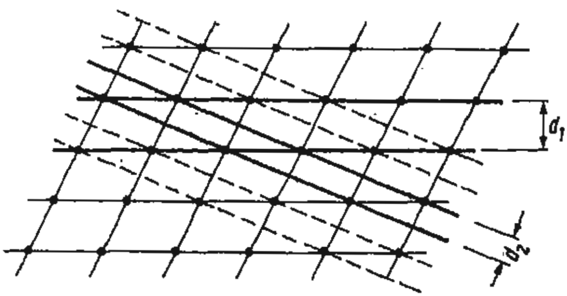
وتُستنبط هذه المعلومات من نماذج حيود الأمواج بعد تفاعلها مع الذرات المرتبة بشكل دوري منتظم، على أن يكون الطول الموجي لهذه الأمواج من نفس رتبة المسافة الفاصلة بين الذرات. وفي هذه الحالة تلعب البلورة (من خلال ذراتها المرتبة بانتظام) دور محززة الحيود (diffraction grating) في الفضاء الثلاثي، ويكون ثابت المحززة (المسافة بين ثقبين متجاورين) هو المسافة بين المستويات البلورية المتجاورة والمارة في مواضع الذرات حسب ميلان هذه المستويات بالنسبة لمحاور البلورة الأولية (انظر الشكل 2.3)



الشكل (2.3): مجموعتان من المستويات البلورية المتوازية في شبيكة ثنائية الأبعاد

أما الأشعة المستخدمة في إجراء تجارب الحيود عن البلورات فهي إما الأشعة السينية (أمواج كهرومغناطيسية) أو أشعة إلكترونية (أمواج دي برويلي) أو أشعة نيوترونية.

ويعتمد الطول الموجي لهذه الأشعة على طاقة الفوتونات (x–rays) أو طاقة الإلكترونات أو طاقة النيوترونات:

- وفي حالة الأشعة السينية فإن طاقة الفوتون E تساوي $E = \frac{hc}{\lambda}$ أي أن الطول الموجي $\lambda = \frac{hc}{E}$ وبالتعويض نجد أن $\lambda(A^\circ) = \frac{12.4}{E(keV)}$. وعليه فإن طاقة الفوتونات اللازمة لدراسة البناء البلوري تتراوح ما بين 10–40 keV.
- وفي حالة استخدام الأشعة الإلكترونية فإن طاقة الإلكترون تعتمد على طول موجة دي برويلي على النحو $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$ ، وبعد التعويض نجد أن $\lambda(A^\circ) = \frac{12}{[E(eV)]^{1/2}}$ اي أن طاقة الإلكترونات يجب أن تكون في المدى 100–200 eV.
- أما في الأشعة النيترونية فإن طاقة النيوترون تعتمد على الطول الموجي على النحو $E = \frac{h^2}{2M\lambda^2}$ حيث M كتلة النيوترون. وبالتعويض نجد أن $\lambda(A^\circ) = \frac{0.28}{[E(eV)]^{1/2}}$ ولو أردنا طولاً موجياً يساوي $1A^\circ$ فإن الطاقة الحركية للنيوترونات تكون في حدود 0.08 eV.

وجميع هذه الأشعة تتفاعل مع الترتيب الدوري المنتظم للذرات داخل الشبيكة وتخضع لنفس القوانين الهندسية (المستويات البلورية والمسافات بينها)، ولكن لكل منها خصائص مميزة تجعلها أكثر ملائمة للاستخدام في ظروف معينة.

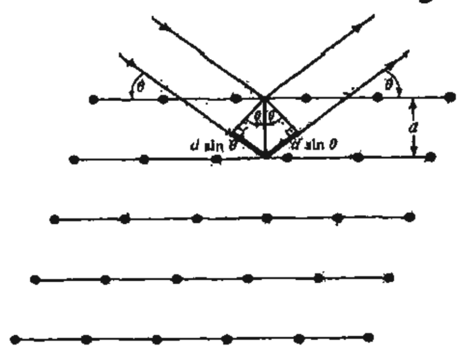
فالأشعة السينية ذات طاقة عالية ويمكنها اختراق البلورة إلى مسافات كبيرة تحت السطح، وهي تعتمد لذلك في دراسة البناء البلوري في الفضاء الثلاثي، كما أن هذه الأشعة تتفاعل مع السحابة الإلكترونية حول النواة، ولكنها لا تتأثر بالنواة الثقيلة للذرة.

