصاحب حزمة الاشعة السينية سيؤثر في هذه الالكترونات ويسبب تعجيلها. الشحنات المعجلة تبعث الاشعاع وكذلك تفعل الكترونات الذرات وفي الواقع فأن هذه الالكترونات تمتص الطاقة من حزمة الاشعة وتشتتها في كل اتجاه، ولكن الالكترونات تُكون غيمة شحنة تحيط بالذرة وعليه عند التعامل مع تشتت الاشعة في هذه الالكترونات يجب اخذ فارق الطور بين الموجات المتشتتة من مختلف شحنات الغيمة بنظر الاعتبار.
ان شدة الحزمة المتشتتة تتناسب مع مربع قيمة المجال وعليه

$$I = |f|^2 = f_e^2 \left| \sum_j exp(i\vec{\mathbf{S}} \cdot \vec{r}) \right|^2 \quad ------ \quad 1$$

f_e هو عامل يعرف بـ (طول التشتت). $\vec{\mathbf{S}}$ يمثل متجه التشتت حيث $\{\vec{\mathbf{S}} = \vec{\boldsymbol{G}}\}$ S متجه الوحدة باتجاه الشعاع المتشتت. و $\vec{r}$ هي متجه نصف القطري للالكترون الثاني نسبة الى الالكترون الاول

ومن الظواهر المهمة المصاحبة لتشتت الاشعة هي صفة التشاكه وهذه الصفة تعني ان هنالك علاقة طور محددة بين مراكز التشتت وبذلك نستطيع ان نتكلم على التداخل بين الموجات الجزئية، وعلى النقيض من ذلك، لو تذبذبت مراكز التشتت عشوائياً او بصورة غير متشاكه، فان الموجات الجزئية لا تتداخل مع بعضها وتكون شدة الاشعة الواصلة الى جهاز قياس الاشعة هي مجموع الشدد (الشدات) الجزئية.

$$I = Nf_e^2 \quad -------2$$

حيث ان N هي عدد مراكز التشتت (الالكترون)

نلاحظ الفرق الواضح بين المعادلة 1 والمعادلة 2 التي تمثل التشتت المتشاكه، ان طول التشتت لالكترون يمثل بالمعادلة المعروفة التالية:

$$f_e = [(1 + cos^2 2\Theta)/2]^{\frac{1}{2}} r_e$$

حيث r_e هي نصف القطر الكلاسيكي للالكترون وقيمته حوالي (10^{-15} متر= 1 فيمتو متر).
وتمثل Θ نصف زاوية التشتت.
وعامل التشتت الذري f_a يعطى بالمعادلة

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

R هو نصف قطر الذرة. نرى من معادلة 3 ان عامل التشتت f_a يعتمد على زاوية التشتت من خلال وجود عامل التذبذب $\frac{\sin Sr}{Sr}$

التشتت من البلورة:

يعرف **عامل التشتت في البلورة** $(\boldsymbol{f_{cr}})$ *كما يلي:*

$$f_{cr} = \sum_{j} exp(i\vec{\mathbf{S}} \cdot \vec{r}) \qquad ----4$$

اذ يمتد الجمع الى الكترونات البلورة كافة ولأجل الاستفادة من عامل التشتت الذري تقسم الجمع من المعادلة الأخيرة 4 الى جزئين،

- ✓ الجزء الأول يشل الجمع على كل الكترونات الذرة
- ✓ والجزء الثاني يشمل الجمع على كل ذرات الشبيكة.

ان الجمع في الجزء الاول يؤدي الى معادلة عامل التشتت الذري وعليه إعادة كتابة المعادلة الأخيرة كما يلي:

$$f_{cr} = \sum_{l} f_{al} exp(i\vec{\mathbf{S}} \cdot \vec{R_l}) \qquad ----5$$

R_l تمثل موقع الذرة المرقمة l و f_{al} هي العامل الذري للذرة l . نعيد كتابة المعادلة 5 بشكل حاصل ضرب عاملين، العامل الأول يشمل الجمع على وحدة الخلية والعامل الثاني الجمع على وحدات الخلية في البلورة كافة.

