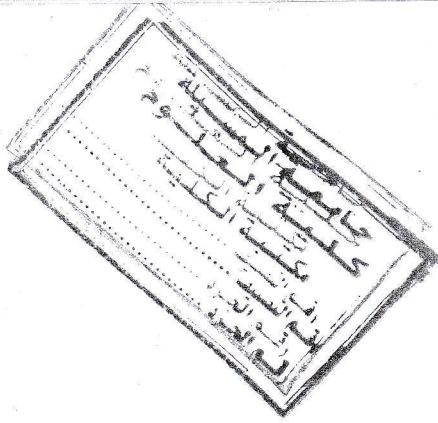




## الفصل الثاني

### حيود الاشعة السينية في البلورات والشبيكة المقلوبة

#### X-ray diffraction in crystals and reciprocal lattice

- 2.1 مقدمة
- 2.2 حيود البلورة
- 2.3 قانون براك
- 2.4 معادلات لاوي
- 2.5 الشبيكة المقلوبة
- 2.6 البناء الهندسي لايوارد - الصيغ الاتجاهية لمعادلات  
الحيود
- 2.7 مناطق برليون
- 2.8 الطرق العملية للحيود في البلورات
- تمارين عامة محلولة
- اسئلة وتمارين عامة

## الفصل الثاني

### حيود الاشعة السينية في البلورات والشبيكة المقلوبة

#### 2.1 المقدمة

من خلال الملاحظات بالعين المجردة او باستعمال المجاهر البصرية يمكن لنا ان نحصل على معلومات مفيدة فيما يخص المظهر الخارجي للبلورة وربما بعض المعلومات عن طبيعة السطوح. و هذا النوع من تقصي المعرفة بشأن البلورات لا يعد كافيا إضافة الى عدم الدقة المحيط بها. ربما نسأل ما هي المشكلة مع استعمال المجهر البصري وما هي محدداته في زيادة قوة تكبيره. يمكن لنا ومن معرفتنا ان المجاهر البصرية تستخدم الضوء المرئي في رؤية التفاصيل الخاصة بالأجسام المنظورة من خلاله ان نكتشف قصور المجهر. ان الضوء المرئي ذا طول موجي يتراوح بشكل تقريبي بين  $4000 \text{ \AA}$  الى  $7000 \text{ \AA}$  ومن هنا سيكون اصغر وحدة طول يمكن رؤيتها بمحدود  $2000 \text{ \AA}$  ( $\lambda = 2d$ )، بينما المسافات البينية بين ذرات البلورة بمحدود بضعة المجسترومات ( $1.44 \text{ \AA} - 5.23 \text{ \AA}$ )، لذلك يتضح الان جلياً عدم فائدة أي أشعاع يكون طوله الموجي اكبر من هذه المسافات البينية اذا أردنا ان نحصل على معلومات دقيقة ووافية عن التركيب البلوري للمواد، مثل معرفة حجم اصغر خلية بناء في البلورة أو معرفة مواضع نوى الذرات والتوزيع الاليكتروني داخل الخلية ومعرفة أنماط اهتزاز البلورة. اذن نحن بحاجة الى استخدام شعاع ذي طول موجي مساوي او اقل قليلاً من المسافات البينية بين الذرات. وتتم هذه العملية من خلال حيود هذه الأشعة عند سقوطها على البلورة. وتكون الاطوال الموجية لفوتونات الاشعة السينية وجسيمات اخرى (سيرد ذكرها في الفقرة اللاحقة) من مرتبة مقدار المسافات البينية بين الذرات.

تستخدم احيانا مصطلحات مثل الحيود والتشتت والاستطارة والانعطاف في العديد من المراجع العربية وربما يكون جديرا توضيح بعض الالتباس الذي يحصل عند استعمال هذه المصطلحات. ان مصطلح الاستطارة يعني انحراف الشعاع عن مساره نتيجة تفاعله مع المادة، أي بمعنى تغير اتجاه الجسيم أو الفوتون عند تفاعله مع النواة أو مع الاليكترون. ونعرف انه اذا فقد الجسيم أو الفوتون المنحرف عن مساره جزءا من طاقته فالعملية تسمى



إستطارة أو تشتت غير مرن، وإذا لم يحصل أي تغير في طاقة الجسيم أو الفوتون فإن العملية تسمى تشتتاً أو استطارة مرنة. تتم عملية التشتت أو الاستطارة من خلال عمليتين منفصلتين ومختلفتين. العملية الأولى تمثل انعكاس عشوائي وتتم هذه العملية عند مرور شعاع ضوئي في وسط مادي ويسقط على جسيمات صغيرة عالقة في الوسط المادي تتصرف وكأنها مرايا، مسببة انعكاساً عشوائياً بسبب توجيهها العشوائي بالنسبة لاتجاه الشعاع الساقط عليها. جدير بالذكر ان ابعاد هذه الجسيمات العاكسة كبير مقارنة بالطول الموجي للشعاع الساقط. أما العملية الثانية فهي ما نسميه الحيود أو أحياناً الانعطاف وتحدث هذه العملية مع جسيمات الوسط المادي الأصغر من الطول الموجي للضوء الساقط. وتتصرف هذه الجسيمات بسبب الحيود وكأنها مراكز للشعاع، تشتت الضوء في جميع الاتجاهات. هذه العملية تشبه تماماً مرور الضوء خلال شق ثم يسمح له بالسقوط على شاشة، إذ نجد تتكون عليها سلسلة من الحزم المضيئة والمظلمة، إذا كان الضوء أحادي الطول الموجي، أو تتكون حزمة ملونة (طيف) إذا كان الضوء أبيض. إذن ظاهرة الحيود هي حالة خاصة للتداخل وتحصل بسبب الطبيعة الموجية للضوء، ولكل الجسيمات التي ترافق حركتها موجات مثل الأليكترونات والنيوترونات. ومن هنا أيضاً يمكن ان نقول ان الحيود حالة خاصة للاستطارة وهو يمثل استطارة مترابطة coherent scattering بغض النظر ان كانت مصحوبة بتغير أو عدم تغير طاقة الشعاع.

## 2.2 حيود البلورة Crystal Diffraction

لغرض دراسة حيود بلورة علينا القيام بالتحضيرات التالية (a) عينة بالشكل الملائم (b) شعاع مناسب يسقط على العينة و (c) اجهزة لقياس موضع وشدت النهايات العظمى في نمط الحيود. ولابد من التأكيد على ان التأثيرات المرغوبة للحيود يتم الحصول عليها فقط عندما يكون الطول الموجي للشعاع الساقط من مرتبة المسافات البينية بين ذرات البلورة تحت الدراسة. ان الاطوال الموجية الأكبر تؤدي الى ظهور تأثيرات بصرية ومن جانب آخر أيضاً الاطوال الموجية الأقصر تحيد خلال زوايا صغيرة غير مناسبة. وأعتماًداً على انواع الشعاع الساقط هنالك ثلاث انظمة أو طرق للحيود:

### 1. حيود فوتونات الأشعة السينية X-Ray diffraction

الأشعة السينية هي موجات كهرومغناطيسية ذات اطوال موجية تقع بين الأشعة فوق البنفسجية وأشعاعات جاما، إذ لا تزيد اطوالها الموجية عن بضعة المجهسترومات،

( $0.1A^\circ - 10A^\circ$ ). يتم انتاج الاشعة السينية بواسطة اصطدام الكترونات سريعة جداً بهدف معدني مثل النحاس او الكوبلت او الموليبدنيوم او الفضة. وعند اصطدام هذه الاليكترونات السريعة بالهدف المعدني تحصل عمليتان مختلفتان واحدة منهما تفضي الى تباطؤ الاليكترونات وانحرافها بسبب الشحنات النووية في ذرات الهدف، وينبعث بسبب ذلك اشعاع عبارة عن فوتونات ذات اطوال موجية مختلفة، ويسمى هذا الطيف من الاطوال الموجية المختلفة بالطيف المستمر. أما العملية الثانية، فيتم خلالها تفاعل غير مرن بين الاليكترونات الساقطة والكترونات لباب ذرات الهدف المعدني القريبة من النواة، أي بعبارة اخرى تهيج ذرات الهدف بالاليكترونات الساقطة، وتتولد عن هذه العملية خطوط طيف مميزة حادة ذات شدة عالية جداً تسمى بالطيف الخطي، ويكون مركباً فوق الطيف المستمر. ان الخطوط الحادة تمثل فوتونات ذات طول موجي محدد لكل خط. ويتولد الخط الحاد من انتقال الكترون من القشرة  $L$  الى القشرة  $K$  يسمى الخط الحاد بخط  $K_\alpha$ ، واذا انتقل الاليكترون من القشرة  $M$  الى القشرة  $K$  فيسمى الخط الحاد بخط  $K_\beta$  وهكذا.. ويتم في العادة استخدام خط  $K_\alpha$  من الطيف المميز.

عن تسليط فرق جهد  $V$  عبر انود وكاثود انبوبة الاشعة السينية تكتسب الاليكترونات (كل منها يحمل شحنة اليكترون  $e$ ) طاقة مقدارها  $Ve$ . وان اعظم طاقة لفوتونات الاشعة السينية الناتجة هي تلك التي فيها:

$$E = Ve = h\nu = hc / \lambda$$

أو نقول يتم الحصول على الفوتون ذي أوطاً طول موجي عندما يكون:

$$\lambda = \frac{hc}{Ve} \text{ أو } \lambda = \frac{hc}{E} \dots\dots\dots 2-1$$

اذ ان  $h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ Js}$  هو ثابت بلانك وان  $c = 3 \times 10^8 \text{ m/s}$  هو سرعة

الضوء ومن هنا فان:

$$\lambda = \frac{19.89 \times 10^{-26}}{E(J)} \text{ m}$$

ولما كان  $1A^\circ = 10^{-10} \text{ m}$  و  $1(eV) = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$ ، يمكننا ان نكتب العلاقة

اعلاه بوحدات مخبرية كما يأتي:



$$\lambda(A^\circ) = \frac{12.43}{E(keV)} \quad \dots\dots\dots 2-2$$

$$\lambda(A^\circ) = \frac{12.43}{V(kV)} \quad \text{أو تكتب:}$$

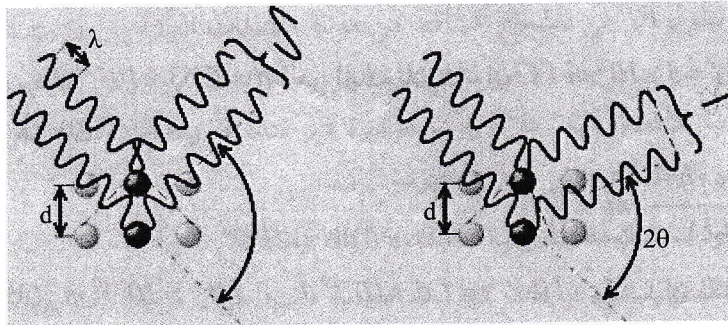
وبذلك لكي نحصل على اشعة سينية طولها الموجي  $1A^\circ$  (وهذا الطول الموجي من مرتبة المسافات البينية بين الذرات في البلورات) يتطلب طاقة مقدارها  $12.4 keV$ ، أو مطلوب ان نسلط فرق جهد مقداره  $12.4 \text{ kilo volt}$  عبر انود وكاثود انبوبة الاشعة السينية.

وتعد انابيب الاشعة السينية التي تعمل بمحدود فروق جهد  $10 kV - 50 kV$  عملية في ملاحظة تاثيرات الحيود ومنها طبعا دراسة التراكيب البلورية.

يتم الحصول على نمط حيود الاشعة السينية اما على ورق تصوير او يتم تسجيله بدلالة شدة التاين الناتجة في غرفة تاين بواسطة الاشعة السينية المستطيرة.

#### ملاحظة

عندما تسقط الاشعة السينية احادية الموجة على ذرة، فانها تجعل الغيمة الاليكترونية تتحرك مثلما تفعل أي موجه كهرومغناطيسية. ان حركة الغيمة الاليكترونية هذه تجعلها تبعث امواجا لها تردد الاشعة الساقطة عليها. تعرف هذه الظاهرة بتشتت ريلايث Rayleigh scattering (او التشتت المرن). تتداخل مجالات الامواج المنبعثة هذه مع بعضها البعض الاخر تداخلا بناءاً أو اتلافياً اعتمادا على انحراف الطور الذي يوضحه الشكل 2-1 منتجة نمط حيود يتم تحسسه اما على مجس او على فلم تصوير، ويعد نمط تداخل الامواج الناتج هو اساس تحليل الحيود.



الشكل 2-1



## 2. حيود النيوترونات Neutron diffraction

عام 1945 تم بناء اول جهاز لتسجيل حيود النيوترونات. وكما هو معروف ان النيوترون متعادل الشحنة ولكن يمتلك عزماً مغناطيسياً بسبب عدم التطابق بين مركزي الشحنة الموجبة والشحنة السالبة. لذلك تكون فائدة حيود النيوترونات جليه في دراسة التركيب البلوري للبلورات المغناطيسية. في هذا النوع من البلورات يتفاعل النيوترون بسبب عزمه المغناطيسي مع اليكترونات هذه البلورات، فضلاً عن تفاعله مع نوى الذرات. اما في البلورات غير المغناطيسية فان النيوترون يتفاعل فقط مع نوى الذرات. ويتميز حيود النيوترونات عن حيود الاشعة السينية باستخدامه في اكتشاف تراكيب بعض العناصر الخفيفة مثل الهيدروجين.

يمكن الحصول على النيوترونات بالطاقة اللازمة من المفاعلات النووية وان حزمة النيوترون الحاملة للنيوترونات ذات الكتلة  $M_n$  وسرعة  $v$  تكون مكافئة لحزمة اشعاع (ديبروكلي) طولها الموجي يعطى بعلاقة ديبروكلي:

$$\lambda = \frac{h}{M_n v} = \frac{h}{p} \quad \dots\dots\dots 2-3$$

اذ ان  $p = M_n v$  يمثل كمية حركة النيوترون. ولما كانت الطاقة  $E = p^2 / 2 M_n$ ، سيكون لدينا من العلاقة 2-3:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2 M_n E}} \quad \dots\dots\dots 2-4$$

ولما كانت كتلة النيوترون  $M_n = 1.675 \times 10^{-27} \text{ kg}$ ، وبالتعبير عن  $E$  بوحدة الاليكترون فولت  $eV$ ، يكون لدينا من المعادلة 2-4:

$$\lambda = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{\sqrt{2 (1.675 \times 10^{-27}) (1.6 \times 10^{-19}) E}}$$

أو بدلالة الوحدات العملية:

$$\lambda (A^\circ) = \frac{0.286}{\sqrt{E (eV)}} \quad \dots\dots\dots 2-5$$

وبذلك لكي نحصل على حزمة نيوترون طولها الموجي  $1 \text{ \AA}$  (المطلوبة للحصول على تأثيرات الحيود) يكون مطلوبا طاقة مقدارها  $E = (0.286)^2 = 0.082 \text{ eV}$ . وهذه الطاقة اقل كثيرا من تلك المطلوبة في حزمة الاشعة السينية.

تششت النيوترونات بوساطة النوى الذرية ولما كان الطول الموجي للنيوترونات اكبر كثيرا من ابعاد النوى المشتتة ( $\approx 10^{-5} \text{ \AA}$ ) يكون عامل التششت الذري (سوف نناقشه لاحقا) غير معتمدا الى حد ما على زاوية التششت. ولما كان تششت الاشعة السينية يتم بوساطة الاليكترونات (وهي طبعا اصغر كثيرا من النوى) يكون تششت النيوترون اقوى من تششت الاشعة السينية. ان انماط الحيود تتكون بالطريقة نفسها التي للاشعة السينية.

### 3. حيود الاليكترونات Electron diffraction

إن ظاهرة حيود الاليكترونات تعد اثباتاً لنظرية ديبروكلي في وجود موجات ترافق الالكترونات. ان ما يميز الاليكترون عن الفوتون او النيوترون امتلاكه للشحنة وانه يتفاعل بقوة مع المواد ويخترقها الى مسافات قد تصل الى بضعة مئات من الانجسترومات قبل ان يتعرض الى تششت مرن او غير مرن. ومن هنا لا يقوم الاليكترون بدور مشابه للاشعة السينية في دراسة التراكيب البلورية، حيث للاشعة السينية قدرة اختراق عالية مما يجعلها مناسبة لدراسة المواد الحجمية، بينما ينحصر استخدام الاليكترون في دراسة سطوح البلورات والاغشية الرقيقة.

يمكن اعتبار الاليكترونات ذات الكتلة  $m$  وتتحرك بسرعة  $v$  أمواج (ديبروكلي) ذات طول موجي:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} \quad \dots\dots\dots 2-6$$

لان  $E = p^2 / 2m$ . واذا اكتسبت الاليكترونات طاقة  $E$  تحت تأثير فرق الجهد  $V$  يكون مقدار هذه الطاقة هو  $E = Ve$ ، وبذلك:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mVe}} \quad \dots\dots\dots 2-7$$

ولما كانت  $m = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$  يمكن ان نكتب العلاقة اعلاه:

$$\lambda = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{\sqrt{2(9.11 \times 10^{-31})(1.6 \times 10^{-19})E}}$$



ونكتبها في الوحدات العملية:

$$\lambda (A^\circ) = \frac{150.8}{\sqrt{E (eV)}} = \frac{150.8}{\sqrt{V (volts)}} \dots\dots\dots 2-8$$

لكي نحصل على تأثيرات حيود يكون مطلوباً طول موجي مقداره  $1A^\circ$  وبذلك يكون واضحاً من المعادلة 2-8 اننا بحاجة الى 150 فولت فقط. والان هنا اجهزة حديثة تستعمل فولتية من مرتبة 50 kV وتنتج طول موجي  $0.05 A^\circ$  ان انماط حيود الاليكترونات مشابهة لتلك التي للاشعة السينية ويتم تفسيرها بالطريقة نفسها.

تشتمل حزمة الاليكترونات بواسطة نوى الذرات وكذلك بواسطة الاليكترونات الذرية. ويتناقص عامل تشتت الاليكترونات بزيادة قيمة زاوية التشتت.

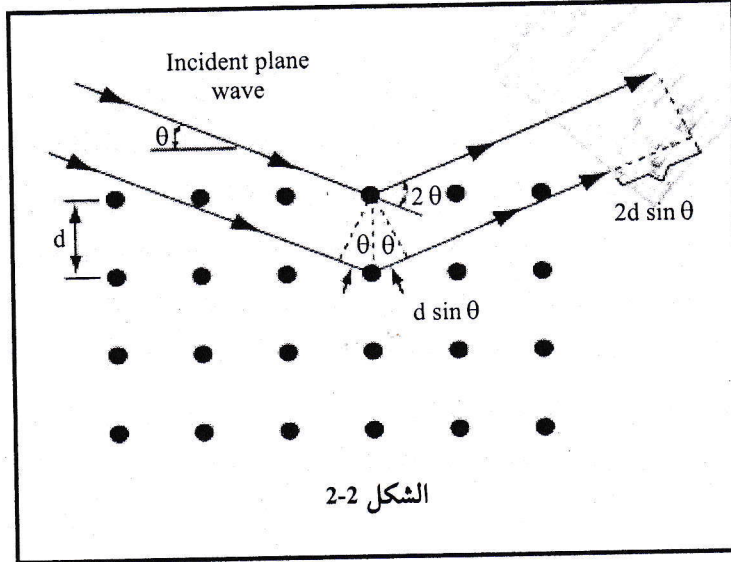
ان ما قدمناه من دراسة حول حيود النيوترونات والاليكترونات هو فقط لغرض تغطية المعلومات حول طرق الحيود المستخدمة، وفي الواقع سندرس بالتفصيل الحيود بواسطة الاشعة السينية.

### 2.3 قانون براك Bragg's law

ان اول من اقترح استخدام البلورات كمحزز حيود للاشعة السينية هو فون لاوي وبعده قام باختبارها عملياً كل من فريدريخ ونيبنك Fredrich and Knipping، ولكن صياغة حيود الاشعة السينية بواسطة البلورات التي قدمها لنا براك وولده W.L. Bragg and W.H. Bragg عام 1912 كانت بسيطة وواضحة فيزيائياً اكثر، ومنح براك وولده جائزة نوبل في الفيزياء عام 1915 لعمله في دراسة التراكيب البلورية لبعض البلورات مثل كلوريد الصوديوم والماس. وبذلك سوف نناقش معالجة براك.