أما الأشعة الإلكترونية فتتفاعل مع السحابة الإلكترونية، ولكن بسبب الشحنة الكهربائية للإلكترونات لا يمكنها الدخول إلى مسافات كبيرة تحت

السطح وهي تُفضَّل غيرها في الدراسات السطحية (Surface Studies). ولما كانت النيوترونات تمتلك عزماً مغناطيسياً وليس لها شحنة كهربائية فإنها تكون أفضل من غيرها في دراسة المواد المغناطيسية حيث نستطيع من دراسة نماذج حيودها الحصول على صورة واضحة لكيفية توزيع العزوم المغناطيسية داخل البلورة. كما أنها تصلح أيضاً لدراسة البناء البلوري لبعض العناصر الخفيفة لأنها تتفاعل مباشرة مع النواة ولا تتأثر بالسحابة الإلكترونية.

2-2-1 قانون براغ (*Bragg's Law*)

اقترح العالم (W.L.Bragg) في بداية القرن العشرين نموذجاً سهلاً وتفسيراً بسيطاً لظاهرة حيود الأشعة عن البلورات. فقد افترض بأن الأشعة الساقطة على البلورة تنعكس عن المستويات البلورية(كما تنعكس الأشعة عن سطح المرآة) بحيث يعكس كل مستوى من هذه المستويات المتوازية (كالمجموعة h,k,l مثلاً) جزءاً يسيراً من الطاقة الإشعاعية (10^{-4} – 10^{-3}) . وعندما يحصل أن تتداخل هذه الأشعة المنعكسة عن جميع هذه المستويات المتوازية تداخلاً بنائياً تظهر نقطة بارزة أو قمة واضحة في نموذج الحيود. ويتم هذا التداخل البنائي إذا كان فرق المسار بين الشعاعين المنعكسين عن مستويين متجاورين مساوياً لعدد صحيح من الطول الموجي للأشعة (انظر الشكل 2.4).



الشكل (2.4): صورة براغ لانعكاسات الأشعة عن مجموعة من المستويات المتوازية.

أي أن شرط التداخل البنائي بين الأشعة المنعكسة هو

$$2d\sin\theta = n\lambda \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (2.11)$$

حيث d هي المسافة بين مستويين متجاورين، θ الزاوية التي تصنعها الأشعة الساقطة مع المستويات البلورية. وتسمى هذه العلاقة بقانون براغ. ويعني ذلك أن نختار قيمة كل من θ, λ بحيث تتفقان في تحقيق المعادلة السابقة. ونستطيع انجاز ذلك تجريبياً أما بتثبيت قيمة λ وإدارة البلورة أمام الأشعة بحيث تواجه الأشعة جميع المستويات البلورية بزوايا مختلفة، أو بتثبيت وضع البلورة وتغيير الطول الموجي تدريجياً حتى يتحقق الشرط (2.11). ومن الواضح أن قانون براغ لا يتحقق إلا عندما يكون الطول الموجي للأشعة $\lambda \leq 2d$ ، ولذا لا نستطيع استخدام الأشعة الضوئية العادية، بل يجب استخدام أشعة اكس حتى تكون λ من نفس رتبة d.

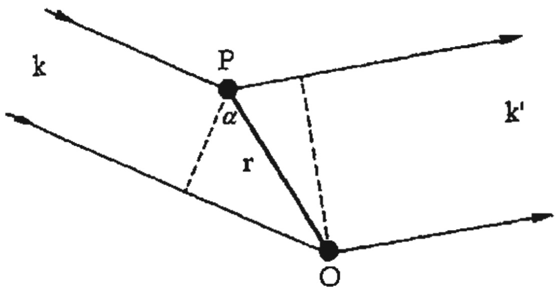
ومع أن افتراض براغ لا يتصف بالدقة العلمية حيث جعل المستويات البلورية كأنها مرايا واستخدم قوانين الضوء الهندسي لمعالجة الانعكاس عن هذه المستويات، ولم يتطرق إلى كيفية توزيع الذرات في هذه المستويات، إلا أن النتيجة التي حصل عليها – مع بساطتها – تتفق مع النتائج التي نحصل عليها من دراسة تشتت الأشعة عن مراكز التشتت – الذرات – ومن معالجتها بطريقة علمية دقيقة.

