الفصل الثاني

الاتجاهات البلورية والشبكة المعكوسة

ان الخواص الفيزياوية للبلورات ليست واحدة، عموما، بالنسبة لجميع الاتجاهات في البلورة بمعنى أن البلورة متباينة المناحي (Anisotropic). لذلك يجب احداث طريقة لتعيين الاتجاهات ولتحديد (تسمية) المستويات في البلورات. ان هذه الطريقة بلا شك تعتمد أساسا على أسلوب تحديد المحاور. ولقد جرت العادة على اختيار المحاور البلورية (x , y , z) (بحيث أن مبدأها منطبق على احدى العقد) منطبقة مع (أو موازية الى) أحرف الخلية الأولية* سواءا كانت أساسية (عندئذ تتوازى المحاور x، y، z مع $\vec{a}_1$، $\vec{a}_2$ و $\vec{a}_3$) أو غير أساسية. وعلى هذا فان المحاور البلورية تكون متعامدة مع بعضها فقط بالنسبة للبلورات المكعبة والرباعية والمعينية المستقيمة** . وما عدا ذلك فالزوايا بين المحاور البلورية هي نفسها α ، β ، $\gamma \neq \frac{\pi}{2}$ - الزوايا الأساسية.

---

* التي نختارها بنفس تناظر الشبكة البلورية.

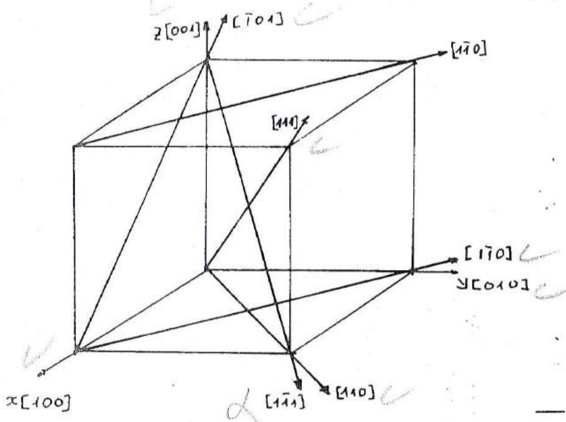
** ستتعرف في الفصل القادم على تصنيف شبكات برافي.

1 - قرائن فيس:

يحدد اتجاه الشعاع (المتجه) البلوري الذي تقع بدايته في مبدأ المحاور (المنطبق على عقدة من عقد الشبكة) باحداثيات أول عقدة يمر بها. والطريقة المتبعة في تحديد اتجاه الشعاع هي بتعيين القرائن التي تحسب من حاصل ضرب المعامل الأصغر لمساقط الشعاع على المحاور البلورية وتسمّى بقرائن فيس مع العلم أن مساقط الشعاع هي احداثيات أول عقدة يمر بها. ويرمز لقرائن الشعاع بالرمز $\vec{\rho} \equiv [u\ v\ w]$ *، أي أن مساقطه على المحاور البلورية x، y، z متناسبة على التوالي مع ua، vb و wc :

$$\vec{\rho} = ua\hat{x} + vb\hat{y} + wc\hat{z} \qquad (1-2)$$

حيث ($\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$) وحدة أشعة المحاور البلورية التي (كما أسلفنا) لا يشترط فيها أن تكون متعامدة ولكنها منطبقة على أحرف الخلية الأولية أو الأساسية (حسب الاختيار). والشكل (2 - 1) يعطي بعض الأمثلة في حالة الشبكة المكعبة (Fcc, bcc, Sc) أو الرباعية أو المعينية المستقيمة**



شكل (2 - 1)

---

* وأحيانا $[hkl]$.

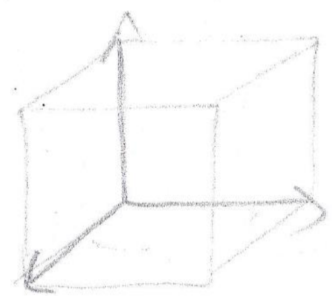
** فيجميع هذه المجموعات تتعامد المحاور البلورية المحددة للخلية الاولية.

فاذا تعامد الشعاع مع محور بلوري معين فان معامل فيس المرافق له يساوي صفرا (مثلا المحور x هو [100]) . واذا كان مسقط الشعاع على محور معين سالبا يكون معامل فيس المرافق له سالبا (مثلا المحور y السالب هو [$0\bar{1}0$]). مع التذكير أنه يمكن نقل الشعاع نقلا موازيا لنفسه ليمر من مركز المحاور المختار الواقع عند رأس من رؤوس الخلية الاولية فللأشعة المتوازية نفس قرائن فيس. كما يمكن نقل مركز المحاور لتنطبق على مبدأ الشعاع.

والآن نعرّف الأشعة المتكافئة : وهي الأشعة التي تنطبق على بعضها عند اجراء عملية تناظرية خاصة بتلك البلورة المدروسة . ويستعمل الرمز $\langle uvw \rangle$ للاشارة الى عائلة الأشعة المتكافئة . معنى هذا أن الرمز $\langle uvw \rangle$ يمثل كل الأشعة التي تشترك مع بعضها بعناصر تناظر تلك البلورة . فمثلا، بحكم تناظر المكعب فان الشعاع [100] يمكن أن يتكرر في البلورات المكعبة مكونا العائلة التالية :

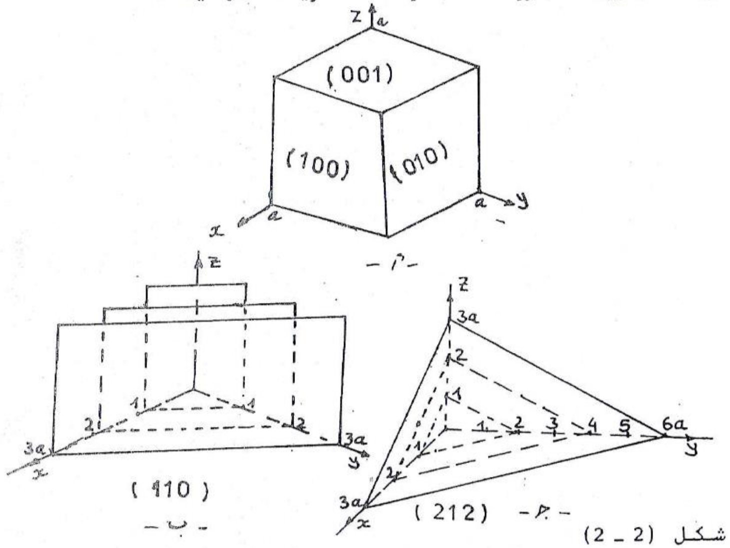
$$\langle 100 \rangle \equiv [100] \text{ و } [010] \text{ و } [001] \text{ و } [\bar{1}00] \text{ و } [0\bar{1}0] \text{ و } [00\bar{1}] \qquad (2-2)$$

وذلك طبقا لعمليات التناظر التالية : نبدأ بالشعاع [100]، وعند اجراء عملية الدوران التناظرية (للبلورة المكعبة _ المكعب) حول المحور z بزاوية $\pi/2$ ينطبق [100] على [010]، ومن ثم الدوران حول المحور x بزاوية $\frac{\pi}{2}$ فينطبق [010] على [001] وهكذا...



2 _ قرائن ملّر :

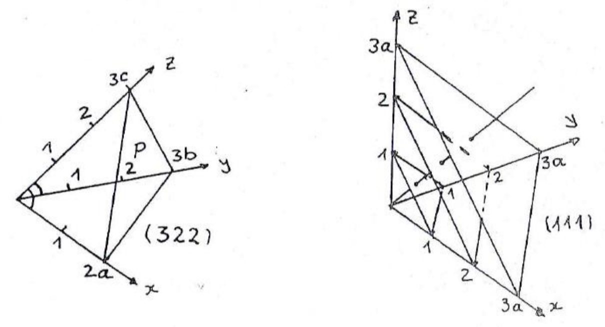
المستوى البلوري أو الذري هو المستوي الحاوي على ثلاثة عقد أو أكثر من عقد الشبكة البلورية، بحيث لا تقع هذه العقد الثلاثة (كحد أدنى) على خط مستقيم . وبسبب التناظر الانسحابي لشبكة برافي فان أي مستوي بلوري يحوي على ما لانهاية له من العقد* التي تشكل شبكة مستوية (ببعدين). والشكل (2 _ 2) يبين بعض المستويات البلورية للبلورة المكعبة وهذه المستويات لا نهائية .



شكل (2 _ 2)

ولتسمية المستويات البلورية يستخدم الرمز (hkl) الذي يسمّى قرائن ملر (Miller indices). ولتحديد قرائن ملر تختار المحاور البلورية الملائمة كما أسلفنا . وطريقة ملر تعتمد على تحديد المقادير النسبية لمقاطع المستوي البلوري للمحاور الاحداثية .

* في الدراسة نفترض الشبكة أو البلورة لا نهائية .



شكل (2 _ 3)

ولفهم ذلك نأخذ المستوى p الموضح في الشكل (2 _ 3 أ) ونجري العمليات التالية :

(1) نحدد مقاطع المستوي p للمحاور الاحداثية البلورية وذلك بوحدات متحولات الشبكة المدروسة ، حيث يحسب المقطع السيني بوحدات المتحول (أو الثابت) a والمقطع _ y بوحدات b والمقطع _ z بوحدات c . أي أن مقاطع المستوي p هي: $2a$, $3b$, $3c$.

(2) نأخذ مقلوب الأرقام 2,3,3 (أي $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{3}$, $\frac{1}{3}$) ثم نضرب المقلوبات بمضاعفها المشترك الأصغر _ 6 لنحصل على (3,2,2). عندئذ نسمّي السطح p بالارقام (322) التي هي معاملات ملر حيث يرمز لها عموما بالرمز (hkl) .

والشكل (2 _ 3 ب) يبين المستوي (111) من البلورة المكعبة حيث تتعامد الاحداثيات البلورية x ، y ، z ؟

واذا وازى المستوي محور معين (أي يقطعه في اللانهاية) عندئذ يؤول معامل ملر المرافق له الى الصفر كما هو حاصل في الشكل (2 _ 2 أ و ب) .

واذا قطع المستوي محور معين من جهته السالبة (مثلا المحور x) عندئذ يكون معامل ملر المرافق له سالبا، أي أن h سالب ويكتب بالصورة $\bar{h}$. فالمستوي $(\bar{2}00)$ في البلورة يوازي المحورين y و z ويقطع المحور _ x من الجهة السالبة بالمقدار $\frac{a}{2}$. والشكل (2 _ 4) يعطي أمثلة على تحديد قرائن ملر لبعض مستويات الشبكة المكعبة وكذلك مجاميع المستويات (hk) للشبكة المستوية (كمثال فقط).

وعموما، عندما يقطع المستوي (hkl) المحاور البلورية (x , y , z) على التوالي بالمقادير النسبية ($\frac{a}{h}$, $\frac{b}{k}$, $\frac{c}{l}$) فان معادلة المستوي هي:

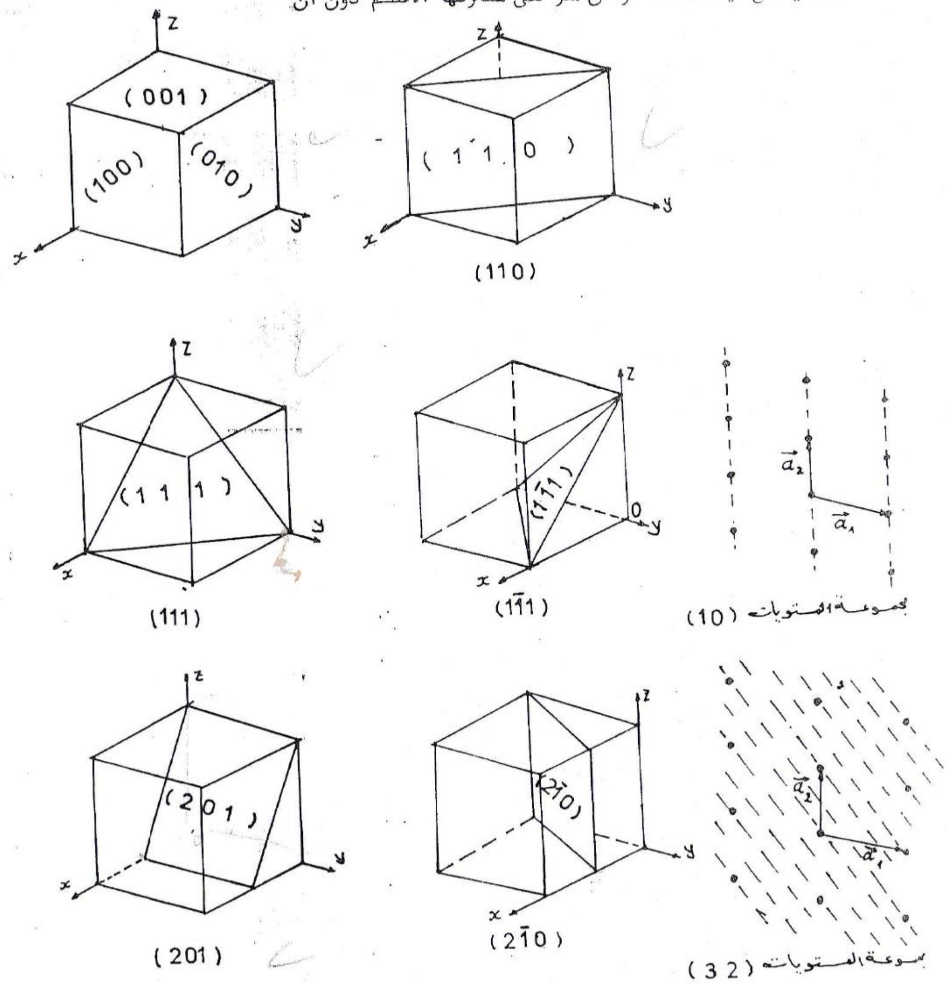
$$\frac{x}{a/h}+\frac{y}{b/k}+\frac{z}{c/l}=K \qquad (3-2)$$

حيث K لا يعتمد على توجه المستوي بل على بعده عن نقطة أصل الاحداثيات . واذا اعتبرنا ضمنيا أن مقطع x مقاس بوحدات a ومقطع y مقاس بوحدات _ b ومقطع _ z مقاس بوحدات c فان معادلة المستوي (hkl) تأخذ الصورة المبسطة التالية

$$hx+ky+lz=m \qquad (4-2)$$

وهذه المعادلة تكون صحيحة سواءا كانت الاحداثيات متعامدة (كحالة البلورة المكعبة حيث $a=b=c$) أو غير متعامدة مع بعضها. فاذا كانت $m=0$ فالمستوي يمر من مركز المحاور،والمستويات $m=1,2,3,\ldots$ تكون متوازية مع بعضها والمسافات بينها متساوية كما لا توجد عقدة بينها. لذلك فلبلورة محددة، عند اعطاء العدد m قيم صحيحة مختلفة (بثبوت h ، k ، l) نحصل على مجموعة كاملة من المستويات البلورية المتوازية. فالمستويات التي لها نفس قرائن ملر تكون متوازية. لذلك نستنتج أن المهم هو توجه ذلك المستوي بالذات وليس وضعه المطلق في الشبكة. وعلى هذا فأن المستويّ يحدد تماما بقرائن ملر الثلاثة. عند

ذلك يمكن أيضا قسمة قرائن ملر على مشتركها الاعظم دون أن



شكل (2 _ 4)

يتغير توجه المستوي من جراء ذلك. فالمستوي (200) يوازي المستوي (100) الا أنه يقطع المحور البلوري x في $a/2$.