تبعاً للصورة التي قدمها براك لحيود الاشعة السينية، تنعكس الامواج الساقطة مرآوياً (تبعاً لقوانين الانعكاس) عن مستويات ذرات البلورة المتوازية. وان كل مستوي يعكس جزءاً صغيراً من الاشعاع فقط ( $10^{-3}$  to  $10^{-5}$ ) مثلما تعكسه مرآة فضضت بشكل طفيف. ووجد ان حزم الحيود تكون قوية عندما تتداخل الانعكاسات الحاصلة من مستويات الذرات المتوازية تداخلاً بناءً. يمكن لنا ان نشق قانون براك باعتماد مستويات شبيكة متوازية تفصل بينها مسافة  $d$  كما في الشكل 2-2. يسقط على هذه المستويات المتوازية حزمة شعاع احادية اللون متوازية في مستوي الصفحة. سوف نستعمل مصطلح زاوية الإصابة او

الخاطفة glancing angle بدلا عن زاوية السقوط. من الشكل 2-2 يمكن ان نكتب فرق المسار ( $P.D$ ) بين الاشعة المنعكسة عن المستويات المتجاورة كالآتي:



$$P.D = CB + BD = d \sin \theta + d \sin \theta = 2d \sin \theta$$

ويكون التداخل تداخلا بناء عندما يتناسب المحرف الطور مع  $2\pi$  أو بمعبارة اخرى عندما يكون فرق الطور عبارة عن مضاعفات عددية صحيحة من الطول الموجي للشعاع الساقط، أي عندما تكون:

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad , \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad \text{2-9}$$

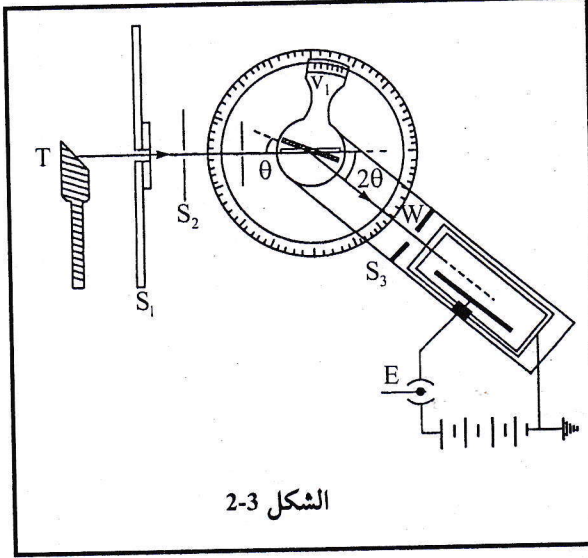
وتسمى هذه المعادلة معادلة براك. وان هذه المعادلة مع حقيقة تساوي زاويتي السقوط والانعكاس تسمى بقانون براك.

#### ملاحظة

مطلوب الانتباه الى ان مستويات الانعكاس الموضحة في الشكل 2-2 لا علاقة لها مع سطوح المستويات التي تحيط بعينة معينة. ان قانون براك يعد نتيجة مباشرة لتكرارية الشبيكة. ان قانون براك لا يشير الى ترتيب الذرات في الاساس المصاحبة لكل نقطة شبيكة ولكن في الواقع ان الشدة النسبية لرتب الحيود المختلفة الناتجة من مجموعة معينة من المستويات المتوازية هي التي تحدد مكونات الاساس.



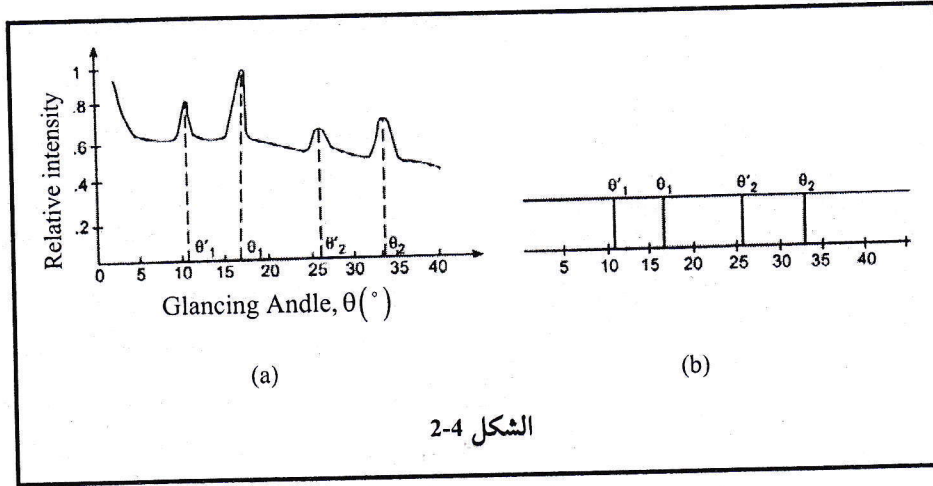
### مطياف براك Bragg's spectrometer



لكي نثبت قانون براك ونستعمله للاغراض العملية قام براك وولده بتصميم مطياف كالذي موضح في الشكل 2-3.

يرد من هدف انبوبة الاشعة السينية  $T$  حزمة نحيفة من الاشعة السينية ويتم تنظيمها لتكون متوازية من خلال شقين  $S_1$  و  $S_2$ . تسقط هذه الحزمة على مستويات البلورة  $C(hkl)$  التي تثبت على منضدة دائرية تدور

حول محور شاقولي. ويمكن قراءة هذه المنضدة من خلال دائرة مدرجة افقية ثابتة،  $G$  ومركزة مع المنضدة الدائرية التي تحمل البلورة بمساعدة قدمة ذات ورنية،  $V_1$ . وبعد تعرض حزمة الاشعة السينية للانعكاس من البلورة تمر الحزمة من خلال شق ثالث  $S_3$ ، وتدخل غرفة تأين  $I$  خلال نافذه من الالمنيوم  $W$ . وتكون مادة التأين في الغالب بروميد الاثيل. ويتم قياس تيار التأين الناتج بواسطة حزمة الاشعة السينية بواسطة اليكتروميتر  $E$ . وابتداءً تكون المنضدة الدوارة بالشكل الذي يتم فيه استلام حزمة الاشعة السينية الواردة من الهدف  $T$  بواسطة الغرفة  $I$  ويكون موضع البلورة على المنضدة يرتبط بزاوية الاصابة (او الزاوية الخاطفة)  $\theta = 0$ . يتم الان تدوير المنضدة وتكون البلورة عند زاوية صغيرة  $\theta$ . ولغرض استلام حزمة الاشعة السينية المنعكسة يتم تدوير غرفة التأين بحيث تكون زاوية الانعكاس مساوية لزاوية السقوط. وبذلك تكون غرفة التأين قد دارت بزاوية  $2\theta$  عن موضعها الاول. نقوم بتغيير قيمة الزاوية  $\theta$  من الصفر بخطوات صغيرة ونسجل بكل خطوة الشدة النسبية للحزمة المنعكسة. والشكل 2-4 a يعرض رسماً لهذه الشدة النسبية بالضد من زاوية الاصابة.



الشكل 2-4

ولغرض التسجيل بطريقة أخرى يتم استبدال غرفة التاين بفلم تصوير والشكل 2-4b يعرض الطيف الحاصل بهذه الطريقة. تعود الزوايا  $\theta_1$  و  $\theta_2$  الى مواضع مرتبة النهاية العظمى الاولى والثانية لطول موجي معين لحزمة الاشعة السينية الساقطة، وان مواضع  $\theta'_1$  و  $\theta'_2$  تخص مواضع طول موجي آخر  $\lambda'$ . ان الطول الموجي  $\lambda'$  يختلف عن  $\lambda$  بشكل طفيف.

يستعمل مطياف براك لغرضين:

1. ايجاد الطول الموجي: توضح معادلة براك  $2d \sin \theta = n\lambda$  انه في حالة معرفة الزاوية  $\theta$  التي تعود لرتبة النهاية العظمى الاولى لحزمة اشعة سينية معينة يمكن حساب الطول الموجي للحزمة الساقطة شريطة معرفة  $d$ . ان العلاقة بين  $d$  و مساحة الشبكة  $a$  معروفة ويمكن حساب مساحة الشبكة  $a$  من الشكل الهندسي لوحدة الخلية وكثافة البلورة. على سبيل المثال: في حالة وحدة خلية مكعبة طول ضلعها  $a$  وتحتوي على  $n$  جزيئة وكثافة  $\rho$  يمكننا ان نكتب:

حجم وحدة الخلية = (عدد الجزيئات لوحدة الخلية) (كتلة كل جزيئة) على الكثافة.

$$a^3 = \frac{n(M / N_A)}{\rho} \quad \text{او:}$$

$$a = \left( \frac{nM}{N_A \rho} \right)^{1/3} \quad \dots\dots\dots 2-10$$



اذ ان  $M$  هو الوزن الجزيئي لمادة البلورة وان  $N_A = 6.02214 \times 10^{23} \text{ part/mol}$  هو عدد افوكادرو (مقلوب كتلة البروتون).

2. ايجاد تركيب بلورة: يعتمد طيف الاشعة السينية الموضح في الشكل 2-4 على طبيعة البلورة. وبذلك يمكن استعمال هذا الطيف في دراسة تركيب البلورات المختلفة. لقد وجد من خلال شبائك برافرز الاربعة عشر ان نسبة فسخ الشبيكة في المستويات الثلاثة (100) و (110) و (111) فريدة. على سبيل المثال، في حالة شبائك المكعب الثلاثة يتم ايجاد الفسخ  $d_{100}$  و  $d_{110}$  و  $d_{111}$  بالنسب التالية:

|        | $d_{100}$ | $d_{110}$    | $d_{111}$    |
|--------|-----------|--------------|--------------|
| s.c.   | 1         | $1/\sqrt{2}$ | $1/\sqrt{3}$ |
| b.c.c. | 1         | $2/\sqrt{2}$ | $1/\sqrt{3}$ |
| f.c.c. | 1         | $1/\sqrt{2}$ | $1/\sqrt{3}$ |

وبذلك باستعمال حزمة اشعة سينية احادية الطول الموجي ذات طول موجي  $\lambda$  معروف، يتم الحصول على الزوايا الخاطفة  $\theta_1$  و  $\theta_2$  و  $\theta_3$  بالنسبة لرتبة النهاية العظمى الاولى من مطياف براك للمستويات (100) و (110) و (111) على التعاقب. ومن ثم سنجد ان معادلة براك تكتب:

$$\lambda = 2d_{100} \sin \theta_1 = 2d_{110} \sin \theta_2 = 2d_{111} \sin \theta_3$$

وبذلك سيكون لدينا:

$$d_{100} : d_{110} : d_{111} :: \frac{1}{\sin \theta_1} : \frac{1}{\sin \theta_2} : \frac{1}{\sin \theta_3}$$

وعند مقارنة النسب الملاحظة مع تلك التي نعرفها من الشكل الهندسي لشبائك برافرز: في حالة بلورة NaCl لدينا:

$$d_{100} : d_{110} : d_{111} :: 1 : 1/\sqrt{2} : 2/\sqrt{3}$$

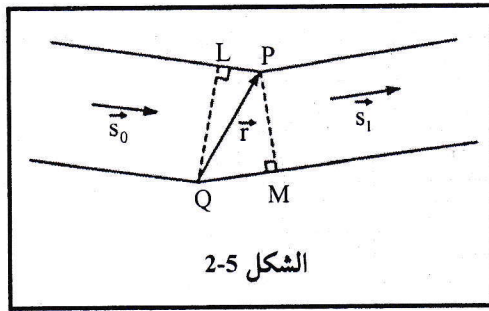
بذلك تكون بلورة NaCl تتكون من وحدات خلية f.c.c، والحال نفسه سنجد ان بلورة KCl تمتلك وحدة خلية s.c. لاننا سنجد عمليا ان:

$$d_{100} : d_{110} : d_{111} :: 1 : 1/\sqrt{2} : 1/\sqrt{3}$$

ان هذا التحليل رغم انه يحدد انواع الشبيكة، ولكنه لا يوضح مواضع الايونات المختلفة. ومعرفة ان نصف ايونات بلورات  $KCl$  او  $NaCl$  موجبة والنصف الاخر سالبة فالتركيب الموضح في الشكل 2-29 هو الاكثر ترجيحاً.

#### 2.4 معادلات لاوي Laue equations

اجعل حزمة اشعة سينية متوازية تسقط على بلورة باتجاه وحدة متجه هو  $\vec{s}_0$  وان



الحزمة المشتتة لوحظت عند نقطة بعيدة باتجاه عشوائي وحدة متجهها  $\vec{s}_1$ ، ولنقل ان الاشعة انشئت بوساطة مركزي تشتت متمثلين هما  $P$  و  $Q$ ، تفصل بينهما مسافة  $\vec{r}$  كما في الشكل 2-5. واذا كانت  $QM$  و  $PL$  مساقط  $\vec{r}$  على اتجاهات الموجة الساقطة والمشتتة على التعاقب فان:

$$QM = \vec{r} \cdot \vec{s}_1 \text{ و } PL = \vec{r} \cdot \vec{s}_0$$

فرق المسارين الاشعة المشتتة عند  $P$  وتلك التي تشتتت عند  $Q$  هو:

$$PD = QM - PL = \vec{r} \cdot (\vec{s}_1 - \vec{s}_0) = \vec{r} \cdot \vec{S} \dots\dots\dots 2-11$$

اذ ان  $\vec{S} = \vec{s}_1 - \vec{s}_0$  ويتضح في الشكل 2-6 عمودي على المستويات المتوازية المتجاورة التي تقع فيها النقاط  $P$  و  $Q$  وهذه المستويات ليست الا مستويات انعكاس براك وان الزاوية  $\theta$  هي زاوية براك. يعطى فرق المسار بين الاشعة المشتتة عند النقطتين بوساطة:

$$\phi = \frac{2\pi}{\lambda}(PD) = \frac{2\pi}{\lambda}(\vec{r} \cdot \vec{S}) \dots\dots\dots 2-12$$

اذ ان  $\lambda$  هي الطول الموجي للاشعة الساقطة. واننا سنحصل على نهاية عظمى للحيود باتجاه  $\vec{s}_1$  اذا اضيفت للطور الاشعة المشتتة بهذا الاتجاه من كل ذرة في البلورة، أي تختلف بالطور بوساطة المضاعفات العددية الصحيحة الى  $2\pi$  وهذا سيحدث اذا اضيفت للطور الاشعة المشتتة من ذرات اقرب الجيران التي تفصل بينها متجهات الشبيكة الاولى  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  وستضاف اسهامات الذرات الاخرى التي تفصلها عن نقطة الاصل مجموعات



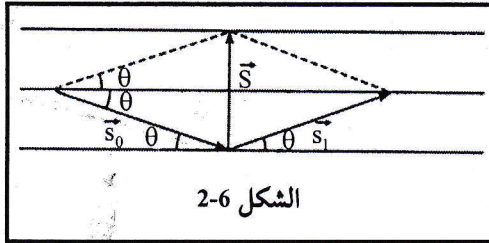
تكاملية من هذه المتجهات الى الطور بسبب دورية ترتيب الذرات. وبذلك يجب ان يكون فرق المسار  $2\pi$  مضروباً بعدد صحيح عندما يستبدل  $\vec{r}$  في المعادلة 2-12 بوساطة  $\vec{a}$  أو  $\vec{b}$  أو  $\vec{c}$ . أي:

$$\frac{2\pi}{\lambda}(\vec{a} \cdot \vec{S}) = 2\pi h' = 2\pi nh$$

$$\frac{2\pi}{\lambda}(\vec{b} \cdot \vec{S}) = 2\pi k' = 2\pi nk$$

$$\frac{2\pi}{\lambda}(\vec{c} \cdot \vec{S}) = 2\pi \ell' = 2\pi n\ell \dots\dots\dots 2-13$$

اذ ان  $h'$  و  $k'$  و  $\ell'$  اعداد صحيحة. لاحظ اننا استبدلنا  $h'$  بوساطة  $nh$  وغيرها،  
لانه ربما تحتوي الاعداد الصحيحة  $h'$  و  $k'$  و  $\ell'$  المعامل المشترك الاكبر  $n$ ، بحيث تكون:  
 $\ell' = n\ell$  و  $k' = nk$  و  $h' = nh$



الشكل 2-6

اذ ان  $n = 1, 2, 3, \dots$  وان  $h$  و  $k$  و  $\ell$  هي الان ثلاث اصغر اعداد صحيحة بالنسبة نفسها كما الى  $h'$  و  $k'$  و  $\ell'$  وتكون مجموعة اعداد مشابهه الى معاملات ميلر.

من الشكل الهندسي للشكل 2-6 يكون مقدار:

$$S' = s_0 \sin \theta + s_1 \sin \theta' = 2 \sin \theta \dots\dots\dots 2-14$$

اذا كانت الزوايا  $\alpha$  و  $\beta$  و  $\gamma$  هي الزوايا التي يصنعها عمود التشتت  $\vec{S}$  مع محاور البلورة  $\vec{a}$  و  $\vec{b}$  و  $\vec{c}$  على التعاقب:

$$\vec{a} \cdot \vec{S} = aS \cos \alpha = 2a \sin \theta \cos \alpha$$

ويمكن الحصول على علاقات مشابهه بالنسبة الى  $\vec{b} \cdot \vec{S}$  و  $\vec{c} \cdot \vec{S}$  وتكتب المعادلة 2-13 كما يأتي:

$$2a \sin \theta \cos \alpha = nh\lambda$$

$$2b \sin \theta \cos \beta = nk\lambda$$

$$2c \sin \theta \cos \gamma = n\ell\lambda \dots\dots\dots 2-15$$

وتسمى هذه المعادلات بمعادلات لاوي Laue equations. ولقيم معلومة للطول الموجي الساقط  $\lambda$  والاعداد الصحيحة  $h, k, \ell, n$  فالمعادلات 2-15 تعين  $\theta$  واثنين من اتجاهات الجيب تمام لعمود التشتت  $\cos \alpha$  و  $\cos \beta$  و  $\cos \gamma$ . ويمكن تعيين اتجاه الجيب تمام الثالث من المثلثات. على سبيل المثال في نظام الاحداثيات الرباعي  $\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1$  وبذلك معادلات لاوي توفر الخدمة في ايجاد قيمة  $\theta$  و  $S$  وتعرف اتجاه التشتت.

ان معادلات لاوي مكافئة لقانون براك وستثبت ذلك الان:

توضح المعادلات 2-15 ان اتجاهات الجيب تمام لعمود التشتت  $S$  تتناسب مع  $h/a$  و  $k/b$  و  $\ell/c$  وكذلك تفعل اتجاهات جيب تمام العمود على المستويات  $(hk\ell)$ . ان المستويات المجاورة ذات معاملات ميلر  $(hk\ell)$  تقطع المحاور  $a$  و  $b$  و  $c$  عند فترات  $h/a$  و  $k/b$  و  $\ell/c$ . ان كل هذه الاعتبارات تثبت ان  $S$  يماثل العمود على عائلة المستويات  $(hk\ell)$ . اذن يمكن اعتبار المستويات  $(hk\ell)$  على انها مستويات انعكاس براك. ان معالجة لاوي بذلك تكون قد اثبتت صحة قانون براك.

اذا كانت  $d$  تمثل المسافة البينية بين المستويات في مستويات  $(hk\ell)$  فاننا نعرف من المعادلات 1-9 ان:

$$d = \frac{a}{h} \cos \alpha = \frac{b}{k} \cos \beta = \frac{c}{\ell} \cos \gamma$$

والان من أي من المعادلات 2-15 سيكون لدينا:

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

والذي هو قانون براك و ان  $n$  تمثل رتبة النهاية العظمى للحيود.

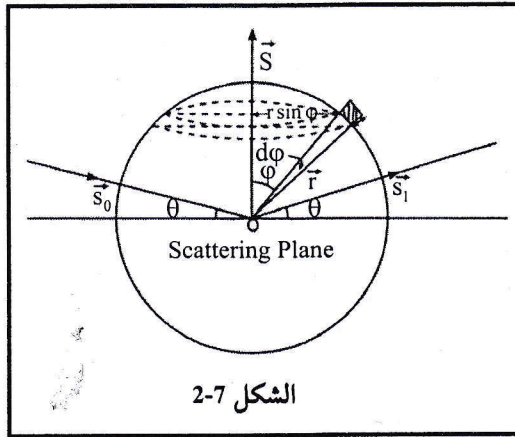
#### عامل التشتت الذري Atomic scattering factor

تعد معادلة براك أو معادلات لاوي المكافئة لها شرطاً أساسياً لحدوث حيود مرن ومتآلف للأشعة السينية من مجموعة السطوح المتوازية  $(hk\ell)$ . وان هذه المعادلات تحقق الحد الأدنى لاحتمال الحصول على قيمة لشدة الموجة المشتتة من السطح  $(hk\ell)$ ، أما مقدار تلك القيمة فقد يكون كبيراً أو متوسطاً أو صغيراً أو صفراً (سعة أو شدة الأشعة المشتتة)، وهذا يتطلب منا تحويل الحسابات من خلال اعتماد تشتت الأشعة السينية بواسطة ذرة محددة بدلاً عن نقطة. ان الذرة المحددة التي تكون أساس الشبكة تمتلك توزيعاً مستمراً لكثافة



الإليكترون يصاحبها (يمكننا هنا إهمال تأثيرات التشتت الصغيرة نسبياً للنوى الذرية). ولما كانت الإليكترونات من أجزاء مختلفة من الغيمة المحددة لا تشتت الأشعة السينية بالطور، فإن السعة ليست السعة للإليكترون واحد مضروبة بعدد الإليكترونات في الغيمة وإنما هي في الواقع سعة إليكترون واحد مضروبة بعامل  $f$ ، يسمى عامل التشتت. وبذلك فإن عامل التشتت يحسب لأبعاد محددة للذرة ويتضمن توزيع كثافة الإليكترون حول الذرة المشتتة والطول الموجي للأشعة السينية الساقطة وزاوية الإصابة. فهو يقيس الكفاءة التي تشتت بها الذرة الشعاع الساقط، ويمكن تعريف عامل التشتت الذري على أنه سعة الأشعة المشتتة من الذرة عند مقارنته بسعة تشتت الأشعة من إليكترون واحد.

