1-2-1 الشبيكة والتماثل الازاحي

تتكون البلورة المثالية من تكرار منظم لوحدات بناء متماثلة في النوع والشكل والاتجاه. وتسمى وحدة البناء الواحدة (الوحدة الأساسية basis)، وهي قد تكون ذرة واحدة أو جزيء واحد أو مجموعة من الذرات أو الجزيئات. ويسهل علينا دراسة وفهم الخصائص الفيزيائية للبلورات إذا افترضنا وجود هذا التكرار المنتظم لوحدات البناء على هيئة شبيكة في الفضاء الثلاثي. ونعرّف الشبيكة بأنها مجموعة لا نهائية من النقاط المنتشرة في الفضاء بشكل دوري منتظم بحيث تكون البيئة حول أي نقطة منها مماثلة للبيئة حول أي نقطة أخرى، أي أن الصورة التي تشاهدها عندما تكون عند نقطة ما تتطابق تماماً مع الصورة عند أي نقطة أخرى. وترتبط هذه النقاط داخل الشبيكة بمتجهات إزاحية (Translation Vectors)، فالنقطتان r, r´ مثلاً يربطهما المتجه T كما يلي:

$$r' = r + n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c} = r + T \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (1-8)$$

حيث تمثل المتجهات $\vec{a},\vec{b},\vec{c}$ أصغر المسافات بين النقاط المتجاورة في الأبعاد الثلاثة (X,Y,Z)، وتسمى بالمتجهات الأولية (primitive vectors). فالشبيكة أذن مفهوم رياضي تخيلي، ويتكون البناء البلوري عندما توضع الوحدة البنائية (basis) على كل نقطة من نقاط الشبيكة، أي أن

البناء البلوري = الشبيكة + الوحدة البنائية

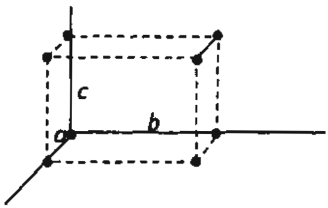
وعندما نريد وصف البناء البلوري علينا أن نحدد أولاً ما هي الشبيكة، ثم نحدد المتجهات الأولية $\vec{a},\vec{b},\vec{c}$ والزوايا بينها وبعد ذلك نختار الوحدة البنائية التي توضع عند كل نقطة في الشبيكة.

وتسمى الشبيكة المعرفة بالعلاقة (8-1) بشبيكة برافس (Bravias) والتي ترتبط نقاطها بالمتجهات الإزاحية.

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

حيث n_1,n_2,n_3 أعداد موجبة أو سالبة

أما حجم متوازي المستطيلات (parallelepiped) الذي تكون المتجهات الأولية اضلاعاً له فهو يساوي $\Omega = \vec{a}.(\vec{b}\times\vec{c})$ ، ويسمى بالخلية الأولية (primitive cell). وهو يمثل أصغر حجم ممكن داخل الشبيكة.



ومن تعريف المتجه الإزاحي T نرى بأن اختيار مجموع المتجهات الأولية (a,b,c) ليس اختياراً وحيداً لا ثاني له، بل يمكن لنا أن نصف شبيكة برافس باختيار مجموعة أخرى من المتجهات الأولية مثل (a',b',c') بدلاً من (a, b, c) على أن ترتبط المجموعتان بالعلاقة:

$$a' = \alpha_{11}\vec{a} + \alpha_{12}\vec{b} + \alpha_{13}\vec{c}$$

$$b' = \alpha_{21}a + \alpha_{22}b + \alpha_{23}c$$

$$c' = \alpha_{31}a + \alpha_{32}b + \alpha_{33}c$$

أي أن:

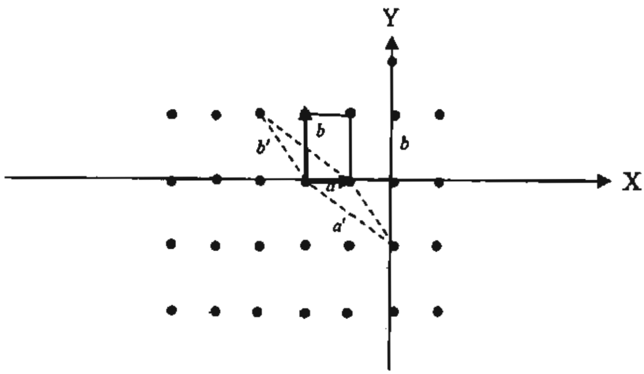
$$\begin{pmatrix} a' \\ b' \\ c' \end{pmatrix} = (M)\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (1\text{–}9)$$

حيث α_{ij} أعداد صحيحة، وقيمة المحدد (determinant) للمصفوفة M تساوي الواحد أي $|M| = 1$. كما أن M^{-1} هي أيضاً مصفوفة من أعداد صحيحة وقيمة المحدد لها تساوي الواحد. وعليه فالمجموعتان متكافئتان في وصف الشبيكة. ويظهر أيضاً مما سبق بأن حجم الخلية الأولية في المجموعة الأولى يساوي حجمها في المجموعة الثانية

$$\Omega = \vec{a}.(\vec{b} \times \vec{c}) = \vec{a}'.(\vec{b}' \times \vec{c}') \ \dots\dots\dots\dots\dots\dots \ (1\text{–}10)$$

أي أن حجم الخلية الأولية لا يعتمد على اختيار المتجهات الأولية، ولذا يفضل اختيار الخلية الأولية التي تتمتع بأكبر قدر من التماثل في الفضاء.

وحتى نوضح هذه المفاهيم نأخذ مثالاً لشبيكة مستطيلة ذات بعدين فقط، وفيها متجهان أوليان هما $\vec{a}, \vec{b}$ (انظر الشكل 1.7)



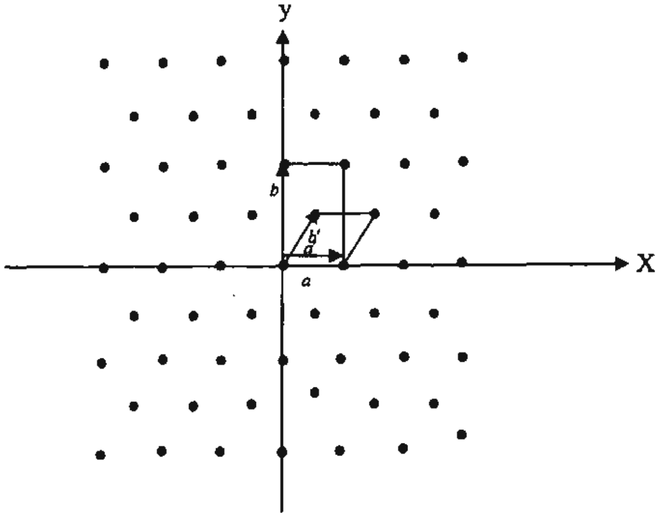
الشكل (1.7)

والمتجهان $\vec{a}, \vec{b}$ هما $b=(0,b,0)$, $a=(a,0,0)$، ويمكن اختيار متجهين آخرين لوصف نفس الشبيكة (كما هو مبين في الشكل) هما $b' = (-a,b,0)$ ، $a' = (2a,-b,0)$ ومن الواضح أن المجموعتين مرتبطتان بالمصفوفة M كما يلي:

$$\begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

حيث أن محدد المصفوفة يساوي واحداً. ويظهر من الشكل بأن المجموعتين متكافئتان، وأن حجم الخلية الأولية هو نفسه في الحالتين. ولكن الاختيار الأول أفضل لان الخلية الأولية فيه مستطيلة، بينما الخلية الأولية مائلة الأضلاع في الاختيار الثاني. والخلية الأولية هي أصغر حجم ممكن ضمن الشبيكة، وهي تشتمل على نقطة واحدة فقط من نقاط الشبيكة. ففي المثال السابق نرى بأن النقطة الواحدة مشتركة بين أربع خلايا أولية متجاورة. لذا فإن الخلية الأولية الواحدة تشتمل على ¼ نقطة من كل زاوية من الزوايا الأربع وهي بذلك تشتمل على نقطة واحدة. ومن تكرار الخلية الأولية في الفضاء تتكون البلورة كاملة، ولهذا فإن للخلية الأولية أهمية خاصة في الحسابات النظرية لتحديد الحالات الكمية للإلكترونات، وفي تعريف مناطق برلوان.

ومن الشكل (1.8) نرى بأن جميع نقاط الشبيكة يمكن أن توصف باستخدام خلايا غير أولية تسمى خلايا عادية (conventional). وهي أكبر من الخلية الأولية، بل هي تشتمل على عدد صحيح من الخلايا الأولية، وعلى عدد مماثل من نقاط الشبيكة. وكمثال على ذلك نأخذ شبيكة مستطيلة ذات نقطة مركزية (أنظر الشكل) (مع نقطة في مركز المستطيل)



الشكل (1.8)

وفي هذا الشكل نختار المتجهات الأولية: $a'=(a,0,0)$ ، $b'=\left(\dfrac{a}{2},\dfrac{b}{2},0\right)$

ويكون حجم الخلية الأولية يساوي $\dfrac{ab}{2}$ وهو أصغر حجم ممكن في هذه الشبيكة. ويمكن كذلك أن نصف الشبيكة باختيار خلية أخرى مستطيلة الشكل مساحتها ضعف مساحة الخلية الأولية ويوجد في مركز المستطيل نقطة ثانية من نقاط الشبيكة. أما متجهات هذه الخلية العادية فهي $b=(0,b,0)$, $a=(a,0,0)$ وهي ترتبط مع المتجهات الأولية بالمصفوفة

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix}$$

وقيمة المحدد لهذه المصفوفة يساوي $|M|=2$ وليس واحداً، اذ أن الخلية العادية تشتمل على خليتين أوليتين وعلى نقطتين من نقاط الشبيكة.

وتساعد الخلية العادية في الوصف التصويري لكثير من البلورات، ولكنها لا تمثل الوحدة البنائية الصغرى التي بتكرارها تتكون البلورة. وفي كثير من

المعالجات التي تعتمد على التماثل الازاحي يجب استخدام الخلية الأولية والمتجهات الأولية وليس العادية.

أما عدد أنواع شبائك (lattices) برافس في فضاء ذي بعدين أوفي فضاء ذي ثلاثة أبعاد فيعتمد على أنواع عمليات التماثل (symmetry operations) الانتقالية أو الدورانية أو الانعكاسية التي تجعل الشبيكة في حالةٍ تُماثل تماماً الحالة التي كانت فيها قبل إجراء العملية. وعمليات الانتقال تكون باستخدام المتجه T، أما العمليات الدورانية فتكون بإدارة الشبيكة حول محور يمر في إحدى نقاط الشبيكة بزاوية معينة. وقد وجد أن العمليات الدورانية التي تجعل الشبيكة لا تتغير هي الدوران بزاوية $\left(\frac{2\pi}{n}\right)$ حيث n=1,2,3,4,6، ولا يمكن لشبيكة أن تعود كما كانت عند تدويرها بزاوية تساوي $\left(\frac{2\pi}{5}\right)$ أو $\left(\frac{2\pi}{7}\right)$. أما عمليات الانعكاس فهي تلك التي تبدو فيها الشبيكة مماثلة لصورتها في مستوى يمر بإحدى نقاط الشبيكة.

وإذا أردنا بناء شبيكة لا تتغير تحت تأثير بعض هذه العمليات أو كلها فلا بد من وضع بعض القيود على المتجهات الأولية a,b,c والزوايا بينها. وقد أمكن تحديد خمسة أنواع من الشبائك في الفضاء ذي البعدين:

الشبيكة المربعة	$\varphi = 90^\circ$	$\lvert a\rvert = \lvert b\rvert$
الشبيكة المستطيلة	$\varphi = 90^\circ$	$\lvert a\rvert \neq \lvert b\rvert$
الشبيكة المستطيلة ذات المركز	$\varphi = 90^\circ$	$\lvert a\rvert \neq \lvert b\rvert$
الشبيكة السداسية	$\varphi = 120^\circ$	$\lvert a\rvert = \lvert b\rvert$
الشبيكة المائلة (oblique)	$\varphi \neq 90^\circ$	$\lvert a\rvert \neq \lvert b\rvert$