يعرف **عامل التركيب الهندسي** F كما يلي:

$$F = \sum_{j} f_{aj} exp(i\vec{S} \cdot \vec{\delta_j}) \qquad ----6$$

والجمع هنا شمل كل الذرات في وحدة الخلية و $\vec{\delta_j}$ يمثل الموقع النسبي للذرة المرقمة j . بطريقة مشابهة نعرف **عامل التشتت الشبيكي (عامل الشبيكة) S** كما يلي:

$$S = \sum_{l} exp(i\vec{S} \cdot \vec{R_l}(c)) \qquad ----7$$

ويمتد الجمع على كل وحدات الخلايا في البلورة $\vec{R_l}(c)$ يمثل موقع الخلية المرقمة l ،

يمكن إعادة كتابة المعادلة 5 بدلالة F و S حيث $\vec{R_l} = \vec{R_l}(c) + \delta_j$ وبالاستعانة بالمعادلة 6 & 7 نرى بان :

$$f_{cr} = FS$$

وتجدر الملاحظة هنا ان عامل التشتت الشبيكي (عامل الشبيكة) يعتمد على النظام البلوري تحت الدراسة فقط. في حين ان عامل التركيب الهندسي F تعتمد على الشكل الهندسي وعلى محتويات وحدة الخلية.

في حالة الشبيكة البسيطة ذات وحدة خلية تحوي ذرة واحدة فقط يصبح العامل F مساوياً للعامل f_a ويمكن اعتبار F و S عاملين غير معتمدين على بعضهما، ان F يتضمن الجمع على عوامل ذرية قليلة فقط، فيمكن حسابه تقريباً بدلالة هذه العوامل الذرية.

<u>عامل التركيب الهندسي:</u>

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

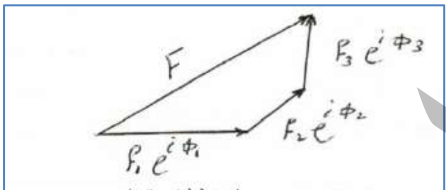
اما سبب تسميته بعامل التركيب الهندسي F_{hkl} فيعود الى انه يمثل محصلة سعة الموجات المستطيرة من الذرات المختلفة، التي تكون عادة متباينة الاطوار بسبب اختلاف مواضع الذرات داخل خلية الوحدة الصادرة عنها تلك الموجات، وفضلاً عن ذلك، قد تكون السعات متباينة في القيمة ايضاً نتيجة اختلاف أنواع الذرات في خلية الوحدة وثم اختلاف العدد والتوزيع الالكتروني للانواع 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 .

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

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 $\mathrm{u_n}\ \ \mathrm{v_n}\ \ \mathrm{w_n}$ 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



(مخطط ارجاند)

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

حيث hkl دلائل ميلر و $\mathrm{u_n, v_n, w_n}$ احداثيات الذرات

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

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

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

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

اذن ستكون المعادلة (1)

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

اذن الشدة تتناسب مع مربع السعة $\mathrm{I} \propto \ F^2_{(hkl)}$

ولحساب F نحتاج الى ما يلي :

1- عدد نقاط الشبيكة 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 الاساس (أي معرفة عامل التشتت لكل نوع من ذرات وحدة الخلية).

ملاحظة: تذكران:

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

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

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

مثال1: حساب عامل التركيب الهندسي لشبيكة مكعب بسيط (SC)

توجد نقطة شبيكة واحدة في خلية الوحدة لشبيكة مكعبة بسيطة (SC) وعندما يكون الاساس المرافق لهذه النقطة مكوناً من ذرة واحدة فقط، فان موقع هـــذه الذرة سيكـــون في u = v = w = 0

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

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

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

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

مثال2: احسب عامل التركيب لشبيكة مكعب متمركز الجسم (BCC).