لكي نشق علاقة لعامل التشتت الذري  $f$  نأخذ سعة الأشعة المشتتة من إليكترون



منفرد عند مركز الذرة وتلك المشتتة بوساطة عنصر شحنة  $\rho(\vec{r}) dv$  موضوعاً في عنصر حجم  $dv$  عند زاوية براك  $\theta$  حول النقطة  $\vec{r}$ . وأن  $\rho(\vec{r})$  هو كثافة الإليكترون. الشكل 2-7 يوضح تشتت الأشعة السينية من غيمة إليكترون ذرة أساس شبيكة بلورة. ان اختلاف الطور بين الأشعة المشتتة عند المركز وتلك المشتتة في العنصر  $dv$  عند  $\vec{r}$  يعطى بوساطة:

$$\varphi = \frac{2\pi}{\lambda} (\vec{r} \cdot \vec{S}) \dots \dots \dots 2-16$$

يمكن ان تؤخذ سعة التشتت من نقطة الإليكترون عند  $O$  باتجاه  $\vec{S}_1$  على أنها:  $Ae^{i(kx - \alpha t)}$ ، اذ ان  $k = 2\pi/\lambda$  وان  $x$  مسافة الاحداثي عبر الاتجاه  $\vec{S}_1$ . وبذلك تكون سعة التشتت من عنصر الحجم  $dv$  عبر الاتجاه  $\vec{S}_1$  هي:  $Ae^{i(kx - \alpha t + \varphi_r)} \rho(\vec{r}) dv$  والذي هو السعة خارج الطور بوساطة  $\varphi_r$  عن تلك بسبب الإليكترون عند  $O$  مضروباً بوساطة الشحنة في العنصر. ان سعة الأشعة المشتتة بوساطة العنصر  $dv$  كمقارنتها بتلك المشتتة بوساطة نقطة الإليكترون عند  $O$  تعطى بوساطة:

$$df = \frac{A e^{i(kx - \omega t + \varphi_r)} \rho(\vec{r}) dv}{A e^{i(kx - \omega t)}} = e^{i\varphi_r} \rho(\vec{r}) dv \dots\dots\dots 2-17$$

وبالتكامل عبر حجم الذرة كله:

$$f = \int \rho(\vec{r}) e^{i\varphi_r} dv \dots\dots\dots 2-18$$

لو فرضنا ان توزيع الشحنة في الذرة متماثل كروياً، فان كثافة الشحنة ستكون دالة الى  $r$ ، أي بمعنى:

$$\rho(\vec{r}) = \rho(r)$$

من المعادلة 2-16:

$$\varphi_r = \frac{2\pi}{\lambda} r S \cos \varphi = \frac{4\pi}{\lambda} r \sin \theta \cos \varphi = \mu r \cos \varphi \dots\dots\dots 2-19$$

$$S = 2 \sin \theta \quad \text{اذ ان:}$$

$$\mu = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta \dots\dots\dots 2-20$$

وبتعويض 2-19 و 2-20 في 2-18 نحصل على:

$$f = \int_V \rho(r) e^{i\mu r \cos \varphi} dv \dots\dots\dots 2-21$$

ولكي نستمر بهذا التكامل عبر المكان كله فنختار عنصر الحجم  $dv$  على انه حلقة نصف قطرها  $r \sin \varphi$  وعرضها  $r d\varphi$  وسمكها  $dr$  كما في الشكل 2-7 والان:

$$dv = 2\pi r \sin \varphi (r d\varphi) dr = 2\pi r^2 \sin \varphi d\varphi dr$$

والمعادلة 2-21 تصبح:

$$f = \int_{r=0}^{\infty} \int_{\varphi=0}^{\pi} \rho(r) e^{i\mu r \cos \varphi} 2\pi r^2 \sin \varphi d\varphi dr \dots\dots\dots 2-22$$

ولايجاد الجزء الزاوي من التكامل نضع:

$$\cos \varphi = z \quad \text{بحيث تكون} \quad \sin \varphi d\varphi = dz$$

$$\int_0^\pi e^{i\mu r \cos \varphi} \sin \varphi d\varphi = \int_{-1}^1 e^{i\mu z} dz = \frac{e^{i\mu r} - e^{-i\mu r}}{i\mu r}$$

$$= \frac{2}{\mu r} \sin \mu r$$

وبذلك تصبح المعادلة 2-22:

$$f = 4\pi \int_0^\infty r^2 \rho(r) \frac{\sin \mu r}{\mu r} dr \dots\dots\dots 2-23$$

إذا تركز كامل كثافة الشحنة عند  $r=0$ ، فإنه فقط  $\mu r=0$  ستسهم بالتكامل وفي هذا الحد سيكون  $\frac{\sin \mu r}{\mu r} = 1$  و:

$$f = \int_0^\infty 4\pi r^2 \rho(r) dr \dots\dots\dots 2-24$$

ولما كانت  $4\pi r^2 dr = dv$  وتمثل حجم القشرة الكروية ذات نصف القطر  $r$  وسمك  $dr$  بذلك:

$$f = \int \rho dv = Z \dots\dots\dots 2-25$$

أي ان العامل  $f$  يساوي شحنة الاليكترون الكلية في الذرة والتي تساوي بوضوح عدد الاليكترونات في الذرة.

وبالطريقة نفسها في الاتجاه الامامي  $\theta=0$  ومن المعادلة 2-20،  $\mu=0$  وثم من المعادلة 2-23 يكون  $f = Z$ .

وخلاصة القول اذا تركزت الشحنة الاليكترونية للذرة عند مركز نقطتها فان سعة الاشعة المشتتة من هذه النقطة تساوي سعة الاشعة من اليكترون واحد مضروبة بوساطة عدد الاليكترونات في الذرة  $Z$ . وما عدا ذلك في حالة ذرة محددة تكون سعة الاشعة المشتتة  $f$  مرة من تلك التي من اليكترون واحد. من الواضح ان  $f < Z$ .

يمكن الحصول على قيمة  $\rho(r)$  وبذلك  $f$  من المعادلة 2-23 بايجاد دوال الموجة للذرة في البلورة. ويمكن الحصول على توزيع الشحنة بوساطة حسابات هارتي - فوك Hartree-Fock أو بالنسبة للذرات ذات العدد الذري اكبر من الربيديوم ribidium من



الطريقة الاحصائية المعطاة بوساطة ثوماس وفيرمي Thomas and Fermi. عموما فان قيم عامل التشتت الذري لمختلف الذرات كدالة الى  $\sin \theta / \lambda$  منشورة على شكل جداول. لقد وجد ان قيم  $f$  التي تم الحصول عليها بهذه الطريقة للذرات الحرة تكون قريبة جدا لتلك التي بالنسبة للذرات في الجوامد حيث يحصل توزيع صغير للاليكترونات عندما تتقارب الذرات الى بعضها البعض الاخر لتشكيل الجامد.

### عامل التركيب الهندسي The geometrical structure factor

ان شدة الاشعة السينية المشتتة من بلورة لا تعتمد فقط على توزيع الشحنة حول الذرة (مثلما اخذناها في الحساب بدلالة عامل التشتت  $f$ )، ولكن تعتمد كذلك على تركيب وحدة الخلية. قد لا تبرر أي تعقيدات في حالة وحدات الخلية الاولى حيث تقع الذرات عند الزوايا ولكن تكون هنالك تعقيدات في حالة الاشعة المشتتة من بلورات ذات وحدات خلية تحتوي على اكثر من ذرة واحدة مثل وحدات خلية تراكيب  $b.c.c.$  و  $f.c.c.$ ، فهنا يجب ان نأخذ بالحسبان تفاعل الحزم المشتتة بوساطة مختلف الذرات ضمن وحدة الخلية. اذا كان  $F(h'k'\ell')$  بالنسبة الى انعكاسات  $(h'k'\ell')$  تمثل نسبة سعات الاشعة المشتتة بوساطة كامل وحدة الخلية الى تلك التي تشتت بوساطة اليكترون نقطة عند نقطة الاصل فانه:

$$F(h'k'\ell') = \sum_j f_j e^{i\varphi_j} \dots\dots\dots 2-26$$

اذ ان  $f_j$  عامل تشتت بالنسبة الى الذرة  $J^{th}$  من وحدة الخلية وان  $\varphi_j$  هو فرق الطور بين الاشعة المشتتة عند نقطة الاصل وتلك المشتتة من الذرة  $J^{th}$  من وحدة الخلية. ان عملية الجمع تمتد عبر كل الذرات التي تخص وحدة الخلية. يعطى وكالعادة فرق الطور بالعلاقة  $\varphi_j = \frac{2\pi}{\lambda} (\vec{r}_j \cdot \vec{S})$ ، اذ ان  $r'_j$  يمثل متجه موضع الذرة  $J^{th}$  من وحدة الخلية. اذا كان الاحداثيات الموضعية الكسرية الى الذرة  $J^{th}$  هي  $(x_j, y_j, z_j)$  فان:

$$\vec{r}_j = x_j \vec{a} + y_j \vec{b} + z_j \vec{c}$$

$$\vec{r}_j \cdot \vec{S} = (x_j \vec{a} + y_j \vec{b} + z_j \vec{c}) \cdot \vec{S}$$

$$= \lambda (h'x_j + k'y_j + \ell'z_j)$$

ولان  $\vec{a} \cdot \vec{S} = nh\lambda = h'\lambda$  و  $\vec{b} \cdot \vec{S} = k'\lambda = nk\lambda$  و  $\vec{c} \cdot \vec{S} = \ell'\lambda = n\ell\lambda$  فمن  
المعادلة 2-26:

$$F(h'k'\ell') = \sum_j f_j e^{2\pi i(h'x_j + k'y_j + \ell'z_j)} \quad \dots\dots\dots 2-27$$

عندما تكون جميع ذرات البلورة متماثلة فتمتلك جميع  $f_j$  القيمة نفسها ولنقل انها  $f$ ،  
فالمعادلة اعلاه ستكتب كما يلي:

$$F(h'k'\ell') = f S \quad \dots\dots\dots 2-28$$

$$S = \sum_j e^{2\pi i(h'x_j + k'y_j + \ell'z_j)} \quad \dots\dots\dots 2-29$$

وتعطى سعة التشتت الكلية بوساطة حاصل ضرب عامل التشتت الذري و عامل  $S$   
الذي يعتمد على ترتيب الذرات ضمن وحدة الخلية ويسمى عامل التركيب الهندسي.  
بالنسبة للبلورات التي لا تكون فيها جميع الذرات متماثلة فان  $F(h'k'\ell')$  لا يمكن  
فصله الى العاملين  $f$  و  $S$ . وفي مثل هذه الحالات فان  $F(h'k'\ell')$  ومثل ما اعطي بوساطة  
المعادلة 2-27 يكون بنفسه كعامل تركيب هندسي، الذي سيظم بالطبع تاثير التركيب  
وكذلك تاثير الحجم المحدد للذرة.  
ولما كان  $F$  عدد معقد فيمكن ان نكتبه:

$$F = \sum_j f_j \cos 2\pi(h'x_j + k'y_j + \ell'z_j) + i \left[ \sum_j f_j \sin 2\pi(h'x_j + k'y_j + \ell'z_j) \right]$$

وتعطى شدة الحزمة المتشتتة بوساطة:

$$I = |F|^2 = FF^* \\ F = \left[ \sum_j f_j \cos 2\pi(h'x_j + k'y_j + \ell'z_j) \right] + i \left[ \sum_j f_j \sin 2\pi(h'x_j + k'y_j + \ell'z_j) \right] \quad \dots\dots\dots 2-30$$

اذ ان  $F^*$  هو المرافق المعقد الى  $F$ .

وعند انعكاس خاص يتصف بوساطة  $\bar{K}$  ربما يحصل ان يلغي عامل التركيب بعض الانعكاسات التي تكون مسموحة لما عدا ذلك بوساطة الشبكة الفضائية. وان هذه الانعكاسات المفقودة تساعد في تعيين تركيب البلورة.

ومن خلال ما سنقوم بتفحصه من وحدات خلية مختلفة يمكن ان ندرك اهمية دراسة التركيب الهندسي في علم البلورات.

#### شبكة المكعب البسيط

تمتلك شبكة المكعب البسيط ذرة واحدة فقط لكل وحدة خلية وان اساس هذه الشبكة مكون من ذرات متماثلة عند  $x_j = y_j = z_j = 0$ . ومن المعادلة  $S = \sum_j e^{2\pi i(h'x_j + k'y_j + \ell'z_j)}$  نجد ان عامل التركيب  $S = 1$  وبذلك يكون لدينا:

$$F(h'k'\ell') = f \quad S = f$$

وبذلك لا تتحور السعة ومن خلالها شدة الحزمة المنتشرة في أي اتجاه مسموح بوساطة الشبكة الفضائية وكما اسلفنا. وسنحصل على جميع الخطوط في نمط الحيود التي تنبأ بها قانون براك.

#### شبكة المكعب ممرکز الجسم

تمتلك شبكة المكعب ممرکز الجسم ذرات متماثلة عند كل ركن وعند مركز جسم وحدة الخلية. وتمتلك وحدة خلية  $b.c.c$  ذرتين وبذلك يجب ان تمتلك قيمة  $S$  تختلف عن 1 ان اساس تركيب  $b.c.c$  يمتلك ذرات متماثلة عند  $x_j = y_j = z_j = 0$  وعند  $x_j = y_j = z_j = 1/2$ ، لذلك يكون الجمع في المعادلة 2-27 محدد بقيم  $j = 0$  و  $j = 1/2$ :

$$F(h'k'\ell') = \sum_j f_j e^{2\pi i(h'x_j + k'y_j + \ell'z_j)}$$

$$F(h'k'\ell') = f \left[ 1 + e^{\pi i(h'+k'+\ell')} \right] \dots\dots\dots 2-31$$

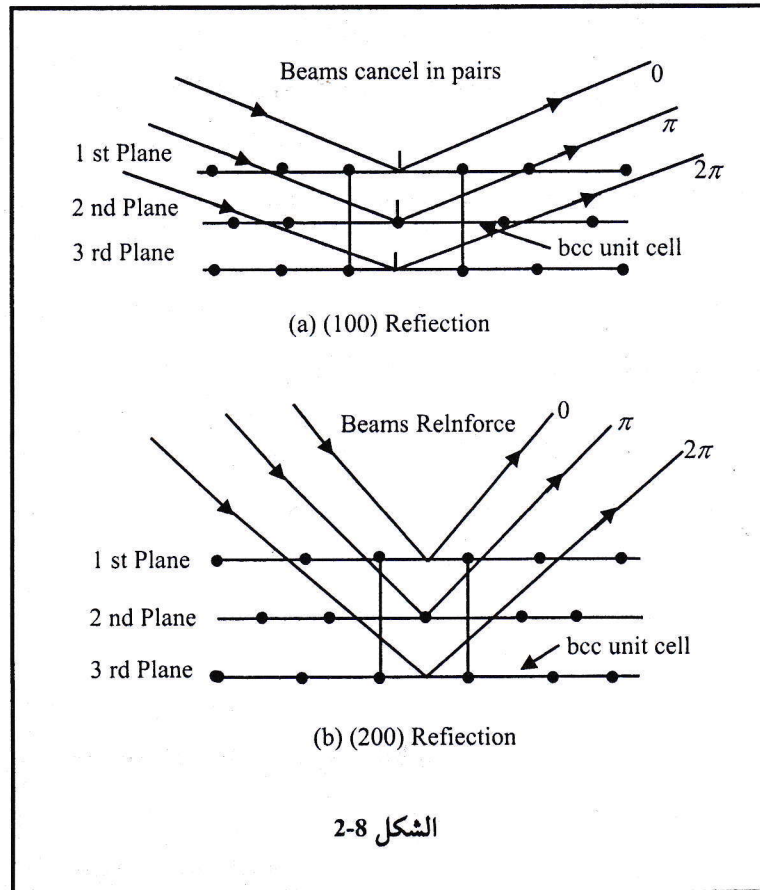


وبذلك:

حيود. امثلة على مثل هذه السطوح  $F = f(1-1) = 0$  عندما يكون  $(h' + k' + \ell')$  عدد فردي وبذلك لا يوجد  $(300), (221), (111), (100)$ .

هنالك حيود ومثال لهذه السطوح  $F = f(1+1) = 2f$  عندما يكون  $(h' + k' + \ell')$  عدد زوجي وبذلك يكون  $(222), (200), (110)$ .

ويمكن فهمها من الشكل 2-8.



يحدث الانعكاس (100) في العادة عندما تختلف الانعكاسات من المستويات التي تحيط الخلية المكعبة في الطور بوساطة  $2\pi$ .

هنالك في شبكة المكعب المركز الجسم مستوي ذرات وسطي (رمز له في الشكل بالمستوي  $2^{nd}$ ) والذي يساوي بقدرة التشتت المستويات الاخرى ويعطي انعكاساً يتخلف بالطور بمقدار  $\pi$  عن المستوي الاول وبذلك يلغي مساهمة ذلك المستوي. يحصل الانعكاس (200) (مرتبة الانعكاس الثانية) من مجموعة المستويات نفسها عندما تختلف الانعكاسات من المستويات التي تحد وحدة الخلية بالطور بوساطة  $4\pi$ . وتم يسهم المستوي الوسطي (مستوي ذرات الجسم المركزية) بحزمة تختلف بالطور بمقدار  $2\pi$  عن ذلك الذي يحصل بوساطة المستوي الاول. اذن تقوي حزم المستويات الاول والثاني بعضها البعض الاخر وبذلك يكون هنالك انعكاس (200).

ويمكن توضيح حصول الحيود او عدم حصوله الاخرى على المنوال نفسه من الاسباب.

#### شبكة مكعب مركز الوجة

ان شبكة f.c.c. شبكة غير اولية وان اساسها يمتلك ذرات متماثلة عند (000) و  $\left(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)$  و  $\left(\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}\right)$  و  $\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0\right)$ . وتعطينا المعادلة 2-27:

$$F(h'k'\ell') = \sum_j f_j e^{2\pi i(h'x_j + k'y_j + \ell'z_j)}$$

$$F(h'k'\ell') = f \left[ 1 + e^{\pi i(k'+\ell')} + e^{\pi i(h'+\ell')} + e^{\pi i(h'+k')} \right] \dots\dots\dots 2-32$$

وهذه معادلة عامة لجميع مستويات f.c.c.

ولكي نحل مثل هذه العلاقات نتبع الشروط التالية:

اذا كانت  $(h' + k' + \ell')$  كلها فردية او كلها زوجية فان كل حد اسي سيعطينا 1 وسنحصل على حيود من هذه السطح

$$F(h'k'\ell') = f [1 + 1 + 1 + 1] = 4f$$

ومن امثلة هذه الاسطح: (111)، (131)، (200)، (220)، (222).

حيود الاشعة السينية في البلورات والشبيكة المقلوبة

اما اذا كانت  $(h' + k' + \ell')$  مختلطة (زوجي + فردي) فسوف لا نحصل على حيود من هذه الاسطح وسيكون عامل التركيب:

$$F(h'k'\ell') = f[0] = 0$$

ومن امثلة هذه السطوح:  $(100)$ ،  $(110)$ ،  $(210)$ ،  $(221)$ .

مثال 1-2:

جد علاقة عامل التركيب لتركيب  $NaCl$ ، اذا علمت ان مواقع ذرات  $Na$  و  $Cl$  كالآتي:

$$Cl: 000, \frac{1}{2}0\frac{1}{2}0, 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\frac{1}{2}0$$

$$Na: \frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}, \frac{1}{2}00, 0\frac{1}{2}0, 00\frac{1}{2}$$

ناقش الشروط اللازمة في تحقق الحيود او عدمه.