ويستعمل الرمز $\{hkl\}$ لعائلة المستويات المتكافئة في البلورة التابعة لمجموعة بلورية معينة، أي أن الرمز يمثل كل المستويات التي تشترك مع بعضها بعناصر تناظر تلك البلورة. فمثلا للمجموعة المكعبة وبحكم تناظر المكعب فان السطح (100) يمكن أن يتكرر ليكون كل سطوح المكعب التالية :

$$\{100\} \equiv (100)\text{ و }(010)\text{ و }(001)\text{ و }(\bar{1}00)\text{ و }(0\bar{1}0)\text{ و }(00\bar{1}) \qquad (5\_2)$$

أما للمجموعة الرباعية فبحكم تناظرها فان:

$$\{100\} \equiv (100)\text{، }(010)\text{، }(\bar{1}00)\text{ و }(0\bar{1}0) \qquad (6\_2)$$

ونذكر أنه عندما يقع الشعاع $[uvw]$ في المستوي (hkl) أو يوازيه تتحقق المعادلة التالية

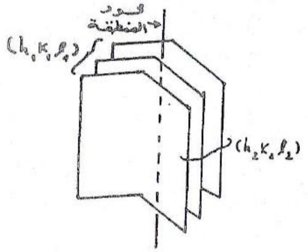
$$hu + kv + lw = 0 \qquad (7\_2)$$

وتستعمل هذه المعادلة لمعرفة خط تقاطع مستويين $(h_1k_1l_1)$ و $(h_2k_2l_2)$.
فخط التقاطع $[uvw]$ يحقق المعادلتين الآنيتين :

$$h_1u + k_1v + l_1w = 0 \quad , \quad h_2u + k_2v + l_2w = 0 \qquad (8\_2)$$

التي تحل بطريقة المتصالب.

ومجموعة المستويات البلورية المتقاطعة والتي توازي خطا أو شعاعا معينا في البلورة تسمى منطقة ($Zone$) كما في الشكل(2_5):
فهذه المستويات $(h_1k_1l_1)$ و $(h_2k_2l_2)$ ... الخ كلها توازي شعاعا معينا $[uvw]$ يسمى محور المنطقة . والشرط المفروض على المستوي (hkl) لكي ينتمي الى المنطقة



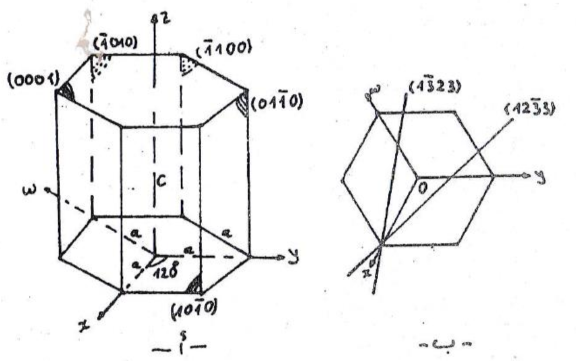
شكل (2 _5)

التي محورها $[u v w]$ هو بالذات المعادلة (2 ـ 7).

وتستعمل قرائن ملر ـ برافي لتحديد المستويات في البلورات السداسية .وعدد هذه القرائن أربعة ($h\ k\ i\ l$) وتحدد بالنسبة للموشور السداسي (ثلاثة خلايا أولية متلاصقة). وطريقة التحديد هي نفس طريقة تعيين قرائن ملر ولكن على أساس المحاور الاربعة الموضحة في الشكل (2 ـ 6) بحيث أن الزوايا بين المحاور في المستوي $w - y - x$ تساوي $120°$. والمستوي الذي يقطع المحور x بالمقدار $\frac{a}{h}$ والمحور y بالمقدار $\frac{a}{k}$ فانه سيقطع المحور w بالمقدار $\frac{a}{h+k}$ ـ أي أن:

$$-(h + k) = i \qquad (9 - 2)$$

لذلك تكتب قرائن ملر ـ برافي أحيانا بالصورة ($h\ k \cdot l$) . وعلى الأساس أعلاه حددت قرائن ملر ـ برافي لمستويات الشكل (2 ـ 6) ويتبين في الشكل (2 ـ 6 ب)



شكل (2 ـ 6)

اثر المستويين $(12\bar{3}3)$ و $(1\bar{3}23)$ على المستوي القاعدي ($w - y - x$) للشبكة السداسية .

نتطرق الآن الى تأثير اختيار المحاور البلورية على قرائن ملر :

ذكرنا سابقا وجود أساليب مختلفة لاختيار أشعة الانسحاب. لذلك يبرز سؤالاً حول علاقات قرائن ملر المحسوبة بالنسبة لمجموعات مختلفة من المحاور البلورية . فقرائن ملر لمستوي معين هي ($h k l$) بالنسبة لاختيار معين لاشعة الانسحاب ($\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$) وقرائن ملر لنفس المستوي ولكنها محسوبة بالنسبة لاختيار آخر لأشعة انسحاب بلورية (ولتكن ($\vec{A}_1, \vec{A}_2, \vec{A}_3$) هي ($H K L$). والمطلوب معرفة العلاقة بين قرائن ملر في كلا الحالتين.

نحلل الشعاع $\vec{A}_1$ بالنسبة للمجموعة ($\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$) لنجد أن :

$$\vec{A}_1 = u_{A_1}\vec{a}_1 + v_{A_1}\vec{a}_2 + w_{A_1}\vec{a}_3 \qquad \text{اذن:} \quad \vec{A}_1\,(u_{A_1}, v_{A_1}, w_{A_1})$$

وبنفس الأسلوب نحلل الاشعة $\vec{A}_2$ و $\vec{A}_3$ لنحصل في النهاية على المصفوفة التالية :

$$\begin{pmatrix} \vec{A}_1 \\ \vec{A}_2 \\ \vec{A}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{A_1} & v_{A_1} & w_{A_1} \\ u_{A_2} & v_{A_2} & w_{A_2} \\ u_{A_3} & v_{A_3} & w_{A_3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{a}_1 \\ \vec{a}_2 \\ \vec{a}_3 \end{pmatrix} \qquad (10 - 2)$$

وهذه المصفوفة تسمى مصفوفة التحويل وهي تعطي العلاقة بين (HKL) و (hkl) :

$$\begin{pmatrix} H \\ K \\ L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{A_1} & v_{A_1} & w_{A_1} \\ u_{A_2} & v_{A_2} & w_{A_2} \\ u_{A_3} & v_{A_3} & w_{A_3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix} \qquad (11 - 2)$$

فمثلا : عند حساب (HKL) لمستوي معين بالنسبة لأشعة الانسحاب الاساسية للشبكة fcc (المعادلات 1 ـ 8 : $\vec{a}_1 = \frac{1}{2}(\vec{a}_y + \vec{a}_z)$ حيث $\vec{a}_x = a\vec{i}$ ..الخ) بمعرفة (hkl) لنفس المستوي بالنسبة لاشعة الانسحاب (P) المنطبقة على أحرف المكعب الاصطلاحي (الشكل 1 ـ 12) نحتاج الى مصفوفة التحويل ($P \leftarrow F$) :

$$\begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix} \qquad (12 - 2)$$

3 ـ الشبكة المعكوسة (Reciprocal lattice):

تعير فيزياء الاجسام الصلبة أهمية بالغة لدراسة الشبكة المعكوسة ومعرفة خواصها لما لها من تطبيقات كثيرة. فعلى أساس فكرة الشبكة المعكوسة تعتمد نظريات الانعراج (diffraction) في البلورات، ونظرية التوصيل الكهربائي والتوزيع الالكتروني في البلورات ... الخ. وأساس فكرة الشبكة المعكوسة مبني على خاصية تناظرها الانسحابي الذي خصص الفصل الاول لدراسته. فخاصية التناظر الانسحابي هي الأساس العام الذي تتمتع به كل الشبكات البلورية وهو ما نعبّر عنه بالدورية في الفضاء. هذه الدورية تشمل التوزيع الالكتروني أو التوزيع الذري أو توزيع الجهد الكهروستاتيكي داخل البلورة ... الخ. لذلك فلاعطاء النموذج الفيزيائي للتركيب البلوري يجب اعطاء دالة فضائية $f(\vec{r})$ تتغير دوريا داخل البلورة أو الشبكة البلورية. وهذه الدالة هي أية خاصية فيزيائية دورية في فضاء البلورة ولتكن التوزيع الذري. ان خاصية التوزيع الدوري الذري أو التناظر الانسحابي تتلخص وتوصف بشعاع الانسحاب $\vec{R}$ الذي يحدد موقع كل عقد شبكة برافي للبلورة المدروسة. وشروط التناظر الانسحابي للدالة $f(\vec{r})$ يتلخص في كونها دورية في الفضاء بدور ينطبق مع دور شبكة برافي، أو أن:

$$f(\vec{r}) = f(\vec{r}+\vec{R}) \qquad (13-2)$$

وهذه المعادلة تصح لجميع نقاط الفضاء $\vec{r}$ ولجميع أشعة الانسحاب $\vec{R}$.

وطبقا لنظرية فوريه الفضائية فان أية دالة دورية في الفضاء يمكن أن تصاغ بالهيئة التالية:

$$f(\vec{r}) = \sum_{K} f_K \, e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} \qquad (14-2)$$

حيث $e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}$ هي معادلة موجة مستوية شعاعها $\vec{K}$ (wave vector).

نطبق المعادلة (2 ـ 14) على حالة شبكة برافي للبلورة. بصورة عامة (المعادلة

2 ـ 14) تختلف دورية الموجة عن دورية شبكة برافي للبلورة. ولكي تنطبق الدوريتان معا يجب أن يساوي $\vec{K}$ الى قيمة محدودة $\vec{G}$ (معنى هذا أن الدالة المدروسة $f(\vec{r})$ هي دالة دورية داخل البلورة تصف التوزيع الذري أو العقدي)، اذن نأخذ مفكوك الدالة $f(\vec{r})$ بالصورة:

$$f(\vec{r}) = \sum_{G} f_G \, e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} \qquad (15-2)$$

وبتطابق الدوريتان يجب أن تتحقق المعادلة الشرط (2 ـ 13) حيث نجد أن:

$$f(\vec{r}+\vec{R}) = \sum_{G} f_G \, e^{i\vec{G}\cdot(\vec{r}+\vec{R})} = \sum_{G} f_G \, e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} \qquad (16-2)$$

ويتم الجمع على كل الأشعة $\vec{G}$. ومنه نجد أن:

$$e^{i\vec{G}\cdot\vec{R}} = 1 \qquad (17-2)$$

وهذه المعادلة صحيحة لكل الأشعة $\vec{R}$ ولكل الأشعة $\vec{G}$، وهي تمثل الشرط المفروض على $\vec{G}$ لكل قيم $\vec{R}$ المحددة لشبكة برافي لكي تتساوى دورية الموجة المستوية في مفكوك فوريه مع دورية شبكة برافي للبلورة المدروسة.

وحيث أن "الشعاع" $\vec{R}$ يصف ويعين كل عقد شبكة برافي لبلورة معينة، لذلك فان "الشعاع" $\vec{G}$ يصبح خاصا لنفس تلك الشبكة وهو يحمل اسم الشعاع الأساسي للشبكة المعكوسة (Reciprocal lattice Vector). ولمعرفة طبيعة "الشعاع" $\vec{G}$ ندرس المعادلة (2 ـ 17): فطالما أنها تصح لجميع الأشعة $\vec{R}$ لذلك فان:

$$\vec{G}\cdot\vec{R} = 2\pi m \qquad (18-2)$$

حيث m ـ عدد صحيح. وحيث أن $\vec{R}$ يمثل مجموعة أشعة تحدد عقد شبكة برافي لبلورة معينة فان $\vec{G}$ يمثل أيضا مجموعة أشعة تحدد عقد شبكة معينة

تسمّى بالشبكة المعكوسة لشبكة برافي المحددة بالأشعة $\vec{R}$. فالموضوع يمكن تصوره بما يلي: الاشعة $\vec{R}$ تحدد عقد شبكة برافي التي تسمّى أيضا بالشبكة " المباشرة "

(*direct lattice*) أو الحقيقية في الفضاء الاعتيادي $\vec{R}$ المحدد بأبعاد الشبكة نفسها، بينما الأشعة $\vec{G}$ (التي مع $\vec{R}$ تحقق الشرط 2 _ 18) تحدد ((صورة للشبكة الحقيقية)) في فضاء فوريه $\vec{K}$. وحيث أن أساس الفضاء $\vec{R}$ هو أشعة الانسحاب الاساسية $\vec{a}_3$، $\vec{a}_2$، $\vec{a}_1$ - المعادلة (1 _ 2) - فان فضاء $\vec{G}$ يمكن أن يحدد بالأشعة $\vec{b}_3$، $\vec{b}_2$، $\vec{b}_1$ المعينة على أساس الأشعة $\vec{a}_3$، $\vec{a}_2$، $\vec{a}_1$ طبقا للمعادلة (2 _ 18)ولكي تحقق مجموعتا الاشعة _ الأساس أعلاه المعادلة (2 _ 17 أو 18) يجب أن يشترط ما يلي:

(1) علاقات أساس الفضاء $\vec{G}$ بأساس الفضاء $\vec{R}$ (أو $\vec{K}$) هي:

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3}{v} \quad , \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1}{v} \qquad (19 - 2)$$

$$\vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2}{v}$$

حيث $v = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)|$ - حجم الخلية الأساسية.

(2) تمتعها بالخاصية التالية *:

$$\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij} \qquad (20 - 2)$$

حيث δ_{ij} هو رمز دلتا _ كرونيكر:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases} \qquad (21 - 2)$$

---

* أي أن $\vec{b}_1$ عموديا على $\vec{a}_1$ ؛ $\vec{a}_3$ ، .... الخ.

