$$\Delta\vec{k} = \vec{G}$$

$$k' - k = G \;\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\; (2.15a)$$

أو:

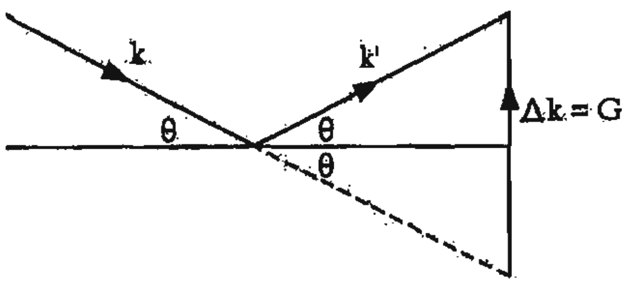
$$k' = \vec{k} + \vec{G}$$
$$2\vec{k}.\vec{G} + G^2 = 0$$

$$2\vec{k}.\vec{G} = G^2 \;\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\; (2.15b)$$

وهذه نتيجة في غاية الأهمية لتشتت الأشعة في الأوساط الدورية المنتظمة (Periodic Structures). وهي تتطابق تماماً مع قانون براغ وتعتبر نصاً بديلاً له. فقد مر معنا بأن المسافة بين المستويات البلورية المتجاورة تساوي $d_{hkl} = \dfrac{2\pi}{|G|}$ ، لذلك يمكن كتابة العلاقة $2\vec{k}.\vec{G} = G^2$ على النحو

$$2\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)\sin\theta = \frac{2\pi}{d} \;\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\; (2.16)$$

حيث θ هي الزاوية بين المستوى البلوري (h,k,l) والشعاع الساقط (انظر الشكل 2.6)



شكل (2.6): العلاقة بين المتجهات الموجية (k,k') والمتجه G.

وحيث أن $|k| = |k'|$ فإنه يتضح من الشكل بأن

$$\Delta k = 2k\sin\theta = |G|$$

وهي نفس العلاقة السابقة، كما أن $\vec{G}$ يعامد المستوى البلوري.

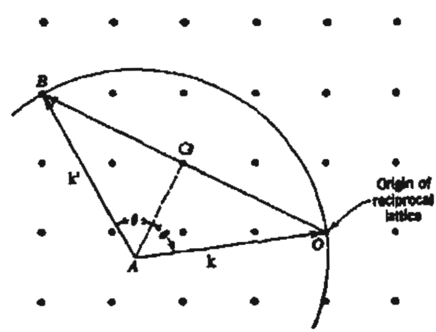
ومن النتيجة السابقة $\Delta\vec{k} = \vec{G}$ نستطيع الحصول على معادلات لاو (Laue)، إذ لو ضربنا طرفي هذه المعادلة على التوالي بالمتجهات الأولية للبلورة لحصلنا على:

$$\left.\begin{aligned}\Delta\vec{k}.\vec{a}_1 &= 2\pi h\\ \Delta k.\vec{a}_2 &= 2\pi k\\ \Delta k.\vec{a}_3 &= 2\pi l\end{aligned}\right\} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (2.17)$$

حيث هي (h, k, l) هي رموز ميللر للمستوى

أي أن $\Delta\vec{k}$ تقع على سطح مخروط حول a_1 وكذلك على سطح مخروط حول a_2 وعلى سطح مخروط ثالث حول a_3. وعندما تتقاطع المخروطات الثلاثة مشتركة في خط واحد تتحقق الشروط الثلاثة ويكون هذا الخط هو اتجاه $\Delta\vec{k}$.

ومن الرسوم الهندسية التي تساعدنا على تصور عملية حيود الأشعة الرسمُ المنسوب إلى (P. Edwald)، والمسمى باسمه (رسم ادولد). وهو يمثل عملية الحيود باستخدام نقاط الشبيكة المقلوبة.



الشكل (2.7): رسم ادوالد في الشبيكة المقلوبة.

نبدأ برسم فضاء الشبيكة المقلوبة بأن نضع نقاط هذه الشبيكة في أماكنها، (انظر الشكل 2.7). ثم نرسم المتجه $\vec{k}$ في اتجاه الشعاع الساقط. وبحيث ينتهي رأس $\vec{k}$ عند أحد نقاط هذه الشبيكة. ثم نجعل هذه النقطة هي نقطة الأصل في الفضاء المقلوب. وبعد ذلك نرسم كرة نصف قطرها يساوي $|k| = \frac{2\pi}{\lambda}$ ومركزها نقطة بداية المتجه k. وإذا ما قطعت هذه الكرة نقطة أخرى (أو أكثر من نقطة واحدة) من نقاط الشبيكة (غير G=0)، فإن شرط حيود براغ $\Delta\vec{k} = G$ يتحقق ويكون اتجاه (أو اتجاهات) الأشعة المشتتة (k') هو المتجه الواصل بين مركز الكرة ونقطة (أو نقاط) التقاطع، حيث أن $|k'| = |k| = \frac{2\pi}{\lambda}$.

2-2-3 شدة الأمواج المشتتة والعوامل المؤثرة عليها

لقد رأينا في قانون براغ بأن توافقًا يجب أن يتم بين زاوية سقوط الأشعة والطول الموجي لها حتى يتحقق القانون ونحصل على تداخل بنائي بين الأشعة المشتتة. كما رأينا بأن فرق الطور بين الأشعة المشتتة عن نقطتين مثل O,P (المسافة بينهما تساوي $\vec{r}$) يساوي ($\Delta\vec{k}.\vec{r}$) وأن قانون براغ يتحقق عندما $\Delta\vec{k} = \vec{G}$. (أي عندما يكون التغير في المتجه الموجي مساويًا لأحد المتجهات في الشبيكة المقلوبة) وهذا هو شرط أساسي لا يتحقق التداخل البنائي للأشعة المشتتة بدونه، ولكنه غير كافٍ بذاته. وذلك لأن شدة الأشعة (Intensity) تعتمد على عوامل أخرى تتعلق بخصائص البلورة مثل نوع الذرات الموجودة في نقاط الشبيكة، ومواقع هذه الذرات ضمن الخلية الأولية، ويعتمد تحديد هذه المواقع على نوع البناء البلوري.

أما العامل الأول، ويسمى العامل الذري (atomic factor) ويرمز له بالرمز f فهو يمثل مقياسًا لمدى فاعلية الذرة في تشتيت الأشعة. ولما كان حجم الذرة من نفس رتبة الطول الموجي للأشعة السينية، فإن التشتت الناتج عن الذرة يساوي مجموع

الأمواج المشتتة عن جميع الإلكترونات الموجودة داخل الذرة، وعليه يعرف العامل الذري للتشتت (f) بأنه يساوي النسبة بين سعة الأمواج المشتتة عن الذرة إلى سعة الموجة المشتتة عن إلكترون واحد. ولو كانت الذرة نقطة واحدة وأهملنا حجمها لكان العامل الذري f مساويًا للعدد الذري Z. ولكن لا يمكن إهمال حجم الذرة، وهناك فرق في الطور بين الأمواج المشتتة عن الإلكترونات المختلفة الموجودة في مواضع مختلفة داخل الذرة.

ولو أخذنا حجمًا صغيرًا dV داخل الذرة على مسافة r من المركز وكانت كثافة الإلكترونات داخلها تساوي $\rho(r)$ فإن فرق الطور بين الأمواج المشتتة عن المركز والأمواج المشتتة عن الشحنة ($\rho(r)dV$) يساوي ($\Delta\bar{k}.\bar{r}$)، وبالتالي فإن النسبة بين سعة الأمواج المشتتة عن الشحنة داخل dV وسعة الموجة المشتتة عن الإلكترون في المركز تساوي

$$df = \rho(r)dV\, e^{i\Delta k.r}$$

وعليه فإن عامل التشتت الذري للذرة الواحدة يساوي:

$$f = \int \rho(r)\, e^{i\Delta k.r}\, dV \;\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\; (2.18)$$

وباستخدام العلاقة $e^{i\Delta k.r} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l J_\ell(\Delta kr)P_\ell(\cos\theta)$

حيث: θ الزاوية بين $\bar{r}, \Delta\bar{k}$

J_ℓ spherical Bessel functions

P_ℓ Legendre Polynomials

ونأخذ الحد الأول ($\ell = 0$) فقط من هذه المجموعة لوجود التماثل الكروي في الذرة فنجد أن:

$$e^{i\Delta kr} = J_{\circ}(\Delta kr)P_{\circ}(\cos\theta)$$
$$= \frac{\sin\Delta kr}{\Delta kr}$$

وبالتعويض نحصل على:

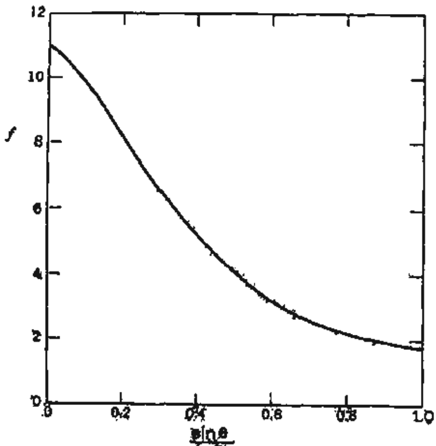
$$f = \int \rho(r)\frac{\sin\Delta kr}{\Delta kr}r^{2}dr\sin\theta\, d\theta\, d\phi$$

$$f = 4\pi\int \rho(r)\frac{\sin\Delta kr}{\Delta kr}r^{2}dr \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (2.19)$$

وعندما تقترب $\theta \to 0$ فإن $\Delta k \to 0$ ويصبح المقدار $\frac{\sin\Delta kr}{\Delta kr} \to 1$ ، أي أن

$$f = 4\pi\int \rho(r)r^{2}dr = Z$$ (عدد الإلكترونات)

ومن هذه العلاقة نرى بأن عامل التشتت الذري f تتناقص قيمته مع زيادة زاوية الحيود θ. انظر الشكل (2.8). كما أن قيمته تختلف من ذرة إلى أخرى لأنه يعتمد على عدد الإلكترونات في الذرة الواحدة (Z). وهو يعتمد على مقدار المتجه (Δk) فقط ولا يعتمد على اتجاهه. كما أنه يتناقص تدريجيًا من قيمته العظمى Z إلى قيمة صغيرة مع زيادة زاوية الحيود θ ، أي مع زيادة قيمة (Δk) من الصفر إلى قيمة كبيرة.



شكل (2.8): عامل التشتت الذري للصوديوم.

أما العامل الثاني الذي يؤثر على شدة الأشعة المشتتة فهو عامل البناء البلوري (Structure Factor) ويرمز له SF. وهو يعتمد على عدد الذرات الموجودة في الخلية الأولية، ونوع الذرة، وإحداثيات الموضع الموجودة فيه.

ولحساب SF نأخذ خلية أولية من الشبيكة البلورية وليكن بداخل هذه الخلية عدد من الذرات، ويحدد موضع كل منها بالمتجه $\bar{r}_j$ أي مسافة الذرة j عن نقطة الأصل (Origin) في الخلية. فالذرة الأولى على مسافة r_1 والثانية على مسافة r_2 وهكذا. ولكل ذرة عامل ذري f_1 للذرة الأولى، f_2 للذرة الثانية .... . وإذا تشابهت الذرات فإن لها جميعًا نفس العامل الذري.

وحتى نجد سعة الأمواج المشتتة في اتجاه ما علينا أن نجمع مساهمات جميع الذرات في الخلية الأولية الواحدة، ثم نضرب في عدد الخلايا الموجودة في البلورة. وعليه فإن المساهمات من خلية واحدة تساوي:

$$SF=\sum_j f_j e^{i\Delta k r_j} \qquad \text{.....................} \; (2.20)$$

ويكون الجمع فوق جميع الذرات الموجودة في الخلية الأولية الواحدة. ويمثل المقدار $\left(\Delta k r_j\right)$ فرق الطور للموجة المشتتة عن الذرة j ، أما f_j فهو العامل الذري للذرة j.

ونستطيع أن نكتب المتجه r_j بدلالة المتجهات الأولية للشبيكة البلورية أي، $r_j = s_j\,\bar{a}_1 + t_j\,\bar{a}_2 + u_j\,\bar{a}_3$ ، حيث s,t,u أعداد تتراوح قيمتها بين $1 \rightarrow 0$.

أما المتجه $\left(\Delta\bar{k}\right)$ فهو يساوي أحد متجهات البلورة المقلوبة $\bar{G}$ ، وإذا كان التشتت عن المستويات البلورية (h,k,l) فإن:

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