الحل:

$$F(h'k'\ell') = \sum_j f_j e^{2\pi i(h'x_j + k'y_j + \ell'z_j)}$$

$$F(h'k'\ell') = f_{Cl} [1 + e^{\pi i(h'+\ell')} + e^{\pi i(k'+\ell')} e^{\pi i(h'+k')}]$$

$$+ f_{Na} [1 + e^{\pi i(h'+k'+\ell')} + e^{\pi ih'} + e^{\pi ik'} + e^{\pi i\ell'}]$$

$$F(h'k'\ell') = f_{Cl} [1 + e^{\pi i(h'+\ell')} + e^{\pi i(k'+\ell')} e^{\pi i(h'+k')}]$$

$$+ f_{Na} e^{\pi i(h'+k'+\ell')} [1 + e^{-\pi i(k'+\ell')} + e^{-\pi i(h'+\ell')} + e^{\pi i(h'+k')}]$$

ولما كانت  $e^{n\pi i} = e^{-n\pi i}$  فان:

$$F(h'k'\ell') = f_{Cl} [1 + e^{\pi i(h'+\ell')} + e^{\pi i(k'+\ell')} e^{\pi i(h'+k')}] [f_{Cl} + f_{Na} e^{\pi i(h'+k'+\ell')}]$$

الشروط:

اذا كانت  $(h'k'\ell')$  مختلطة فان:



$F(h'k'\ell')=0$  ولا يوجد حيود.

واذا كانت  $(h'k'\ell')$  كلها زوجية او كلها فردية فان:

$$F(h'k'\ell')=4[f_{Cl}+f_{Na}]$$
 وهنالك حيود

مثال 2-2:

جد علاقة عامل التركيب لتركيب الماس وناقش شروط تحقق الحيود من عدمه اذا علمت ان ذرات الاساس للماس هي:

$$000, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}$$

الحل:

$$F(h'k'\ell')=\sum_j f_j e^{2\pi i(h'x_j+k'y_j+\ell'z_j)}$$

$$F(h'k'\ell')=f \left[ 1 + e^{\pi i(k'+\ell')} + e^{\pi i(h'+\ell')} e^{\pi i(h'+k')} \right] \\ + f \left[ e^{\frac{1}{2}\pi i(h'+k'+\ell')} + e^{\frac{1}{2}\pi i(h'+3k'+3\ell')} + e^{\frac{1}{2}\pi i(3h'+k'+3\ell')} + e^{\frac{1}{2}\pi i(3h'+3k'+\ell')} \right]$$

نجعل القوس الثاني مشابه للاول:

$$F(h'k'\ell')=f \left[ 1 + e^{\pi i(k'+\ell')} + e^{\pi i(h'+\ell')} e^{\pi i(h'+k')} \right] \\ + f e^{\frac{1}{2}\pi i(h'+k'+\ell')} \left[ 1 + e^{\frac{1}{2}\pi i(2k'+2\ell')} + e^{\frac{1}{2}\pi i(2h'+2\ell')} + e^{\frac{1}{2}\pi i(2h'+2k')} \right]$$

$$F(h'k'\ell')=f \left[ 1 + e^{\pi i(k'+\ell')} + e^{\pi i(h'+\ell')} e^{\pi i(h'+k')} \right] \\ + f e^{\frac{1}{2}\pi i(h'+k'+\ell')} \left[ 1 + e^{\pi i(k'+\ell')} + e^{\pi i(h'+\ell')} + e^{\pi i(h'+k')} \right]$$

$$F(h'k'\ell')=f \left[ 1 + e^{\pi i(k'+\ell')} + e^{\pi i(h'+\ell')} e^{\pi i(h'+k')} \right] \left[ 1 + e^{\frac{1}{2}\pi i(h'+k'+\ell')} \right]$$

وهذا هو القانون العام لكل تركيب يشبه تركيب الماس.

الشروط:

إذا كانت  $(h'k'\ell')$  مختلطة فان:

$$F(h'k'\ell') = 0 \text{ ولا يوجد حيود.}$$

وإذا كانت  $(h'k'\ell')$  كلها فردية فان:

$$F(h'k'\ell') = 4f \left[ 1 + \left( e^{\pi i (h'+k'+\ell')} \right)^{1/2} \right]$$

سيكون المقدار  $e^{\pi i (h'+k'+\ell')} = -1$ . ولما كانت الدالة الاسية مرفوعة لاس  $I/2$  فان مقدار القوس سيكون  $\sqrt{-1}$  وهذا يمثل  $i$  أو بطريقة اخرى:

$$e^{\frac{1}{2}\pi i (h'+k'+\ell')} = \cos 90^\circ + i \sin 90^\circ = 0 + i = i$$

وسيكون عامل التركيب:

$$F(h'k'\ell') = 4f [1 + i]$$

وإذا كانت  $(h'k'\ell')$  كلها زوجية فان الاس يمكن ان يكون زوجي ويكون عامل التركيب هو:

$$F(h'k'\ell') = 4f [1 + 1] = 8f$$

اما اذا كان الاس فردي فان عامل التركيب سيكون:

$$F(h'k'\ell') = 4f [0] = 0 \text{ ولا يوجد حيود.}$$

## 2.5 الشبيكة المقلوبة Reciprocal lattice

ترتبط الشبيكة المقلوبة بالشبيكة المباشرة بالطريقة التالية: إذا كانت  $\vec{a}$  و  $\vec{b}$  و  $\vec{c}$  هي متجهات الانتقال الاولى للشبيكة الفضائية المباشرة فان متجهات الانتقال الاولى للشبيكة المقلوبة  $\vec{a}^*$  و  $\vec{b}^*$  و  $\vec{c}^*$  تعرف كما يلي:

$$\vec{a}^* \cdot \vec{a} = \vec{b}^* \cdot \vec{b} = \vec{c}^* \cdot \vec{c} = 1 \dots\dots\dots 2-33$$

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

$$\vec{a}^* \cdot \vec{c} = \vec{b}^* \cdot \vec{a} = \vec{c}^* \cdot \vec{b} = 0 \dots\dots\dots 2-34$$

وبدقة اكبر يمكننا تعريف شبكة مقلوبة لشبكة بـافز نقاطها  $\vec{R} = p\vec{a} + q\vec{b} + r\vec{c}$  (اذا ان  $p, q, r$  هي اعداد صحيحة) على انها مجموعة متجهات الموجة  $\vec{k}$  ( $= 2\pi/\lambda$ ) التي تعطي أمواج مستوية  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$  بتكرارية  $\vec{R}$ ، أي بمعنى:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = 1 \text{ و } e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}+\vec{R})} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \dots\dots\dots 2-35a$$

وتتصف الشبكة المقلوبة بوساطة مجموعة متجهات الموجة  $\vec{k}$  التي تحقق المعادلة 2-35a لجميع  $\vec{R}$ . تعطى نقاط الشبكة المقلوبة بوساطة المتجه:

$$\vec{k} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + \ell\vec{c}^* \dots\dots\dots 2-35b$$

اذا ان  $h$  و  $k$  و  $\ell$  هي اعداد صحيحة.

لدينا من المعادلة 2-34:  $\vec{a}^* \cdot \vec{c} = \vec{b}^* \cdot \vec{a} = \vec{c}^* \cdot \vec{b} = 0$  وهذا يعني ان  $\vec{a}^*$  عمودي على المستوي المحدد بوساطة  $\vec{b}$  و  $\vec{c}$  وموازي الى المتجه  $\vec{b} \times \vec{c}$  وبذلك يمكننا ان نكتب:

$$\vec{a}^* = A (\vec{b} \times \vec{c}) \dots\dots\dots 2-36$$

اذا ان  $A$  ثابت عددي.

وكذلك من المعادلة 2-33 يمكننا ان نكتب:

أو ان:

$$\vec{a}^* \cdot \vec{a} = A (\vec{b} \times \vec{c}) \cdot \vec{a} = 1$$

$$A = \frac{1}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}$$

وبتعويض قيمة  $A$  في المعادلة 2-36 نحصل على:

$$\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})} \dots\dots\dots 2-37a$$

والامر نفسه فان  $\vec{b}^*$  موازي الى  $\vec{c} \times \vec{a}$  وان  $\vec{c}^*$  موازي الى  $\vec{a} \times \vec{b}$  ويمكننا كتابة:

$$\vec{b}^* = \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})} \dots\dots\dots 2-37b$$

$$\vec{c}^* = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})} \dots\dots\dots 2-37c$$

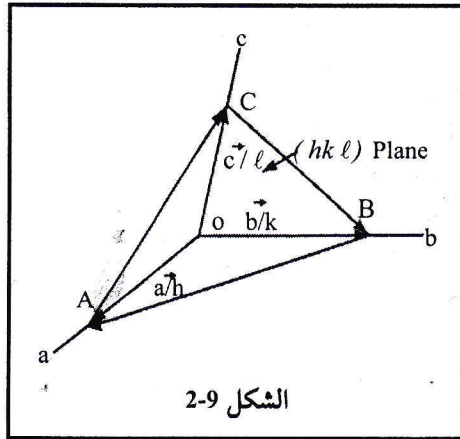


ومن هنا نجد ان الشبائك المباشرة والمقلوبة ترتبط بوساطة المعادلة 2-37 نقوم بتدوير بلورة فاننا ندور الشبيكة المقلوبة وكذلك الشبيكة المباشرة. تمتلك المتجهات في شبيكة البلورة ابعاد (length) تلك متجهات الشبيكة المقلوبة ابعاد مقلوب الطول  $(length)^{-1}$ . وان شبيكة البلورة هي شبيكة في الواقع والحقيقة او في الفضاء الاعتيادي بينما الشبيكة المقلوبة هي شبيكة في فضاء يدعى فضاء فوريير Fourier space. وبينما تعطي صورة البلورة بالمجهر التركيب الحقيقي للبلورة فان نمط الحيود يعد خريطة للشبيكة المقلوبة للبلورة.

لقد ادخل العالم أيوالد P.P.Ewald مفهوم الشبيكة المقلوبة، وهذا المفهوم يجعل التعبير عن قانون براك بسيطاً. وان ظواهر اخرى عديدة مثل سلوك الموجة الميكانيكية للاليكترونات في شبيكة البلورة الدورية يمكن فهمه بشكل مباشر بدلالة الشبيكة المقلوبة.

### خصائص الشبيكة المقلوبة

ان اهم خصائص الشبيكة المقلوبة هي:



الشكل 2-9

1. اذا كان هناك متجه مثل

$$\vec{r}^* = h'\vec{a}^* + k'\vec{b}^* + \ell'\vec{c}^*$$

الاصل الى أي نقطة شبيكة من الشبيكة

المقلوبة فانه يكون عمودي على المستوي

$(hkl)$  في الشبيكة المباشرة او الحقيقية، اذ

ان  $h', k', \ell'$  هي اعداد وهي ترتبط

بالمعاملات  $(hkl)$  بالشكل

$$\ell' = n\ell, k' = nk, h' = nh \quad \text{وان } n$$

عدد صحيح.

من الشكل 2-9 يتضح ان المستوي  $(hkl)$  يقطع المحاور وكما اسلفنا سابقا  $\vec{a}$  و  $\vec{b}$  و  $\vec{c}$

عند  $\vec{a}/h$  و  $\vec{b}/k$  و  $\vec{c}/\ell$  بحيث ان المتجهات:

$$\vec{AC} = -\frac{\vec{a}}{h} + \frac{\vec{c}}{\ell} \quad \text{و} \quad \vec{CB} = \frac{\vec{b}}{k} - \frac{\vec{c}}{\ell} \quad \text{و} \quad \vec{BA} = \frac{\vec{a}}{h} - \frac{\vec{b}}{k} \quad \text{تقع جميعها في المستوي } (hkl).$$

ولكن:

$$\begin{aligned} \vec{r}^* \cdot \left( -\frac{\vec{a}}{h} + \frac{\vec{c}}{\ell} \right) &= (h'\vec{a}^* + k'\vec{b}^* + \ell'\vec{c}^*) \cdot \left( -\frac{\vec{a}}{h} + \frac{\vec{c}}{\ell} \right) \\ &= -\frac{h'}{h} + \frac{\ell'}{\ell} = -\frac{nh}{h} + \frac{n\ell}{\ell} = -n + n = 0 \end{aligned}$$

وبالطريقة نفسها سيكون:

$$\vec{r}^* \cdot \left( \frac{\vec{b}}{k} + \frac{\vec{c}}{\ell} \right) = 0 \quad \text{و ان} \quad \vec{r}^* \cdot \left( \frac{\vec{a}}{h} + \frac{\vec{b}}{k} \right) = 0$$

وبذلك يكون المتجه  $\vec{r}^*$  عمودي على الاتجاهات المستقلة الخطية  $\vec{AC}$  و  $\vec{CB}$  و  $\vec{BA}$  والتي تقع كلها في المستوي  $(hkl)$ . بذلك يجب ان يكون المتجه  $\vec{r}^*$  عمودي على المستوي  $(hkl)$  نفسه.

$$2. \text{ يتناسب طول متجه الشبكة المقلوبة } \vec{r}^* \text{ مع } \frac{1}{d_{hkl}}$$

اذا كان  $\vec{n}$  وحدة المتجه العمودي على المستوي  $(hkl)$  للشبكة المباشرة فان:

$$\vec{n} = \frac{\vec{r}^*}{r^*}$$

اذ ان  $\vec{r}^*$  كما نعرف هو متجه عمودي على المستوي  $(hkl)$ . اذا كانت  $d_{hkl}$  هي المسافة بين مستويات  $(hkl)$  المتجاورة يكون لدينا من المعادلة 2-9:

$$\begin{aligned} d_{hkl} &= \frac{\vec{a} \cdot \vec{n}}{h} = \frac{\vec{a} \cdot \vec{r}^*}{h r^*} = \vec{a} \cdot \frac{(h'\vec{a}^* + k'\vec{b}^* + \ell'\vec{c}^*)}{hr^*} \\ &= \frac{h'}{h} \cdot \frac{1}{r^*} = \frac{n}{r^*} \end{aligned}$$

أي ان مقدار  $\vec{r}^*$  يعطى بوساطة:

$$r^* = \frac{n}{d_{hkl}} \quad \dots\dots\dots 2-38$$

ونستخدم بشكل عام متجه الشبكة المقلوبة بالشكل التالي:

$$\vec{G} = 2\pi\vec{r}^* = 2\pi(h'\vec{a}^* + k'\vec{b}^* + \ell'\vec{c}^*)$$

ومقداره يكون:

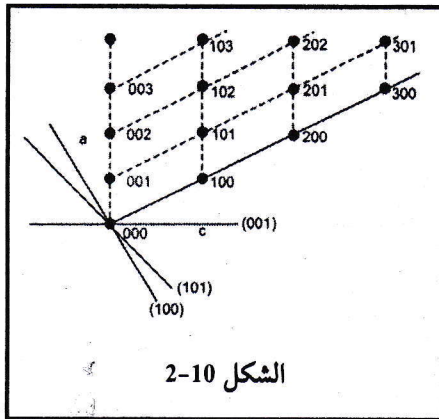
$$G = 2\pi r^* = \frac{2\pi n}{d_{hkl}} \quad \dots\dots\dots 2-39$$

وان  $G = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$  اذا كان  $n=1$  أو اذا كان  $h'=h$  و  $k'=k$  و  $\ell'=\ell$ .

### الفهم الفيزيائي للشبيكة المقلوبة

نحن الان في وضع يمكن فيه ان نخطط الشبيكة المقلوبة اذا اعطينا الشبيكة المباشرة وان خطوات وضع النقاط في الشبيكة المقلوبة هي:

1. ارسم من نقطة الاصل المشتركة اعمدة لكل مستوي من مستويات الشبيكة المباشرة.
2. ضع على كل من هذه الاعمدة نقاط تعود الى كل مجموعة متوازية من السطوح عند مسافة تساوي  $\frac{1}{d_{hkl}}$ ،  $\frac{2}{d_{hkl}}$  الخ من نقطة الاصل.
3. ان مجموعة نقاط كهذه ستشكل شبيكة مقلوبة.



الشكل 2-10

وكتوضيح لهذه الخطوات نرسم شبيكة مقلوبة لبلورة احادية الميل كما في الشكل 2-10. ان المحور  $\bar{b}$  للشبيكة المباشرة يكون عمودي على مستوى الورقة، وان  $\bar{a}$  و  $\bar{c}$  تقع في مستوى الورقة. خذ المستويات  $(100)$  و  $(001)$  و  $(101)$  ولما كانت جميعها موازية للمحور  $\bar{b}$  فان اعمدتها تقع في مستوى الورقة. ان جميع النقاط على طول هذه الاعمدة على مسافات خاصة من  $\frac{n}{d_{hkl}}$  تمثل شبيكة

مقلوبة للشبيكة المباشرة معرفة بوساطة وحدات المتجه الاولى  $\bar{a}$  و  $\bar{b}$  و  $\bar{c}$ .

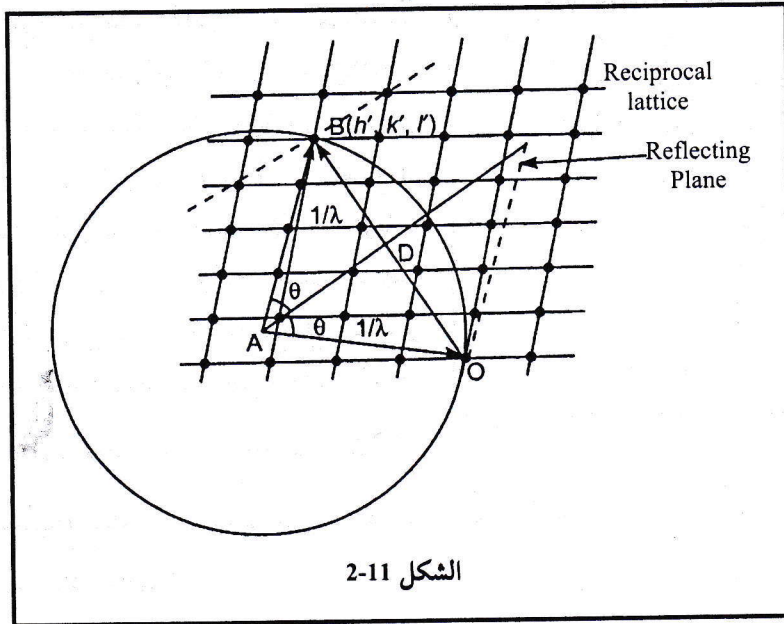
### أهمية الشبيكة المقلوبة

يمكن تعيين توجيه مستوي بشكل تام بوساطة عموده. ولما كان طول العمود في الشبيكة المقلوبة (مسافة النقطة ذات العلاقة من نقطة الاصل) يتناسب مع مقلوب المسافة البينية بين المستويات (أي يتناسب مع  $\frac{1}{d_{hkl}}$ ) فان طول واتجاه العمود يصف مجموعة المستويات المتوازية. وبذلك من خلال استخدام الشبيكة المقلوبة يمكن تقليص مشكلة التعامل مع التوجيه النسبي لمستويات (بعدين) الى تلك التي تتعامل مع اعمدة (بعد واحد) وهذا بالتأكيد يبسط المشكلة. ويمكن تلخيص فوائد استعمال الشبيكة المقلوبة على الشبيكة المباشرة بما يأتي:



1. ان مشكلة معالجة توجيه مجاميع مختلفة من مستويات بلورة في شبكة برافز تم تحويلها الى مشكلة معالجة اطوال وتوجيه الاعمدة وبذلك تكون المشكلة في ايسر حال.
2. يتم الحصول على شروط الحيود بملائمة اكبر باستعمال الشبكة المقلوبة.
3. لما كان نمط الحيود هو خارطة الشبكة المقلوبة للبلورة فان تفسير نمط حيود البلورة يكون ايسر.
4. ويكون كذلك من السهل فهم السلوك الموجة الميكانيكي للالكترونات في شبكة بلورة دورية.

### الشبكة المقلوبة وشروط براك



لما كان نمط الحيود هو خريطة الشبكة المقلوبة لبلورة مشتتة فان شرط براك والذي هو نتيجة لتشتت الاشعة عن الشبكة الدورية يجب ان يعبر عنه بدلالة الشبكة المقلوبة. دعونا نمثل حزمة الاشعة السينية الساقطة بالمتجه  $\vec{AO}$  بطول يساوي  $1/\lambda$  وينتهي عند نقطة اصل الشبكة المقلوبة كما هو موضح في الشكل 2-11. علينا ان نلاحظ ان ذيل المتجه  $\vec{AO}$  ليس بالضرورة ان يكون على نقطة شبكة. ولنجعل كرة نصف قطرها  $1/\lambda$  ومركزها عند A تقطع بعض نقاط  $(h', k', l')$  للشبكة المقلوبة عند B. ومن ثم تبعاً لخصائص الشبكة

المقلوبة يجب ان يكون المتجه  $\vec{OB}$  من نقطة الاصل الى النقطة  $(h', k', \ell')$  عموديا على المستوي  $(hk\ell)$  للشبيكة المباشرة ويمتلك الطول  $n/d$  (هنا  $n$  هي العامل المشترك الاكبر للاعداد  $h', k', \ell'$  وان  $d$  هي المسافة البينية بين المستويات في الشبيكة المباشرة. من هندسة الشكل 2-11 لدينا:

$$OB = OD + DB = \frac{1}{\lambda} \sin \theta + \frac{1}{\lambda} \sin \theta = \frac{2 \sin \theta}{\lambda}$$

وبذلك يمكننا ان نكتب:

$$\frac{2 \sin \theta}{\lambda} = \frac{n}{d} \quad \text{أو ان نكتبها بالصورة } 2d \sin \theta = n\lambda$$

والتي هي شرط براك.

