الفصل الدراسي الثاني / المحاضره الاولى

(1-1) اشتقاق لاوي لسعة الموجة المستطيرة **Laue Derivation of Amplitude of Scattered Wave**

لقد بينا سابقا أن الحيود يحدث من الذرات الموجوده في المستويات البلورية. استطاع العالم براك أيجاد علاقة رياضية لحيود الاشعة الساقطه على البلوره من المعادلة $n\lambda = 2d_{hkl}\ \sin\theta$. أن هذه المعادلة لاتعطي تفاصيل دقيقة عما يحدث داخل البلوره أثناء الحيود وكذلك لاتعطي معلومات عن شدة وسعة الموجة المستطيره. لقد أهمل براك في نظريته دور التوزيع الالكتروني سواءا داخل الذره أو في داخل وحدة الخلية وكذلك أهمل في حساباته مساهمه الموجات المستطاره الناتجة من كل عنصر حجمي للبلوره.

فعند سقوط حزمه من الاشعة ذات طول موجي معين على ذرات البلوره فأن كل الكترون من الالكترونات تلك الذرات تعمل على استطارة جزء من الاشعه الساقطه بصوره متشاكهه وفي أتجاهات مختلفة وفي اتجاهات مختلفة وذلك حسب قانون ثومسون (Thomson) وقد تساهم النواة في عملية الاستطاره ايضا وذلك لكونها تحمل شحنة الا ان مساهمتها يمكن ان تهمل وذلك لكونها أثقل من الالكترونوان استجاباتها واهتزازها ضعيف جدا.

أن سعة الموجه الكلية المستطاره التي يمكن ان ترصد عند نقطة معينة تساوي حاصل جمع سعات الموجات المستطاره والتي تقع جميعها في نفس الاتجاه.

أن أول من درس ظاهرة الموجات المستطاره هو العالم لاوي (Laue) حيث استطاع ان يحصل على علاقة اتجاهات الموجات المستطيره الخارجة من البلوره بالنسبة للموجه الساقطه . وكذلك حصل على معادلات مكافئه لمعادلة براك أطلق عليها بمعادلات لاوي (Laue equations).

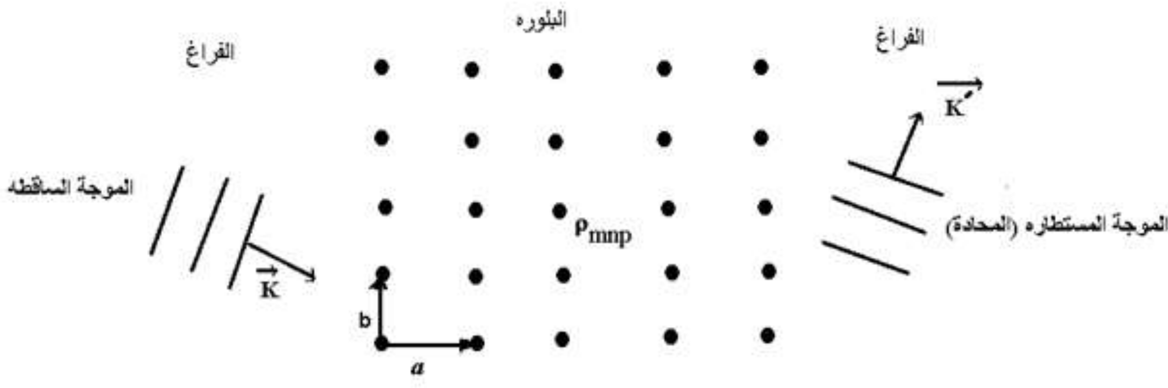
نفرض أن موجه كهرومغناطيسيه مستوية تسقط على شبيكة بلوره صغيره ذات مجموعة من الشحنات النقطيه(point charges) مرتبة بنظام وبشكل دوري ومحدده بالمتجهات $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ وكما مبين بالشكل (1-1) .

نفرض أن سعة الموجه الكهرومغناطيسيه (E) عند نقطه تبعد عن نقطة الاصل بمسافة (x) تساوي:

$$E\,(x) = A\ \exp[\,I\,(\vec{K}\cdot\vec{x} - \omega t)]$$

حيث أن K يمثل متجه الموجه ويساوي $\frac{2\pi}{\lambda}$ ، λ الطول الموجي ، ω التردد الزاوي ، t الزمن ، A سعة الموجه.

الفصل الدراسي الثاني / المحاضره الاولى



الشكل (1-1)

لنفترض أن التفاعل بين الاشعه الساقطه والبلوره هو من النوع الخطي اي أن التردد الزاوي (ω') للموجة المستطيره (الحايده) يساوي التردد الزاوي للموجه الساقطة (ω) والعلاقة بين التردد الزاوي والطول الموجي لموجة ما في الفراغ تعطى بالعلاقة:

$\omega = C\,K$

حيث أن C يمثل سرعة الضوء

لذا فعندما يكون ($\omega = \omega'$ فأن $K = K'$) (تشتت مرن)

يمكن التعبير عن موقع اية ذره في البلوره بمتجه صادر عن نقطة أصل مشتركة فنلاحظ من الشكل (3-3) ان المتجه ρ_{mnp} يساوي

$$\overrightarrow{\rho_{mnp}} = m\,\vec{a} + n\,\vec{b} + p\,\vec{c}$$

حيث أن (m , n , p) أعداد صحيحه ، وينطلق هذا المتجه من نقطة الاصل ويمر عبر نقاط الشبيكه داخل البلوره.