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

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

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

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

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

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

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

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

(a) اذا كان (h+k+l) مجموعهم عدد فردي

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

وبالتعويض في معادلة 2 سيكون عامل التركيب :-

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

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

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

اما اذا كان مجموع (h+k+l) هو عدد زوجي

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

وعند التعويض بالمعادلة 2 سيكون عامل التركيب :-

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

القاعدة: ستكون هنا هي اذا كان $\{h+k+l=$ 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}	**الملاحظات Notes**
(100)	فردي Odd	0	***absent reflection*** × انعكاس مفقود (غائب)
(110)	وزوجي Even	$2f$	***present reflection*** انعكاس موجود (حاضر)
(111)	فردي odd	0	***absent reflection*** × انعكاس مفقود (غائب)
(200)	وزوجي even	$2f$	***present reflection*** انعكاس موجود (حاضر)
(210)	فردي odd	0	***absent reflection*** × انعكاس مفقود (غائب)
(220)	وزوجي even	$2f$	***Reflections present*** انعكاس موجود (حاضر)

ان بعض العناصر لها شبيكة bcc مثل الصوديوم والبوتاسيوم والباريوم والسيزيوم 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 .

مثال3: احسب عامل التركيب لشبيكة مكعب متمركز 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 لشبيكة بلورة كلوريد السيزيوم CsCL ؟

قدرة التشتت f_{cs} f_{cl} (مختلفة لان في Cs 54 الكترون اما في الكلور CL 18 الكترون)

احداثيات Cs هي في الموقع 000 واحداثيات ذرة cl هي في الموقع $\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}$

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

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

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

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

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

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 $\mathrm{F_{hkl}} = f_{\mathrm{cs}} - f_{\mathrm{cl}}$

اقل شدة $I = (f_{cs} - f_{cl})^2$

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

- 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 $\mathrm{F_{hkl}} = f_{\mathrm{cs}} + f_{\mathrm{cl}}$

اعظم شدة $I = (f_{cs} + f_{cl})^2$

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

- وهذه الحالة المعادلة مجموع (h + k + l) هو اعداد زوجية ويكون الشدة قوية (تداخل بناء) .

مثال4: احسب عامل التركيب لشبيكة مكعب متمركز الاوجه F.C.C ؟ وان اساسها يمتلك ذرات متماثلة (ذرات متشابهة) عند الاحداثيات u v w (000) , $(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0)$, $(\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2})$, $(0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2})$

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

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

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

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

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

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

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

فان **عامل التركيب:** **{ $F_{hkl}= 4f$ }**   و**الشدة** 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)   &   (فردي+فردي=زوجي)

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

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

القاعدة: اذا كان $\{$ (زوجي وفردي) $\}$ $\{(\boldsymbol{h} \& \boldsymbol{k} \& \boldsymbol{l}) =$ مختلطة

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

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

ومن امثلة هذه السطوح

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

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

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

مثال5: احسب عامل التركيب لشبيكة مكعب متمركز الاوجه (FCC). اذا كانت الذرات مختلفة $\boldsymbol{f}$ غير متساوية. خذ على سبيل المثال بلورة كلوريد الصوديوم NaCl

س) احسب عامل التركيب لشبيكة بلورة كلوريد الصوديوم NaCl؟

$$Na^+ : \; 000 \;،\; \frac{1}{2}\frac{1}{2}0 \;،\; \frac{1}{2}0\frac{1}{2} \;،\; 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$$
$$Cl^- : \; \frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2} \;،\; 00\frac{1}{2} \;،\; 0\frac{1}{2}0 \;،\; \frac{1}{2}00$$

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

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

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

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

لكن تغيير إشارة الاس للكميات الاسية ليس في قيمتها

$$e^{-i\pi(h+k)} = e^{i\pi(h+k)} \quad \text{مثل} \quad e^{-i\pi(\text{عدد زوجي})} = e^{i\pi\,(\text{عدد زوجي})}$$
$$e^{-i\pi(\text{عدد فردي})} = e^{i\pi\,(\text{عدد فردي})}$$

$$F_{hkl} = \left[1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)}\right]\left[f_{Na} + f_{Cl}e^{i\pi(h+k+l)}\right] \;\ldots\ldots\ldots 5$$

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

اولاً: ان عامل التركيب يساوي صفراً عندما تكون معاملات ميلر للمستوي (hkl) اعداداً مختلطة.

{ $F_{hkl}= 0$ }

القاعدة: ستكون هنا هي اذا كان $\left[(\boldsymbol{h}\,\&\boldsymbol{k}\,\&\,\boldsymbol{l}) = \text{مختلطة}\,(\text{زوجي وفردي})\right]$

فان عامل التركيب:

لا يحدث انعكاس { $F_{hkl}= 0$ }

الشدة صفر I=0

ثانياً: ان عامل التركيب يكون كمية كبيرة او صغيرة تبعاً لمعاملات ميلر للمستوي فيما اذا كانت جميعها اعداد زوجية او جميعها اعداد فردية.

القاعدة: ستكون هنا هي اذا كان $\left[(\boldsymbol{h}\,\&\boldsymbol{k}\,\&\,\boldsymbol{l}) = \text{متشابهة}\,(\text{كلها زوجي او كلها فردي})\right]$

فان عامل التركيب:

$$\boldsymbol{F_{hkl} = 4[\,f_{Na} + f_{Cl}]}\;\ldots\ldots\ldots(\text{كلها زوجي}) \quad \text{اعظم شدة} \quad \boldsymbol{I = 16[\,f_{Na} + f_{Cl}]^2}$$
$$\boldsymbol{F_{hkl} = 4[\,f_{Na} - f_{Cl}]}\;\ldots\ldots\ldots(\text{كلها فردي}) \quad \text{شدة قليلة} \quad \boldsymbol{I = 16[\,f_{Na} - f_{Cl}]^2}$$

هذا السؤال من د. تغريد & د. حسين مع الجواب

س6) أحسب عامل التركيب الهندسي للمركب Ni_3Al اذا كانت الذرة Al تقع بالموقع (000) وذرات Ni تقع في المواقع$(0\ \frac{1}{2}\frac{1}{2}),(\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}),(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\ 0)$؟

الحل:

$$f_{Ni} \neq f_{Al}$$

Al: 000 Ni: $\frac{1}{2}\frac{1}{2}0, \frac{1}{2}0\frac{1}{2}, 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$

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

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

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

$F_{hkl} = f_{Al} + 3f_{Ni}$ اذا كان (hkl)اعداد فردية أو زوجية

لانه (زوجي+زوجي=زوجي) & (فردي+فردي=زوجي)

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

$F_{hkl} = f_{Al} - f_{Ni}$ اذاكان (hkl) اعداد مختلطة

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

س) 2-النيوبيوم المعدني له تركيب بلوري BCC إذا حدثت زاوية الحيود من مجموعة المستويات (211) عند 75.99 ° عند استخدام أشعة سينية بطول 0.1659 nm , احسب (أ) المسافة البينية للمستويات (ب) نصف قطر ذرة النيوبيوم.

(أ) $\theta = \text{زاوية براك} = \frac{75.99}{2} = 37.995^{\circ} \qquad 2\theta = \text{زاوية الحيود} = \mathbf{75.99}^{\circ}$

$$d_{211} = \frac{n\lambda}{2\sin\theta} = \frac{(1)(\mathbf{0.1659\ nm})}{(2)(\sin 37.995^{\circ})} = 0.134748\ nm$$

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

$$a = d_{211}\sqrt{(2)^2+(1)^2+(1)^2} = (0.134748\ nm)(\sqrt{6}) = 0.33006\ nm$$

For BCC : $a = \frac{4r}{\sqrt{3}} \qquad r = \frac{a\sqrt{3}}{4} = \frac{0.33006\ nm\sqrt{3}}{4} = 0.1429\ nm$

س) لأي مجموعة من المستويات البلورية ستحدث قمة حيود من الدرجة الأولى بزاوية حيود 44.93 ° للنيكل FCC عند استخدام إشعاع بطول موجي 0.1542 nm عندما يكون نصف القطر الذري للنيكل r_{Ni} = 0.1246 nm ؟

$\theta = \text{زاوية براك} = \frac{44.93}{2} = 22.465^{\circ} \qquad 2\theta = \text{زاوية الحيود} = \mathbf{44.93}^{\circ}$

$$d_{hkl} = \frac{n\lambda}{2\sin\theta} = \frac{(1)(\mathbf{0.1542\ nm})}{(2)(\sin 22.465^{\circ})} = 0.2017696\ nm$$

