أي أن الشبيكة المقلوبة المناظرة للنوع (fcc) هي مكعبة مركزية الحجم (bcc)

- أما إذا كانت الشبيكة العادية من النوع (bcc) فإن الشبيكة المقلوبة المناظرة لها هي من النوع (fcc).

- ولو أخذنا شبيكة سداسية عادية فإن

$$a_1 = a\left(\frac{1}{2},\frac{\sqrt{3}}{2},0\right),\ a_2 = \left(-\tfrac{1}{2},\frac{\sqrt{3}}{2},0\right),\ a_3 = c\left(0,0,1\right)$$

وتكون المتجهات الأولية للشبيكة المقلوبة

$$g_1 = \frac{2\pi}{a}\left(1,\frac{1}{\sqrt{3}},0\right),\ g_2 = \frac{2\pi}{a}\left(-1,\frac{1}{\sqrt{3}},0\right),\ g_3 = \frac{2\pi}{c}\left(0,0,1\right)$$

أي أن الشبيكة المقلوبة هي أيضاً شبيكة سداسية

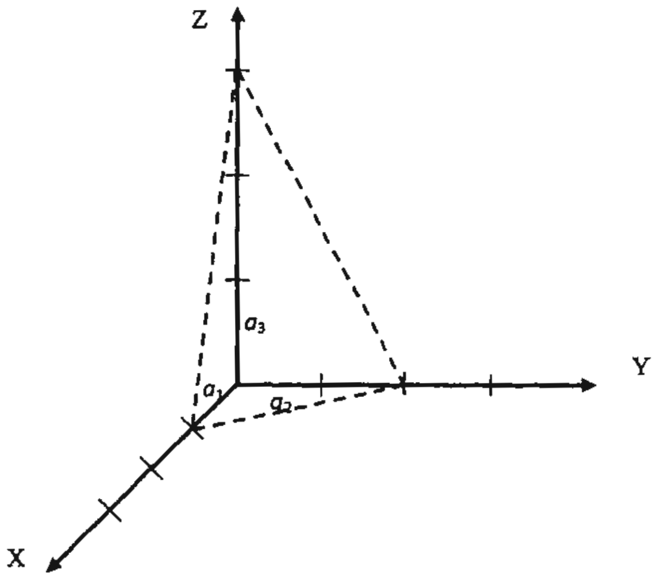
وسوف تظهر لنا أهمية الشبيكة المقلوبة عند دراسة تشتت الأشعة السينية عند المستويات البلورية داخل البلورة العادية.

2-1-2 المستويات البلورية وترقيمها

يعرف المستوى البلوري بأنه ذلك المستوى الذي يحتوي على ثلاث نقاط ليست على خط مستقيم من نقاط الشبيكة. وسوف نضع ترقيماً لهذه المستويات البلورية بحيث يساعدنا في فهم نتائج حيود الأشعة عن البلورات.

ونبدأ أولاً بتحديد المحاور البلورية الثلاثة $\vec{a}_1,\vec{a}_2,\vec{a}_3$ (المتجهات الأولية). ثم نجد نقاط تقاطع المستوى البلوري مع هذه المحاور الثلاثة أي n_1a_1 على المحور الأول، n_2a_2 على المحور الثاني، n_3a_3 على المحور الثالث حيث n_1,n_2,n_3 أعداد صحيحة (انظر الشكل 2.1).

وعلى سبيل المثال فإن المستوى في الشكل المجاور يقطع المحاور الثلاثة في النقاط $1a_1, 2a_2, 3a_3$



الشكل (2.1)

نأخذ الآن مقلوب هذه الأعداد الصحيحة فنحصل على $\left(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}\right)$ ، ثم نضرب الآن بعدد صحيح آخر لنحصل على أبسط ثلاثة أعداد. وفي المثال السابق نضرب بالعدد 6 لنحصل على $(6,3,2)$ وهي أبسط الأعداد الممكنة التي لا يمكن اختصارها ، فتكون هذه الأعداد $(6,3,2)$ هي الرقم المعتمد للمستوى البلوري المبين في الشكل.