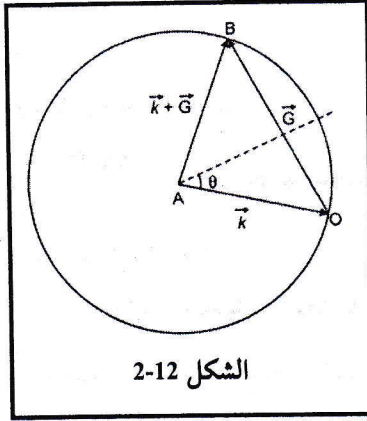
ان رابط المتجهات المختلفة والزاوية  $\theta$  في الشكل 2-11 مع عناصر معادلة براك يمكن فهمه بسهولة اذا نقلنا المتجه  $\vec{AB}$  موازيا لنفسه حتى يستقر ذيله فوق نقطة  $O$  فبعد ذلك سنرى ان  $\vec{AO}$  و  $\vec{AB}$  و  $\vec{OB}$  تمثل اتجاهات الحزمة الساقطة و الحزمة المتشتتة وعمود التشتت على التعاقب. ومن الواضح فان  $AD$  أو أي خط موازي له من النقطة  $O$  أو  $B$  يجب ان يمثل مقطع مستوي الانعكاس وان الزاوية  $\theta$  ليست الا زاوية براك. نستنتج من هندسة الشكل 2-11 ما يأتي:

1. هنالك انعكاس براك بالنسبة الى كل تقاطع للشبيكة المقلوبة بوساطة الكرة ذات نصف القطر  $1/\lambda$  المرسوم حول  $A$ . وان زاوية براك المناسبة تعطى في كل حالة بوساطة الزاوية بين المتجه  $\vec{AO}$  ومستوي عمودي على  $OB$ .
2. وبالمقابل لن يتشتت طول موجي  $\lambda$  بوساطة البلورة باتجاه معين اذا لم يقطع نصف قطر الكرة  $1/\lambda$  والمركز عند  $A$  أي من نقاط الشبيكة المقلوبة. وهذه الحقيقة تستعمل احيانا في فحص مختلف التوجيهات الممكنة للبلورة التي يتحقق فيها شرط براك.
3. لا يحدث حيود اشعة سينية في شبيكة ذات ثابت شبيكة  $a$ ، اذا كانت  $\lambda > 2a$ . واذا كان نصف القطر  $\frac{1}{\lambda} < \frac{1}{2a}$  فلا يمكن للدائرة ان تقطع أي نقطة من نقاط الشبيكة المقلوبة وبذلك لن يكون هنالك انعكاس براك.

4. كلما كان المتجه  $\vec{AO}$  اطول (أي طول موجي  $\lambda$  أقصر) تكون الفرصة بالنسبة للكرة لان تقطع نقطة من نقاط الشبكة المقلوبة اكبر وبذلك تكون فرصة الحيود اعظم.

## 2.6 البناء الهندسي لا يوالد- الصيغ الاتجاهية لمعادلات الحيود

### Ewald construction- vector forms of diffraction equations



الشكل 2-12

اقترح ايوالد Ewald بناءاً هندسياً تبعاً له يمكن إعادة رسم متجهات الشكل 2-11 كما تبدو في الشكل 2-12 بمقياس تم تكبيره بوساطة عامل مقداره  $2\pi$ ، أي تم رسم متجه  $\vec{k}$  بالمقدار  $2\pi/\lambda$  باتجاه حزمة الاشعة السينية الساقطة التي تنتهي عند نقطة الاصل  $O$  للشبكة المقلوبة. و تم رسم كرة نصف قطرها  $|\vec{k}|$  مركزها عند  $A$ . لتقطع الكرة نقطة معينة من نقاط الشبكة المقلوبة ثم سيعطى المتجه  $\vec{OB}$  الذي رمز له بالرمز  $\vec{G}$  بوساطة:

$$\vec{G} = 2\pi(h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + \ell\vec{c}^*) \dots\dots\dots 2-40$$

ويتضح انه عمودي على المستوي  $(hkl)$  ويمتلك طول  $2\pi n/d$  (اذا  $n$  هو العامل المشترك الاعظم للاعداد  $h', k', \ell'$  وان  $d$  هي المسافة بين المستويات المتجاورة  $(hkl)$ ).

#### معادلة براك

من خلال ترتيب المتجهات في الشكل 2-12 يبدو ان المتجه  $\vec{AB}$  يجب ان يمثل المتجه  $\vec{k} + \vec{G}$  ومقداره يجب ان يساوي مقدار  $\vec{k}$  حيثما تحقق شرط براك. أي بمعنى اننا يمكن ان نكتب:

$$(\vec{k} + \vec{G})^2 = \vec{k}^2$$

أو:

$$2\vec{k} \cdot \vec{G} + \vec{G}^2 = 0 \dots\dots\dots 2-41$$



وهذه هي الصيغة الاتجاهية لمعادلة براك.

اذا رمزنا لمتجه الموجة المشتتة  $\vec{AB}$  بالرمز  $\vec{k}'$  فان:  $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}$  و  $k'^2 = k^2$   
وهذا يبين ان التشتت يغير فقط اتجاه الحزمة الساقطة وان اتجاه الموجة المشتتة يختلف عن الموجة الساقطة بوساطة متجه الشبيكة المقلوبة  $\vec{G}$  وهذا ليس الا حالة تشتت مرن.

### معادلات لاوي

لدينا من بناء ابوالد في الشكل 2-12:

$$\vec{k}' - \vec{k} = \Delta\vec{k} = \vec{G} \dots\dots\dots 2-42$$

ان حاصل الضرب العددي للطرفين بوساطة متجه الشبيكة الاولى  $\vec{a}$  لشبيكة البلورة يعطينا:

$$\vec{a} \cdot \Delta\vec{k} = \vec{a} \cdot \vec{G} = \vec{a} \cdot [2\pi(h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + \ell\vec{c}^*)]$$

$$= 2\pi(h\vec{a} \cdot \vec{a}^* + k\vec{a} \cdot \vec{b}^* + \ell\vec{a} \cdot \vec{c}^*)$$

ولكن من تعريف معاملات الشبيكة المقلوبة في المعادلة 2-33 و 2-34 لدينا:

$$\vec{a} \cdot \vec{b}^* = \vec{a} \cdot \vec{c}^* = 0 \text{ و } \vec{a} \cdot \vec{a}^* = 1$$

اذن:

$$\vec{a} \cdot \Delta\vec{k} = 2\pi h \dots\dots\dots 2-43a$$

وبالطريقة نفسها يمكن ان نكتب:

$$\vec{b} \cdot \Delta\vec{k} = 2\pi k \dots\dots\dots 2-43b$$

$$\vec{c} \cdot \Delta\vec{k} = 2\pi \ell \dots\dots\dots 2-43b$$

وتمثل هذه المعادلات الثلاثة الصيغة الاتجاهية لمعادلات لاوي.

من الناحية التحليلية فان  $\vec{a} \cdot \Delta\vec{k} = 2\pi h$  تمثل ان  $\Delta\vec{k}$  يقع على مخروط حول اتجاه  $\vec{a}$  والامر نفسه تجربنا العلاقتين الباقية على التعاقب من ان  $\Delta\vec{k}$  يقع على مخروط حول  $\vec{b}$  وان  $\Delta\vec{k}$  يقع على مخروط حول  $\vec{c}$ . في حالة الابعاد الثلاثة فان  $\Delta\vec{k}$  عند الانعكاس يجب ان يحقق المعادلات الثلاثة آنياً وان مثل هذا التطابق ممكن الحصول عندما تقتسم المخاريط

الثلاثة شعاعاً مشتركاً ولغرض الوصول لمثل هذا التطابق علينا بالمسح المستمر بالطول الموجي او من خلال توجيه البلورة.

## 2.7 مناطق برليون Brillouin zones

تعد مناطق برليون Brillouin zone (B.Z.) ذات اهمية خاصة في فيزياء الجوامد ورغم انه من الناحية التاريخية تعد مناطق برليون جزءاً من تحليل حيود الاشعة السينية الا ان هذه المناطق تعد كذلك جزءاً اساسياً من تحليل تركيب طاقة - رابطة الاليكترون للبلورات. ان مناطق برليون هي الحجم المشغول كلياً بالمستويات بالشكل الذي يكون فيه كل متجه موجة  $\vec{k}$  ( $2\pi/\lambda$ ) من نقطة الاصل الى أي من هذه المستويات هو انعكاس براك. تشتت حزمة اشعة سينية ساقطة على بلورة اذا حقق متجه موجتها  $\vec{k}$  شرط براك  $(2\vec{k} \cdot \vec{G} + \vec{G}^2 = 0)$ .

$$\vec{k} \cdot \left( \frac{1}{2} \vec{G} \right) + \left( \frac{1}{2} \vec{G} \right)^2 = 0 \dots\dots\dots 2-44$$

تقترح هذه العلاقة ان أي مستوي عمودي على متجه الشبكة المقلوبة  $\vec{G}$  وعند نقطة الوسط يشكل جزءاً من حد المنطقة. واذا نظرنا الى الشكل 1-4 الذي يعطي خلية وينر - يتر الاولى للشبكة المباشرة ففيه حاولنا ان نعرّف منطقة برليون بانها خلية وينر- سيتز في الشبكة المقلوبة.

يظهر بناء برليون كل متجهات الموجة الساقطة  $\vec{k}$  التي يمكن ان تكون انعكاس براك بوساطة البلورة. ولكي نبني ، لنقل، منطقة برليون الاولى لشبكة معينة فعلينا ان نأخذ مستويات عمودية على هذه المتجهات عند نقاطها الوسطية وان اصغر حجم نحصل عليه يكون هو منطقة برليون الاولى. يمكننا تعريف منطقة برليون الاولى بانها اصغر حجم محصور كلياً بمستويات تكون قواطع منصفة عمودية لمتجهات الشبكة المقلوبة المرسومة من نقطة الاصل. ان حد منطقة برليون الذي يمثل بطريقة ما مكان قيم  $\vec{k}$  التي يحصل عندها انعكاس براك يمكن اعتباره كسطح عاكس. ويمثل حد المنطقة الاولى السطح العاكس لرتبة الانعكاس الاولى ويمثل حد المنطقة الثانية السطح العاكس لرتبة الانعكاس الثانية، وهكذا.. وجدير بالاشارة ان أي متجه  $\vec{k}$  ينتهي قبل أو بعد حد المنطقة لا يعطي انعكاس براك. ومن هنا يمكن استعمال نمط مناطق برليون لايجاد نمط حيود الاشعة السينية لبلورة والعكس صحيح ايضاً.

### مناطق برليون لشبيكة خطية

يتضح انه بالنسبة لشبيكة خطية تكون منطقة برليون الاصغر طول ( ليست حجما؟ ) محصور بوساطة قواطع منصفة عمودية لمتجهات الشبيكة المقلوبة من نقطة الاصل. وبالنسبة لشبيكة خطية ذات ذابت شبيكة  $a$  لدينا:

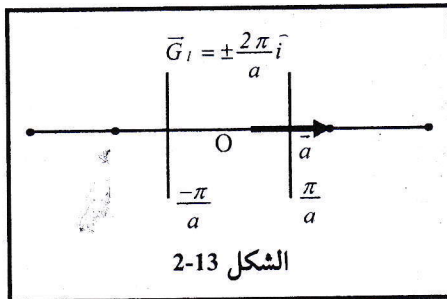
$$\vec{a} = a \hat{i}$$

وان متجه الشبيكة المقلوبة الاولي هو:

$$\vec{a}^* = \frac{1}{a} \hat{i}$$

ويعطى المتجه  $\vec{G}$  من العلاقة  $\vec{G} = 2\pi(h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + \ell'\vec{c}^*)$  بوساطة:

$$\vec{G} = 2\pi(h\vec{a}^*) = \frac{2\pi}{a}h\hat{i} \dots\dots\dots 2-45$$



ولاصغر قيم  $\vec{G}$ ،  $h = \pm 1$  وبلك تكون منطقة برليون محددة بوساطة القواطع المنصفة العمودية لـ  $\vec{G}$ . أي ان الطول بين  $\frac{\pi}{a}$  و  $-\frac{\pi}{a}$  يمثل منطقة برليون كما موضح في الشكل 2-13. وتعطى القيمة الاصغر اللاحقة لـ  $\vec{G}$  بوساطة  $h = \pm 2$ . وبذلك تتحدد منطقة برليون

الثانية بوساطة الاعمدة عند  $\frac{2\pi}{a}$  و  $\frac{\pi}{a}$  بالاتجاه الامامي وتلك التي عند  $-\frac{2\pi}{a}$  و  $-\frac{\pi}{a}$  في الاتجاه الخلفي. وبالطريقة نفسها يمكننا تعريف رتب مناطق اعلى.

### مناطق برليون بالنسبة لشبيكة مربعة

تمثل الشبيكة المربعة لبلورة بمتجهاتها الانتقالية الاولية كما يأتي:

$$\vec{a} = a \hat{i} , \vec{b} = a \hat{j}$$

اذ ان  $a$  هو ثابت الشبيكة. وان متجهات الشبيكة المقلوبة الاولية لها هي:

$$\vec{a}^* = \frac{1}{a} \hat{i} , \vec{b}^* = \frac{1}{a} \hat{j}$$



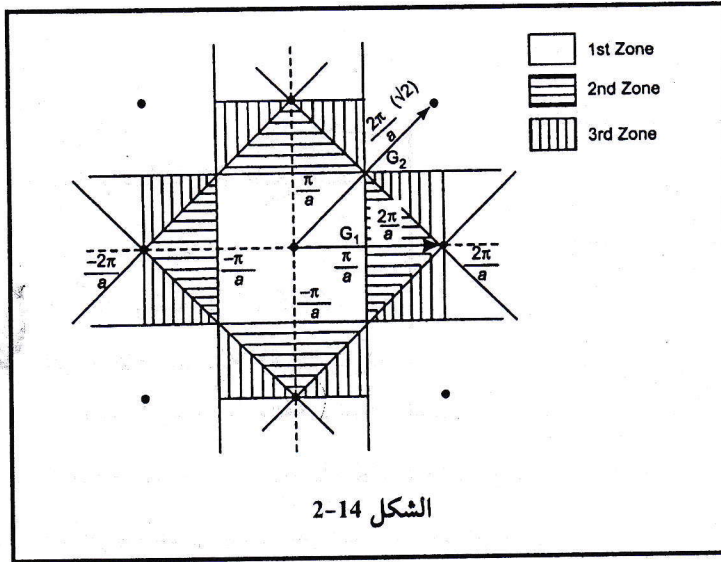
ونلاحظ ان الشبكة المقلوبة هي نفسها شبكة مربعة بثابت شبكة  $\frac{1}{a}$ . ويعطى متجه الشبكة المقلوبة بذلك بوساطة:

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{a} (h \hat{i} + k \hat{j}) \dots\dots\dots 2-46$$

وان اصغر قيمة لمتجهات  $\vec{G}$  تعطى بوساطة:

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{a} (\pm \hat{i} \pm \hat{j})$$

ان منطقة برليون الاولى لشبكة مربعة هي شبكة مربعة محاطة بخطوط عمودية على متجهات الشبكة المقلوبة  $\pm \frac{2\pi}{a} \hat{i}$  ،  $\pm \frac{2\pi}{a} \hat{j}$  ونقاطها الوسطية هي  $\pm \frac{\pi}{a} \hat{i}$  و  $\pm \frac{\pi}{a} \hat{j}$ .



والشيء نفسه المساحة الاضافية المظلمة في الشكل 2-14 المحاطة بوساطة خطوط عمودية على متجهات اربعة مقدار كل منها  $\frac{2\pi}{a}(\sqrt{2})$  عند منتصفاتها  $\frac{\pi}{a}(\sqrt{2})$  تمثل المنطقة الثانية وان المنطقة الثانية تمتلك مساحة المنطقة الاولى نفسها. ان مقاطع المثلثات الاربعة كلها مع بعض تسد مربع المنطقة الاولى. وهذا يسري على حالة المنطقة الثالثة.

وفضلا عن ذلك فان منطقة برليون الخاصة بشبيكة معينة يمكن ان يتم الحصول عليها كما يلي: يتم التعبير عن متجه موجة حزمة الاشعة السينية بالشكل:

$$\vec{k} = k_x \hat{i} + k_y \hat{j}$$

ويعطينا شرط براك (  $2\vec{k} \cdot \vec{G} + \vec{G}^2 = 0$  ):

$$2(k_x \hat{i} + k_y \hat{j}) \cdot \left[ \frac{2\pi}{a} (h\hat{i} + k\hat{j}) \right] + \frac{4\pi^2}{a^2} (h\hat{i} + k\hat{j})^2 = 0$$

أو:

$$hk_x + hk_y = -\frac{\pi}{a} (h^2 + k^2)$$

وبأخذ كل الاشكال الممكنة الى  $h$  و  $k$  يمكننا الحصول على قيمة  $\vec{k}$  التي هي انعكاس براك.

وبذلك، بالنسبة لمنطقة برليون لدينا مربع محاط بالخطوط  $k_y = \pm \frac{\pi}{a}$  و  $k_x = \pm \frac{\pi}{a}$

والشيء نفسه فالمنطقة الاضافية التي تحدد بوساطة  $\pm k_x = \frac{2\pi}{a}$  و  $\pm k_y = \frac{2\pi}{a}$  تكون هي منطقة برليون الثانية.

**منطقة برليون لشبيكة مكعب بسيط**

ان متجهات الشبيكة الاولى لشبيكة المكعب البسيط هي:

$$\vec{a} = a \hat{i}, \quad \vec{b} = a \hat{j}, \quad \vec{c} = a \hat{k}$$

وان متجهات الشبيكة المقلوبة التي تعود لها هي:

$$\vec{a}^* = \frac{1}{a} \hat{i}, \quad \vec{b}^* = \frac{1}{a} \hat{j}, \quad \vec{c}^* = \frac{1}{a} \hat{k}$$

وان متجه الشبيكة المقلوبة هو:

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{a} (h \hat{i} + k \hat{j} + \ell \hat{k}) \dots\dots\dots 2-47$$

وبتعويض قيمة  $\vec{G}$  هذه ولدنا:

$$\vec{k} = k_x \hat{i} + k_y \hat{j} + k_z \hat{k}$$

وبشرط براك يكون لدينا:

$$2(k_x \hat{i} + k_y \hat{j}) \cdot \left[ \frac{2\pi}{a} (h\hat{i} + k\hat{j} + \ell\hat{k}) \right] + \frac{4\pi^2}{a^2} (h\hat{i} + k\hat{j} + \ell\hat{k})^2 = 0$$

أو:

$$hk_x + hk_y + \ell k_z = -\frac{\pi}{a} (h^2 + k^2 + \ell^2) \dots\dots\dots 2-48$$

ويتضح ان المنطقة الاولى للشبيكة المكعبة هي مكعب تتكون حدوده من مستويات ستة عمودية على ست متجهات شبيكة مقلوبة هي  $\pm \frac{2\pi}{a} \hat{k}$  ،  $\pm \frac{2\pi}{a} \hat{j}$  و  $\pm \frac{2\pi}{a} \hat{i}$  عند منتصفات نقاطها  $\pm \frac{\pi}{a} \hat{k}$  و  $\pm \frac{\pi}{a} \hat{j}$  و  $\pm \frac{\pi}{a} \hat{i}$ . أي ان منطقة برليون الاولى هي مكعب يقطع محاور  $k_x$  و  $k_y$  و  $k_z$  عند النقاط  $\pi/a$  وبذلك تكون اضلاعه تساوي  $2\pi/a$  وحجمه هو  $(2\pi/a)^3 = 8\pi^3/a^3$ .

وتكون المنطقة الثانية مكونة من اهرامات تضاف لكل من الواجه الستة لمكعب المنطقة الاولى.

**منطقة برليون لشبيكة المكعب ممرکز الواجه**

المتجهات الانتقالية الاولى لشبيكة f.c.c. هي:

$$\vec{a} = \frac{1}{2}a(\hat{i} + \hat{j}) \quad \text{و} \quad \vec{b} = \frac{1}{2}a(\hat{j} + \hat{k}) \quad \text{و} \quad \vec{c} = \frac{1}{2}a(\hat{k} + \hat{i})$$

اذ ان  $a$  هي طول ضلع الخلية المكعبة. وان متجهات الشبيكة المقلوبة الاولى هي:

$$\begin{aligned} \vec{a}^* &= \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} = \frac{\frac{a^2}{4}(\hat{j} + \hat{k}) \times (\hat{k} + \hat{i})}{\frac{a^3}{8}(\hat{i} + \hat{j}) \cdot (\hat{j} + \hat{k}) \times (\hat{k} + \hat{i})} \\ &= \frac{2(\hat{i} + \hat{j} - \hat{k})}{a(\hat{i} + \hat{j}) \cdot (\hat{i} + \hat{j} - \hat{k})} = \frac{2(\hat{i} + \hat{j} - \hat{k})}{a(1+1)} = \frac{1}{a}(\hat{i} + \hat{j} - \hat{k}) \end{aligned}$$



وبالطريقة نفسها نحصل على:

$$\bar{b}^* = \frac{1}{a}(-\hat{i} + \hat{j} + \hat{k}) \quad \text{و} \quad \bar{c}^* = \frac{1}{a}(\hat{i} - \hat{j} + \hat{k})$$

تمتلك هذه المتجهات الاتجاه القطري للمكعب وبذلك فهي تمثل المتجهات الانتقالية لشبيكة مكعب ممرز الجسم  $b.c.c.$  وهذا يعني ان الشبيكة المقلوبة لشبيكة  $f.c.c.$  هي شبيكة  $b.c.c.$

ان حجم الخلية الاولى في الشبيكة المقلوبة هو:

$$V^* = \bar{a}^* \cdot \bar{b}^* \times \bar{c}^* = \frac{1}{a^3}(\hat{i} + \hat{j} - \hat{k}) \cdot (-\hat{i} + \hat{j} + \hat{k}) \times (\hat{i} - \hat{j} + \hat{k})$$

$$V^* = \frac{1}{a^3}(\hat{i} + \hat{j} - \hat{k}) \cdot 2(\hat{i} + \hat{j}) = \frac{4}{a^3} \dots\dots\dots 2-49$$

متجه الشبيكة المقلوبة:

$$\bar{G} = 2\pi(h\bar{a}^* + k\bar{b}^* + \ell\bar{c}^*)$$

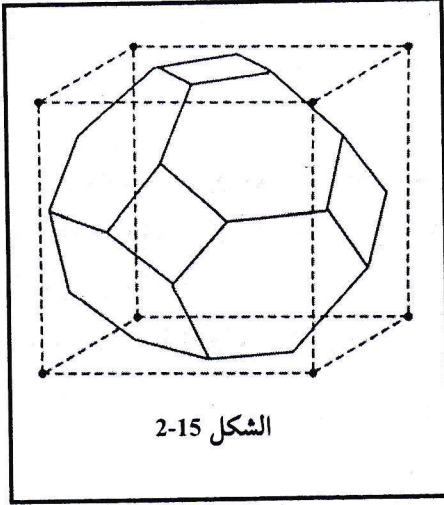
$$= \frac{2\pi}{a}[\hat{i}(h - k + \ell) + \hat{j}(h + k - \ell) + \hat{k}(-h + k + \ell)] \dots\dots\dots 2-50$$

وان اقصر متجهات  $\bar{G}$  اللاصفريه هي ثمانية وتعطى بوساطة:

$$\frac{2\pi}{a}(\pm\hat{i} \pm \hat{j} \pm \hat{k}) \dots\dots\dots 2-51$$

ان حدود الخلية الاولى في الشبيكة المقلوبة وبذلك لمنطقة برليون الاولى يتم تحديدها بشكل كبير بوساطة المستويات العمودية على هذه المتجهات الثمانية عند منتصفاتها وتظم هذه الحدود مجسمات ثمانية الشكل، ولكن تقطع زوايا هذه المجسمات الثمانية بوساطة مستويات تكون قواطع عمودية لمتجهات الشبيكة المقلوبة الستة الاخرى:

$$\frac{2\pi}{a}(\pm 2\hat{i}), \frac{2\pi}{a}(\pm 2\hat{j}), \frac{2\pi}{a}(\pm 2\hat{k}) \dots\dots\dots 2-52$$



الشكل 2-15

علينا ان نلاحظ ان  $\frac{2\pi}{a}(\pm 2\hat{i})$  تمثل متجهات الشبكة المقوية لان هذه العلاقة تكون مساوية الى  $2\pi(\vec{a}^* + \vec{c}^*)$ . وان هذه المستويات الستة تحدد مكعبا طول ضلعه  $2\pi/a$  وحجمه قدره  $(2\pi/a)^3$ .

ان منطقة برليون الاولى لشبكة  $f.c.c.$  تكون بذلك الجسم الثماني المقطوع كما في الشكل 2-15، ويسمى هذا الشكل كذلك tetraikadehedron، أي الشكل متعدد السطوح ذي 14 وجه.

**منطقة برليون لشبكة مكعب ممرکز الجسم  $b.c.c.$**

المتجهات الانتقالية الاولى لشبكة  $b.c.c.$  هي:

$$\vec{a} = \frac{1}{2}a(\hat{i} + \hat{j} - \hat{k}) \quad \text{و} \quad \vec{b} = \frac{1}{2}a(-\hat{i} + \hat{j} + \hat{k}) \quad \text{و} \quad \vec{c} = \frac{1}{2}a(\hat{i} - \hat{j} + \hat{k})$$

اذ ان  $a$  طول ضلع خلية المكعب. وتكون متجهات الانتقال الاولى للشبكة المقلوبة:

$$\begin{aligned} \vec{a}^* &= \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} = \frac{\frac{a^2}{4}(-\hat{i} + \hat{j} + \hat{k}) \times (\hat{i} - \hat{j} + \hat{k})}{\frac{a^3}{8}(\hat{i} + \hat{j} - \hat{k}) \cdot (-\hat{i} + \hat{j} + \hat{k}) \times (\hat{i} - \hat{j} + \hat{k})} \\ &= \frac{2}{a} \frac{2(\hat{i} + \hat{j})}{(\hat{i} + \hat{j} - \hat{k}) \cdot 2(\hat{i} + \hat{j})} = \frac{2}{a} \frac{(\hat{i} + \hat{j})}{1+1} = \frac{1}{a}(\hat{i} + \hat{j}) \end{aligned}$$

وبالطريقة نفسها نجد ان:

$$\vec{b}^* = \frac{1}{a}(\hat{j} + \hat{k}) \quad \text{و} \quad \vec{c}^* = \frac{1}{a}(\hat{k} + \hat{i})$$

حيود الاشعة السينية في البلورات والشبيكة المقلوبة

ونجد انها المتجهات الانتقالية الاولى لشبيكة  $f.c.c.$  وبذلك فان الشبيكة المقلوبة لشبيكة  $b.c.c.$  هي شبيكة  $f.c.c.$  وان حجم الخلية الاولى في هذه الشبيكة المقلوبة هو:

$$V^* = \vec{a}^* \cdot \vec{b}^* \times \vec{c}^* = \frac{1}{a^3} (\hat{i} + \hat{j}) \cdot (\hat{j} + \hat{k}) \times (\hat{k} + \hat{i})$$

$$= \frac{1}{a^3} (\hat{i} + \hat{j}) \cdot (\hat{i} + \hat{j} - \hat{k}) = \frac{2}{a^3}$$

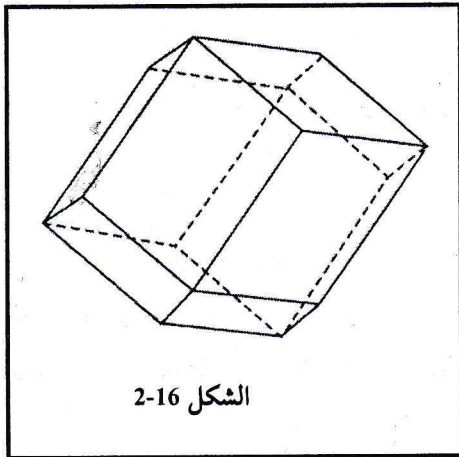
وان متجه الشبيكة المقلوبة هو:

$$\vec{G} = 2\pi (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + \ell\vec{c}^*)$$

$$= \frac{2\pi}{a} [\hat{i}(h + \ell) + \hat{j}(h + k) + \hat{k}(k + \ell)] \dots\dots\dots 2-53$$

وان اقصر  $\vec{G}$  لا صفري هو 12 متجه:

$$\frac{2\pi}{a} (\pm\hat{i} \pm \hat{j}), \frac{2\pi}{a} (\pm\hat{j} \pm \hat{k}), \frac{2\pi}{a} (\pm\hat{k} \pm \hat{i}) \dots\dots\dots 2-54$$



وكل اختيارات الاشارة مستقلة. ويتم تحديد حدود الخلية الاولى في الشبيكة المقلوبة (التي هي منطقة برليون الاولى) بوساطة المستويات العمودية على هذه المتجهات الاثنا عشر عند منتصفاتها. وان المنطقة هي جسم صلب ذي 12 وجه منتظم يسمى المعين ذو الالوجه الاثنا عشر rhombic dodecahedron والشكل 2-16 يوضح منطقة برليون الاولى في الشبيكة  $b.c.c.$

**منطقة برليون للشبيكة السداسية**

المتجهات الانتقالية الاولى للشبيكة السداسية هي:

$$\vec{a} = \frac{\sqrt{3}a}{2} \hat{i} + \frac{a}{2} \hat{j} \quad \text{و} \quad \vec{b} = \frac{-\sqrt{3}a}{2} \hat{i} + \frac{a}{2} \hat{j} \quad \text{و} \quad \vec{c} = c\hat{k} \dots\dots\dots 2-55$$



اذ ان  $a$  طول ضلع القاعدة وان  $c$  ارتفاع الخلية السداسية. وجدير بالذكر ان الاحداثي  $x$  يؤخذ عبر المتجه  $\vec{a}$  وان الاحداثي  $y$  يؤخذ عبر المتجه  $\vec{b}$  والاحداثي  $z$  يؤخذ عبر المتجه  $\vec{c}$ .

يمكننا الحصول على المتجهات الانتقالية الاولى في الشبكة المقلوبة كما يلي:

$$\begin{aligned}\vec{a}^* &= \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} = \frac{\left( \frac{-\sqrt{3}a}{2} \hat{i} + \frac{a}{2} \hat{j} \right) \times (c\hat{k})}{\left( \frac{\sqrt{3}a}{2} \hat{i} + \frac{a}{2} \hat{j} \right) \cdot \left( \frac{-\sqrt{3}a}{2} \hat{i} + \frac{a}{2} \hat{j} \right) \times (c\hat{k})} \\ &= \frac{\frac{ac}{2} (\sqrt{3} \hat{j} + \hat{i})}{\frac{a^2 c}{4} (\sqrt{3} \hat{i} + \hat{j}) \cdot (\sqrt{3} \hat{j} + \hat{i})} = \frac{\frac{2}{a} (\sqrt{3} \hat{j} + \hat{i})}{\sqrt{3} \times 2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}a} \hat{i} + \frac{1}{a} \hat{j}\end{aligned}$$

وبالطريقة نفسها نجد ان:

$$\vec{b}^* = \frac{1}{\sqrt{3}a} \hat{i} + \frac{1}{a} \hat{j} \quad \text{و} \quad \vec{c}^* = \frac{1}{c} \hat{k}$$

وتوضح هذه العلاقات ان الشبكة المقلوبة لشبكة سداسية هي شبكة سداسية نفسها ولكن بمحور دوران.

ويعطى حجم الخلية الاولى في الشبكة المقلوبة:

$$\begin{aligned}V^* &= \vec{a}^* \cdot \vec{b}^* \times \vec{c}^* = \left( \frac{1}{\sqrt{3}a} \hat{i} + \frac{1}{a} \hat{j} \right) \cdot \left( -\frac{1}{\sqrt{3}a} \hat{i} + \frac{1}{a} \hat{j} \right) \times \left( \frac{1}{c} \hat{k} \right) \\ &= \left( \frac{1}{\sqrt{3}a} \hat{i} + \frac{1}{a} \hat{j} \right) \cdot \left( \frac{1}{\sqrt{3}a} \hat{j} + \frac{1}{ac} \hat{i} \right) = \frac{2}{\sqrt{3}a^2 c} \dots\dots\dots 2-56\end{aligned}$$

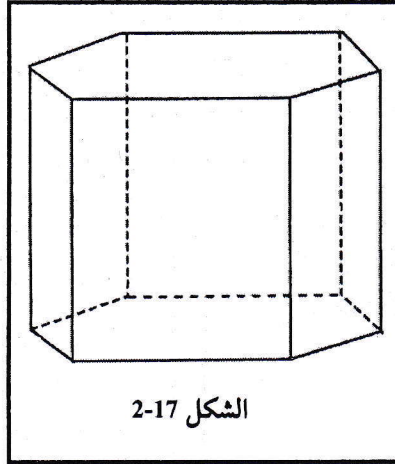
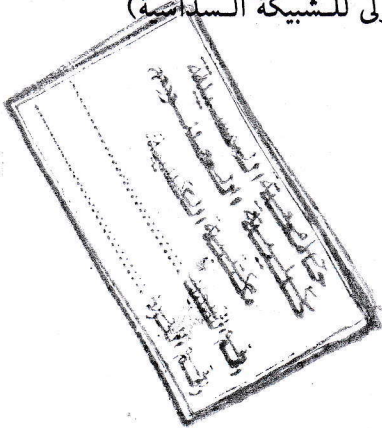
والذي بالطبع هو مقلوب الحجم  $\left(\sqrt{3} \frac{a^2 c}{2}\right)$  الخاص بوحدة الخلية الاولى للشبيكة المباشرة.

ويعطى متجه الشبيكة المقلوبة:

$$\vec{G} = 2\pi(h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + \ell\vec{c}^*)$$

$$= 2\pi\left[\frac{1}{\sqrt{3}a}(h-k)\hat{i} + \frac{1}{a}(h+k)\hat{j} + \frac{1}{c}\hat{k}\right]$$

ان اصغر  $\vec{G}$  لا صفريه هي ثمانية. ويتم تحديد حدود الخلية الاولى في الشبيكة المقلوبة وبذلك منطقة برليون الاولى بوساطة المستويات العمودية على المتجهات الثمانية هذه عند منتصفاتها. وان شكل المنطقة السداسية (منطقة برليون الاولى للشبيكة السداسية) موضح في الشكل 2-17.



الشكل 2-17

## 2-8 الطرق العملية للحيود في البلورات

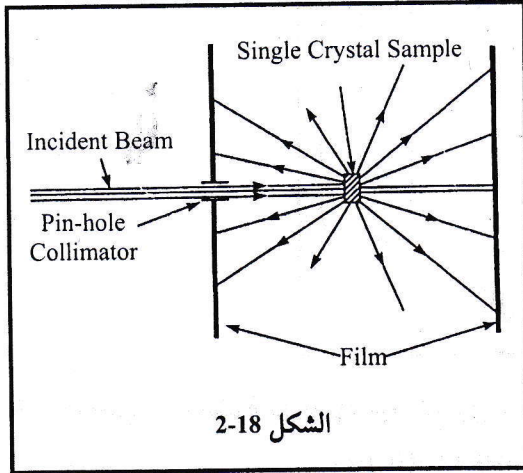
### Experimental crystal diffraction methods

تبعاً لقانون براك يتم الحصول على انماط الحيود عندما تتطابق بالصدفة قيم الطول الموجي  $\lambda$  للاشعة السينية الساقطة والزاوية  $\theta$  في تحقيق معادلة براك  $(2d \sin \theta = n\lambda)$ . ولهذا في أي ترتيب لدراسة حيود البلورات يجب ان نحقق التطابق بين هاتين الكميتين. ويمكن تجاوز ذلك إما بوساطة تغيير  $\lambda$  بالنسبة لقيمة  $\theta$  ثابتة أو بوساطة تغيير  $\theta$  بالنسبة

لقيمة  $\lambda$  ثابتة. وهناك ثلاث طرق عملية قياسية للقيام بذلك. في الدراسة الفنية لعلم البلورات تستعمل طرق الكاميرا الدقيقة المعقدة ونستعرض ادناه المفاهيم الاساسية لثلاث طرق:

### 1. طريقة لاوي Laue Method

وتعد تاريخيا أول نوع من انواع طرق الحيود للبلورة. يتم وضع بلورة أحادية بشكل ثابت ويتم تعريضها لحزمة بيضاء (اطوال موجية متصلة ومستمرة) من اشعة سينية. ويوضح الشكل 2-18 تخطيطا لهذه الطريقة. يتم توجيه حزمة اشعة سينية متوازية من مصدر ذي مدى واسع من الاطوال الموجية (من  $2A^\circ - 0.2$ ) بمساعدة ثقب على عينة بلورة منفردة ابعادها بحدود  $1mm$  ويتم الحصول على الاشعة المشتتة على اللوح الفوتوغرافي بالاتجاهين الامامي والخلفي. وتنتج هذه الاشعة المشتتة من مختلف اسطح البلورة والمحققة لشرط براك لبعض الاطوال الموجية نمط من بقع على اللوح الفوتوغرافي. وتوضح البقع المتكونة على اللوح الفوتوغرافي لبلورة معروف تركيبها تماثل البلورة والاتجاهات البلورية الموازية والعمودية على اتجاه سقوط الاشعة السينية وربما تكون هذه المعلومات مهمة لتجارب اخرى ولاغراض مختلفة وكذلك يستدل من خلال البقع على عيوب البلورة التي تحصل من بعض التأثيرات الميكانيكية او الحرارية.



لا يمكن استخدام طريقة لاوي في تعيين احداثيات شبيكة أو تركيب بلوري لبلورة غير معروفة التركيب وذلك بسبب مدى القيم الواسع للاطوال الموجية حيث تمثل البقعة الواحدة عدة انعكاسات أي يمكن لمجاميع من السطوح المتوازية ذات فسخ مختلفة ان تعكس أنبأ عدة اطوال موجية لعدة قيم للرتبة  $n$  وبذلك يتعذر اعتبار شدة بقعة ما ممثلة

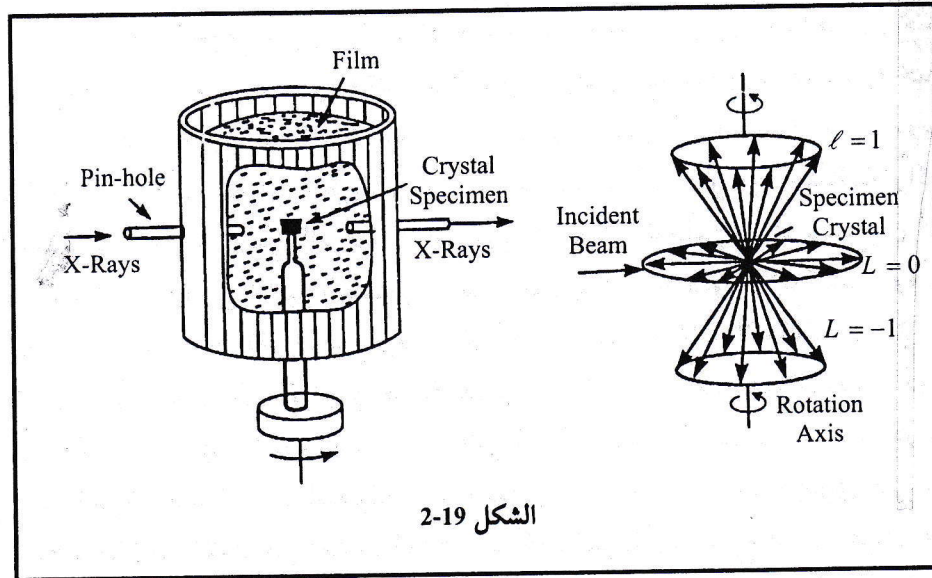
لشدة انعكاس لسطح  $(hkl)$  معين ذو فسخة معينة. وبالرغم من ان التماثل في نمط لاوي يعطينا شكل وحدة الخلية، إلا ان هذه الطريقة غير مناسبة في ايجاد تركيب البلورة. وبسبب مدى الاطوال الموجية الواسع للاشعة الساقطة تنعكس العديد من الاطوال الموجية باتجاهات مختلفة من مستوي احادي مؤدية الى تداخل رتب مختلفة عند بقعة واحدة. وبذلك يكون



قياس شدة الانعكاس من كل بقعة وبذلك قياس شدة الانعكاسات المفقودة يصبح صعباً وجدير بالذكر ان هذا القياس وكما موضحه الشكل 2-18 يعد اشارة مهمة لمعرفة تركيب البلورة.