وعلى أساس الأشعة _ الأساس $\vec{b}_j$ ($j = 1,2,3$) يمكن كتابة شعاع الشبكة المعكوسة بصورة التراكب الخطي للأشعة $\vec{b}_j$ ، أي:

$$\vec{G} = g_1 \vec{b}_1 + g_2 \vec{b}_2 + g_3 \vec{b}_3 \qquad (22 - 2)$$

وعلى هذا الأساس وباستخدام تعريف الشعاع $\vec{R}$ نجد أن :

$$\vec{G} \cdot \vec{R} = 2\pi (g_1 n_1 + g_2 n_2 + g_3 n_3) = 2\pi m \qquad (23 - 2)$$

حيث m (وبالتالي $\sum_{i=1}^{3} g_i n_i$) عدد صحيح طبقا للمعادلة (2 _ 18). عندئذ يجب أن تكون كل من g_1 ، g_2 ، g_3 - أعدادا صحيحة . أي أن أي شعاع من المجموعة (2 _ 22) يحقق الشرط (2 _ 18) ويحدد عقدة من عقد الشبكة المعكوسة .

وأخيرا نذكر أن الدالة f_G في المعادلة (2 _ 15) وطبقا لنظرية فوريه تحدد بالصورة التالية :

$$f_G = \frac{1}{v} \int_v f(\vec{r})\, e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}}\, d\vec{r} \qquad (24 - 2)$$

ويتم التكامل على الحجم v للخلية الأساسية للشبكة .

4 ـ خـواص الشبكـة المعكـوسـة

ذكرنا بأن الشبكة المعكوسة تحدد بالأشعة $\vec{G}$ (المعادلة 2 ـ 22) المبنيـة على أساس فضاء الشبكة المعكوسة $\vec{b}_1$ ، $\vec{b}_2$ ، $\vec{b}_3$ ؛ المستنتج من علاقته بفضاء الشبكـة المباشرة $\vec{a}_1$ ، $\vec{a}_2$ ، $\vec{a}_3$ طبقا للمعادلة (2 ـ 19)، معنى هذا أنـه لكل شبكة برافي " مباشرة " توجد شبكة مناظرة لها معكوسة.

وعند حساب الشبكة المعكوسة يلاحظ ما يلي:

(1) تجب معرفة شبكة برافي للبلورة المدروسة، ونذكّر بأن شبكة برافي هي التي تتمتع بوجود مجموعة الأشعة $\vec{R}$ التي تحدد كل عقدها أو أن كل عقد شبكة برافي متماثلة مع بعضها من ناحية التوزيع الفضائي لما يحيط بكل منها من عقد. فالشبكة hcp مثلا ليست شبكة برافي بينما الشبكات $Sc(P)$، $bcc(I)$ و $fcc(F)$ والسداسية البسيطة كلها شبكات برافي.

(2) عندما تكون الخلية الاولية لشبكة برافي غير أساسية (مثل مكعب التراكيب fcc و bcc) عندئذ يتم التعامل مع أشعة الانسحاب الأساسية لها $\vec{a}_1$ ، $\vec{a}_2$ ، $\vec{a}_3$ وذلك عند حساب الشبكة المعكوسة.

(3) ان الأشعة $\vec{b}_1$ ، $\vec{b}_2$ ، $\vec{b}_3$ تحدد الخلية الاساسية للشبكة المعكوسة وهي بصورة متوازي سطوح تنتسب له عقدة واحدة من عقد الشبكة المعكوسة.

والآن نذكر بعض الخواص الأساسية للشبكة المعكوسة:

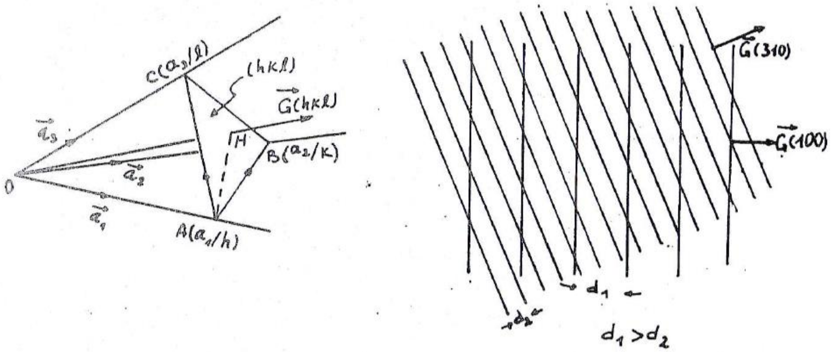
أ ـ الشبكة المعكوسة هي شبكة برافي: طالما تستنتج الشبكة المعكوسة من شبكة برافي " المباشرة " للبلورات، لذلك نتوقع أن الشبكة المعكوسة هي أيضا شبكة برافي، أي أن

(1) الأشعة $\vec{G}$ المبنية على الأشعة الاساس ($\vec{b}_1$ ، $\vec{b}_2$ ، $\vec{b}_3$) والارقام الصحيحة g_1 ، g_2 ، g_3 تحدد كل عقد الشبكة المعكوسة.

(2) عقد الشبكة المعكوسة متماثلة تماما من ناحية ما يحيط بكل منها من عقد بالعدد والتوزيع الفضائي. فالشبكة المعكوسة متناظرة انسحابيا.

(ب) ـ شعاع الشبكة المعكوسة $\vec{G}$ المحدد بالأرقام الصحيحة l و k و h يكون عموديا دائما على جملة المستويات المتوازية (hkl).

ولبرهان هذه الخاصية العامة نأخذ مستويا محددا بقرائن ملر (hkl) يقطع أشعة الانسحاب الاساسية لشبكة برافي $\vec{a}_1$ ، $\vec{a}_2$ ، $\vec{a}_3$ بالنقاط $A(\frac{a_1}{h},0,0)$ ، $B(0,\frac{a_2}{k},0)$ ، $C(0,0,\frac{a_3}{l})$ حيث a_1 ، a_2 ، a_3 هي أبعاد الخلية الاساسية، كما في الشكل (2 ـ 7 أ). نأخذ شعاع الشبكة المعكوسة المحدد بالارقام h و k و l:



ـ أ ـ

ـ ب ـ

شكل (2 ـ 7)

$$\vec{G}(hk\ell) = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + \ell\vec{b}_3 \qquad (25\_2)$$

ونأخذ الشعاعان $\vec{AB}$ و $\vec{AC}$ الواقعان في المستوي المدروس ($hk\ell$):
$\vec{AB} = \frac{\vec{a}_2}{k} - \frac{\vec{a}_1}{h}$ ، $\vec{AC} = \frac{\vec{a}_3}{\ell} - \frac{\vec{a}_1}{h}$. والآن نبرهن أن الشعاع $\vec{G}(hk\ell)$ عمودي على الشعاعين $\vec{AB}$ و $\vec{AC}$:

$$\vec{G}\cdot\vec{AB} = (h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + \ell\vec{b}_3)\cdot\left(\frac{\vec{a}_2}{k} - \frac{\vec{a}_1}{h}\right) = 0$$

$$\vec{G}\cdot\vec{AC} = (h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + \ell\vec{b}_3)\cdot\left(\frac{\vec{a}_3}{\ell} - \frac{\vec{a}_1}{h}\right) = 0$$

وذلك لان $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$. معنى هذا أن الشعاع $\vec{G}(hk\ell)$ عمودي على المستوي ($hk\ell$) " لان المستقيم العمودي على مستقيمين في مستوي يكون عموديا على المستوي نفسه ".

نناقش الآن مسألة اختيار المحاور الأساسية وتأثيرها على النتيجة أعلاه . الشبكة المعكوسة لشبكة برافي المكعبة البسيطة هي مكعبة أيضا ، وقرائن ملر لمستوي في الشبكة (Sc) هي احداثيات الشعاع العمودي عليه وذلك بالنسبة ، لمجموعة الاحداثيات الاساسية المنطبقة على أحرف المكعب. أما الشبكات المكعبة fcc و bcc فهي تعتبر شبكة مكعبة بسيطة مع قواعد عقدية . وبما أن كل مستوي في الشبكتين fcc و bcc هو ايضا مستوي في الشبكة Sc (التي هي جزء من الشبكتين fcc و bcc) ، لذلك فان المستويات البلورية في fcc و bcc توصف كوصف المستويات البلورية في Sc أي بالنسبة للاحداثيات المنطبقة على حافات المكعب الاصطلاحي (Conventional) .

فلو أخذنا مستويا في الشبكة fcc (أو bcc) قرائنه ($hk\ell$) محسوبة بالنسبة للمحاور المنطبقة على أحرف المكعب الاصطلاحي ، و(HKL) بالنسبة للمحاور الاساسية للشبكة fcc (أو bcc) $\vec{a}_1$ ، $\vec{a}_2$ ، $\vec{a}_3$ _ المعادلة

(1 _ 8) أو (1 _ 5). فطالما أن

$$^{*}\vec{G} = H\vec{b}'_1 + K\vec{b}'_2 + L\vec{b}'_3 = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + \ell\vec{b}_3 \qquad (26\_2)$$

حيث ($\vec{b}'_1 , \vec{b}'_2 , \vec{b}'_3$)_ أشعة الشبكة المعكوسة المحسوبة على أسس المحاور الأساسية ($\vec{a}_1 , \vec{a}_2 , \vec{a}_3$) أما ($\vec{b}_1 , \vec{b}_2 , \vec{b}_3$) فهي أشعة الشبكة المعكوسة المحسوبة على أساس الأشعة الكارتيزية المنطبقة على أحرف المكعب (وهي تعتبر أساسية طالما اعتبرنا الشبكة fcc كشبكة بسيطة Sc مع قواعد عقدية) . وبما أننا نفضل التعامل مع معاملات ملر محسوبة بالنسبة لمحاور المكعب الاصطلاحي لذلك نتعامل مع هيئة الشعاع $\vec{G}(hk\ell)$ الموجود في الجهة اليمنى للمعادلة أعلاه ونقول أنه عمودي على المستوي ($hk\ell$).

ويجب التذكر أنه عند وصف المستويات في البلورات الغير مكعبة فان قرائن ملر لمستوي هي احداثيات العمود عليه محسوبة بالنسبة لاحداثيات الشبكة المعكوسة بدلا من الشبكة المباشرة .

وأخيرا نذكر بأنه طبقا للخاصية أعلاه : عقد الشبكة المعكوسة هي رؤوس الأشعة $\vec{G}(hk\ell)$ العمودية على المستويات المتوازية ($hk\ell$). لهذا فان تأشير (Indexing) عقد الشبكة المعكوسة يتم بدلالة قرائن ملر للمستويات، لأن كل هذه العقد تحدد بالشعاع الأساسي $\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + \ell\vec{b}_3$. فكل عقدة من عقد الشبكة المعكوسة تقابل أو تمثل مجموعة المستويات المتوازية في الشبكة المباشرة . وقد كتبنا $\vec{G}$ بدلالة الأرقام h , k , ℓ لكي يكون له معنى محدد.

* هذه تبرهن على أساس المعادلة (2 _ 10 و 11)

ج ـ أن قيمة الشعاع $\vec{G}(hkl)$ تتناسب عكسيا مع الفاصلة بين المستويات البلورية المتوازية (hkl) العمودية عليه.

البرهان: نعود للشكل (2 ـ 17) فنقول بأن أحد المستويات المتوازية (hkl) يمر بالمركز "O" (معادلته $hx + ky + lz = 0$) والمستوي الموازي والأقرب له هو المبين في الشكل (ومعادلته $hx + ky + lz = 1$). ونفرض أن الفاصلة بين مجموعة المستويات المتوازية هذه تساوي d_{hkl} وتساوي البعد OH حيث $\vec{G}$ وبالتالي (OH) عمودي على المستويات (hkl). ويمكن اعتبار البعد OH كمسقط للشعاع $\vec{OA}$ على الشعاع $\vec{G}$، أي أن:

$$\vec{G}(hkl)\cdot\vec{OA} = |\vec{G}|\, d_{hkl}$$

$$(h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3)\cdot\frac{\vec{a}_1}{h} = |\vec{G}|\cdot d_{hkl}$$

ومنه نجد أن:

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}(hkl)|} \qquad (27-2)$$

أي أن الفاصلة بين المستويات الشبكية المتوازية (hkl) تتناسب عكسيا مع قيمة شعاع الشبكة المعكوسة العمودي عليها، وهذه الأخيرة معتمدة على قيم h، k، l (المعادلة 2 ـ 25). معنى هذا أن الفاصلة بين المستويات البلورية ذات القرائن الكبيرة تكون صغيرة بالنسبة للفاصلة بين المستويات ذات القرائن الصغيرة، وهذه النتيجة تبدو واضحة في الشكل (2 ـ 7ـب).

علاقة الفواصل بين المستويات المتوازية:

بمعرفة ثوابت الشبكة البلورية a، b، c، α، β، γ نستطيع استخراج علاقة عامة (مفترضين أن $a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma$) لحساب الفواصل بين المستويات البلورية باستخدام العلاقة:

$$d_{hkl}^2 = \frac{4\pi^2}{|\vec{G}(hkl)|^2}$$

حيث:

$$|\vec{G}|^2 = (h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3)\cdot(h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3)$$

$$|\vec{G}|^2 = h^2\vec{b}_1\cdot\vec{b}_1 + k^2\vec{b}_2\cdot\vec{b}_2 + l^2\vec{b}_3\cdot\vec{b}_3 + 2hk\,\vec{b}_1\cdot\vec{b}_2 + 2kl\,\vec{b}_2\cdot\vec{b}_3 + 2lh\,\vec{b}_3\cdot\vec{b}_1$$

والآن نأخذ الخلية الاولية ونعتبر محاور الانسحاب الاساسية منطبقة على أحرفها (فاذا كانت الخلية غير أساسية، فنعتبرها أساسية مع قاعدة عقدية فهذا لا يؤثر على حساب d_{hkl})، أي:

$$\vec{a}_1 = a\vec{u}_{a_1}, \quad \vec{a}_2 = b\vec{u}_{a_2}, \quad \vec{a}_3 = c\vec{u}_{a_3}$$

حجم الخلية الاولية ((الاساسية)) يساوي:

$$v = |\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\wedge\vec{a}_3)|$$

وباستعمال علاقة $\vec{a}_j$ مع $\vec{b}_i$ نجد:

$$\frac{1}{d^2_{hkl}} = \frac{1}{v^2}\Big\{h^2|\vec{a}_2\wedge\vec{a}_3|^2 + k^2|\vec{a}_3\wedge\vec{a}_1|^2 + l^2|\vec{a}_1\wedge\vec{a}_2|^2 + 2hk(\vec{a}_2\wedge\vec{a}_3)\cdot(\vec{a}_3\wedge\vec{a}_1) + 2kl(\vec{a}_3\wedge\vec{a}_1)\cdot(\vec{a}_1\wedge\vec{a}_2) + 2hl(\vec{a}_1\wedge\vec{a}_2)\cdot(\vec{a}_2\wedge\vec{a}_3)\Big\}$$

ومن قوانين التحليل الشعاعي:

$$(\vec{a}_i\wedge\vec{a}_j)\cdot(\vec{a}_j\wedge\vec{a}_k) = (\vec{a}_i\cdot\vec{a}_j)(\vec{a}_j\cdot\vec{a}_k) - (\vec{a}_i\cdot\vec{a}_k)a_j^2 = a_i a_j^2 a_k(\cos\alpha_{ij}\cos\alpha_{jk} - \cos\alpha_{ik})$$

حيث α_{ij}، α_{jk}، α_{ik} ـ هي الزوايا بين الأشعة $(\vec{a}_i, \vec{a}_j)$، $(\vec{a}_j, \vec{a}_k)$ و $(\vec{a}_k, \vec{a}_i)$ على التوالي. فباستعمال الزاوية α بين $(\vec{a}_2$ و $\vec{a}_3)$ و β

بين $(\vec{a}_3 , \vec{a}_1)$ ؛ و γ بين $(\vec{a}_2 , \vec{a}_1)$ نجد أخيرا :

(28 _ 2)
$$\frac{1}{d^2_{hkl}} = \frac{a^2b^2c^2}{v^2}\left\{\frac{h^2\sin^2\alpha}{a^2}+\frac{k^2\sin^2\beta}{b^2}+\frac{l^2\sin^2\gamma}{c^2}+\frac{2hk}{ab}(\cos\alpha\cos\beta-\cos\gamma)+\frac{2kl}{bc}(\cos\beta\cos\gamma-\cos\alpha)+\frac{2lh}{ac}(\cos\alpha\cos\gamma-\cos\beta)\right\}$$

والحجم v يساوي :

(29 _ 2)
$$v^2 = |\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\wedge\vec{a}_3)|^2 = \begin{vmatrix} \vec{a}_1\cdot\vec{a}_1 & \vec{a}_1\cdot\vec{a}_2 & \vec{a}_1\cdot\vec{a}_3 \\ \vec{a}_2\cdot\vec{a}_1 & \vec{a}_2\cdot\vec{a}_2 & \vec{a}_2\cdot\vec{a}_3 \\ \vec{a}_3\cdot\vec{a}_1 & \vec{a}_3\cdot\vec{a}_2 & \vec{a}_3\cdot\vec{a}_3 \end{vmatrix}$$

$$v^2 = a^2b^2c^2(1+2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma-\cos^2\alpha-\cos^2\beta-\cos^2\gamma)$$

وباستخدام المعادلتان أعلاه نستطيع أخذ الحالات الخاصة التالية :

1 _ عندما $a=b=c$ ، $\alpha=\beta=\gamma\neq\frac{\pi}{2}$ ، نسمي الشبكة بالثلاثية المتساوية الأحرف :

(30 _ 2)
$$\frac{1}{d^2_{hkl}} = \frac{(h^2+k^2+l^2)\sin^2\alpha+2(hk+kl+lh)(\cos^2\alpha-\cos\alpha)}{a^2(1+2\cos^3\alpha-3\cos^2\alpha)}$$

2 _ عندما يكون $a=b$ ، $\alpha=\beta=\frac{\pi}{2}$ ، $\gamma=120°$ ، نسمي الشبكة سداسية .

(31 _ 2)
$$\frac{1}{d^2_{hkl}} = \frac{4}{3}\left(\frac{h^2+hk+k^2}{a^2}\right)+\frac{l^2}{c^2}$$

3 _ عندما $\alpha=\gamma=\frac{\pi}{2}$ نسمي الشبكة أحادية الميل:

(32 _ 2)
$$\frac{1}{d^2_{hkl}} = \frac{1}{\sin^2\beta}\left(\frac{h^2}{a^2}+\frac{k^2\sin^2\beta}{b^2}+\frac{l^2}{c^2}-\frac{2hl\cos\beta}{ac}\right)$$

4 _ عندما $\alpha=\beta=\gamma=\frac{\pi}{2}$ نسمي الشبكة معينية مستقيمة :

(33 _ 2)
$$\frac{1}{d^2_{hkl}} = \frac{h^2}{a^2}+\frac{k^2}{b^2}+\frac{l^2}{c^2}$$

5 _ عندما $\alpha=\beta=\gamma=\frac{\pi}{2}$ و $a=b$ نسمي الشبكة رباعية :

(34 _ 2)
$$\frac{1}{d^2_{hkl}} = \frac{h^2+k^2}{a^2}+\frac{l^2}{c^2}$$

6 _ عندما $\alpha=\beta=\gamma=\frac{\pi}{2}$ ، $a=b=c$ نسمي الشبكة مكعبة :

(35 _ 2)
$$\frac{1}{d^2_{hkl}} = \frac{h^2+k^2+l^2}{a^2}$$

د _ حجم الخلية الاساسية للشبكة المعكوسة متناسب عكسيا مع حجم الخلية الاولية الاساسية للشبكة المباشرة .

البرهان : نبرهن هذه الخاصية من تعريف الحجم للخلية الأساسية للشبكة المعكوسة v_R :

(36 _ 2)
$$v_R = |\vec{b}_1\cdot(\vec{b}_2\wedge\vec{b}_3)|$$
$$= (2\pi)^3\,\frac{(\vec{a}_2\wedge\vec{a}_3)\cdot\{(\vec{a}_3\wedge\vec{a}_1)\wedge(\vec{a}_1\wedge\vec{a}_2)\}}{v^3}$$

حيث $v=|\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\wedge\vec{a}_3)|$ _ حجم الخلية الاساسية للشبكة المباشرة .

وحيث أن :

$$\vec{A}\wedge(\vec{B}\wedge\vec{C}) = (\vec{A}\cdot\vec{C})\vec{B}-(\vec{A}\cdot\vec{B})\vec{C}$$

اذن :

$$(\vec{a}_3\wedge\vec{a}_1)\wedge(\vec{a}_1\wedge\vec{a}_2) = [\vec{a}_2\cdot(\vec{a}_3\wedge\vec{a}_1)]\,\vec{a}_1-[\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_3\wedge\vec{a}_1)]\,\vec{a}_2$$

A B C

$$= v\,\vec{a}_1$$

وذلك لأن : $\vec{A}\cdot(\vec{B}\wedge\vec{C}) = \vec{C}\cdot(\vec{A}\wedge\vec{B}) = \vec{B}\cdot(\vec{C}\wedge\vec{A})$

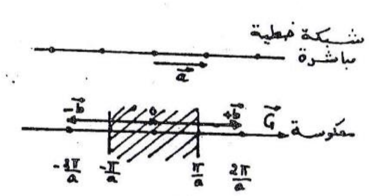
ومنه نجد أن :

$$v_R = (2\pi)^3 \frac{v(\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)\cdot \vec{a}_1}{v^3} = \frac{(2\pi)^3}{v} \qquad (37-2)$$

هـ- منطقة بريليون الاولى:

ان الاشعة $\vec{b}_1$ ، $\vec{b}_2$ ، $\vec{b}_3$ تحدد في الفضاء $\vec{G}$ أو فضاء الشبكة المعكوسة متوازي سطوح يمثل الخلية الاساسية للشبكة المعكوسة. ولكنه وفي أغلب الأحيان يتم التعامل مع خلية أساسية أخرى هي خلية فيكز - زايتس في فضاء الشبكة المعكوسة، وتسمّى هذه الخلية بمنطقة بريليون الاولى. وطريقة تصميم هذه المنطقة تشبه تماما طريقة تصميم خلية فيكنر - زايتس للشبكة المباشرة. فنصل أية عقدة من عقد الشبكة المعكوسة مع كل العقد المجاورة لها بمستقيمات، ومن ثم نقيم على هذه المستقيمات ومن منتصفاتها مستويات؛ أن أصغر متعدد سطوح متكون من هذه المستويات يمثل منطقة بريليون الاولى. والمستويات المذكورة أعلاه لا نهائية لذلك فانها تشكل فيما بينها مناطق أخرى تسمّى مناطق بريليون الثانية والثالثة والرابعة ... الخ. وسنعود لفهم هذا الموضوع أكثر لاحقا.

والشكل (2 - 8) يبيّن "شبكة" خطية شعاعها الأساسي $\vec{a}$ ، و "شبكة" معكوسة شعاعها الأساسي $\vec{b}$ ذو الطول $\frac{2\pi}{a}$. أصغر شعاعين أساسيين "للشبكة" المعكوسة اعتبارا من عقدة ما هما $-b$ و $+b$ ؛ والخطين العموديين عليها من المنتصف يمثلان حدود منطقة بريليون الاولى حيث تكون قيمة G عند هذه الحدود $\pm\frac{\pi}{a}$.

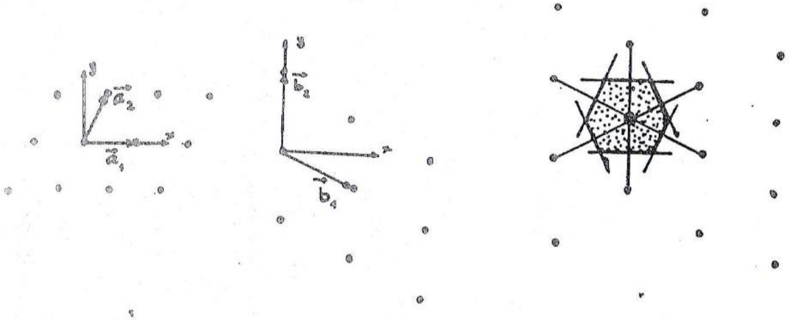


شكل (2 - 8)

والشكل (2 - 9) يمثل شبكة مائلة مستوية (ببعدين) شعاعاها الاساسيان هما $\vec{a}_1 = a\vec{i}$ و

$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}\vec{i} + a\vec{j}$ حيث $\vec{i}$ و $\vec{j}$ هما وحدتا الأشعة الكارتيزية. ولحساب الشبكة المعكوسة نفرض أن $\vec{a}_3 = a\vec{k}$ عموديا على مستوى الرسم. وتصمم الشبكة المعكوسة طبقا للعلاقات (2 - 19). حجم الخلية الاساسية يساوي:

$v = |a_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)| = a^3$. والأشعة الاساسية للشبكة المعكوسة



-أ- -ب- -ج-

شكل (2 - 9)

هي:

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3}{v} = \frac{2\pi}{a}\left(\vec{i} - \frac{1}{2}\vec{j}\right)$$

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1}{v} = \frac{2\pi}{a}\vec{j}$$

ولا توجد ضرورة لحساب $\vec{b}_3$ لان مستوي الشبكة المعكوسة هو نفس مستوي الشبكة المباشرة (x - y): $\vec{b}_1$ عمودي على المستوي ($\vec{a}_2 , \vec{a}_3$) و $\vec{b}_2$ عمودي على المستوي ($\vec{a}_1 , \vec{a}_3$) أي أن $\vec{b}_1$ ، $\vec{b}_2$ تقع في نفس مستوي الشبكة المباشرة

(y ـ x). والشبكة المعكوسة مبينة في الشكل (2 ـ 9ب). وباستخدام نفس أسلوب بناء خلية فيكنر ـ زايتس نستطيع أن نصمم منطقة بريليون الاولى وهي موضحة في الشكل (2 ـ 9 ج).

ونذكر بأن حجم الخلية الاساسية للشبكة المباشرة أو المعكوسة لا يعتمد على طريقة اختيار الأشعة الاساسية (وهو يكون أصغر من حجم الخلية الأولية غير الاساسية). لذلك فان حجم خلية فيكنر ـ زايتس أو حجم منطقة بريليون الاولى (وهما خليتان أساسيتان) هو نفس حجم الخلية الاساسية التي بهيئة متوازي سطوح عموما. وعلى هذا الأساس تصح المعادلة (2 ـ 37) لحساب حجم منطقة بريليون الاولى.

ولو عدنا الى الشكل (2 ـ 9) لوجدنا أن " مساحة " منطقة بريليون تساوي $|\vec{b}_1 \wedge \vec{b}_2| = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2$. وسندرس الآن أمثلة أخرى على تعيين منطقة بريليون الاولى والشبكة المعكوسة.

5 ـ أمثلة: تحديد الشبكة المعكوسة ومنطقة بريليون:

عقد الشبكة المعكوسة هي رؤوس الأشعة $\vec{G}$ أو رؤوس الأعمدة على المستويات البلورية للشبكة المباشرة. فاذا تصورنا وجود شبكة مباشرة وحددنا جميع مستوياتها (أو المهمة منها) وبنينا على كل مستوي (أو مجموعة مستويات متوازية) شعاعا $\vec{G}$ عمودي عليه وبطول يحقق المعادلة (2 ـ 27) فان رؤوس هذه الاشعة تمثل الشبكة المعكوسة. ولكننا سنقوم بتعيين الشبكة المعكوسة بطريقة الحسابات الشعاعية.

المثال الأول: الشبكة المكعبة البسيطة (Sc):

أشعة الانتقال الأساسية للشبكة المكعبة البسيطة منطبقة على أحرف مكعب يمثل الخلية الأساسية طول ضلعه a، وهي:

$$\vec{a}_1 = a\vec{i} \quad , \quad \vec{a}_2 = a\vec{j} \quad , \quad \vec{a}_3 = a\vec{k}$$

حيث $\vec{i}$ ، $\vec{j}$ ، $\vec{k}$ ـ تمثل وحدات الأشعة الكارتيزية. وبتطبيق المعادلات (2 ـ 19) نجد:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\vec{i} \quad , \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\vec{j} \quad , \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\vec{k} \qquad (2-38)$$

حيث $v = a^3$ ـ حجم الخلية الأساسية. وهذه الأشعة تحدد الخلية الأساسية للشبكة المعكوسة حيث يتبين منها أن الشبكة المعكوسة هي أيضا مكعبة بسيطة خليتها الأساسية مكعب طول ضلعه $\frac{2\pi}{a}$ وحجمه $v_R = |\vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \wedge \vec{b}_3)| = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$

وحدود منطقة بريليون الاولى هي:

$$\pm\frac{1}{2}\vec{b}_1 = \pm\frac{\pi}{a}\vec{i} \quad , \quad \pm\frac{1}{2}\vec{b}_2 = \pm\frac{\pi}{a}\vec{j} \quad , \quad \pm\vec{b}_3 = \pm\frac{\pi}{a}\vec{k}$$

أي أن منطقة بريليون الاولى محددة بستة أشعة (أو ثلاثة أزواج متعامدة) لذلك فهي عبارة عن مكعب طول ضلعه $\frac{2\pi}{a}$ وحجمه $\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$ ـ ويساوي v_R.

المثال الثاني: الشبكة المعكوسة الممركزة الجسم (bcc):

الأشعة الأساسية لهذه الشبكة معطاة في المعادلة (1 ـ 5) والشكل (1 ـ 8 ب):

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(-\vec{i}+\vec{j}+\vec{k}) \quad , \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{k}+\vec{i}-\vec{j})$$
$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i}+\vec{j}-\vec{k})$$

حيث a ـ طول ضلع المكعب ـ الخلية الاولية غير الاساسية و $\vec{i}$ ، $\vec{j}$ ، $\vec{k}$ وحدات الاشعة الكارتيزية المنطبقة على أحرف المكعب. حجم الخلية الاساسية يساوي:

$$v = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)| = a^3/2$$

وباستخدام المعادلات (2 ـ 19) نجد:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\vec{j}+\vec{k}) \quad , \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\vec{k}+\vec{i}) \qquad (39\_2)$$
$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i}+\vec{j})$$

وهذه هي الأشعة الاساسية للشبكة المعكوسة. وحجم الخلية الأساسية المعكوسة يساوي:

$$v_R = |\vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \wedge \vec{b}_3)| = 2\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 \qquad (40\_2)$$

وبمقارنة الأشعة (2 ـ 39) مع الأشعة (1 ـ 8) يتبين أن هذه الأشعة هي الأشعة الأساسية لشبكة مكعبة fcc ولكن طول ضلع خليتها الاولية (غير الاساسية) ـ المكعب يساوي $\frac{4\pi}{a}$. ومن هذا يتضح أن الشبكة المكعبة fcc هي الشبكة المعكوسة للشبكة المكعبة bcc .

والشعاع الأساسي للشبكة المعكوسة يساوي:

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{a}\left[(k+l)\vec{i} + (h+l)\vec{j} + (h+k)\vec{k}\right] \qquad (41\_2)$$

وهو يحدد كل عقد الشبكة المعكوسة للشبكة المكعبة bcc . والأشعة (2 ـ 39) تعتبر أصغر أشعة (تختلف عن الصفر) أساسية للشبكة المعكوسة. وعموما، نقول أن

أصغر أشعة أساسية للشبكة المعكوسة $\vec{G}$ هي:

$$\frac{2\pi}{a}(\pm\vec{i} \pm\vec{j}) \quad , \quad \frac{2\pi}{a}(\pm\vec{j} \pm\vec{k}) \qquad (42\_2)$$
$$\frac{2\pi}{a}(\pm\vec{i} \pm\vec{k})$$

وحيث أن أختيار الاشارة حرا لذلك يوجد (12) شعاعا يحدد الخلية الأساسية ـ منطقة بريليون ذات الحجم المساوي الى $v_R = 2\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$. وشكل منطقة بريليون الاولى للشبكة bcc هو نفس شكل خلية فيكنر ـ زايتس للشبكة fcc أي بصورة أثنعشري معيني أي له أثنا عشر سطحا متشابها بهيئة معين كما هو واضح في الشكل (1 ـ 12 ب).

المثال الثالث: الشبكة المكعبة الممركزة الوجوه fcc :

الأشعة الأساسية لهذه الشبكة معطاة في المعادلة (1 ـ 8) والشكل (1 ـ 10):

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{j}+\vec{k}) \quad , \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{k}+\vec{i})$$
$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i}+\vec{j})$$

حجم الخلية الأساسية يساوي:

$$v = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)| = a^3/4$$

وباستخدام المعادلات (2 ـ 19) نجد:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(-\vec{i}+\vec{j}+\vec{k}) \quad , \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\vec{k}+\vec{i}-\vec{j}) \qquad (43\_2)$$
$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i}+\vec{j}-\vec{k})$$

وهذه هي الأشعة الاساسية للشبكة المعكوسة؛ وحجم خليتها الأساسية يساوي:

$$v_R = |\vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \wedge \vec{b}_3)| = 4\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 \qquad (44\_2)$$

وهو ضعف حجم الخلية الأساسية للشبكة المعكوسة bcc . وبمقارنة الأشعة (2_43) مع الأشعة (1 _ 5) يتبين أن هذه الأشعة الاساسية لشبكة مكعبة bcc ولكن طول ضلع خليتها الاولية (غير الأساسية) _ المكعب يساوي $\frac{4\pi}{a}$. ومن هذا يتضح أن الشبكة المكعبة bcc هي الشبكة المعكوسة للشبكة المكعبة fcc والعكس بالعكس .

أشعة الشبكة المعكوسة هي:

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{a}\left[(-h+k+l)\,\vec{i} + (h-k+l)\,\vec{j} + (h+k-l)\,\vec{k}\right]$$

حيث h, k, l أعداد صحيحة .

وأصغر أشعة أساسية $\vec{G}$ للشبكة المعكوسة :

$$\frac{2\pi}{a}\left(\pm\vec{i} \pm \vec{j} \pm \vec{k}\right) \qquad (45\_2)$$

وعددها ثمانية تحدد أساسا منطقة بريليون ذات الحجم المساوي الى $v_R = 4\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$. وشكل منطقة بريليون الاولى للشبكة fcc هو نفس شكل خلية فيكنر _ زايتس للشبكة bcc أي بصورة ثماني وجوه مشذب أي له ثمانية وجوه عبارة عن مسدسات منتظمة محددة بالأشعة (2 _ 45) _ أي بالمستويات العمودية عليها من منتصفاتها _ ، ووستة وجوه مربعة الشكل عمودية على أشعة الشبكة المعكوسة التالية $\frac{2\pi}{a}(\pm 2\vec{i})$(*) و $\frac{2\pi}{a}(\pm 2\vec{j})$ و $\pm\frac{2\pi}{a}(2\vec{k})$ وذلك من منتصفاتها . وذلك كما في الشكل (1 _ 12 أ).

(*) الشعاع $\frac{2\pi}{a}(2\vec{i})$ هو شعاع الشبكة المعكوسة لأنه يساوي $\vec{b}_2 + \vec{b}_3$.

تمرينات الفصل الثاني

1 _ خذ شبكة مكعبة وأجب عن الأسئلة التالية :

1) عين الاتجاهات [100] ، [111] ، [221] ، [120] ، [320] ،
عين المستويات (100)، (111)، (221)، (120)، (320).

2) أحسب الزاوية بين الاتجاهين [111] و $[\bar{1}\bar{1}1]$.
أحسب الزاوية بين المستويين (100) و (110) .

3) ما هي معاملات ملر لمستوي
أ _ يقطع المحاور بالنقاط A ، B ، C حيث :

$$OA = a\,,\quad OB = \frac{3}{2}a\,,\quad OC = \frac{1}{2}a$$

ب _ يمر بالنقاط : A(111) ، B(0,1,2) ، $C(\bar{1},2,1)$.

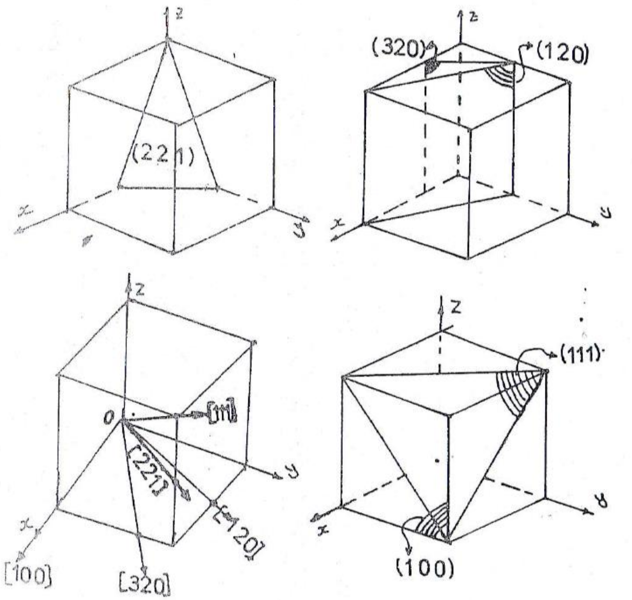
ج _ الحاوي على الشعاعين $\vec{B}\,[\bar{2}10]$ و $\vec{A}\,[0\bar{3}2]$.

4) ما هي قرائن فيس لمستقيم تقاطع المستويين (111) و $(\bar{1}10)$.

5) ما هي قرائن ملر لمستوي حاوي على الأشعة $\vec{A}\,[21\bar{1}]$ ، $\vec{B}\,[120]$ و $[30\bar{2}]$

الحل:

(1



شكل تمرين (1)

2) الزاوية بين الاتجاهين [$u_1 v_1 w_1$] و [$u_2 v_2 w_2$] في المجموعة المكعبة هي :

$$\cos\theta = \frac{u_1u_2+v_1v_2+w_1w_2}{\sqrt{(u_1^2+v_1^2+w_1^2)(u_2^2+v_2^2+w_2^2)}}$$

$$\cos\theta(\overrightarrow{111},\overrightarrow{\bar{1}11}) = -\frac{1}{3} \quad , \quad \theta = 109^\circ\, 28'$$

الشعاع [hkl] عمودي على المستوي (hkl) للمجموعة المكعبة، لذلك نستخرج الزاوية بين العمودين على المستويين وهما [100] ، [110]

$$\cos\theta(\overrightarrow{100},\overrightarrow{110}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad , \quad \theta = 45^\circ$$

3) أ ـ $OA : OB : OC = 1 : \frac{3}{2} : \frac{1}{2}$

$$h : k : l = 1 : \frac{2}{3} : 2 \quad \text{و} \quad (hkl) = (326)$$

ب ـ معادلة المستوي $hx + ky + lz = m$

اذن:

$$\left.\begin{aligned} h + k + l &= m \\ k + 2l &= m \\ -h + k + 2l &= m \end{aligned}\right\} \quad h = \frac{m}{4} \ , \ k = \frac{m}{2} \ , \ l = \frac{m}{4}$$

$$h : k : l = \frac{m}{4} : \frac{m}{2} : \frac{m}{4} \quad \text{و} \quad (hkl) = (121)$$

جـ ـ العمود على المستوي $\vec{N}$ يساوي :

$$\vec{N} = \overrightarrow{OA} \wedge \overrightarrow{OB} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ 0 & -3 & 2 \\ -2 & 1 & 0 \end{vmatrix}$$

وحدة الشعاع $\vec{n}$:

$$n = \frac{\vec{N}}{N} = -\frac{2\vec{i} + 4\vec{j} + 6\vec{k}}{\sqrt{56}} \quad , \quad \text{و} \ [hkl] = [123]$$

وحيث أن العمود على المستوي (hkl) هو الشعاع [hkl] اذن المستوي هو (123).

4) قرائن فيس للشعاع [uvw] يستنتج من المعادلتين التاليتين:

$$hu+kv+lw=0 \begin{cases} h_1u + k_1v + l_1w = u + v + w = 0 \\ h_2u + k_2v + l_2w = -u + v = 0 \end{cases}$$

وباستخدام طريقة المتصالب نجد $u : v : w$ أي:

$$\begin{array}{c|cccc|c} h_1 & k_1 & l_1 & h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 & h_2 & k_2 & l_2 \end{array} \equiv \begin{array}{c|cccc|c} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{array}$$

$$u : v : w = (k_1l_2 - k_2l_1) : (l_1h_2 - l_2h_1) : (h_1k_2 - h_2k_1)$$

$$= -1 : -1 : 2 \quad ; \quad [uvw] = [\bar{1}\bar{1}2]$$

5) هذه الاشعة واقعة في مستوي واحد لأن $\vec{A}\cdot(\vec{B}\wedge\vec{C})=0$. والعمود على المستوي هو العمود على أي شعاعين فيه، اذن العمود على المستوي $\vec{N}$ يساوي:

$$\vec{N} = \vec{A} \wedge \vec{B} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ 2 & 1 & \bar{1} \\ 1 & 2 & 0 \end{vmatrix} = 2\vec{i} - \vec{j} + 3\vec{k}$$

وحدة الشعاع العمودي هي:

$$\vec{n} = \frac{\vec{N}}{N} = \frac{2\vec{i} - \vec{j} + 3\vec{k}}{\sqrt{14}}$$

ومنه $\vec{n} \,//\, [2\,\bar{1}\,3]$ وقرائن ملر للمستوي العمود على $\vec{n}$ هي ($2\,\bar{1}\,3$).

2 ـ ما هو الشرط المفروض على المستوي (hkl) لكي ينتمي الى المنطقة التي محررها $[u\,v\,w]$.

الحل : نأخذ المستوي (hkl):

$$hx + ky + lz = m$$

ينتمي الى المنطقة ذات المحور $[u\,v\,w]$. ننقل هذا المحور نقلا موازيا لكي ينطبق على المستوي (hkl) مارا بالنقطة الاختيارية $A(x_0, y_0, z_0)$. عندئذ فان هذا المحور سيمر حتما بالنقطة الأخرى B حيث $B(x_0+u\,,\ y_0+v\,,\ z_0+w)$ (لانه، مثلا $(x_0 + u) - x_0 = u$). النقطتان A و B تحققان معادلة المستوي (hkl)، أي:

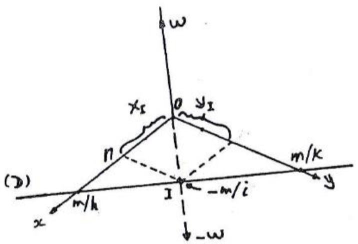
$$hx_0 + ky_0 + lz_0 = m$$

$$h(x_0+u) + k(y_0+v) + l(z_0+w) = m$$

وبالطرح نحصل على الشرط المفروض على المستوي (hkl) لكي ينتمي الى المنطقة التي محورها $[u\,v\,w]$ وهو :

$$hu + kv + lw = 0$$

3 ـ بين أن $i = -(h + k)$ تكون صحيحة دائما للمستويات المحددة بقرائن ملر ـ برافي.



شكل تمرين 3

الحل: نأخذ مستويا اختياريا ($hkil$) يقطع المستوي ($w - y - x$) بالخط المستقيم (D) كما في الشكل. وهذا المستقيم يقطع المحاور x و y و w بالمقادير $\frac{m}{h}$ ، $\frac{m}{k}$ ، $\frac{m}{i}$ على التوالي. معادلة الخط المستقيم D هي

$$hx + ky = m$$

النقطة I ذات الاحداثيات ($x_I\,,\ y_I$) تقع

على المستقيم D :

$$hx_I + ky_I = m$$

وتبعد ببعدين متساويين عن المحورين x و y وذلك لان الاتجاه ($-w$) يقسم الزاوية بين المحورين x و y الى نصفين متساويين، اذن $x_I = y_I$ ومنه $x_I = \frac{m}{h+k}$ وحيث أن المثلث OnI متساوي الأضلاع اذن $On = OI$ وباستعمال الاشارة نجد أن $On = -OI$ اذن : $x_I = -\frac{m}{i}$

وأخيرا نجد:

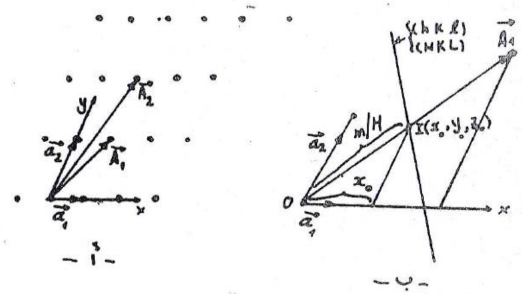
$$\frac{m}{h+k} = -\frac{m}{i} \qquad \text{و} \qquad i = -(h + k)$$

4 ـ اشتق العلاقة بين أحداثيات ملر لمستوي معين عندما تحسب بالنسبة لمجموعتين مختلفتين من المحاور البلورية .

الحل: قرائن ملر لمستوي معين هي (hkl) محسوبة بالنسبة لاختيار معين لأشعة الانسحاب (ولتكن $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$) وقرائن ملر لنفس هذا المستوي ولكنها محسوبة بالنسبة لاختيار آخر لأشعة الانسحاب ولتكن ($\vec{A}_1$ ، $\vec{A}_2$ ، $\vec{A}_3$) هي (HKL). والمطلوب معرفة العلاقة بين قرائن ملر في كلا الحالتين. نتصور الموضوع باستخدام شبكة ببعدين (للتبسيط). فالشكل يمثل أسلوبان لاختيار أشعة الانسحاب هما ($\vec{a}_1$ ، $\vec{a}_2$) و ($\vec{A}_1$ ، $\vec{A}_2$). ونجعل المحوران y و x (ليس من الشرط أن يكونا متعامدان) منطبقان على الأشعة ($\vec{a}_1$ و $\vec{a}_2$). نحلل الشعاعان $\vec{A}_1$ و $\vec{A}_2$ * بدلالة الأشعة $\vec{a}_1$ و $\vec{a}_2$:

---

* هذه المعادلات تنتج من قوانين جمع الأشعة، والرموز w ، v ، u هي نفس رموز قرائن فيس.



شكل تمرين 4

$$\vec{A}_1 = u_{A_1}\vec{a}_1 + v_{A_1}\vec{a}_2 \quad و \quad \vec{A}_2 = u_{A_2}\vec{a}_1 + v_{A_2}\vec{a}_2$$

(حيث يبدو من الشكل أن: $u_{A_1} = v_{A_1} = u_{A_2} = 1$ ، $v_{A_2} = 2$) وبالتعميم في الأبعاد الثلاثة نجد ثلاثة معادلات، نكتبها بصيغة المصفوفة :

$$\begin{pmatrix} \vec{A}_1 \\ \vec{A}_2 \\ \vec{A}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{A_1} & v_{A_1} & w_{A_1} \\ u_{A_2} & v_{A_2} & w_{A_2} \\ u_{A_3} & v_{A_3} & w_{A_3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{a}_1 \\ \vec{a}_2 \\ \vec{a}_3 \end{pmatrix}$$

ونسمي هذه المصفوفة (3 x 3) بمصفوفة التحويل.

والآن نأخذ المستوي البلوري (hkl) حيث معادلته بالنسبة للاحداثيات x ، y ، z المنطبقة على الأشعة $\vec{a}_1$ ، $\vec{a}_2$ ، $\vec{a}_3$ هي $hx + ky + lz = m$

هذا المستوي يتقاطع مع الشعاع $\vec{A}_1$ بالنقطة $I(x_0, y_0, z_0)$ التي تبعد عن مبدأ المحاور بالبعد $\frac{m}{H}$ كما هو واضح في الشكل – أن احداثيات ملر لهذا المستوي بالنسبة للأساس : $\vec{A}_1$ و $\vec{A}_2$ و $\vec{A}_3$ هي (HKL) – النقطة I تحقق معادلة المستوي:

$$hx_0 + ky_0 + lz_0 = m$$

وهي كذلك تحقق معادلة حامل الشعاع $\vec{A}_1$ محسوبة بالنسبة للاحداثيات x ، y ، z السابقة الذكر؛ معادلة حامل الشعاع $\vec{A}_1$ متكونة من تقاطع معادلتا المستويان:

$$\frac{y}{x} = \frac{v_{A_1}}{u_{A_1}} \quad و \quad \frac{z}{x} = \frac{w_{A_1}}{u_{A_1}}$$

اذن:

$$y_0 = \frac{v_{A_1}}{u_{A_1}} x_0 \quad و \quad z_0 = \frac{w_{A_1}}{u_{A_1}} x_0$$

ومما جاء أعلاه نجد أن :

$$x_0 = m\, u_{A_1} / (h\, u_{A_1} + k\, v_{A_1} + l\, w_{A_1})$$

ومن تشابه المثلثين في الشكل (ب) يتبين أن :

$$\frac{m/H}{1} = \frac{x_0}{u_{A_1}}$$

وذلك لأن m/H محسوبا بالنسبة لطول $\vec{A}_1$ الذي يعتبر وحدة قياس المقطع ، اذن:

$$H = h\, u_{A_1} + k\, v_{A_1} + l\, w_{A_1}$$

وبنفس الأسلوب تماما نجد أن:

$$K = h\, u_{A_2} + k\, v_{A_2} + l\, w_{A_2}$$
$$L = h\, u_{A_3} + k\, v_{A_3} + l\, w_{A_3}$$

5 - قرائن ملر لمستوي هي (200) محسوبة بالنسبة لأشعة الانسحاب المنطبقة على أحرف مكعب أو خلية الشبكة المكعبة . الى ماذا تؤول هذه القرائن عندما تحسب بالنسبة لأشعة الانتقال الأساسية في حالة الشبكة المركزة السطوح (F) والمركزة الحجم (I).

الحل:

أشعة الانتقال الاساسية للشبكة fcc هي :

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{j}+\vec{k}) = \frac{1}{2}(\vec{a}_y+\vec{a}_z) \qquad \vec{a}_x = a\vec{i}$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{k}+\vec{i}) = \frac{1}{2}(\vec{a}_z+\vec{a}_x) \quad ; \quad \vec{a}_y = a\vec{j}$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i}+\vec{j}) = \frac{1}{2}(\vec{a}_x+\vec{a}_y) \qquad \vec{a}_z = a\vec{k}$$

وقرائن ملر (HKL) للمستوي (200) = (hkl) تحسب من المعادلة التالية :

$$\begin{pmatrix} H \\ K \\ L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

أي أن (011) = (HKL)

أشعة الانتقال الأساسية للشبكة bcc هي:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{j}+\vec{k}-\vec{i}) = \frac{1}{2}(-\vec{a}_x+\vec{a}_y+\vec{a}_z)$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{k}+\vec{i}-\vec{j}) = \frac{1}{2}(\vec{a}_x-\vec{a}_y+\vec{a}_z)$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i}+\vec{j}-\vec{k}) = \frac{1}{2}(\vec{a}_x+\vec{a}_y-\vec{a}_z)$$

ومنها نجد مصفوفة التحويل ($I \longrightarrow P$)

$$\begin{pmatrix} -1/2 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & -1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & -1/2 \end{pmatrix}$$

وقرائن ملر (HKL) للمستوي (200) = (hkl) تحسب كالسابق

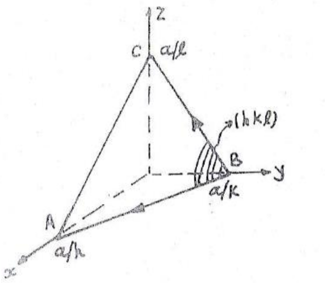
لنجد : $(HKL) = (\bar{1}11)$

6 - **برهن أن الشعاع [hkl] للشبكة المكعبة عمودي على المستوي(hkl) .**

الحل : نأخذ مستويا عاما (hkl) يقطع المحاور الكارتيزية المنطبقة على حروف الخلية الاولية للشبكة المكعبة **(المكعب) بالنقاط :**

$$A\left(\frac{a}{h},0,0\right),\ B\left(0,\frac{a}{k},0\right),\ C\left(0,0,\frac{a}{\ell}\right)$$

ويحتوي هذا المستوي على الشعاعين : $\vec{BA}$ و $\vec{BC}$



شكل تمرين 6

$$\vec{BA} = \frac{a}{h}\vec{i} - \frac{a}{k}\vec{j} \quad ; \quad \vec{BC} = \frac{a}{\ell}\vec{k} - \frac{a}{k}\vec{j}$$

والعمود $\vec{N}$ على هذين الشعاعين (وهو العمود على المستوي $hk\ell$) هو :

$$\vec{N}' = \vec{BC} \wedge \vec{BA} = a^2\left(\frac{\vec{i}}{k\ell} + \frac{\vec{j}}{h\ell} + \frac{\vec{k}}{hk}\right)$$

$$N = a^2\sqrt{\frac{h^2+k^2+\ell^2}{h^2k^2\ell^2}}$$

وشعاع الوحدة العمودي على المستوي ($hk\ell$) هو $\vec{n}$:

$$\vec{n} = \frac{\vec{N}}{N} = \frac{h\vec{i}+k\vec{j}+\ell\vec{k}}{\sqrt{h^2+k^2+\ell^2}}$$

أو بطريقة أخرى: معادلة المستوي ($hk\ell$) ذو المقاطع الموصوفة أعلاه هي:

$$\frac{h}{a}x + \frac{k}{a}y + \frac{\ell}{a}z = m$$

حيث m يتناسب مع بعد المستوي عن مركز المحاور. وهذه المعادلة توضع بالشكل التالـي:

$$\phi(x,y,z) = \frac{h}{a}x + \frac{k}{a}y + \frac{l}{a}z = m$$

وتدرج الدالة ϕ يمثل العمود على المستـوي $\phi = m$:

$$\vec{\nabla}\phi = \vec{i}\,\frac{\partial\phi}{\partial x} + \vec{j}\,\frac{\partial\phi}{\partial y} + \vec{k}\,\frac{\partial\phi}{\partial z}$$

$$= \frac{1}{a}\left(h\vec{i} + k\vec{j} + l\vec{k}\right)$$

وشعـاع الوحدة العمود يسـاوي :

$$\vec{n} = \frac{\vec{\nabla}\phi}{|\vec{\nabla}\phi|} = \frac{h\vec{i} + k\vec{j} + l\vec{k}}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

ومن التعريف الأسـاسي للشعـاع $[hkl]$ نجد أنه :

$$[hkl] = ha\vec{i} + ka\vec{j} + la\vec{j}$$

اذن :

$$[hkl] = a\sqrt{h^2+k^2+l^2}\,\vec{n}$$

فالشعاعان $\vec{n}$ و $[hkl]$ متوازيـان بمعنى أن الشعـاع $[hkl]$ عمـودي على المستوي (hkl) للشبكـة المكعبـة.

7 ـ انطلاقا من العلاقة $d = \frac{2\pi}{|G|}$ ما هي الفاصلة بين المستويات البلوريـــة d_{hkl} للشبكتين المكعبتين fcc و bcc ، اذا كانت قرائن ملر محسوبة بالنسبة للمحاور المنطبقة على أحرف المكعب الاصطلاحـي.

الحـــل : الشبكة المكعبة Fcc : حجم الخلية الاساسيـة $v = a^3/4$. والاشعـــة الاساسيـة للشبكة المعكوسـة هي:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\left(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}\right), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\left(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}\right)$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\left(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}\right) \qquad (1)$$

والآن نأخذ مجموعة من المستويات المتوازيـة المحددة بقرائن ملر (HKL) محسوبة بالنسبة للمحاور الاساسيـة $\vec{a}_1 ، \vec{a}_2 ، \vec{a}_3$ و (hkl) محسوبة بالنسبة لمحاور أحرف المكعب الاصطـلاحي.

والشعاع $\vec{G}(HKL)$ عمودي على هذه المستويات، أي أن :

$$\vec{G}(HKL) = H\vec{b}_1 + K\vec{b}_2 + L\vec{b}_3 \qquad (2)$$

عمودي على المستويات (HKL) أو (hkl) المرتبطة مع بعضهـــــا بالعلاقـات التاليـة :

$$\begin{pmatrix} H \\ K \\ L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix} \qquad (3)$$

والآن :

$$\vec{G}(HKL) = \frac{2\pi}{a}\left\{(-H+K+L)\vec{i} + (H-K+L)\vec{j} + (H+K-L)\vec{k}\right\}$$

ومنـه نجـد أن:

$$|\vec{G}(HKL)| = \frac{2\pi}{a}\left\{3(H^2+K^2+L^2) - 2(HK+HL+KL)\right\}^{1/2} \qquad (4)$$

وباستخدام العلاقات (3) نجد :

$$(5) \quad |\vec{G}(HKL)| = \frac{2\pi}{a}(h^2+k^2+\ell^2)^{1/2}$$

وحيث أن $d_{hk\ell} = \dfrac{2\pi}{|\vec{G}(HKL)|}$ اذن:

$$(6) \quad d_{hk\ell} = \frac{2\pi}{\sqrt{h^2+k^2+\ell^2}}$$

و نفس هذه العلاقة تصح للشبكة المكعبة البسيطة .

الشبكة المكعبة bcc : حجم الخلية الاساسية $v = a^3/2$ والاشعة الأساسية للشبكة المعكوسة هي :

$$(7) \quad \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\vec{j}+\vec{k}), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\vec{k}+\vec{i}), \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i}+\vec{j})$$

والشعاع :

$$(8) \quad \vec{G}(HKL) = H\vec{b}_1 + K\vec{b}_2 + L\vec{b}_3$$

عمودي على المستويات المتوازية (HKL) أو $(hk\ell)$ المرتبطة مع بعضها بالعلاقات :

$$(9) \quad \begin{pmatrix} H \\ K \\ L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/2 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & -1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \\ \ell \end{pmatrix}$$

والآن :

$$\vec{G}(HKL) = \frac{2\pi}{a}\{(K+L)\vec{i} + (H+L)\vec{j} + (H+K)\vec{k}\}$$

ومنه نجد أن :

$$(10) \quad |\vec{G}(HKL)| = \frac{2\pi}{a}\{2(H^2+K^2+L^2)+2(HK+HL+KL)\}^{1/2}$$

وباستخدام العلاقات (9) نجد:

$$|\vec{G}(HKL)| = \frac{2\pi}{a}(h^2+k^2+\ell^2)^{1/2}$$

وفي النهاية نحصل على نفس النتيجة (6).

ومما جاء أعلاه يتضح ما يلي

(1) أن العلاقة (6) تصح لجميع أنواع الشبكات المكعبة (F ، I ، P).

(2) باستعمال معادلات التحويل (3) و (9) تصح العلاقة التالية

$$\vec{G} = H\vec{b}_1 + K\vec{b}_2 + L\vec{b}_3 = h\vec{b}_1^s + k\vec{b}_2^s + \ell\vec{b}_3^s$$

حيث $\vec{b}_1^s$ ، $\vec{b}_2^s$ ، $\vec{b}_3^s$ - الاشعة الاساسية للشبكة المعكوسة المساوية $\frac{2\pi}{a}\vec{i}$ ، $\frac{2\pi}{a}\vec{j}$ ، $\frac{2\pi}{a}\vec{k}$ على التوالي وهي محسوبة بالنسبة للاشعة المنطبقة على أحرف المكعب الاصطلاحي. $\vec{b}_1$ ، $\vec{b}_2$ ، $\vec{b}_3$ - الاشعة الاساسية للشبكة المعكوسة المحسوبة على أساس المحاور الاساسية ($\vec{a}_1$ ، $\vec{a}_2$ ، $\vec{a}_3$) للشبكات (FCC, BCC). حيث (HKL) و ($hk\ell$) هي قرائن نفس المستوي ولكن القرائن في الاولى محسوبة بدلالة $\vec{b}_1$ ، $\vec{b}_2$ ، $\vec{b}_3$ ، وفي الثانية محسوبة بالنسبة للاشعة $\vec{b}_1^s$ ، $\vec{b}_2^s$ ، $\vec{b}_3^s$

(3) نتفق على وصف المستويات البلورية في الشبكات (F و I) بالنسبة للاحداثيات المرتبطة مع أحرف المكعب الاصطلاحي. والشعاع العمود $\vec{G}(hk\ell)$ هو المعين بدلالة $\vec{b}_1^s$ ، $\vec{b}_2^s$ ، $\vec{b}_3^s$.

8 - برهن أن " معكوس " الشبكة المعكوسة هو شبكة مباشرة .

الحل:

نأخذ شبكة مباشرة أشعتها الأساسية $\vec{a}_1 ، \vec{a}_2 ، \vec{a}_3$ وشبكتها المعكوسة تحدد بالأشعة التالية :

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3}{v} , \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1}{v} , \quad \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2}{v}$$

حيث $v = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)|$ - حجم الخلية الأساسية للشبكة المباشرة .

والآن نعتبر شبكة مباشرة أشعتها هي $\vec{b}_1 ، \vec{b}_2 ، \vec{b}_3$ وشبكتها المعكوسة سوف تحدد بالأشعة التالية :

$$\vec{b}_1' = 2\pi \frac{\vec{b}_2 \wedge \vec{b}_3}{v_R} , \quad \vec{b}_2' = 2\pi \frac{\vec{b}_3 \wedge \vec{b}_1}{v_R} , \quad \vec{b}_3' = 2\pi \frac{\vec{b}_1 \wedge \vec{b}_2}{v_R}$$

حيث : $v_R = |\vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \wedge \vec{b}_3)| = \frac{(2\pi)^3}{v}$ - حجم الخلية الاساسية للشبكة المعكوسة (التي اعتبرناها مباشرة) . عندئذ نجد :

$$\vec{b}_1' = 2\pi \frac{\vec{b}_2 \wedge \vec{b}_3}{v_R} = \frac{(2\pi)^3}{(2\pi)^3/v} \cdot \frac{(\vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1) \wedge (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)}{v^2}$$

$$\vec{b}_1' = \frac{[(\vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1) \cdot \vec{a}_3]\vec{a}_2 - [(\vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1) \cdot \vec{a}_2]\vec{a}_3}{v}$$

$$\vec{b}_1' = \frac{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)}{v} \vec{a}_3 = \vec{a}_3$$

حيث استعملنا العلاقات الشعاعية التالية :

$$\vec{A} \wedge (\vec{B} \wedge \vec{C}) = (\vec{A} \cdot \vec{C})\vec{B} - (\vec{A} \cdot \vec{B})\vec{C}$$
$$\vec{A} \cdot (\vec{B} \wedge \vec{C}) = \vec{C} \cdot (\vec{A} \wedge \vec{B}) = \vec{B} \cdot (\vec{C} \wedge \vec{A})$$

وبنفس الاسلوب نجد أن: $\vec{b}_2' = \vec{a}_2$ و $\vec{b}_3' = \vec{a}_1$. وهذا هو المطلوب اثباته . ومن الأمثلة على ذلك هو الشبكة المكعبة fcc التي مقلوبها يكون شبكة مكعبة bcc التي مقلوبها يعود شبكة مكعبة fcc .

9 - (أ) برهن أن الكثافة العقدية السطحية للمستويات البلورية المتوازية (hkl) تساوي : $\sigma_{hkl} = \frac{d_{hkl}}{v}$ حيث v - حجم الخلية الأساسية ، d_{hkl} - الفاصلة بين المستويات المتوازية (hkl) .

(ب) برهن أن الكثافة العقدية السطحية تكون أعظم ما يمكن للمستويات المتوازية (111) في البلورة المكعبة fcc ، وللمستويات المتوازية (110) للبلورة المكعبة bcc .

الحل : (أ) ندرس داخل الشبكة مكعب طول ضلعه 1 متر، قاعدتان منه تعود لمجموعة المستويات المتوازية (hkl)(*) . يحتوي هذا المكعب على n عقدة أي أن الكثافة العقدية الحجمية n . وكذلك يحتوي هذا المكعب على $\frac{1}{d}$ (حيث d بالمتر) مستويا متوازيا من المجموعة (hkl) . وعدد العقد في كل مستوي (داخل المكعب) هي الكثافة العقدية السطحية σ . لذلك فان العدد الكلي للعقد داخل الحجم 1م³ (n) يساوي $\frac{1}{d} \times \sigma$ أي أن $n = \sigma(\frac{1}{d})$. وبما أن $nv = 1$ حيث v - حجم الخلية الأساسية للشبكة المباشرة (انظر الفقرة 3 من الفصل الاول) اذن :

$$\sigma_{hkl} = \frac{d_{hkl}}{v} \qquad (1)$$

وبما أن $d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}(hkl)|}$ اذن:

$$\sigma_{hkl} = \frac{2\pi}{v|\vec{G}(hkl)|} \qquad (2)$$

(*) أية مجموعة متوازية في المستويات البلورية (hkl) تحوي على كل عقد الشبكة. تتساوى الكثافة العقدية السطحية لكل المستويات المتوازية أو المتناظرة طبقا لتناظر البلورة المدروسة .

بما أن $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ تحدد كل عقد الشبكة حيث $\vec{R}$ محدد بالاشعة الاساسية لذلك نحسب σ (الذي يمثل عدد العقد) بالنسبة للمستوي (HKL) ثم نحسب (hkl) من معادلات التحويل وليس العكس.

(ب) الشبكة المكعبة fcc : حجم الخلية الأساسية $v = a^3/4$. الأشعة الاساسية للشبكة المعكوسة هي :

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(-\vec{i}+\vec{j}+\vec{k})\ ,\ \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i}-\vec{j}+\vec{k})\ ,\ \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i}+\vec{j}-\vec{k})$$

وشعاع الانسحاب الاساسي للشبكة المعكوسة :

$\vec{G} = H\vec{b}_1 + K\vec{b}_2 + L\vec{b}_3$ عمودي على المستوي ذو القرائن (HKL) المحسوبة بالنسبة للمحاور الاساسية $\vec{a}_1 ، \vec{a}_2 ، \vec{a}_3$. إذن :

$$\vec{G}(HKL) = \frac{2\pi}{a}\{(-H+K+L)\vec{i} + (H-K+L)\vec{j} + (H+K-L)\vec{k}\}$$

$$|\vec{G}(HKL)| = \frac{2\pi}{a}\{3(H^2+K^2+L^2) - 2(HK+HL+KL)\}^{1/2}$$

والكثافة السطحية للشبكة fcc تساوي :

$$(3)\quad \sigma(HKL) = \frac{4}{a^2}\,\frac{1}{\{3(H^2+K^2+L^2) - 2(HK+HL+KL)\}^{1/2}}$$

والتناسب العكسي بين (H, K, L) و σ يسمح لنا باختيار قيم قليلة للقرائن للحصول على σ عالية :

$$\begin{array}{c} hkl \\ 100 \\ 110 \\ 111 \end{array} \Longrightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix} \Longrightarrow \begin{array}{cc} HKL & \sigma \\ 011 & 2/a^2 \\ 112 & 1,4/a^2 \\ 111 & 2,3/a^2 \leftarrow \end{array}$$

أي أن السطح (111) يملك أعظم كثافة عقدية .

الشبكة bcc : حجم الخلية الاساسية $v = a^3/2$. والاشعة الاساسية للشبكة المعكوسة

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\vec{j}+\vec{k})\ ,\ \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\vec{k}+\vec{i})\ \text{و}\ \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\vec{i}+\vec{j})$$

والشعاع $\vec{G}(HKL) = H\vec{b}_1 + K\vec{b}_2 + L\vec{b}_3$ يساوي

$$\vec{G}(HKL) = \frac{2\pi}{a}\{(K+L)\vec{i} + (H+L)\vec{j} + (H+K)\vec{k}\}$$

والكثافة السطحية لعقد الشبكة bcc تساوي:

$$\sigma = \frac{2}{a^2}\,\frac{1}{\{2(H^2+K^2+L^2) + 2(HK+HL+KL)\}^{1/2}}$$

ومنه

$$\begin{array}{c} hkl \\ (100) \\ (110) \\ (111) \end{array} \quad \begin{pmatrix} -1/2 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & -1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & -1/2 \end{pmatrix} \quad \begin{array}{cc} HKL & \sigma \\ \{\bar{1}11\} & 1/a^2 \\ \{001\} & 1,4/a^2 \leftarrow \\ \{111\} & 0,7/a^2 \end{array}$$

وهكذا تكون المستويات المتوازية (110) مالكتاً لاعظم كثافة عقدية .

10 ـ أ ـ أعتبر شبكة خليتها الاساسية بصورة متوازي مستطيلات (تسمّى شبكة معينية مستقيمة Orthorhombic) أبعاده $a \neq b \neq c$ وزواياه $\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2}$. أحسب الفاصلة بين مستوياتها الذرية.

حالة خاصة: عين المطلوب أعلاه للشبكة المكعبة

ب ـ عين شكل وأبعاد منطقة بريليون الاولى للشبكة المعينة المستقيمة.

الحل: أشعة الانتقال الأساسية للشبكة المعينية المستقيمة هي:

$$\vec{a}_1 = \vec{a} = a\vec{i} \ , \quad \vec{a}_2 = \vec{b} = b\vec{j} \ , \quad \vec{a}_3 = \vec{c} = c\vec{k}$$

أي أن الأشعة $\vec{a}$ ، $\vec{b}$ ، $\vec{c}$ متعامدة مع بعضها وتتجه باتجاه المحاور الكارتيزية x ، y ، z على التوالي.

حجم الخلية الاساسية يساوي:

$$v = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)| = abc$$

وأساس الشبكة المعكوسة هي الأشعة:

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3}{v} = \frac{2\pi}{a^2}\vec{a} \ ; \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1}{v} = \frac{2\pi}{b^2}\vec{b}$$

$$\vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3}{v} = \frac{2\pi}{c^2}\vec{c}$$

ومربع الشعاع الأساسي للشبكة المعكوسة يساوي:

$$|\vec{G}(hkl)|^2 = |h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3|^2 = 4\pi^2\left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}\right)$$

والشعاع $\vec{G}(hkl)$ عمودي على مجموعة المستويات المتوازية (hkl) وقيمته تتناسب عكسيا مع الفاصلة بين هذه المستويات d_{hkl}:

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}(hkl)|} = \frac{1}{\left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}\right)^{1/2}}$$

حالة خاصة: للشبكة المكعبة حيث $a = b = c$ نجد:

$$d_{hkl} = \frac{a}{(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}}$$

ب ـ

حجم الخلية الاساسية للشبكة المعكوسة يساوي:

$$v_R = |\vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \wedge \vec{b}_3)| = \frac{(2\pi)^3}{abc} = \frac{(2\pi)^3}{v}$$

أصغر أشعة للشبكة المعكوسة هي:

$$\pm\vec{b}_1 \ , \quad \pm\vec{b}_2 \ , \quad \pm\vec{b}_3$$

وعددها ستة. والمستويات العمودية عليها ومن منتصفاتها هي التي تحدد منطقة بريليون الاولى؛ أي أن الأشعة التي تحدد منطقة بريليون الاولى هي:

$$\pm\frac{1}{2}\vec{b}_1 = \pm\frac{\pi}{a}\vec{i} \ , \quad \pm\frac{1}{2}\vec{b}_2 = \pm\frac{\pi}{b}\vec{j} \ , \quad \pm\frac{1}{2}\vec{b}_3 = \pm\frac{\pi}{c}\vec{k}$$

ومن طبيعة هذه الأشعة العمودية على أوجه منطقة بريليون الاولى نستنتج أن هذه المنطقة معينية مستقيمة أيضا أبعادها $\frac{2\pi}{a}$ و $\frac{2\pi}{b}$ و $\frac{2\pi}{c}$ وحجمها يساوي v_R:

$$v_R = \frac{(2\pi)^3}{abc}$$

11 ـ الخلية الاولية للشبكة السداسية البسيطة (شبكة برافي) محددة بوالوسيطين a و c . أعتبر الشعاع الاساسي $\vec{a}_1$ مائلا عن المحور الكارتيزي x بزاوية 30° .

(أ) صف واعط الأشعة الاساسية للشبكة المعكوسة .

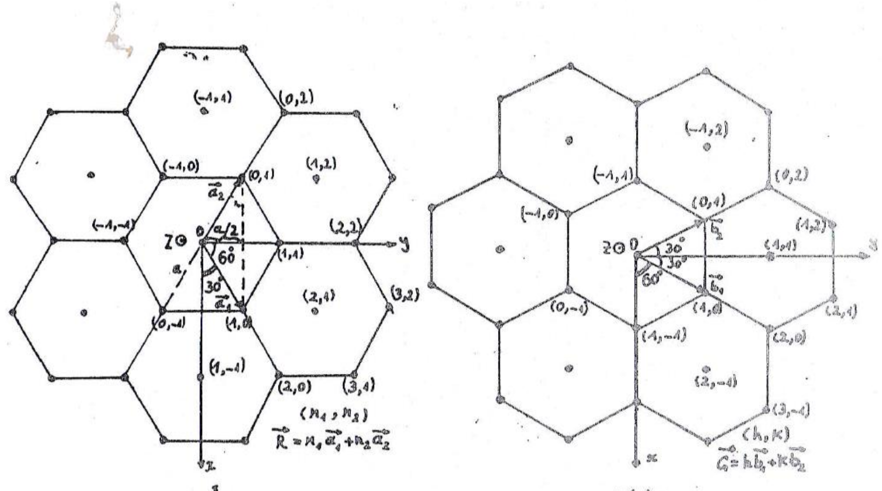
(ب) ما هي النسبة بين وسيطي الشبكة المعكوسة $\left(\frac{c}{a}\right)_R$ اذا كانت هذه النسبة $\frac{c}{a}$ مثالية للشبكة المباشرة . وما هي قيمة $\frac{c}{a}$ لكي تتساوى النسبة بين وسيطي الشبكة المعكوسة مع مثيلتها للشبكة المباشرة .

(ج) صف وعين منطقة بريليون الاولى.

الحل:

(أ) الأشعة الأساسية للشبكة السداسية " المباشرة " معطاة في الشكل (أ)

حيث يتبين أن : $\vec{a}_1 = \frac{\sqrt{3}}{2}a\vec{i} + \frac{a}{2}\vec{j}$; $\vec{a}_2 = -\frac{\sqrt{3}}{2}a\vec{i} + \frac{a}{2}\vec{j}$; $\vec{a}_3 = c\vec{k}$ (1)



ـ أ ـ

ـ ب ـ

شكل تمرين 11

وعقد هذه الشبكة تحدد بالشعاع $\vec{R}$ المبتديء من أية عقدة :

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$$

حيث $n_1 ، n_2 ، n_3$ ـ أعداد صحيحة موجبة وسالبة . والشكل (أ) يبين المستوي العقدي الذي فيه $n_3 = 0$: $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2$ ؛ وعقد الشبكة تحدد بالاحداثيات (n_1 و n_2) بالنسبة للمحاور الاساسية $\vec{a}_1 , \vec{a}_2$.

حجم الخلية الاساسية يساوي :

$$v = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)| = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2c$$

والأشعة الاساسية للشبكة المعكوسة هي :

$$\vec{b}_1 = 2\pi\frac{\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3}{v} = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\vec{i} + \frac{2\pi}{a}\vec{j}$$

$$\vec{b}_2 = 2\pi\frac{\vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1}{v} = -\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\vec{i} + \underline{\quad}\,\vec{j} \qquad (2)$$

$$\vec{b}_3 = 2\pi\frac{\vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2}{v} = \frac{2\pi}{c}\vec{k}$$

حجم الخلية الاساسية للشبكة المعكوسة :

$$v_R = |\vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \wedge \vec{b}_3)| = \frac{(2\pi)^3}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2c} = \frac{(2\pi)^3}{v}$$

والمعادلات (2) تحدد كل عقد الشبكة المعكوسة وذلك من خلال شعاع الشبكة المعكوسة $\vec{G}$:

$$\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$$

حيث $h ، k ، l$ ـ أعداد صحيحة . والشكل (ب) يبين المستوى العقدي الذي فيه $l = 0$: $\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2$ ؛ والعقد تحدد بالاحداثيات (h , k) بالنسبة للمحاور الاساسية $\vec{b}_1 , \vec{b}_2$. ولقد وضعت الاشعة $\vec{b}_1 ، \vec{b}_2 ، \vec{b}_3$ بالنسبة للمحاور الكارتيزية (x , y , z) على أساس أن الشعاع $\vec{b}_1$ يميل بزاوية 60° مع الاتجاه x والشعاع $\vec{b}_2$ يميل بزاوية 60° مع الاتجاه (x-) والشعاع $\vec{b}_3$ منطبق على z . طول $\vec{b}_1$

يساوي طول $\vec{b}_2$ ويساوي $\frac{4\pi}{\sqrt{3}\,a}$ وطول $\vec{b}_3$ يساوي $\frac{2\pi}{c}$.

والآن نقارن المعادلات (2) مع المعادلات (1) فنجد أن لهما نفس الهيئة العامة حيث نستنتج أن الشبكة السداسية البسيطة المعكوسة هي أيضا شبكة سداسية بسيطة خليتها الاولية محددة بالوسيطين ($\frac{4\pi}{\sqrt{3}\,a}$ و $\frac{2\pi}{c}$). وبمقارنة الشكلين (أ) و (ب) يتبين أن الشبكة المعكوسة (مقارنة مع الشبكة المباشرة) تكون قد دارت حول المحور z (العمودي على الورقة) بزاوية $30°$.

(ب): النسبة بين وسيطي الشبكة المعكوسة تساوي :

$$\left(\frac{c}{a}\right)_R = \frac{\frac{2\pi}{c}}{\frac{4\pi}{\sqrt{3}\,a}} = \frac{\sqrt{3}}{2}\;\frac{a}{c}$$

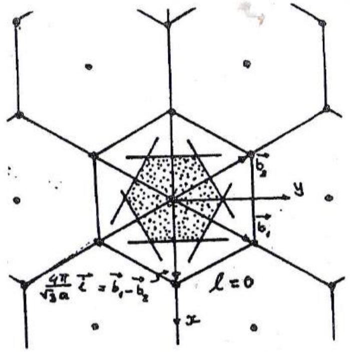
في الحالة المثالية تكون $\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}}$ اذن :

$$\left(\frac{c}{a}\right)_R = \frac{3}{8}\;\sqrt{2} = 0,53$$

ولو تساوت $\frac{c}{a} = \left(\frac{c}{a}\right)_R$ لكانت $\frac{c}{a} = 0,9$

(جـ) الشكل (جـ) يبين تصميم منطقة بريليون الاولى: موشور سداسي * يحدد بالمستويات المنصفة ـ العمودية على ثمانية أشعة هي: $\pm\vec{b}_1$ ، $\pm\vec{b}_2$ ، $\pm\vec{b}_3$ ، $\pm(\vec{b}_1-\vec{b}_2)$.

وحجم منطقة بريليون: $v_R = (2\pi)^3 / \frac{\sqrt{3}}{2}\,a^2 c$.



شكل تمرين (11 جـ)

(*) ان تصميم منطقة بريليون الاولى لا يعتمد على أسلوب اختيار المحاور الاساسية للشبكة المعكوسة ، لذلك فللمنطقة نفس تناظر كل الشبكة وهو $n=6$ (كما سنرى)

12 ـ شبكة برافي المنشأة من ثلاثة أشعة انسحاب أساسية بنفس الطول a وتصنع مع بعضها زوايا متساوية θ تسمّى بالشبكة الثلاثية (خليتها الاساسية عبارة عن مكعب مضغوط من أحد أقطاره الفضائية). برهن بأن معكوس الشبكة الثلاثية هو أيضا شبكة ثلاثية تنشأ من ثلاثة أشعة أنسحاب أساسية $\vec{b}_1$ ، $\vec{b}_2$ ، $\vec{b}_3$ تشكل بينها زوايا متساوية θ^* (حيث $\cos\theta^* = \frac{-\cos\theta}{1+\cos\theta}$) وأطوالها متساوية وتساوي

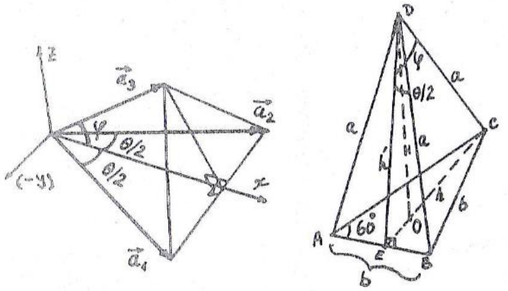
$$b = \frac{2\pi}{a}\,(1+2\cos\theta\cos\theta^*)^{-1/2}$$

الحل: أشعة الانسحاب الاساسية موضحة في الشكل التالي:

$$\vec{a}_1 = a\cos\frac{\theta}{2}\,\vec{i} - a\sin\frac{\theta}{2}\,\vec{j}$$

$$\vec{a}_2 = a\cos\frac{\theta}{2}\,\vec{i} + a\sin\frac{\theta}{2}\,\vec{j}$$

$$\vec{a}_3 = a\cos\varphi\,\vec{i} + a\sin\varphi\,\vec{j}$$



شكل تمرين 12

وتحسب الزاوية φ من هندسة الهرم :

$$\Delta_{DEB}:\quad BE = \frac{1}{2}b = a\sin\frac{\theta}{2}\quad,\quad b = 2a\sin\frac{\theta}{2}$$

$$h' = a\cos\frac{\theta}{2}$$

$$\Delta_{ACB}:\quad h = \frac{b\sqrt{3}}{2} = a\sqrt{3}\,\sin\frac{\theta}{2}$$

$$\Delta_{DEC}:\quad h^2 = h'^2 + a^2 - 2h'a\cos\varphi$$

اذن:

$$\cos\varphi = \frac{\cos\theta}{\cos\theta/2}\quad,\quad \sin\varphi = \frac{\sqrt{1+\cos\theta-2\cos^2\theta}}{\sqrt{2}\,\cos\theta/2}$$

ولحساب أشعة انسحاب الشبكة المعكوسة نحتاج الى النتائج الرياضية التالية :

$$\vec a_2 \wedge \vec a_3 = \begin{pmatrix} a^2\sin\varphi \sin\frac{\theta}{2} \\ -a^2 \sin\varphi\cos\frac{\theta}{2} \\ -a^2\cos\varphi\sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}, \quad \vec a_3\wedge \vec a_1 = \begin{pmatrix} a^2\sin\varphi\sin\frac\theta2 \\ a^2\sin\varphi\cos\frac\theta2 \\ -a^2\cos\varphi\sin\frac\theta2\end{pmatrix}, \quad \vec a_1\wedge\vec a_2 = \begin{pmatrix}0\\0\\2a^2\sin\frac\theta2\cos\frac\theta2\end{pmatrix}$$

وحجم الخلية الاساسية يساوي:

$$v = |\vec a_1\cdot(\vec a_2\wedge\vec a_3)| = a^3 \sin\varphi\sin\theta$$

اذن:

$$\vec b_1 = \frac{2\pi}{v}\vec a_2\wedge\vec a_3 = \frac{2\pi}{a}\left[\frac{\sin\frac\theta2}{\sin\theta}\vec i - \frac{\cos\frac\theta2}{\sin\theta}\vec j - \frac{\cos\varphi\sin\frac\theta2}{\sin\varphi\sin\theta}\vec k\right]$$

حيث:

$$|\vec b_1| = \frac{2\pi}{a}\left[\frac{1}{\sin^2\theta}+\frac{\cos^2\varphi\sin^2\frac\theta2}{\sin^2\varphi\sin^2\theta}\right]^{1/2} = \frac{2\pi}{a}\left[\frac{1}{\sin^2\theta}+\frac{2\sin^2\frac\theta2\cos^2\theta}{\sin^2\theta(1+\cos\theta-2\cos^2\theta)}\right]^{1/2}$$

$$= \frac{2\pi}{a}\left[\frac{1+\cos\theta-2\cos^2\theta+\cos^2\theta(1-\cos\theta)}{\sin^2\theta(1+\cos\theta-2\cos^2\theta)}\right]^{1/2} = \frac{2\pi}{a}\left[\frac{(1+\cos\theta)-\cos^2\theta(1+\cos\theta)}{\sin^2\theta(1+\cos\theta-2\cos^2\theta)}\right]^{1/2}$$

$$= \frac{2\pi}{a}\left[\frac{1+\cos\theta}{1+\cos\theta-2\cos^2\theta}\right]^{1/2} = \frac{2\pi}{a}\left[1+2\cos\theta\cos\theta^*\right]^{-1/2}$$

حيث سنبين أن $\cos\theta^* = -\frac{\cos\theta}{1+\cos\theta}$

وبنفس الاسلوب نحسب $\vec b_2$ و $\vec b_3$:

$$\vec b_2 = \frac{2\pi}{a}\left[\frac{\sin\frac\theta2}{\sin\theta}\vec i + \frac{\cos\frac\theta2}{\sin\theta}\vec j - \frac{\cos\varphi\sin\frac\theta2}{\sin\varphi\sin\theta}\vec k\right]$$

حيث $b_2 = b_1$

$$\vec b_3 = \frac{2\pi}{a}\frac{1}{\sin\varphi}\vec k \quad , \quad b_3 = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{\sqrt2\cos\frac\theta2}{\sqrt{1+\cos\theta-2\cos^2\theta}}\right) = b_1$$

حيث $\sqrt2\cos\theta/2 = (1+\cos\theta)^{1/2}$. معنى هذا أن أشعة أنسحاب الشبكة المعكوسة متساوية في الطول. نحسب الزوايا بينها :

$$\vec b_1\cdot\vec b_2 = b_1 b_2\cos\theta^* ; \quad \frac{\sin^2\frac\theta2}{\sin^2\theta} - \frac{\cos^2\frac\theta2}{\sin^2\theta} + \frac{\cos^2\varphi\sin^2\frac\theta2}{\sin^2\varphi\sin^2\theta} = \frac{1+\cos\theta}{1+\cos\theta-2\cos^2\theta}\cos\theta^*$$

اذن :

$$\frac{-\cos^2\theta}{\sin^2\theta} + \frac{2\sin^2\frac\theta2\cos^2\theta}{\sin^2\theta(1+\cos\theta-2\cos^2\theta)} = \frac{1+\cos\theta}{1+\cos\theta-2\cos^2\theta}\cos\theta^*$$

$$\frac{-\cos\theta+\cos^3\theta}{\sin^2\theta} = (1+\cos\theta)\cos\theta^*$$

اذن :

$$\cos\theta^* = -\frac{\cos\theta}{1+\cos\theta}$$

و بنفس الاسلوب نجد الزوايا بين $\vec b_1$ و $\vec b_3$ ، $\vec b_2$ و $\vec b_3$ لنجدها متساوية تماما وتساوي θ^* .

وبهذا توصف الشبكة المعكوسة بنفس وصف الشبكة المباشرة أي تتشكل من ثلاثة أشعة $\vec b_1$ ، $\vec b_2$ ، $\vec b_3$ متساوية في الطول وتشكل بين بعضها نفس الزاوية θ^* . معنى هذا أن الشبكة المعكوسة هي أيضا ثلاثية .