ويتضح مما سبق أن خطوات عملية الترقيم هي:

1) نجد نقاط تقاطع المستوى مع المحاور الثلاثة n_1a_1, n_2a_2, n_3a_3

2) نأخذ مقلوب الأعداد $\frac{1}{n_1},\frac{1}{n_2},\frac{1}{n_3}$ ثم نضرب بعدد صحيح p بحيث يكون الناتج هو أبسط ثلاثة أعداد، أي $\frac{p}{n_1},\frac{p}{n_2},\frac{p}{n_3}$ وتسمى هذه الأعداد الثلاثة برموز ميلر (Miller indices)، ونرمز لها بالحروف h,k,l أي $(h,k,l)\equiv\left(\frac{p}{n_1},\frac{p}{n_2},\frac{p}{n_3}\right)$. وتوصف جميع هذه المستويات المتوازية بمجموعة الأرقام h,k,l.

وعندما يقطع المستوى أحد المحاور في الجانب السالب، توضع إشارة سالب فوق الرقم (مثلاً $h,\bar{k},l$). كما أن مجموعة المستويات المتشابهة في خاصية التماثل البلوري يرمز لها هكذا $\{h,k,l\}$، ففي البلورة المكعبة مثلاً تشتمل المجموعة $\{1,1,1\}$ على المستويات:

$$(1,1,1),\ (\bar{1},\bar{1},\bar{1}),(\bar{1},\bar{1},1),(\bar{1},1,\bar{1}),(1,\bar{1},\bar{1}),(\bar{1},1,1),(1,\bar{1},1),(1,1,\bar{1})$$

وعندما لا يقطع المستوى أحد المحاور الثلاثة (أي يكون موازياً له) فإن نضع نقطة التقاطع تساوي ∞، وبالتالي فإن أحد رموز ميللر لهذا المستوى يكون مساوياً للصفر $\left(\frac{1}{\infty}\right)$، أي $(h,0,l)$ مثلاً.

أما الرموز التي تستخدم لتحديد اتجاه ما داخل البلورة فهي $[u,\upsilon,\omega]$، وهي تمثل مجموعة أصغر الأعداد الصحيحة التي تحدد مركبات المتجه (في الاتجاه المطلوب) بالنسبة للمحاور الثلاثة. فالاتجاه [100] مثلاً هو المحور الأول $\bar{a}_1$. أما الاتجاه [110] في البلورة المكعبة فهو اتجاه القطر في أحد وجوه المكعب. ونظراً لتكافؤ هذه الاتجاهات في البلورة فإن المجموعة:

$$[110],[1\bar{1}0],[\bar{1}10],[\bar{1}\bar{1}0],[101],[\bar{1}01],[011],[0\bar{1}1],\ldots..$$

وهي اثنا عشر اتجاهاً يرمز لها عادة بالرمز $\langle 110 \rangle$.

وبعد هذا التعريف بترميز ميللر للمستويات البلورية وللاتجاهات داخل البلورة فإننا نستطيع أن نبين العلاقات التالية التي تجعل الشبيكة المقلوبة ذات أهمية خاصة في فهم حيود الأشعة:

- إن كل متجه من المتجهات الأولية $\vec{g}_1, \vec{g}_2, \vec{g}_3$ في الشبيكة المقلوبة يعامد مجموعة المستويات التي يحددها أي زوج من المتجهات الأولية في الشبيكة العادية، فمثلاً يكون المتجه g_1

$$\vec{g}_1 = \frac{2\pi}{\Omega}(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$$

معامداً لكل من $\vec{a}_2, a_3$ (ولكن ليس بالضرورة موازياً للمتجه $\vec{a}_1$ إلا في البلورات المكعبة)، وبالتالي فهو يعامد جميع المستويات التي يحددها المتجهان $\vec{a}_2, \vec{a}_3$. كما أن طول هذا المتجه يتناسب مع مقلوب المسافة بين المستويات البلورية المتجاورة، وذلك لأن $\vec{a}_2 \times \vec{a}_3$ يساوي مساحة القاعدة في الخلية الأولية فيكون الارتفاع العامودي للخلية الأولية يساوي $\left(\frac{\Omega}{a_2 \times a_3}\right)$ أي يساوي $\frac{2\pi}{|g_1|}$، وهذا الارتفاع العامودي للخلية هو المسافة بين المستويات المتجاورة.

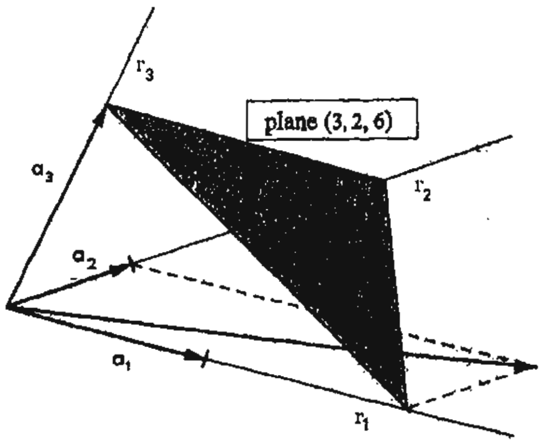
- وبشكل عام فإن المتجه $\vec{G}$ في الشبيكة المقلوبة الذي يصل من نقطة الأصل (origin) إلى النقطة (h,k,l) في الشبيكة المقلوبة يكون عامودياً على المستوى البلوري (h,k,l) في البلورة العادية، أي أن المتجه

$$G = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\,\vec{g}_3$$

يعامد المستوى البلوري ذي الرموز (h,k,l). وتوضيحاً لذلك أنظر الشكل (2.2) حيث يقطع المستوى البلوري المظلل محاور المتجهات الأولية عند النقاط

$$r_1 = 2a_1$$
$$r_2 = 3a_2$$
$$r_3 = a_3$$

أي أن مقلوب هذه القيم هو $\frac{1}{2},\frac{1}{3},1$ ، وعليه فإن رموز ميللر لهذا المستوى البلوري هي $(h,k,l) \equiv (3,2,6)$.



الشكل (2.2): المستوى البلوري (3,2,6)

ونلاحظ أن المتجه $\vec{G} = 3\vec{g}_1 + 2\vec{g}_2 + 6\vec{g}_3$ في الشبيكة المقلوبة يعامد المستوى المبين في الشكل حيث أن $\vec{G}.(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \vec{G}.(r_2 - r_3) = 0$

فهو (أي $\vec{G}$) يعامد المستوى الذي يشتمل على كل من $(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ ، $(\vec{r}_2 - \vec{r}_3)$.

وبشكل عام فإن المتجه

$$r = n_1\vec{a}_1 - n_2\vec{a}_2$$
$$= p\left(\frac{\vec{a}_1}{h} - \frac{\vec{a}_2}{k}\right)$$

يقع ضمن المستوى المذكور، كما أن المتجه $r' = p\left(\frac{a_2}{k} - \frac{a_3}{\ell}\right)$ يقع أيضاً ضمن هذا المستوى.

وهما (أي r, r') يعامدان المتجه $\vec{G}$ ، وبالتالي فإن $\vec{G}$ يعامد المستوى.

- ويمكن أيضاً الحصول على نتيجة أخرى من هذا التحليل وهي أن طول المتجه $\vec{G}$ يساوي مقلوب المسافة بين المستويات (h,k,l) المتجاورة. فلو أخذنا وحدة المتجه المعامد للمستوى أي $\vec{n} = \frac{\vec{G}}{|G|}$ فإن حاصل الضرب

$$\vec{n}.\left(\frac{p}{h}\right)\vec{a}_1 = \vec{n}.\left(\frac{p}{k}\right)\vec{a}_2 = n.\left(\frac{p}{l}\right)\vec{a}_3$$

يساوي المسافة العامودية بين المستويات، أي أن

$$d_{hkl} = \vec{n}.\left(\frac{p}{h}\right)a_1 = \left(\frac{p}{h}\right)\frac{\vec{G}}{|G|}.a_1 = \frac{2\pi\, p}{|G|} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (2.10)$$

أي أن المسافة بين مستويين متجاورين في البلورة العادية الأصلية تتناسب مع مقلوب القيمة المطلقة للمتجه G من الشبيكة المقلوبة والذي يعامد هذه المستويات.

في ضوء ما تقدم فقد أصبح لدينا آلية رياضية تسهل علينا الولوج إلى موضوع حيود الأشعة عن البلورات وتفسير نماذج الحيود (Patterns) التي نحصل عليها تجريبياً عندما تتشتت الأشعة عن عينات مختلفة من البلورات من أجل تحديد نوع البناء البلوري لها.

2-2 حيود الأشعة

تستخدم تجارب حيود الأشعة عن البلورات للحصول على معلومات دقيقة وشاملة نسبياً عن البناء البلوري والمستويات البلورية وترتيب الذرات داخل البلورة.