## 2. طريقة تدوير البلورة Rotating crystal method

في هذه الطريقة وعلى خلاف طريقة لاوي، يتم تدوير عينة من بلورة أحادية ابعادها لا تتجاوز  $1\text{ mm}$  حول محور ثابت توضع على مغزل دوّار والشكل 2-19 يوضح تخطيطاً لهذه الطريقة. تستعمل حزمة اشعة سينية احادية الطول الموجي يتم الحصول عليها بوساطة مرشح أو بوساطة انعكاس من بلورة اضافية اخرى (تعمل على السماح لطول موجي معين من الانعكاس منها ثم يستخدم هذا الشعاع المنعكس كحزمة ساقطة) وتكون باتجاه عمودي على محور دوران البلورة. يثبت لوح فوتوغرافي داخل حامل اسطواناني متمركز مع المغزل الدوّار.



الشكل 2-19

ومن خلال تغيير الزاوية  $\theta$  الذي يتم من خلال تدوير البلورة يتم وضع مستويات البلورة المختلفة في وضع انعكاس وتشتت الحزمة من مستوي بلورة معين عندما تحقق قيمة الزاوية  $\theta$  شرط براك. وتقع الحزم المتشتتة من كل المستويات الموازية لمحور الدوران في المستوي الافقي وتعطي بقعاً على اللوح الفوتوغرافي على محيط دائرة أفقية مؤشرة بالرمز

$\ell = 0$ . وتعطي الحزم الواردة من المستويات ذات التوجيهات الأخرى بقعاً على الدوائر الأفقية التي تقع فوق وتحت الدائرة  $\ell = 0$  وتؤشر على أنها  $\ell = \pm 1$  و  $\ell = \pm 2$  وهكذا. وسوف لن يكون هنالك حزم تنعكس مستويات البلورة التي تظم دائماً الحزمة الساقطة. والشكل 2-19 b يوضح تلك الدوائر التي تعود إلى  $\ell = \pm n$  (إذا كان  $n$  عدد صحيح) تقع على قواعد المخاريط الواقعة حول محور الدوران وبزاوية قائمة بالنسبة للحزمة الساقطة. وبذلك يسجل اللوح الفوتوغرافي الأسطواني الانعكاسات التي تعود إلى طبقة شبكية مقلوبة على شكل بقع تقع عبر خط أفقي يسمى خط الطبقة وأن خطوط الطبقات المختلفة تعود إلى طبقات شبكية مقلوبة مختلفة. إن ارتفاع خط الطبقة عن خط  $\ell = 0$  يتناسب عكسياً مع المسافة البينية بين المستويات  $d_{hkl}$ . وبذلك يمكن استعمال صور تدوير البلورة في تحديد معاملات وحدة الخلية لعينة البلورة مع العلاقات الهندسية بين  $d_{hkl}$  ومعاملات الشبكة التي عرضناها في الفصل الأول.

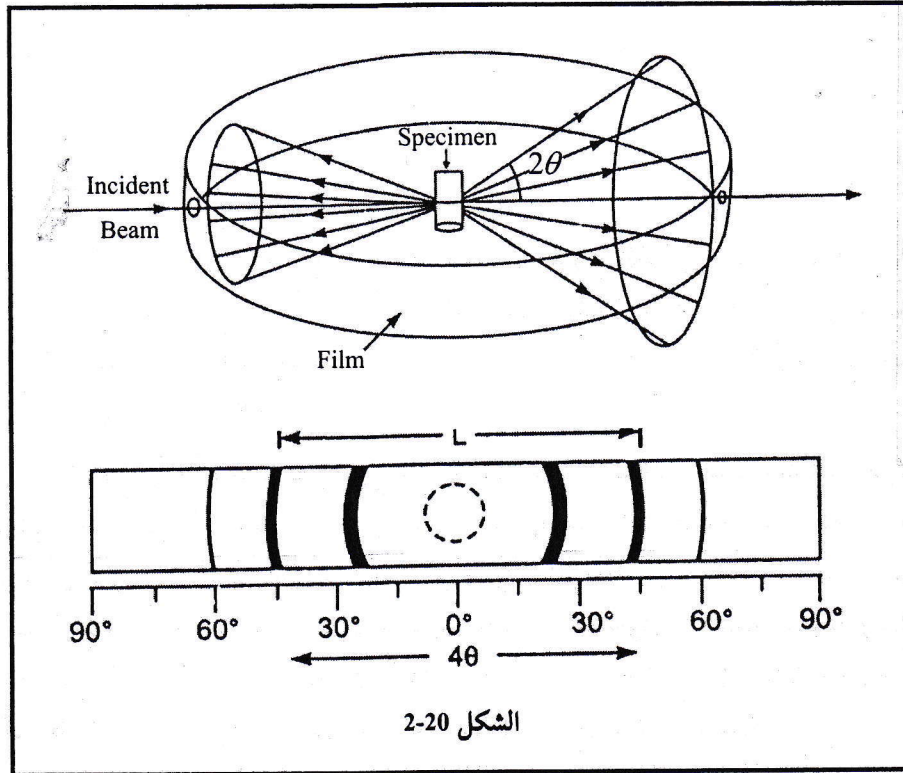
ولأن هنالك عدد كبير جداً من الأشعة المنتشرة (يصل إلى أكثر من 10000) فلقد تم تطوير طرق أخرى تقوم بتقليص تراكب الانعكاسات المختلفة ومن بين هذه الطرق المحورة عن طريقة تدوير البلورة هي طريقة تذبذب البلورة، وفيها يسمح للبلورة بالتذبذب خلال مدى زاوي محدد يتراوح عادة بين عشر درجات إلى عشرين درجة بدلاً من تدويرها خلال  $360^\circ$ . من مميزات هذه الطريقة مقارنة بطريقة التدوير أنها تقلل من احتمالية تراكب الانعكاسات المختلفة وتعطي الفرصة لدراسة قوة تشتت كل انعكاس حيث يسمح في هذه الطريقة لعدد محدود من مجاميع السطوح بتحقيق قانون براك وحصول الانعكاس. وهناك طريقة أخرى تسمى طريقة وايزنبرج وفيها يتم التغلب على المحلل الانعكاسات المتراكبة والمسجلة على اللوح الفوتوغرافي في طريقة تدوير البلورة وإزالته من خلال تحديد دوران البلورة خلال تعرضها للأشعة السينية بعدد قليل من الدرجات لا يزيد عن عشرين درجة. في هذه الطريقة تحاط البلورة بأسطوانة معدنية تدعى شاشة الطبقة الخطية ويحتوي على شق تمر خلاله الأشعة المنتشرة من إحدى طبقات الشبكة المقلوبة إلى اللوح الفوتوغرافي. عند دوران البلورة وتعرضها للأشعة السينية سينتج عدد كبير من الانعكاسات بطبقات مختلفة ولكن وجود الشق سوف يسمح فقط للأشعة المنعكسة من عدد محدود من السطوح البلورية بالمرور وتتكون طبقة أفقية من البقع على اللوح الفوتوغرافي إذا كان اللوح الفوتوغرافي ثابتاً ولما كان اللوح الفوتوغرافي مستمراً بالحركة فسوف تسجل الانعكاسات المتعاقبة المنبعثة من



البلورة والمكونة لطبقة واحدة من البقع في مواقع مختلفة من اللوح الفوتوغرافي، وبذلك تكون قد انحلت بعضها عن بعض.

### 3. طريقة المسحوق Powder method

ان أول من استعمل طريقة المسحوق هو ديباي وشيرر. تستخدم هذه الطريقة عندما يصعب تكوين بلورة كبيرة لدراستها بوحدة من الطرق السابقة، ففي هذه الطريقة يتم طحن المادة على هيئة مسحوق متجانس من الحبيبات أو البلورات الصغيرة وتكون العينة عبارة عن قضيب من مادة متعددة التبلور (يصنع القضيب من حبيبات مسحوق مصمغة مع بعضها الآخر أو يتم وضع مادة حبيبية متعددة التبلور في انبوبة شعرية نحيفة. وغالبا ما تكون الحزمة الساقطة اشعاع  $K_{\alpha}$  للنحاس ( $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$ ) أو الموليبدنيوم ( $\lambda = 0.709 \text{ \AA}$ ) يتم الحصول عليه أما بوساطة مرشح أو من بلورة أخرى اضافية ويتم تمرير الحزمة عبر ثقب. ويكون اللوح الفوتوغرافي عبارة عن شريحة ملفوفة على الجدار الداخلي لغرفة اسطوانية تتمركز على العينة ويعرض الشكل 2-20 الشكل التخطيطي لكاميرا المسحوق.



الشكل 2-20



يكون توزيع اتجاهات الحبيبات البلورية مستمرا تقريبا. وتخرج الاشعة المختلفة المشتتة عن الحبيبات البلورية التي يحدث انها تتوجه بمستويات تصنع زاوية براك  $\theta$  مع حزمة الاشعة محققة شرط براك باتجاهات تصنع زاوية  $2\theta$  (لمعرفة سبب ذلك راجع الشكل 2-3). ولما كان متوفرا في جميع التوجيهات مجموعة معينة من مستويات  $(hkl)$  فستشتت اشعة الحيود المختلفة عبر مخاريط متمركزة مع الحزمة الساقطة ومع زاوية نصف رأسية  $2\theta$ . وتنتج مستويات  $(hkl)$  المختلفة ذات المخاريط المختلفة وتكون اجزاء هذه المخاريط المقطوعة بوساطة شريحة اللوح الفوتوغرافي على شكل زوج من الاقواس كما هو واضح في الشكل 2-20 b. وكما يتضح من هذا الشكل فان المسافة  $L$  بين قوسين يقعان بشكل متماثل حول البقعة المركزية تظم زاوية  $4\theta$ . ومن الشكل 2-20 a لو كان  $x$  يمثل قطر الدائرة على اللوح وان  $R$  هي المسافة من العينة الى اللوح يكون لدينا:

$$\tan 2\theta = \frac{x}{2R} \quad \text{أو يمكن ان نكتبها:}$$

$$2\theta = \frac{x}{R}$$

$$x = 4\theta R \quad \text{ومنها نجد ان:}$$

ان  $R$  تساوي في العادة نصف القطر الداخلي للوح الكاميرا الفوتوغرافي وبذلك يمكن معايرة شريحة اللوح بدلالة  $\theta$  كما يتضح من الشكل 2-20 b وتعويض قيمة  $\lambda$  المستعملة وقيمة  $\theta$  من الشريحة المعايرة في علاقة براك  $2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda$  يمكن ان نحصل على قيمة  $d_{hkl}$  ذات العلاقة.

وأضافة الى فائدة هذه الطريقة في دراسة مكونات السبائك ونسب تلك المكونات فتسمح البعض من كاميراتها بتسخين الحبيبات البلورية لدرجات حرارة عالية. تتضمن هذه الطريقة في دراسة التركيب البلوري الكثير من مصادر الاخطاء في حسابات المسافات البينية بين السطوح ومن بين الاخطاء الفيزيائية فيها امتصاص المسحوق للاشعة السينية وكذلك انكسار هذه الاشعة بوساطة المسحوق، وهنالك اخطاء هندسية تكمن في مثلا عدم معرفة نصف قطر اللوح الفوتوغرافي بصورة دقيقة وكذلك انفراج الاشعة السينية.

حيود الاشعة السينية في البلورات والشبيكة المقلوبة

سوف نلخص اهم الفوائد من كل طريقة من الطرق الثلاثة لدراسة حيود الاشعة السينية في الجدول 2-1:

| الاستعمال                   | طريقة لاوي | طريقة تدوير البلورة | طريقة المسحوق |
|-----------------------------|------------|---------------------|---------------|
| التعرف على نظام البلورة     | غير ممكن   | ممكن تحت وضع خاص    | ممكن          |
| معاملات أو احداثيات الشبيكة | غير ممكن   | ممكن                | ممكن          |
| معاملات السطوح              | صعب        | ممكن                | صعب           |
| توجيه البلورة               | ممكن       | ممكن تحت وضع خاص    | غير ممكن      |

### تمارين عامة محلولة

1. اثبت تحليليا ان حجم وحدة الخلية في الشبكة المقلوبة هو مقلوب حجم وحدة خلية الشبكة المباشرة.

الحل:

معاملات وحدة خلية الشبكة المقلوبة ترتبط بتلك التي تعود الى الشبكة المباشرة من خلال العلاقات التالية:

$$\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})} \quad \text{و} \quad \vec{b}^* = \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})} \quad \text{و} \quad \vec{c}^* = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}$$

ويكون من هنا حجم وحدة خلية الشبكة المقلوبة هو:

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

ونعرف من جبر المتجهات ان:

$$\vec{x} \times (\vec{a} \times \vec{b}) = \vec{a}(\vec{x} \cdot \vec{b}) - \vec{b}(\vec{x} \cdot \vec{a})$$

ولو وضعنا  $\vec{x} = \vec{c} \times \vec{a}$  فسيكون:

$$\begin{aligned} (\vec{c} \times \vec{a}) \times (\vec{a} \times \vec{b}) &= \vec{a}(\vec{c} \times \vec{a} \cdot \vec{b}) - \vec{b}(\vec{c} \times \vec{a} \cdot \vec{a}) \\ &= \vec{a}(\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}) - \vec{b}(\vec{c} \cdot \vec{a} \times \vec{a}) \\ &= \vec{a}(\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}) - 0 \end{aligned}$$

وبذلك:

$$\begin{aligned} (\vec{b} \times \vec{c}) \cdot (\vec{c} \times \vec{a}) \times (\vec{a} \times \vec{b}) &= (\vec{b} \times \vec{c}) \cdot \vec{a}(\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}) \\ (\vec{b} \times \vec{c} \cdot \vec{a})(\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}) &= (\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c})^2 \end{aligned}$$



اذن:

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

اذ ان  $V$  هو حجم وحدة خلية الشبيكة المباشرة.

$$2. \text{ اشتق معادلة براك } 2d_{hk\ell} \sin \theta = n\lambda \text{ من صيغتها الاتجاهية } 2\vec{k} \cdot \vec{G} + \vec{G}^2 = 0$$

الحل:

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{n}_1$$

نعرف من التعريف ان:

اذ ان  $\vec{n}_1$  وحدة متجه باتجاه  $\vec{k}$  و:

$$\vec{G} = 2\pi(h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + \ell\vec{c}^*) = 2\pi\vec{r}^*$$

$$= 2\pi\left(\frac{n}{d_{hk\ell}}\right)\vec{n}_2$$

اذ ان  $\vec{n}_2$  وحدة متجه باتجاه  $\vec{G}$ .

وبتعويض قيم  $\vec{k}$  و  $\vec{G}$  في صيغة المتجه المعطاة

$$2\vec{k} \cdot \vec{G} + \vec{G}^2 = 0$$

$$2\left(\frac{2\pi}{\lambda}\vec{n}_1\right) \cdot \left(\frac{2\pi n}{d_{hk\ell}}\vec{n}_2\right) + \left(\frac{2\pi n}{d_{hk\ell}}\vec{n}_2\right)^2 = 0$$

أو:

$$2d_{hk\ell}\vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2 + n\lambda\vec{n}_2^2 = 0$$

$$\vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2 = \cos(90^\circ + \theta) = -\sin \theta \text{ و } \vec{n}_2^2 = 1$$

ولكن:

ويمكن ان نرى من الشكل 12-2 ان الزاوية بين الاتجاهات  $\vec{k}$  و  $\vec{G}$  هي  $(90^\circ + \theta)$ :

$$2d_{hk\ell} \sin \theta = n\lambda$$

اذن:

3. هنالك ثلاث مصادر للإشعاع احدهما يعطي اشعة سينية والاخر يعطي حزمة نيوترونات والثالث يعطي حزمة اليكترونات وكل منها بطاقة مقدارها  $10^4 \text{ eV}$ . احسب الطول الموجي لكل اشعاع.

الحل:

يعطى الطول الموجي للاشعة السينية بواسطة:

$$\lambda (A^\circ) = \frac{12.43}{E (keV)}$$

$$\lambda = \frac{12.43}{10 keV} = 1.243 A^\circ$$

ويعطى الطول الموجي بالنسبة لاشعاع النيوترون بواسطة:

$$\lambda (A^\circ) = \frac{0.286}{\sqrt{E (eV)}}$$

$$\lambda = \frac{0.286}{\sqrt{10^4}} = 0.00286 A^\circ$$

وبالنسبة لحزمة الاليكترونات يعطى الطول الموجي بواسطة:

$$\lambda = \sqrt{\frac{150.8}{E (eV)}} = \sqrt{\frac{150.8}{10^4}} = 0.1228 A^\circ$$

4. جد المسافة البينية بين الذرات في حالة بلورة  $NaCl$ . اذا علمت ان كثافة  $NaCl$  هي  $2.16 \text{ g/cm}^3$  وان الوزن الذري لـ  $Na$  هو 23 والى  $Cl$  هو 35.5 وان عدد افوكادرو هو  $N_A = 6.03 \times 10^{23}$ .

الحل:

وحدة خلية  $NaCl$  هي خلية مكعبة تمتلك عند الاركان المتتابة ذرات  $Na$  و  $Cl$ . ولما كان كل من الاركان الثمانية يشترك مع ثمان ذرات اخر فهنالك بالمعدل ذرة واحدة لكل وحدة خلية، بمعنى ان كل وحدة خلية مكعبة من  $NaCl$  تحتوي على نصف ذرة  $Na$  ونصف ذرة  $Cl$ ، أو نصف جزيئة  $NaCl$ . وكذلك الوزن الجزيئي الى  $NaCl$  هو  $23 + 35.5 = 58.5$ .

حيود الاشعة السينية في البلورات والشبيكة المقلوبة

$$\frac{1}{2} \left( \frac{58.5}{N_A} \right) = \text{كتلة وحدة الخلية} = \text{كتلة جزيئة } NaCl$$

ومن الشكل الهندسي لخلية المكعب الذي طول ضلعه  $d$  لدينا كتلة وحدة الخلية  $d^3 \times$  الكثافة

$$d^3 \times \text{الكثافة} = \frac{58.5}{2N_A} \text{ ولدينا الكثافة وعدد افوكادرو فسيكون طول ضلع المكعب}$$

هو:

$$d = \left( \frac{58.5}{2 \times 6.03 \times 10^{23} \times 2.16} \right)^{1/3} = 2.821 \times 10^{-8} \text{ cm} = 2.821 \text{ \AA}$$

وبطريقة اخرى يمكن ان نجد المسافة البينية بين الذرات من المعادلة:

$$a = \left( \frac{nM}{N_A \rho} \right)^{1/3}$$

$$\text{ولدينا } n = \frac{1}{2} \text{ و } M = 58.5 \text{ و } N_A = 6.03 \times 10^{23} \text{ و } \rho = 2.16 \text{ g / cm}^3$$

$$a = \left( \frac{58.5}{2 \times 6.03 \times 10^{23} \times 2.16} \right)^{1/3} = 2.821 \times 10^{-8} \text{ cm} = 2.821 \text{ \AA}$$

5. لوحظت رتبة الانعكاس الاولى لحزمة اشعة سينية احادية الطول الموجي من بلورة  $NaCl$  بزاوية خاطفة  $8^\circ$ . اذا كانت المسافة بين المستويات الاساسية لبلورة  $NaCl$  هي  $2.821 \text{ \AA}$ . د الطول الموجي لحزمة الاشعة السينية. عند أي زاوية ستكون النهاية العظمى الثانية؟

الحل:

من معادلة براك:

$$2d_{hk\ell} \sin \theta = n\lambda$$

لدينا:  $n = 1$  و  $\theta = 8^\circ$  و  $d = 2.821 \text{ \AA} = 2.821 \times 10^{-10} \text{ m}$  وبذلك:

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



$$= \frac{2(2.821 \times 10^{-10})(0.1392)}{1} = 0.7854 \times 10^{-10} \text{ m} = 0.7854 \text{ \AA}$$

وبالنسبة الى  $n = 2$

$$\sin \theta = \frac{n\lambda}{2d} = \frac{2(0.7854 \times 10^{-10})}{2(2.821 \times 10^{-10})} = 0.2784$$

$$\theta = 16^\circ 10'$$

6. احسب قيمة زاوية براك التي تعود لانعكاس الرتبة الاولى لحزمة اشعة سينية طاقتها  $0.01 \text{ MeV}$  من المستوي (100) لبلورة علما ان  $d_{100} = 3.14 \text{ \AA}$ . مالذي ستكون عليه اعلى رتبة انعكاس يمكن ملاحظتها في هذه الحالة؟  
الحل:

لما كان  $2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda$  ولدينا  $n = 1$  و  $d = 3.14 \text{ \AA}$  و  $E = 0.01 \text{ MeV}$  فان:

$$\lambda(\text{\AA}) = \frac{12.43}{E(\text{keV})} = \frac{12.43}{10} = 1.243 \text{ \AA}$$

$$\sin \theta = \frac{n\lambda}{2d} = \frac{1(1.243 \times 10^{-10})}{2(3.14 \times 10^{-10})} = 0.1979$$

$$\theta = 11^\circ 25'$$

ولما كانت القيمة العظمى الى  $\sin \theta$  هي 1 فان:

$$\sin \theta = \frac{n\lambda}{2d} < 1$$

$$n < \frac{2d}{\lambda} < \frac{2(3.14 \times 10^{-10})}{1.243 \times 10^{-10}} < 5.05$$

أو

وبذلك تكون اعلى رتبة ممكن ملاحظتها هي  $n = 5$ .

