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

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

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

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

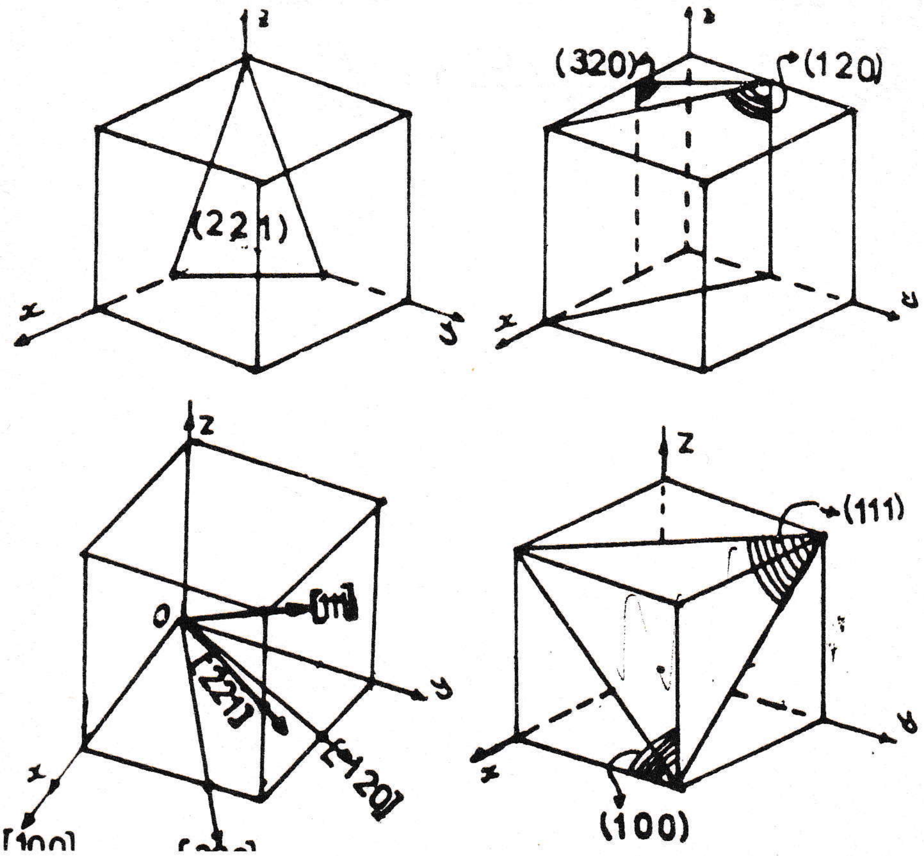
جـ ـ الحاوي على الشعاعين $\vec{B}$ [$\bar{2}$10] و $\vec{A}$ [0$\bar{3}$2] .

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 :

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

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

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

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

ب ـ معادلة المستوي $hx + ky + lz = m$

اذن:

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

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

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 $\vec{n}$:

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

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 $[2\bar{1}3] /\!/ \vec{n}$ 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 محورها $[u\,v\,w]$.

الحل : نأخذ المستوي (hkl):

$$hx + ky + lz = m$$

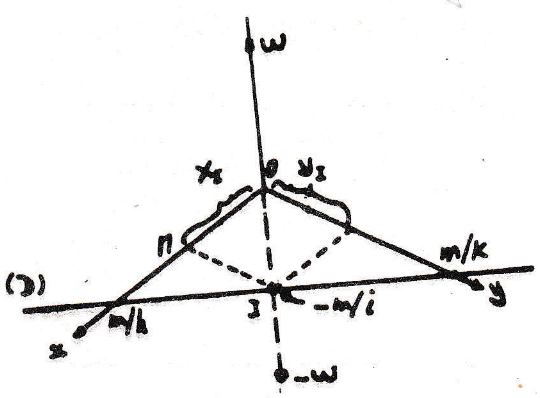
ينتمي الى المنطقة ذات المحور $[u\,v\,w]$. ننقل هذا المحور نقلا موازيا لكي ينطبق على المستوي ($h\,k\,l$) مارا بالنقطة الاختيارية $A(x_0, y_0, z_0)$. عندئذ فان هذا المحور سيمر حتما بالنقطة الأخرى B حيث $B(x_0+u\,,\,y_0+v\,,\,z_0+w)$ (لانه، مثلا $(x_0+u)-x_0=u$). النقطتان A و B تحققان معادلة المستوي (hkl)،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

$$h x_I + k y_I = m$$

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:

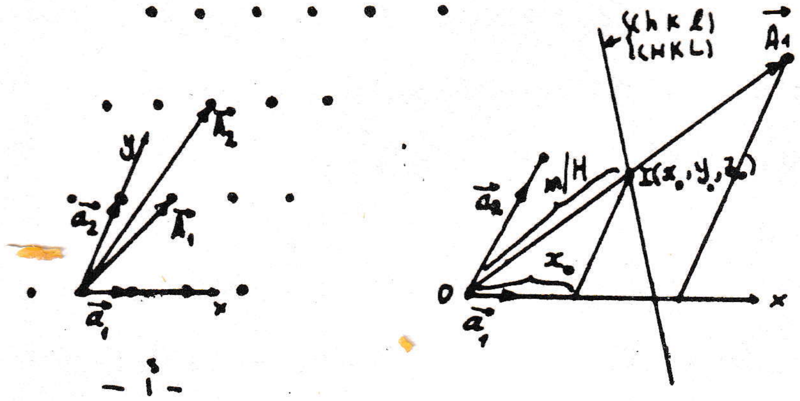
$$\frac{m}{h+k} = -\frac{m}{i} \quad \text{و} \quad i = -(h+k)$$

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 x و y (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.



- أ -

- ب -

شكل تمرين 4

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

(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 : $\vec{A}_3$ و $\vec{A}_2$ و $\vec{A}_1$ هي (HKL) - النقطة I تحقق معادلة المستوي:

$$h x_0 + k y_0 + l z_0 = m$$

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

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

أذن:

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

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 ـ 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) والممركزة 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 $(HKL) = (011)$

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 : $(HKL) = (\bar{1}11)$

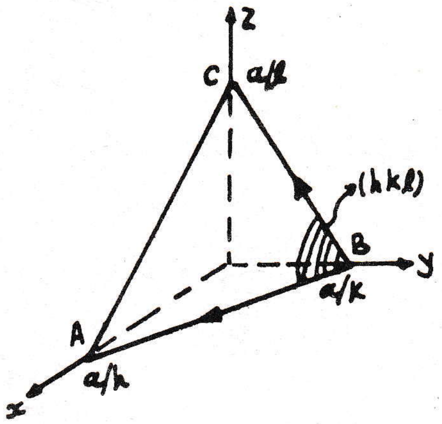
6 ـ برهن أن الشعاع $[hk\ell]$ للشبكة المكعبة عمودي على المستوي $(hk\ell)$.

الحل: نأخذ مستويا عاما $(hk\ell)$ 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 $\overrightarrow{BC}$ و $\overrightarrow{BA}$:



شكل تمرين 6

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

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

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

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

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 التالي:

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

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

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

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

وشعاع الوحدة العمود يساوي :

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

ومن التعريف الأساسي للشعاع $[hkl]$ 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 $[hkl]$ متوازيان بمعنى أن الشعاع $[hkl]$ عمودي على المستوي (hkl) للشبكة المكعبة.

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

الحل : الشبكة المكعبة Fcc : حجم الخلية الاساسية $v = a^3/4$. والاشعة الاساسية للشبكة المعكوسة هي:

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

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

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

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

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

عمودي على المستويات (HKL) أو (hkl) المرتبطة مع بعضهـــا بالعلاقات التالية :

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

والآن :

م.ت أضعاف للشبكة المباشرة

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

ومنه نجد أن:

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

وباستخدام العلاقات (3) نجد :

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

وحيث أن

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

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

و نفس هذه العلاقة تصح للشبكة المكعبة البسيطة .

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

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

والشعاع :

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

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

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

والآن :

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

ومنه نجد أن :

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

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 :

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

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 :

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

حيث : $\dfrac{(2\pi)^3}{v} = |\vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \wedge \vec{b}_3)| = v_R$ - 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 1 م^3 (n) يساوي $\frac{1}{d} \times \sigma$ أي أن $n = \sigma \left(\frac{1}{d} \right)$. وبما أن $n v = 1$ حيث v - حجم الخلية الأساسية للشبكة المباشرة (انظر الفقرة 3 من الفصل الاول) اذن :

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

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

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

(*) 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 :

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

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

والكثافة السطحية للشبكة fcc تساوي :

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

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

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

أي أن السطح (111) يملك أعظم كثافة عقدية .

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

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

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

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

والكثافة السطحية لعقد الشبكة bcc تساوي:

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

ومنه

$$\begin{array}{cccc} hkl & & HKL & \sigma \\ (100) & \multirow{3}{*}{} & \{\bar{1}11\} & 1/a^2 \\ (110) & \begin{pmatrix} -1/2 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & -1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & -1/2 \end{pmatrix} & \{001\} & 1{,}4/a^2 \leftarrow \\ (111) & & \{111\} & 0{,}7/a^2 \end{array}$$

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

10 ـ أ ـ أعتبر شبكة خليتها الاساسية بصورة متوازي مستطيلات (تسمى 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:

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

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 :

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

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

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 (hkl) $\vec{G}$ 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 -

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 :

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

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

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

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 :

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