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

For FCC $a = \frac{4r}{\sqrt{2}}$

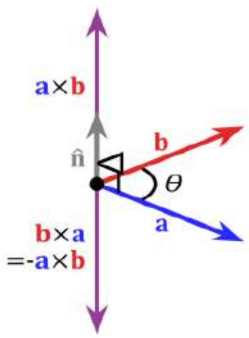
$$\sqrt{(h)^2+(k)^2+(l)^2} = \frac{a}{d_{hkl}} = \frac{4r}{d_{hkl}\sqrt{2}} = \frac{4 * \mathbf{0.1246\ nm}}{0.2017696\ nm * \sqrt{2}}$$
$$= 1.74665568917 9$$

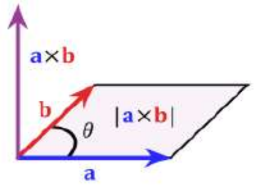
$$(h)^2+(k)^2+(l)^2 = 3$$

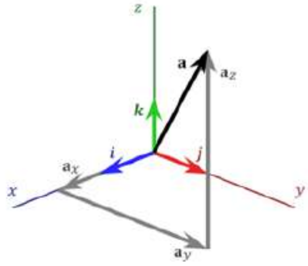
بالتجربة والخطأ ، الأعداد الثلاثة الوحيدة التي لها مجموع مربعاتها 3 هي 1 و 1 و 1. لذلك، فإن مجموعة المستويات المسؤولة عن ذروة الحيود هي (111) .

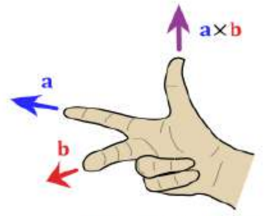
Table Miller Indices of the Diffracting Planes for BCC and FCC Lattices

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}	$1^2+1^2+0^2$	2	...	110
{111}	$1^2+1^2+1^2$	3	111	
{200}	$2^2+0^2+0^2$	4	200	200
{210}	$2^2+1^2+0^2$	5		
{211}	$2^2+1^2+1^2$	6	...	211
...		7		
{220}	$2^2+2^2+0^2$	8	220	220
{221}	$2^2+2^2+1^2$	9		
{310}	$3^2+1^2+0^2$	10	...	310









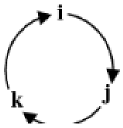
Finding the direction of the cross product by the right-hand rule

This little cycle diagram can help you remember these results.

$\mathbf{i}\times\mathbf{j}=\mathbf{k}$ $\quad$ $\mathbf{j}\times\mathbf{i}=-\mathbf{k}$

$\mathbf{j}\times\mathbf{k}=\mathbf{i}$ $\quad$ $\mathbf{k}\times\mathbf{j}=-\mathbf{i}$

$\mathbf{k}\times\mathbf{i}=\mathbf{j}$ $\quad$ $\mathbf{i}\times\mathbf{k}=-\mathbf{j}$



$$\mathbf{a}=(a_1,a_2,a_3)=a_1\mathbf{i}+a_2\mathbf{j}+a_3\mathbf{k}$$

$$\mathbf{b}=(b_1,b_2,b_3)=b_1\mathbf{i}+b_2\mathbf{j}+b_3\mathbf{k}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{a}\times\mathbf{b}&=(a_1\mathbf{i}+a_2\mathbf{j})\times(b_1\mathbf{i}+b_2\mathbf{j})\\&=a_1b_1(\mathbf{i}\times\mathbf{i})+a_1b_2(\mathbf{i}\times\mathbf{j})+a_2b_1(\mathbf{j}\times\mathbf{i})+a_2b_2(\mathbf{j}\times\mathbf{j})\end{aligned}$$