7. حزمة ضيقة من اشعة  $K_\alpha$  للنحاس ( $\lambda = 1.542 \text{ \AA}$ ) سقطت على رقاقة جرافايت تدور حول محور ثابت عمودي على الاشعاع الساقط. لوحظ ان الشعاع انعكس جزئيا

من مستوي الرقاقة مرويا عندما صنع اتجاهه زاوية مقدارها  $13^\circ$  أو  $27^\circ$  أو  $43^\circ$  أو  $64^\circ$  مع مستوي الرقاقة. ما الذي تستنتج من هذه الملاحظات؟

الحل:

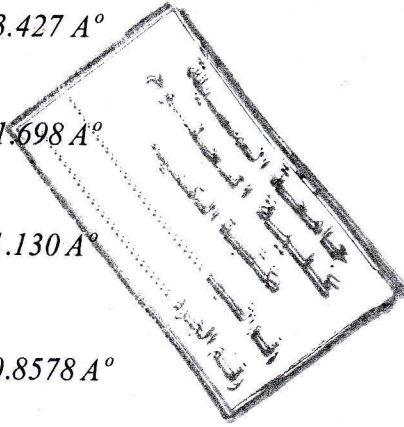
تمتلك رقاقة الجرافيت اربعة مجموعات مختلفة من المستويات بمسافات بينية بين المستويات  $d_1$  و  $d_2$  و  $d_3$  و  $d_4$  التي تعكس الحزمة الساقطة باتجاهات اربعة مختلفة هي حسب الترتيب  $\theta_1$  و  $\theta_2$  و  $\theta_3$  و  $\theta_4$ . ولما كانت  $2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda$  فانه بالنسبة الى  $n=1$  ستكون  $d$  لكل حالة هي:

$$d_1 = \frac{\lambda}{2 \sin \theta_1} = \frac{1.542}{2 (0.2250)} = 3.427 \text{ Å}$$

$$d_2 = \frac{\lambda}{2 \sin \theta_2} = \frac{1.542}{2 (0.4540)} = 1.698 \text{ Å}$$

$$d_3 = \frac{\lambda}{2 \sin \theta_3} = \frac{1.542}{2 (0.6820)} = 1.130 \text{ Å}$$

$$d_4 = \frac{\lambda}{2 \sin \theta_4} = \frac{1.542}{2 (0.8988)} = 0.8578 \text{ Å}$$



8. اثبت انه بالنسبة لشبيكة مكعب بسيط ان  $d_{hkl} = a / \sqrt{h^2 + k^2 + \ell^2}$  وانه بالنسبة

$$\text{لنظام سداسي } \frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4}{3a^2} (h^2 + hk + k^2) + \frac{\ell^2}{c^2}$$

الحل:

يكون حاصل الضرب متجه الشبيكة المقلوبة بنفسه هو:

$$\begin{aligned} \vec{r}^* \cdot \vec{r}^* &= (h'\vec{a}^* + k'\vec{b}^* + \ell'\vec{c}^*) \cdot (h'\vec{a}^* + k'\vec{b}^* + \ell'\vec{c}^*) \\ &= n^2 (h^2 \vec{a}^* \cdot \vec{a}^* + k^2 \vec{b}^* \cdot \vec{b}^* + \ell^2 \vec{c}^* \cdot \vec{c}^* + 2hk \vec{a}^* \cdot \vec{b}^* + 2k\ell \vec{b}^* \cdot \vec{c}^* + 2h\ell \vec{c}^* \cdot \vec{a}^*) \end{aligned}$$

اذ ان  $h' = nh$  و  $k' = nk$  و  $\ell' = n\ell$  وهنا  $n$  يمثل عدد صحيح. لو كانت  $\alpha^*$  الزاوية بين  $\vec{b}^*$  و  $\vec{c}^*$  وكانت  $\beta^*$  الزاوية بين  $\vec{c}^*$  و  $\vec{a}^*$  وكانت  $\gamma^*$  الزاوية بين المتجهات المقلوبة  $\vec{a}^*$  و  $\vec{b}^*$  وكذلك لدينا  $\vec{r}^* \cdot \vec{r}^* = \frac{n^2}{d_{hk\ell}^2}$  يمكننا ان نكتب:

$$\frac{1}{d_{hk\ell}^2} = h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + \ell^2 c^{*2} + 2hka^*b^* \cos \gamma^* + 2k\ell b^*c^* \cos \alpha^* + 2\ell h c^*a^* \cos \beta^*)$$

وهذه العلاقة تقود لنتائج معقدة بالنسبة للتركييب البلورية المعقدة ولكنها بالنسبة للتركييب البلورية البسيطة ذات التماثل العالي فانها يمكن ان تكون اكثر تبسيطا. فبالنسبة لشبكة المكعب البسيط تكون  $\vec{a}^* = \vec{b}^* = \vec{c}^*$  وان  $\alpha^* = \beta^* = \gamma^* = 90^\circ$  وبذلك تبسط المعادلة الى الصورة:

$$\frac{1}{d_{hk\ell}^2} = a^{*2} (h^2 + k^2 + \ell^2)$$

ولكن  $a^* = 1/a$  وبذلك:

$$d_{hk\ell} = a / \sqrt{h^2 + k^2 + \ell^2}$$

اما بالنسبة للنظام سداسي فلدينا  $\vec{a}^* = \vec{b}^* \neq \vec{c}^*$  و  $\alpha^* = \beta^* = 90^\circ$ ;  $\gamma^* = 60^\circ$  وبذلك تبسط المعادلة الى:

$$\frac{1}{d_{hk\ell}^2} = a^{*2} (h^2 + hk + k^2) + \ell^2 c^{*2}$$

ولكن الشبكة المقلوبة لشبكة سداسية هي شبكة سداسية اخرى فيها  $a^* = 1/a \cos 30^\circ = 2/a\sqrt{3}$  و  $c^* = 1/c$  او نكتب:

$$a^{*2} = \vec{a}^* \cdot \vec{a}^* = \left( \frac{1}{a\sqrt{3}} \hat{i} + \frac{1}{a} \hat{j} \right) \cdot \left( \frac{1}{a\sqrt{3}} \hat{i} + \frac{1}{a} \hat{j} \right)$$

$$= \frac{1}{3a^2} + \frac{1}{a^2} = \frac{4}{3a^2}$$

$$a^* = \frac{2}{a\sqrt{3}}$$

بحيث ان:



$$\frac{1}{d_{hk\ell}^2} = (h^2 + hk + k^2) \frac{4}{3a^2} + \frac{\ell^2}{c^2}$$

9. دالة الموجة بالنسبة الى ذرة هيدروجين في حالتها المستقرة تعطى

بوساطة:  $\psi = e^{-r/a_0} / \sqrt{\pi a_0^3}$  اذا ان  $a_0$  هو نصف قطر بوهلر الاول. احسب عامل التركيب الذري.

الحل:

اذا كانت  $\psi^*$  هي المرافق المعقد الى  $\psi$  فان كثافة الاليكترون تعطى بوساطة:

$$\rho(r) = \psi\psi^* = \frac{e^{-r/a_0}}{\sqrt{\pi a_0^3}} \times \frac{e^{-r/a_0}}{\sqrt{\pi a_0^3}} = \frac{e^{-2r/a_0}}{\pi a_0^3}$$

ويعطى عامل التركيب الذري لذرة مثل هذه بوساطة المعادلة 2-23:

$$f = 4\pi \int_0^\infty r^2 \rho(r) \frac{\sin \mu r}{\mu r} dr$$

وبتعويض قيمة  $\rho(r)$  والتبسيط يكون لدينا:

$$f = \frac{4}{\mu a_0^3} \int_0^\infty r e^{-2r/a_0} \sin \mu r dr$$

ومن التكاملات القياسية لدينا:  $\int_0^\infty x e^{-ax} \sin bx dx = \frac{2ab}{(a^2 + b^2)^2}$  وفي معادلتنا

اعلاه ستكون  $a = 2/a_0$  و  $b = \mu$  وبذلك:

$$f = \frac{4}{\mu a_0^3} \frac{2 \left( \frac{2}{a_0} \mu \right)}{\left( \frac{4}{a_0^2} + \mu^2 \right)^2} = \frac{16}{a_0^4} \left( \frac{a_0^2}{4 + \mu^2 a_0^2} \right)^2$$

$$f = \frac{16}{(4 + \mu^2 a_0^2)^2}$$

10. لديك متجه الشبكة المقلوبة  $\vec{G} = \frac{2\pi}{V}(h\vec{b} \times \vec{c} + k\vec{c} \times \vec{a} + \ell\vec{a} \times \vec{b})$ ، جد علاقة متجه الشبكة المقلوبة بالاحداثيات الكارتيزية بالنسبة لشبكة مكعب ممرزة الواجه وشبكة مكعب ممرزة الجسم تناسب خلية مكعب طول ضلعه  $a$ . احسب منها اطوال متجهات الشبكة المقلوبة لاختيارات  $h$  و  $k$  و  $\ell$  التالية:

| $h$ | $k$ | $\ell$ |
|-----|-----|--------|
| 1   | 0   | 0      |
| 1   | -1  | 0      |
| 1   | 1   | 0      |
| 1   | 1   | -1     |

الحل:

بالنسبة لشبكة المكعب ممرز الواجه تكون المتجهات الانتقالية الاولى هي:

$$\vec{a} = \frac{a}{2}(\hat{i} + \hat{j}) \quad \vec{b} = \frac{a}{2}(\hat{j} + \hat{k}) \quad \vec{c} = \frac{a}{2}(\hat{k} + \hat{i}) \quad \text{وبذلك يكون حجم وحدة الخلية:}$$

$$V = \vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c} = \frac{a^3}{8} [(\hat{i} + \hat{j}) \cdot (\hat{j} + \hat{k}) \times (\hat{k} + \hat{i})]$$

$$= \frac{a^3}{8} (\hat{i} + \hat{j}) \cdot (\hat{i} + \hat{j} - \hat{k}) = \frac{a^3}{8} (1 + 1) = \frac{a^3}{4}$$

وبتعويض  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  و  $V$  في العلاقة المعطاة بالنسبة الى  $\vec{G}$  سيكون لدينا:

$$\vec{G} = \frac{8\pi}{a^3} \left[ h \frac{a^2}{4} (\hat{j} + \hat{k}) \times (\hat{k} + \hat{i}) + k \frac{a^2}{4} (\hat{k} + \hat{i}) \times (\hat{i} + \hat{j}) + \ell \frac{a^2}{4} (\hat{i} + \hat{j}) \times (\hat{j} + \hat{k}) \right]$$

$$= \frac{2\pi}{a} [(h - k + \ell)\hat{i} + (h + k - \ell)\hat{j} + (-h + k + \ell)\hat{k}]$$

أطوال متجه الشبيكة المقلوبة:

$$G = \sqrt{\vec{G} \cdot \vec{G}} = \frac{2\pi}{a} \left[ (h-k+\ell)^2 + (h+k-\ell)^2 + (-h+k+\ell)^2 \right]^{1/2}$$

وبالنسبة للاختيارات الاربعة المعطاة يكون:

$$G = \frac{2\pi}{a} \sqrt{3} , \frac{2\pi}{a} 2\sqrt{2} , \frac{2\pi}{a} 2 , \frac{2\pi}{a} 2\sqrt{5}$$

اما بالنسبة لشبيكة المكعب ممرکز الجسم فان متجهات الانتقال الاولى هي:

$$\vec{a} = \frac{a}{2}(\hat{i}+\hat{j}-\hat{k}) \text{ و } \vec{b} = \frac{a}{2}(-\hat{i}+\hat{j}+\hat{k}) , \vec{c} = \frac{a}{2}(\hat{i}-\hat{j}+\hat{k})$$

ومن ثم يكون حجم وحدة الخلية:

$$V = \vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c} = \frac{a^3}{8} \left[ (\hat{i}+\hat{j}-\hat{k}) \cdot (-\hat{i}+\hat{j}+\hat{k}) \times (\hat{i}-\hat{j}+\hat{k}) \right]$$

$$= \frac{a^3}{8} (\hat{i}+\hat{j}-\hat{k}) \cdot [2(\hat{i}+\hat{j})] = \frac{a^3}{4} (1+1) = \frac{a^3}{2}$$

وبتعويض  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$  و  $V$  في العلاقة المعطاة بالنسبة الى  $\vec{G}$  سيكون لدينا:

$$\vec{G} = \frac{4\pi}{a^3} \left[ h \frac{a^2}{4} (-\hat{i}+\hat{j}+\hat{k}) \times (\hat{i}+\hat{j}-\hat{k}) + k \frac{a^2}{4} (\hat{i}-\hat{j}+\hat{k}) \times (\hat{i}+\hat{j}-\hat{k}) + \ell \frac{a^2}{4} (\hat{i}+\hat{j}-\hat{k}) \times (-\hat{i}+\hat{j}+\hat{k}) \right]$$

$$= \frac{2\pi}{a} \left[ h(\hat{i}+\hat{j}) + k(\hat{j}+\hat{k}) + \ell(\hat{k}+\hat{i}) \right]$$

$$= \frac{2\pi}{a} \left[ (\ell+h)\hat{i} + (h+k)\hat{j} + (k+\ell)\hat{k} \right]$$



وطول متجه الشبكة المقلوبة:

$$G = \sqrt{\vec{G} \cdot \vec{G}} = \frac{2\pi}{a} \left[ (\ell + h)^2 + (h + k)^2 + (k + \ell)^2 \right]^{1/2}$$

وبالنسبة للاختيارات الاربعة:

$$G = \frac{2\pi}{a} \sqrt{2} , \frac{2\pi}{a} \sqrt{2} , \frac{2\pi}{a} \sqrt{6} , \frac{2\pi}{a} \sqrt{10}$$

### أسئلة وتمارين عامة

1. ما هي فوائد ومحددات استعمال الاشعة السينية في دراسة التراكيب البلورية؟
2. وضح كيف عالج براك حيود البلورة كانعكاس مرآوي للاشعة السينية من شبيكة بلورة. اشتق قانون براك.
3. كيف يمكن اثبات قانون براك عملياً؟
4. شوهد انعكاس الرتبة الاولى ( $100$ ) بزاوية خاطفة  $18^\circ$  عندما تشتتت حزمة اشعة سينية طولها الموجي  $1.542 \text{ \AA}$  من بلورة مكعبة. ما هي المسافة  $d_{100}$  في البلورة؟  
الجواب:  $d_{100} = 0.2495 \text{ \AA}$
5. في مطياف براك شوهد الزاوية الخاطفة للرتبة الاولى عند  $14.6^\circ$ . احسب الطول الموجي للاشعة السينية اذا علمت ان  $d = 3.04 \text{ \AA}$ .  
الجواب  $\lambda = 1.533 \text{ \AA}$
6. حزمة اشعة سينية طولها الموجي  $0.5 \text{ \AA}$ . عندما سقطت على بلورة اعطت رتبة انعكاس اولى عند  $4.9^\circ$ . ما هي المسافة البينية بين المستويات المتجاورة للبلورة. وعند أي زاوية تكون النهاية العظمى الثانية؟  
الجواب:  $d = 2.927 \text{ \AA}$  ،  $\theta = 9^\circ 50'$
7. بلورة كوارتز المسافة البينية بين ذراتها  $4.26 \text{ \AA}$  تعرضت لاشعاع  $K_\alpha$  للنحاس ( $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$ ). احسب اصغر زاوية خاطفة. ما تكون عليه اعلى رتبة انعكاس التي يمكن ان تشاهد في هذه التجربة؟  
الجواب:  $\theta = 10^\circ 25'$  ،  $n = 5$
8. كيف عالج لاوي حيود الاشعة السينية من بلورة؟ اشتق معادلات لاوي واستنتج قانون براك من هذه المعادلات.
9. بين كيف ان سعة الاشعة السينية المتشتتة من ذرة محددة لا تساوي السعة من اليكترون مضروب بوساطة  $Z$  (عدد الاليكترونات في تلك الذرة). اشتق علاقة

بالنسبة للعامل الذي يستبدل  $Z$  في مثل هذه الحالة. هل لا يدعى بعامل التركيب أو عامل التشتت؟

10. جد عامل التركيب الهندسي لبلورة مكعب ممرزة الواجه (جميع ذراتها متماثلة). أي من انعكاسات الأشعة السينية التالية سيكون موجودا لهذه البلورة:  $(100)$ ،  $(110)$ ،  $(111)$ ،  $(200)$ ،  $(220)$ ،  $(222)$ ،  $(211)$ ،  $(221)$ ،  $(123)$ ،  $(400)$ .  
الجواب: الانعكاسات موجودة عند:  $(111)$ ،  $(200)$ ،  $(220)$ ،  $(222)$ ،  $(400)$ .
11. اشتق علاقة عامل التركيب الذري. وبين ما هي القواعد التي يلعبها في دراسة حيود الأشعة السينية؟ اشتق معادلات لاوي لحيود الأشعة السينية بوساطة البلورات.
12. احسب عامل التركيب الهندسي لشبيكة مكعب ممرز الجسم. قم بتسمية بعض المستويات المهمة التي تتلشى من طيف حيود الأشعة السينية لبلورة مكعب ممرز الجسم.
13. ما المقصود بالشبيكة المقلوبة؟ احسب الشبيكة المقلوبة لشبيكة مكعب ممرز الواجه المباشرة. ما المقصود بمنطقة برليون الأولى؟
14. ناقش خواص الشبيكة المقلوبة. وما هي فوائدها؟ وضح مفهوم مناطق برليون.
15. ما هو بناء ايوالد؟ كيف يساعدنا في تفسير صور حيود الأشعة السينية؟
16. بين ان تركيب المكعب البسيط هو مقلوب نفسه. وان الشبيكة المقلوبة لشبيكة مكعب ممرز الجسم هي شبيكة مكعب ممرز الواجه. وان شبيكة مكعب ممرز الجسم هي الشبيكة المقلوبة لمكعب ممرز الواجه.
17. احسب مناطق برليون الثلاثة الأولى لشبيكة مربعة ببعدين واثبت ان كل منطقة تمتلك المساحة نفسها.
18. صف طريقة المسحوق في ايجاد تركيب البلورة. لماذا تكون هذه الطريقة اكثر ملائمة من طرق حيود الأشعة السينية الاخرى؟
19. اثبت ان متجه في الشبيكة المقلوبة  $\vec{r}^* = h'\vec{a}^* + k'\vec{b}^* + \ell'\vec{c}^*$  يكون عمودي على مستوي  $(hkl)$  لشبيكة مباشرة، اذ ان  $h' = nh$  و  $k' = nk$  و  $\ell' = n\ell$  وان  $n$  أي عدد صحيح.



20. اثبت ان طول متجه الشبيكة المقلوبة  $\vec{r}_{h'k'l'}^* = n / d_{hkl}$ .
21. أثبت ان حجم وحدة الخلية في الشبيكة المقلوبة يكون مقلوب حجم وحدة الخلية في الشبيكة المباشرة.
22. حزمة نيوترونات طاقتها  $0.083 \text{ eV}$  تشتتت من عينة غير معروفة. وشاهد انعكاس رتبة اولى عند زاوية  $\theta = 22^\circ$ . ما هي المسافة البينية بين مستويات هذه العينة. اذا كان المستوي الذي حصل عنده الانعكاس  $(220)$ ، فما هي المسافة البينية بين الذرات.
23. سقطت حزمة نيوترونات على بلورة ملح الطعام. المسافة البينية بين سطوحها  $2.81 \text{ \AA}$  وعانت حيود رتبة اولى عند الزاوية  $\theta = 20^\circ$ . ما طاقة الحزمة؟
24. اشعة سينية احادية الطول الموجي سقطت على بلورة مكعبة ثابت الشبيكة لها  $a = 5.78 \text{ \AA}$ . اذا حدث انعكاس الرتبة الاولى من المستوي  $(111)$  عند الزاوية  $\phi = 2\theta = 26^\circ 40'$ . احسب الطول الموجي للحزمة الساقطة.
25. سقطت اشعة سينية طولها الموجي  $0.71 \text{ \AA}$  على بلورة ملح الطعام. احسب زاوية انعكاس الرتبة الاولى من المستويات  $(100)$ ،  $(110)$ ،  $(111)$  اذا علمت ان  $d_{100} = 2.84 \text{ \AA}$ .