2-2-2 حساب سعة الأمواج (*Amplitude*) المشتتة

تتشتت الأشعة السينية (x-rays) نتيجة تفاعلها مع السحابة الإلكترونية للذرات الموجودة في نقاط الشبيكة والمرتبة بشكل دوري منتظم. وعليه فإن الكثافة العددية للإلكترونات داخل البلورة، $n(r)$ ، هي دالة دورية منتظمة، أي أن هذه الكثافة تحقق الشرط

$$n(r) = n(r+T) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (2.12)$$

ولنأخـذ الآن أحـد مراكـز التـشتت ونختـار نقطـتين داخـل هـذا المركـز، احـداهما عنـد نقطـة **الأصل** $(r = 0)$ والثانيـة تبعـد عـن الأولى مـسافة تـساوي $\vec{r}$ (انظرالشكل 2.5).



الشكل (2.5): تشتت الأشعة الساقطة (k) عن مركزين O, P والأشعة المشتتة (k').

وسوف نفترض أن الشعاع الساقط لا يتفاعل إلا مرة واحدة مع الإلكترون عند النقطـة P أو O، أي أن الأمـواج الـصادرة عـن التفاعـل والمشتتة (k') لا تتفاعـل مـرة أخرى مع الإلكترونات أي هـي عمليـة تشتت أحادية (Single Scattering). كمـا أن العملية هـي عمليـة تشتت مـرن (Elastic Scattering) لا يفقـد فيها الشعاع الساقط شيئاً من طاقته ولا يتغير الطول الموجي له، أي أن

$$|k| = |k'| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

والـذي يـتغير هـو اتجـاه الـشعاع فقـط، إذ كـان يـسير بالاتجـاه $\vec{k}$ وأصـبح في الاتجاه $\vec{k'}$ بعد التشتت. وقد استخدمنا أشعة متوازية باعتبار الأمواج أمواجًا مـستوية (plane waves) حيث يقع مصدر الأشعة على مسافة مـن المركـز أكبر كثيرًا مـن "r"، وكـذلك الحـال بالنـسبة للأشـعة بعـد تـشتتها إذ تقـع الآلـة الكاشـفة أو الفيلم الحساس على مسافة أكبر كثيرًا من "r".

ويلاحظ من الشكل أن فرق المسار بين الأشعة الساقطة على النقطتين O,P يساوي $r\sin\alpha$ وبالتالي فإن فرق الطور (phase difference) يساوي $\frac{2\pi}{\lambda}r\sin\alpha$ وهذا المقدار يساوي $(\bar{k}.\bar{r})$. وبنفس الطريقة فإن فرق الطور بين الأشعة بعد تشتتها يساوي $(\bar{k}'.\bar{r})$ ، أي أن فرق الطور الكلي بين الموجتين يساوي

$$\Delta=(k-k').\,r=\Delta\bar{k}.\bar{r}$$

فإذا كانت الأمواج الصادرة عن O توصف بالعلاقة $\frac{Ae^{i(k'r'-\omega t)}}{r'}$ حيث A هي سعة اهتزاز الموجة الساقطة، r' المسافة إلى نقطة الملاحظة، فإن الأمواج الصادرة عن النقطة P توصف بالعلاقة $\frac{A}{r'}e^{i(k'r'-\omega t+\Delta)}$. لذلك فإن المقدار Δ هو الذي يحدد نوع التداخل بين الموجتين، وحتى نحصل على جميع المساهمات من الإلكترونات داخل الحجم V نضرب في الكثافة الإلكترونية n(r) ثم نكامل فوق dV، أي أن سعة الأمواج المشتتة تكون على النحو:

$$A'=\int n(r)e^{-i\Delta}\,dV=\int n(r)e^{-i\Delta k.r}\,dV \;..................\; (2.13)$$

حيث يمثل المقدار $\Delta\bar{k}$ التغير في المتجه الموجي نتيجة التشتت.

ونظراً لأن الدالة n(r) هي دالة دورية منتظمة فإنه يمكن تمثيلها على شكل متوالية فورير (كما مر معنا عند تعريف الشبيكة المقلوبة) أي:

$$n(r)=\sum_{G}C_{G}e^{iG.r}$$

وبالتعويض في المعادلة 2.13 نحصل على

$$A'=\sum_{allatoms}C_{G}\int dV\;e^{i(\bar{G}-\Delta\bar{k}).r} \;..................\; (2.14)$$

ويظهر لنا من هذه النتيجة أن شدة الأمواج المشتتة $|A'|^2$ تكون أعظم ما يمكن وتساوي $|C_GV|^2$ عندما يكون التغير في المتجه الموجي $\Delta\bar{k}$ مساوياً لأحد متجهات الشبيكة المقلوبة، أي أن الشرط اللازم للتشتت البنائي هو: