الفصل الثاني
الشبيكة المقلوبة وحيود الأشعة عن البلورات

الفصل الثاني
الشبيكة المقلوبة وحيود الأشعة عن البلورات

2–1 الشبيكة المقلوبة (*Reciprocal Lattice*)

لما كانت البلورات تتصف بالتماثل الإزاحي، فإن كثيرًا من الخواص الفيزيائية، مثل الكثافة الإلكترونية أو الجهد الكهربائي بين الذرات، يكون لها نفس القيمة في كل خلية من خلايا البلورة. أي أن قيم هذه الخواص تتكرر بانتظام من خلية إلى أخرى. ويعني ذلك أننا نستطيع وصف هذه الخواص بواسطة دوال دورية منتظمة تحقق الشرط:

$$F(r + T) = F(r) \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (2.1)$$

لجميع قيم r وقيم T (متجه إزاحي) في فضاء الشبيكة.

ويمكن أن ننشر هذه الدوال الدورية على هيئة متوالية فوريية (Fourier Series) من دوال جيبية أو أسية. ولو أخذنا دالة دورية تكرر نفسها بانتظام كل مسافة مقدارها "d" في بعد واحد، أي $F(x + d) = F(x)$، فإنه يمكن نشرها على النحو:

$$F(x) = \sum C_n e^{\frac{2\pi n}{d} i x} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (2.2)$$

حيث n عدد صحيح. وللبلورة في ثلاثة أبعاد فإن الدالة الدورية F(r) يمكن نشرها على النحو

$$F(r) = \sum_G C_G e^{iG\cdot r} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (2.3)$$

ومن الشرط (2.1) نجد أن مجموعة المتجهات $\vec{G}$ يجب أن تحقق الشرط

$$e^{iG.T} = 1 \;\dots\dots\dots\dots\dots\dots\; (2.4)$$

أو بمعنى آخر $G.T = 2\pi$ (عدد صحيح)

وحيث أن مجموعة المتجهات T تشكل شبيكة ثلاثية الأبعاد، فإن مجموعة المتجهات G تشكل أيضاً شبيكة ثلاثية الأبعاد ولكن وحداتها هي مقلوب وحدات الطول (m^{-1}). ومن هنا جاء أسم الشبيكة المقلوبة التي تمثلها المتجهات G.

وعليه فإن دراسة البلورات فيزيائيًا تقتضي أن نُعرف شبيكة مقلوبة في فضاء مقلوب إضافة إلى الشبيكة العادية في الفضاء العادي.

ولو أخذنا بلورة عادية ومتجهاتها الأولية هي $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ فإننا نعرف المتجهات الأولية للشبيكة المقلوبة المناظرة لها على النحو $\vec{g}_1, \vec{g}_2, \vec{g}_3$ بحيث أن

$$\vec{a}_i.\vec{g}_j = 2\pi\delta_{ij} \;\dots\dots\dots\dots\dots\dots\; (2.5)$$

(حيث $i \neq j \quad \delta_{ij} = 0 \quad , \quad i = j \quad \delta_{ij} = 1$)

ويظهر من هذا التعريف بأن المتجه g_1 يكون متعامدًا مع كل من $\vec{a}_2, \vec{a}_3$ أي أنه يكون موازيًا للمتجه $\vec{a}_2 \times \vec{a}_3$. بينما تحدد العلاقة $a_1 . g_1 = 2\pi$ قيمة g_1. وبنفس الطريقة نحدد المتجهات الأخرى، فنحصل على التعريف:

$$\vec{g}_1 = \frac{2\pi}{\Omega}\vec{a}_2 \times \vec{a}_3 \quad , \quad \vec{g}_2 = \frac{2\pi}{\Omega}\vec{a}_3 \times \vec{a}_1 \quad , \quad \vec{g}_3 = \frac{2\pi}{\Omega}\vec{a}_1 \times \vec{a}_2 \;\dots\dots\; (2.6)$$

حيث Ω هو حجم الخلية الأولية في الشبيكة العادية $\Omega = \vec{a}_1.(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$.

وعليه فإن جميع النقاط التي تمثلها المتجهات (g_m) تشكل الشبيكة المقلوبة

$$g_m = m_1\vec{g}_1 + m_2\vec{g}_2 + m_3\vec{g}_3 \;\dots\dots\dots\dots\dots\dots\; (2.7)$$

حيث m_1,m_2,m_3 أعداد صحيحة

ومن الواضح من هذا التعريف أن حاصل ضرب أي متجه من الشبيكة المقلوبة مع أي متجه من الشبيكة العادية يساوي:

$$g_m.r_n=(m_1g_1+m_2g_2+m_3g_3).(n_1a_1+n_2a_2+n_3a_3)$$
$$=2\pi\ (\text{عدد صحيح})\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ (2.8)$$

كما أن أي متجه $\vec{q}$ يحقق هذه العلاقة (($\vec{q}.r_n=2\pi$ (عدد صحيح)) يجب أن يكون واحدًا من متجهات الشبيكة المقلوبة.

ومن الجدير بالملاحظة هنا أن المتجه الموجي $\vec{k}$ للأمواج الكهرومغناطيسية المستوية الممثلة بالدالة $e^{i\vec{k}.\vec{r}}$ له وحدات الطول المقلوب (m^{-1}) ويمكن تمثيله في الفضاء المقلوب ($\vec{g}_m$). ويكون للأمواج الكهرومغناطيسية المستوية خاصية الدورية التي للشبيكة إذا كان المتجه الموجي يساوي أحد المتجهات في الشبيكة المقلوبة، أي أنه أذا كان $\vec{k}=\vec{g}_m$ فإن

$$F(r)=e^{ik.r}=e^{ig_m.r}=e^{ig_m.(r+r_n)}=e^{ig_m.r}.e^{ig_m.r_n}=e^{ig_m.r}$$

أي أن الدالة الموجية F(r) لا تتغير إذا انتقلنا من $\vec{r}\to\vec{r}+\vec{r}_n$.

وكما أن حجم الخلية الأولية في الشبيكة العادية $\Omega=a_1.(a_2\times a_3)$ هو أصغر حجم فيها، فإن حجم الخلية الأولية في الشبيكة المقلوبة هو أيضًا كذلك وهو يساوي:

$$\Omega_k=g_1.(g_2\times g_3)$$
$$=\frac{(2\pi)^3}{\Omega^3}\,\bar{a}_2\times\bar{a}_3.[(a_3\times a_1)\times(a_1\times a_2)]$$
$$=\frac{(2\pi)^3}{\Omega^3}\,(a_2\times a_3.a_1)^2=\frac{(2\pi)^3}{\Omega}\ \ldots\ldots\ (2.9)$$

حيث استخدمت علاقة الضرب الاتجاهي لضرب ثلاث متجهات

$\vec{A}\times\vec{B}\times\vec{C}=\vec{B}(\vec{A}.\vec{C})-\vec{C}(\vec{A}.\vec{B})$.

أي أن حجم الخلية الأولية في الشبيكة المقلوبة يتناسب مع مقلوب حجم الخلية الأولية في الشبيكة العادية.

2-1-1 الشبيكة المقلوبة لبعض البلورات

– من السهل أن تجد بأن الشبيكة المقلوبة للشبيكة المكعبة البسيطة (sc) هي أيضا مكعبة بسيطة حيث أن

$$\vec{a}_1=a(1,0,0)$$
$$a_2=a(0,1,0)$$
$$a_3=a(0,0,1)$$

وباستخدام تعريف المتجهات الأولية للشبيكة المقلوبة فإننا نحصل على:

$$g_1=\frac{2\pi}{a}(1,0,0)\qquad g_2=\frac{2\pi}{a}(0,1,0)\qquad g_3=\frac{2\pi}{a}(0,0,1)$$

أي أن الشبيكة المقلوبة مكعبة أيضاً وضلع المكعب فيها $\left(\frac{2\pi}{a}\right)$ وحجم الخلية الأولية $\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$.

– أما الشبيكة المكعبة مركزية الوجه (fcc) فإن

$$a_1=\frac{a}{2}(0,1,1)\quad a_2=\frac{a}{2}(1,0,1)\quad a_3=\frac{a}{2}(1,1,0)$$

وباستخدام (2.6) نحصل على

$$g_1=\frac{2\pi}{a}(-1,1,1)\qquad g_2=\frac{2\pi}{a}(1,-1,1)\qquad g_3=\frac{2\pi}{a}(1,1,-1)$$