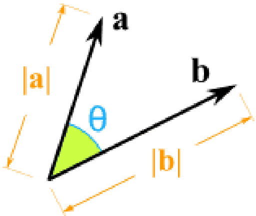
$\mathbf{i}\times\mathbf{i}=\mathbf{0}=\mathbf{j}\times\mathbf{j}$ and that $\mathbf{i}\times\mathbf{j}=\mathbf{k}=-\mathbf{j}\times\mathbf{i}$,

$$\begin{aligned}\mathbf{a}\times\mathbf{b}&=(a_1b_2-a_2b_1)\mathbf{k}\\&=\begin{vmatrix}a_1&a_2\\b_1&b_2\end{vmatrix}\mathbf{k}.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{a}\times\mathbf{b}&=(a_1\mathbf{i}+a_2\mathbf{j}+a_3\mathbf{k})\times(b_1\mathbf{i}+b_2\mathbf{j}+b_3\mathbf{k})\\&=a_1b_1(\mathbf{i}\times\mathbf{i})+a_1b_2(\mathbf{i}\times\mathbf{j})+a_1b_3(\mathbf{i}\times\mathbf{k})\\&\quad+a_2b_1(\mathbf{j}\times\mathbf{i})+a_2b_2(\mathbf{j}\times\mathbf{j})+a_2b_3(\mathbf{j}\times\mathbf{k})\\&\quad+a_3b_1(\mathbf{k}\times\mathbf{i})+a_3b_2(\mathbf{k}\times\mathbf{j})+a_3b_3(\mathbf{k}\times\mathbf{k})\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{a}\times\mathbf{b}&=a_1b_2\mathbf{k}-a_1b_3\mathbf{j}-a_2b_1\mathbf{k}+a_2b_3\mathbf{i}+a_3b_1\mathbf{j}-a_3b_2\mathbf{i}\\&=(a_2b_3-a_3b_2)\mathbf{i}-(a_1b_3-a_3b_1)\mathbf{j}+(a_1b_2-a_2b_1)\mathbf{k}.\end{aligned}$$

$$\mathbf{a}\times\mathbf{b}=\begin{vmatrix}a_2&a_3\\b_2&b_3\end{vmatrix}\mathbf{i}-\begin{vmatrix}a_1&a_3\\b_1&b_3\end{vmatrix}\mathbf{j}+\begin{vmatrix}a_1&a_2\\b_1&b_2\end{vmatrix}\mathbf{k}.$$



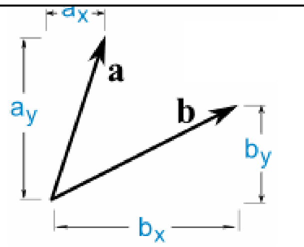
a · b = |**a**| × |**b**| × cos(θ)

Where:

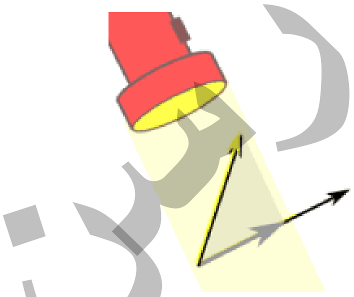
|**a**| is the magnitude (length) of vector **a**

|**b**| is the magnitude (length) of vector **b**

θ is the angle between **a** and **b**

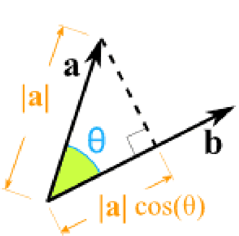


a · b = $a_x \times b_x + a_y \times b_y$

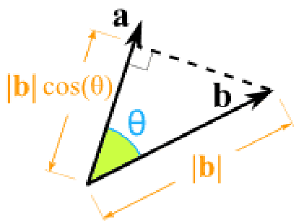


Like shining a light to see where the shadow lies

a · b = |**a**| × |**b**| × cos(θ)



a · b = |**a**| × cos(θ) × |**b**|



a · b = |**a**| × |**b**| × cos(θ)

The dot or scalar product ⇨ $A\cdot B=|A|\cdot|B|\cdot\cos\Theta$

Where |A| and |B| represents the magnitudes of vectors A and B and Θ is the angle between vectors A and B.

$A=a_1 i+a_2 j$ and $B=b_1 i+b_2 j$ ⇨ $A\cdot B=a_1\cdot b_1+a_2\cdot b_2$