في حالة التشتت المرن يكون $|K| = |K'| = \dfrac{2\pi}{\lambda}$

وللحصول على اقصى شده للموجة المستطيره من بلوره يجب أن تتحقق المعادلات الثلاث الاتيه أنيا لاية قيم موجبه أو سالبه (من ضمنها الصفر) للاعداد الصحيحه l ,k,h

$$\left(\begin{array}{l} \vec{a}\,.\,\overrightarrow{\Delta K} = 2\,\pi\,\mathrm{h} \\ \vec{b}\,.\,\overrightarrow{\Delta K} = 2\,\pi\,\mathrm{k} \\ \vec{c}\,.\,\overrightarrow{\Delta K} = 2\,\pi\,\mathrm{l} \end{array}\right) \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(1\text{-}1)$$

هذه المعادلات تدعى بمعادلات لاوي للنهايات العظمى للحيود

أن $\overrightarrow{\Delta K}$ يعطى بالعلاقة :

$$\overrightarrow{\Delta K} = \overrightarrow{\mathrm{K}'} - \overrightarrow{\mathrm{K}}$$

حيث أن

$\overrightarrow{\Delta K}$ يمثل التغير الاتجاهي لمتجه الموجه ويدعى بمتجه الحيود

$\overrightarrow{\mathrm{K}}$ يمثل متجه جبهة الموجه الساقطه

$\overrightarrow{\mathrm{K}'}$ يمثل متجه جبهة الموجه المتشتته

يكون حل معادلات لاوي سهلا عندما تكون المحاور الاساسية للبلوره $\vec{\mathrm{a}}$, $\vec{\mathrm{b}}$, $\vec{\mathrm{c}}$ متعامدة مع بعضها (Orthogonal) كما في أنظمة البلورات المكعبه والرباعية والمعينيه القائمة وعند ذلك يصبح الحل بالشكل :

$$\overrightarrow{\Delta K} = 2\,\pi\left(\frac{\mathrm{h}}{a}\,\vec{\imath} + \frac{\mathrm{k}}{\mathrm{b}}\,\vec{\jmath} + \frac{\mathrm{l}}{c}\,\vec{k}\right) \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots.(2-1)$$

حيث أن $\vec{\imath}$, $\vec{\jmath}$, $\vec{k}$ تمثل وحدات المتجهات باتجاه محاور البلوره $\vec{\mathrm{a}}$, $\vec{\mathrm{b}}$, $\vec{\mathrm{c}}$.

أما أذا كانت محاور البلوره غير متعامده بعضها مع بعض فسيكون الحل أكثر تعقيدا من المعادلة (1-2) وذلك لانه في هذه الحاله $\vec{a}\,.\,\vec{b} \neq 0$ ولهذا نحتاج الى معرفة بعض المفاهيم الخاصة بالمتجهات في الفضاء المقلوب (Reciprocal space) والشبيكة المقلوبة او المعكوسة (Reciprocal lattice)

المـــادة: صلبة I

المرحلة : الثالثة

أ.د. نجاة احمد دحام

جامعـــة تكريـــت
كليـــــة العلـــوم
قسم علوم الفيزياء

الفصل الدراسي الثاني / المحاضره الاولى

(2-1) الشبيكة المقلوبة (Reciprocal lattice)

أن نظرية الشبيكه المقلوبة تعد من المفاهيم الاساسيه في علم البلورات وفي فيزياء الحاله الصلبة بحيث يمكن استخدامها للتعبير عن كل الظواهر التي تنتج من تفاعل الموجات في المواد الصلبة مثل الحيود والاستطاره وكذلك يمكن استعمال مفهوم الشبيكه المقلوبة في تفسير نظرية الحزم (Band theory) .

أن حيود الاشعه السينيه تنتج من أستطارتها من الذرات الواقعة ضمن اي مجموعة من المستويات المتوازية في البلوره ، فعليه من الصعب عمليا تعقب معرفة مصدر كل استطاره وذلك بسبب التداخل بين المستويات في البلوره فلاجل معرفة مصدر كل استطاره يمكن استخدام الشبيكة المقلوبة واظهار كل مجموعة من المستويات في البلوره بدلالة نقطة يطلق عليها بنقطة الشبيكة المقلوبة .

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

$$F\,(r+d) = F\,(r) \qquad (3\text{-}1)$$

أستطاع فورير أن يجزء هذه الداله الى مركبتين الاولى تدعى بالمركبه الجيبيه ($\sin(\alpha r)$) والثانيه تدعى بمركبة جيب تمام ($\cos(\alpha r)$) . ويمكن كتابة الداله بالصيغة (($\exp(I(\alpha r))$ حيث أن $\alpha = \frac{\mathbf{2\pi\, n}}{\mathbf{d}}$ وتمثل (n) عددا صحيحا بينما (d) المسافة البينية بين المستويات.

أن الداله النهائية والتي لها علاقة بالشبيكة المقلوبه هي :

$$F\,(r) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{f\,(n)\,exp}\left(\frac{2\,\pi\, i\, r}{d}\right) \mathrm{dr} \qquad (4-1)$$

ففي الحقيقه جاءت تسمية الشبيكة المقلوبة من خلال المعادلة اعلاه حيث نرى ان المسافة (d) بين المستويات تظهر في المعادلة بصورة مقلوبة.

لذا تعرف الشبيكة المقلوبة بأنها عدد غير محدود من نقاط مرتبه بنظام دوري في فضاء ثلاثي الابعاد بحيث أن الفسح بين هذه النقاط تتناسب عكسيا مع الفسح (المسافة البينيه) للمجاميع من السطوح في شبيكه اعتياديه او مباشره.

الفصل الدراسي الثاني / المحاضره الاولى

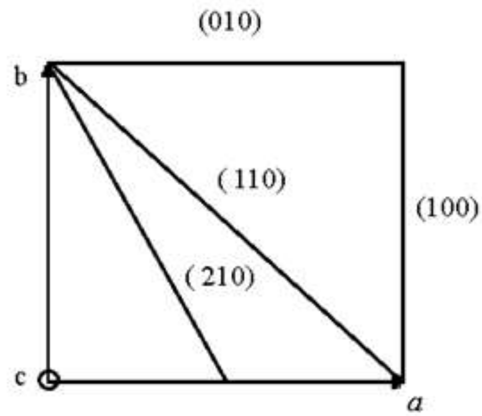
أن كل مجموعة من السطوح في بلوره تمثل بمتجهات من نقطة الاصل لشبيكة مقلوبة ، وكل متجه عمودي على تلك المجموعة من السطوح التي يمثلها وطوله يتناسب عكسيا مع الفسحة (d) لتلك المجموعة من السطوح ، وبعباره اخرى ، ان النقاط الواقعة عند نهايات تلك المتجهات العمودية تشكل نقاط الشبيكة المقلوبه لبلوره، تقاس أطوال المتجهات في الشبيكه المقلوبه بمقلوب وحدات المتجهات في الشبيكة المباشره كأن تكون (m^{-1}) أو (cm^{-1}) أو ($Å^{-1}$) .

(3-1) كيفية رسم (بناء) الشبيكه المقلوبه

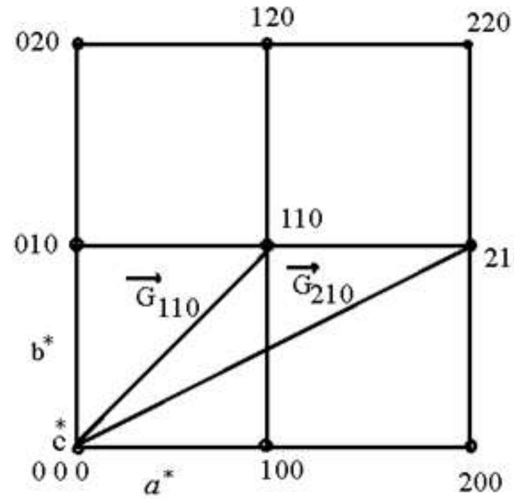
يبين الشكل (1-2) مجموعة الخطوط المستقيمه التي تمثل مستويات ذات احداثيات (010) و(100) و(110) و(210) مرسومة في بعدين. وتعود هذه المستويات الى خلية مكعبة عند النظر اليها على طول محورها المنفرد C بينما محوراها الاخران a و b ، فلأجل تعيين مواقع نقاط الشبيكة المقلوبة التي تناظر هذه المستويات نتبع الخطوات التالية:

1- أرسم من نقطة الاصل المشتركه 0 أحداثيات البلوره.
2- جد قيمة $\frac{1}{d_{hkl}}$ لكل مجموعة من المستويات المتوازية.
3- أرسم من نقطة الاصل عمود على المستوي ثم ضع نقطة على العمود تبعد عن نقطة الاصل بمسافة $\frac{1}{d_{hkl}}$.
4- يبين الشكل (1-3) مجموعة من النقاط التي تمثل المستويات والتي يطلق عليها بمقلوب الشبيكة.

الفصل الدراسي الثاني / المحاضره الاولى



الشكل (1-2)



الشكل(1-3)

أن أتجاه وطول المتجه الذي يربط نقطة الاصل بأية نقطة يميز توجيه وفسحة تلك المجموعة من السطوح التي تمثلها النقطة . أن مثل هذا المتجه يسمى بمتجه الشبيكة المقلوبة وسنرمز له بالرمز $\vec{G}$ ولذلك تكون قيمة $\vec{G}$ هي :

$$|\vec{G}| = A\,\frac{1}{d_{hkl}} \qquad \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (5-1)$$

حيث أن A يمثل عامل مقياس الرسم وقيمته أما واحد أو (2π) ونحن سنختار قيمة A تساوي ($A = 2\pi$).

(4-1