(1)

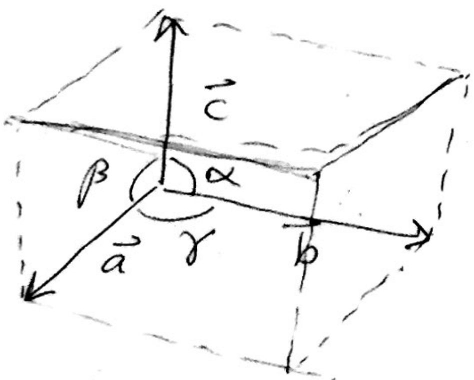
وحدة الخلية unit cell :

وحدة الخلية اصغر جزء في البلورة والتي يمكن من خلالها تشكيل البلورة باجراء عمليات انتقال مناسبة بحيث تملئ الفراغ بدون ترك فراغات او تداخل

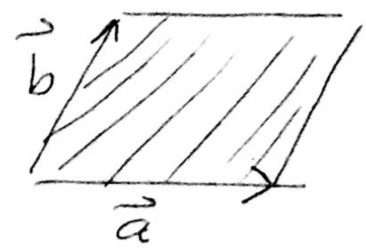
تصنف ~~[illegible]~~ وحدة الخلية الى : خلية اولية وخلية غير اولية

الخلية الاولية : لها نقطة شبيكة واحدة لكل وحدة خلية وحجمها اصغر ما يمكن .

الخلية غير الاولية : لها اكثر من نقطة شبيكة لكل وحدة خلية وحجمها مضاعفات لوحدة الخلية الاولية



وحدة الخلية بثلاثة ابعاد



وحدة خلية في بعدين

$$V = |\vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c}|$$

$$A = |\vec{a} \times \vec{b}|$$

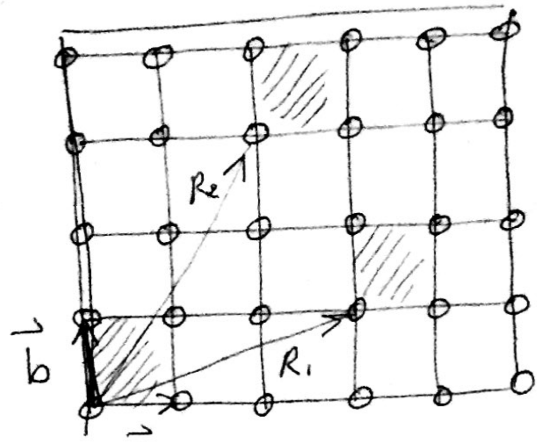
يمكن التعبير عن الخلية بدلالة متجهات الانتقال الاولية للخلية primitive translation vector

يمكن الوصول الى اي نقطة شبيكة بدلالة متجهات الانتقال الاولية $\vec{a},\vec{b},\vec{c}$ عن طريق المتجه

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

في الفضاء الثنائي

$$\boxed{\vec{R} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b}}$$



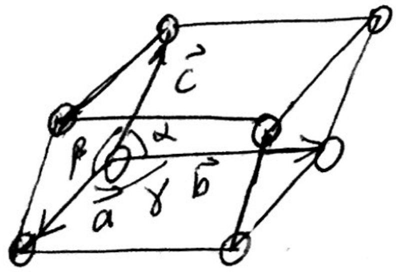
$\vec{R}_1 = 3\vec{a} + \vec{b}$
$R_2 = 2\vec{a} + 3\vec{b}$

n_1, n_2, n_3 اعداد صحيحة موجبة او سالبة

الشبكة البلورية في الفضاء الثلاثي هي 14 نوع تسمى بشبكة برافيز Bravais Lattice وتختلف الواحدة عن الاخرى من حيث شكل وحدة الخلية وانواع التماثل الذي تمتلكه وهذه الانواع الاربعة عشر تنقسم الى سبعة انظمة هي (الانظمة البلورية Crystal systems)

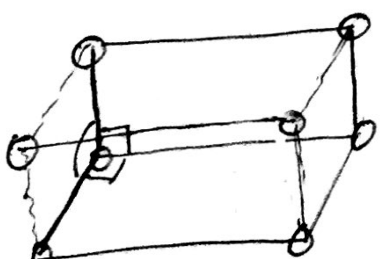
1. نظام ثلاثي الميل (Triclinic) : تحوي على شبكة الخلية الاولية (P)

$$a \neq b \neq c \quad ; \quad \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90$$

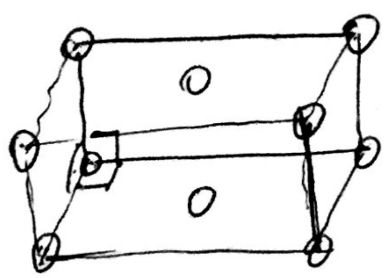


2. نظام احادي الميل (monoclinic)

$a \neq b \neq c$
$\alpha = \gamma = 90 \neq \beta$



(P)



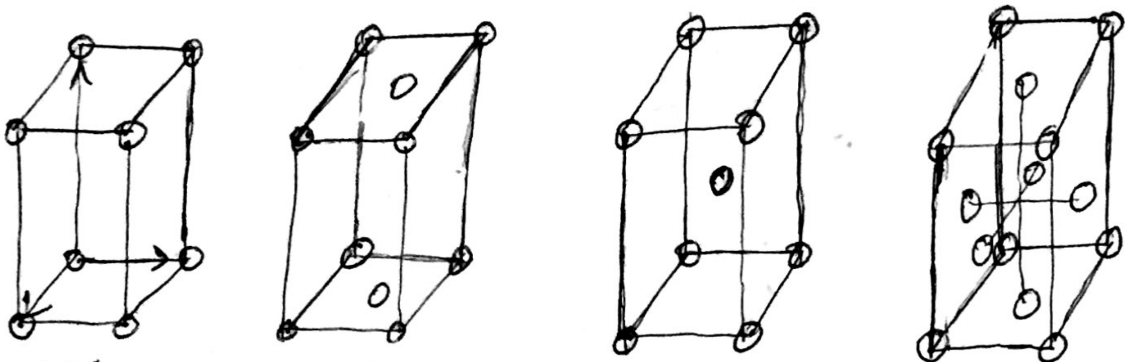
(C)

شبكة الخلية متمركزة الوجهين (C)

٣. نظام المعيني القائم (Orthorhombic)

$$a \neq b \neq c \; ; \; \alpha = \beta = \gamma = 90$$

يحوي النظام اربعة اصناف من الخلايا هي (P) ، مركزة القاعدتين (C)
مركزة الجسم (I) ومركزة الاوجه (F) ، حجم الخلية $V = abc$

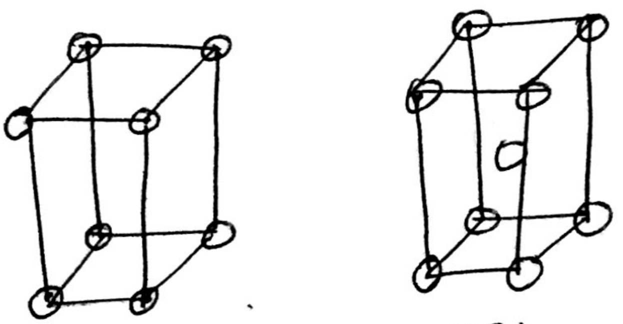


(P) (C) (I) (F)

٤. النظام الرباعي القائم (Tetragonal)

$$a = b \neq c \; ; \; \alpha = \beta = \gamma = 90$$

يحوي النظام على خلية الاولية (P) ومركزة الجسم (I) ، حجم الخلية $V = a^2c$

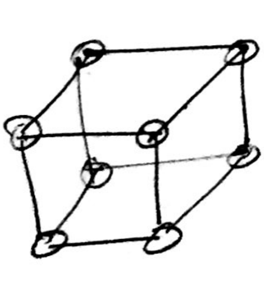


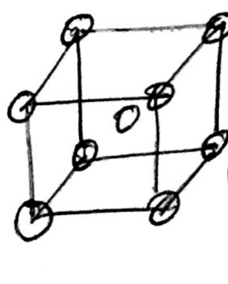
(P) (I)

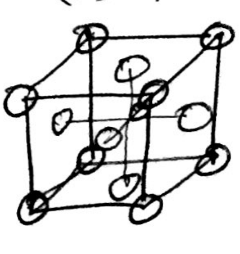
٥. النظام المكعبي (Cubic system)

$$a = b = c \; ; \alpha = \beta = \gamma = 90 \; ; \; V = a^3$$

يحوي النظام ثلاثة اصناف من وحدة الخلية الاولية (P) ومركز الجسم (I)
ومركز الاوجه (F)


(P)

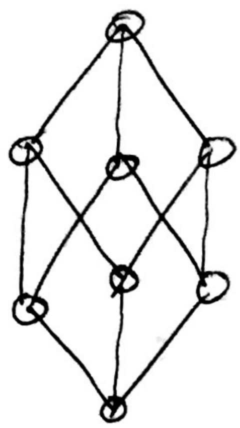

(I)


F

4

٦. نظام ثلاثي التماثل (Trigonal)

$a = b = c \quad ; \quad \alpha = \beta = \gamma < 120 \neq 90$



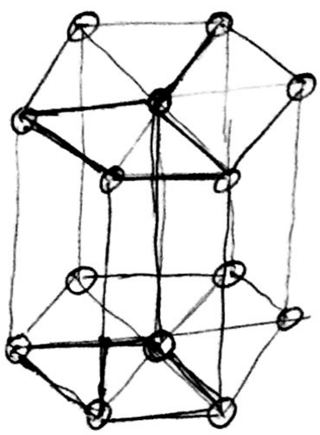
يحوي هذا النظام على
الخلية الاولية (P)

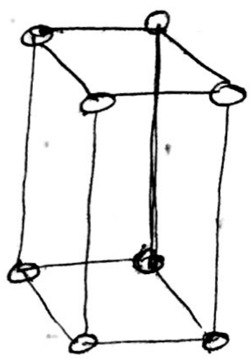
(P)

٧. النظام السداسي (Hexagonal)

$a = b \neq c \quad ; \alpha = \beta = 90$

$\gamma = 120$

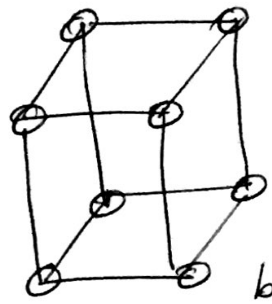




(P)

أنواع الخلايا في الفضاء الثلاثي

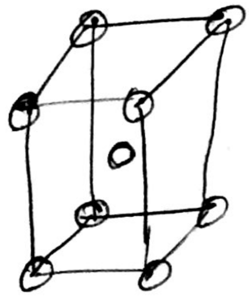
١. الخلية الأولية primitive cell (P)



(P)

عدد النقاط لوحدة الخلية = 1

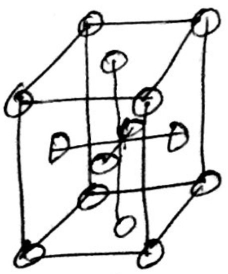
٢. خلية مركزة الجسم body center cell (I)



(I)

عدد النقاط لوحدة الخلية = 2

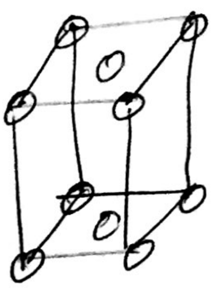
٣. خلية مركزة الأوجه face center cell (F)



(F)

عدد النقاط لوحدة الخلية = 4

٤. خلية مركزة الوجهين المتقابلين base center cell (C)

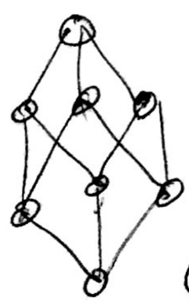


(C)

عدد النقاط لوحدة الخلية = 2

٥. خلية معينية الوجه (R)

عدد النقاط لوحدة الخلية = 1



(R)

يتم اختيار وحدة الخلية لشبيكات برافيز حسب المعايير التالية :

١. ان يكون تماثل وحدة الخلية متوافق مع تماثل الشبيكة بأجمعها

٢. ان يكون عدد الزوايا القائمة وعدد الاضلاع المتساوية اكبر عدد ممكن

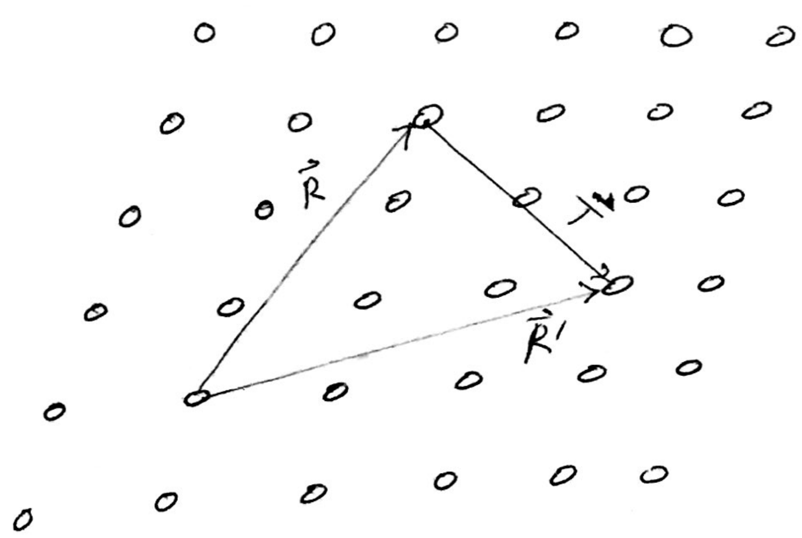
٣. ان يكون حجم وحدة الخلية اصغر حجم ممكن

الشبيكة البلورية في الفضاء الثلاثي اما تكون اولية او غير اولية ويمكن التمييز بين النوعين من خلال العلاقة

$$\boxed{\vec{R}' = \vec{R} + n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}} \quad (1)$$

حيث $\vec{R}$ و $\vec{R}'$ هما متجهات الى نقطتين في الشبيكة باختيار قيم مناسبة للاعداد الصحيحة n_1 ، n_2 ، n_3

فاذا تحققت العلاقة (1) فان الشبيكة اولية .

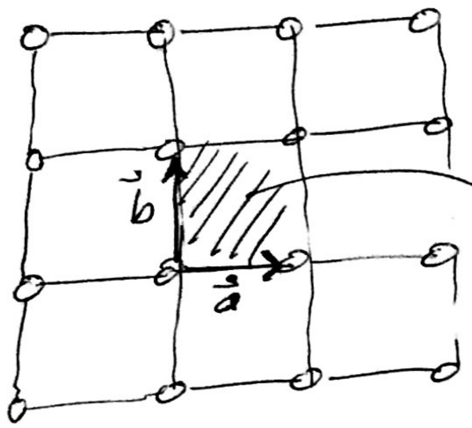


الشبيكة المستوية : الشبيكة الفراغية ببعدين

$$\boxed{\vec{R} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b}}$$

$\vec{a}$ ، $\vec{b}$ متجهات الانتقال الاولية

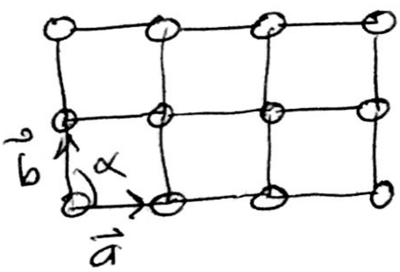
n_1 ، n_2 اعداد صحيحة



$$A = |\vec{a} \times \vec{b}|$$

خمسة انواع من شبيكات برافيز في الفضاء الثنائي

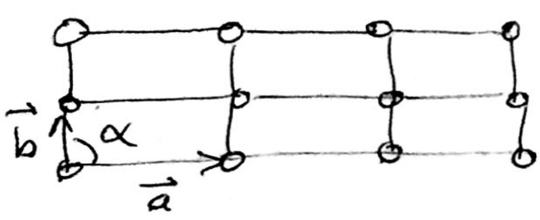
① المربعة square lattice :



$|\vec{a}| = |\vec{b}|$; $\alpha = 90$

تمتلك تماثل دوراني رباعي وتماثل انعكاسي 4mm وكذلك تماثل دوراني ثنائي وتماثل انعكاسي بمرآتين متعامدتين 2mm عند منتصف الاضلاع

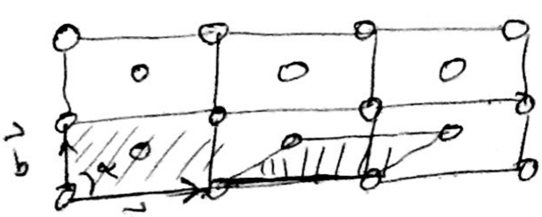
② المستطيلة الاولية primitive rectangular lattice



$|\vec{a}| \neq |\vec{b}|$; $\alpha = 90$

تمتلك تماثل دوراني ثنائي وتماثل انعكاسي بالاتجاهين mm ومجاميع نقطة 2mm

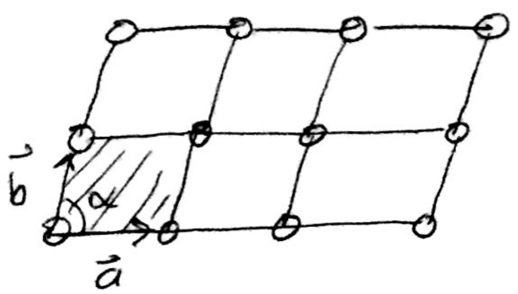
③ شبيكة مستطيلة مركزة centered rectangular lattice



$|\vec{a}| \neq |\vec{b}|$; $\alpha = 90$

لها تماثل الشبيكة المستطيلة الاولية اضافة الى تماثل دوراني في موقع نقاط التماثل للشبيكة المماثلة

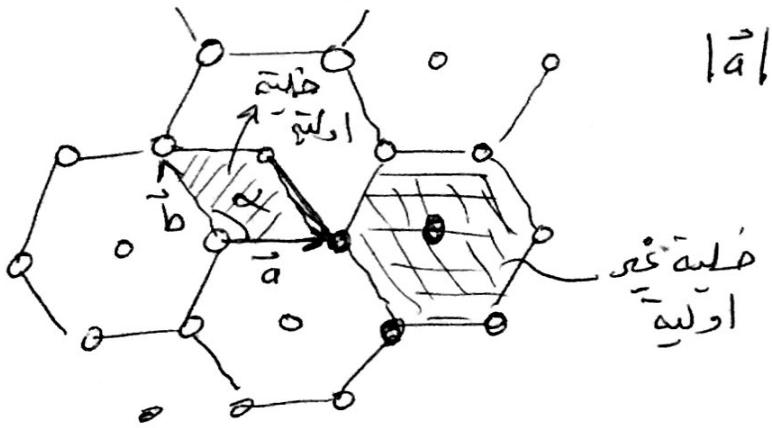
٤. شبيكة مائلة oblique lattice



$|\vec{a}| \neq |\vec{b}|$ ، $\alpha \neq 90$

تمتلك تماثل دوراني ثنائي

٥. شبيكة سداسية Hexagonal lattice



$|\vec{a}| = |\vec{b}|$; $\alpha = 120$

تمتلك تماثل 6mm

خلية ويكنر - ستز الاولية primitive Wigner-Seitz cell

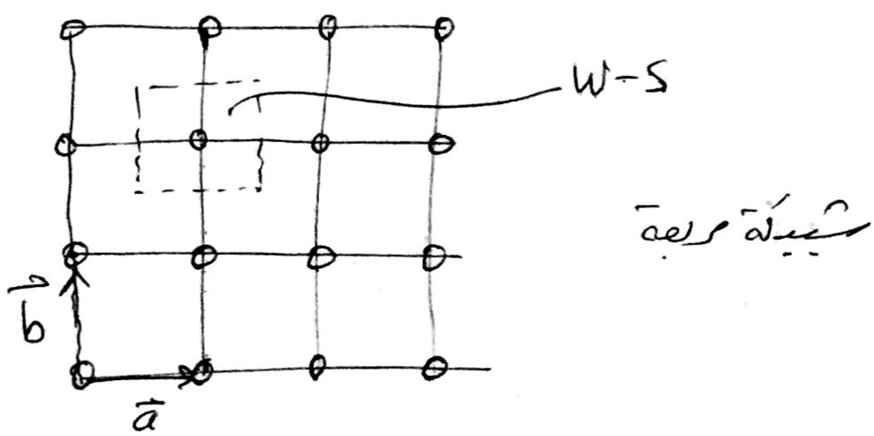
يمكن تعريف الخلية الاولية بطريقة منفردة حيث تعرف خلية W-S بانها المحل الهندسي الذي تكون المنطقة الواقعة داخل الخلية اقرب ما يكون الى نقطة الشبيكة تلك من اي نقطة اخرى.

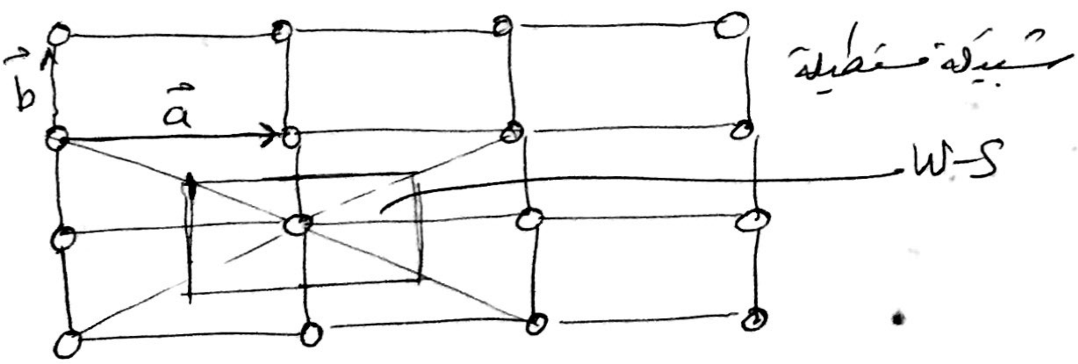
من خصائص خلية W-S الاولية انها تحوي نقطة شبيكة واحدة حجمها (او مساحتها) اصغر ما يمكن و يمكن لهذه الخلية ان تملئ الفراغ بدون ترك فراغات او تداخل باستخدام متجه انتقال مناسب. و تمتلك خلية W-S خصائص تماثل نقطة كامل لتلك الشبيكة.

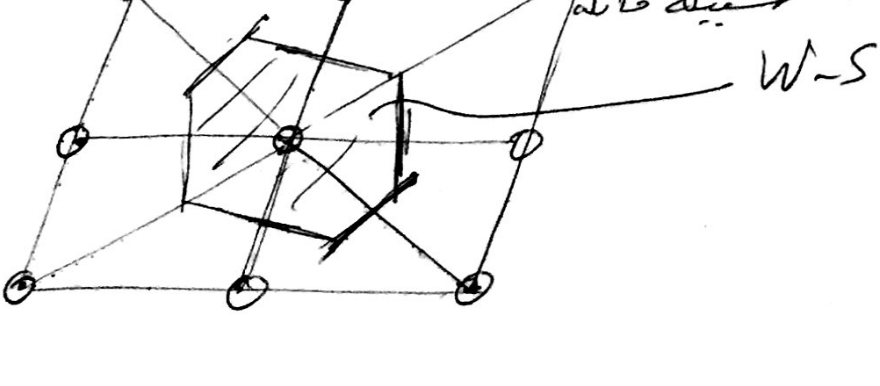
تعيين خلية W-S :

١- اختيار نقطة شبيكة ونعتبرها نقطة اصل .
٢- نرسم خطوط من هذه النقطة الى جميع النقاط المجاورة لها
٣- نرسم منتصفات لهذه الخطوط خطوط عمودية عليها
(او مستويات عمودية عليها في الفضاء الثلاثي)
٤- المساحة المتكونة من هذه الخطوط (او الحجم المتكون من هذه المستويات) بشكل خلية W-S الاولية

مثال





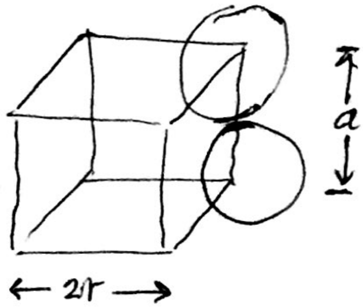


Packing factor عامل الملئ

يعرف عامل الملئ بانه نسبة حجم الذرات في وحدة الخلية الى الحجم الكلي للخلية

$$\text{Packing factor} = \frac{\text{Volume of atom} \times \text{no. of atoms in the cell}}{\text{Volume of the cell.}}$$

مثال: جد نسبة الملئ للشبكية المكعبة (للمكعب البسيط)



$V_{cell} = a^3$

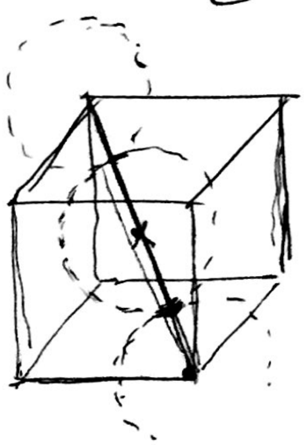
$\text{Volume of atom} = \frac{4}{3}\pi r^3$

$a = 2r$

no. of atom in the cell $= 1$

$$P.f. = \frac{\frac{4\pi}{3}\left(\frac{a}{2}\right)^3 \times 1}{a^3} = \frac{\pi}{6} = 0.523$$

مثال: جد نسبة الملئ لشبكية مكعبة من نوع bcc



$\sqrt{3}\,a$ = طول القطر

$\sqrt{3}\,a = 4r$

r نصف قطر الذرة

$r = \frac{\sqrt{3}}{4}a$

$$P.f. = \frac{\frac{4\pi}{3}\left(\frac{\sqrt{3}}{4}a\right)^3 \times 2}{a^3} = \frac{\sqrt{3}}{8}\pi = 0.68$$

مميزات الشبيكة المكعبة • $a=b=c \; ; \; \alpha=\beta=\gamma=90$

• يحوي هذا النظام على ثلاثة انواع من الشبيكات (P),(I),(F)

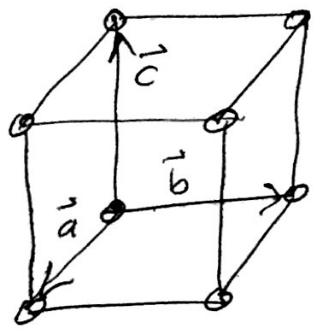
$(P) \longrightarrow$ SC Simple cubic

$(I) \longrightarrow$ bcc body center cubic

$(F) \longrightarrow$ fcc face center cubic

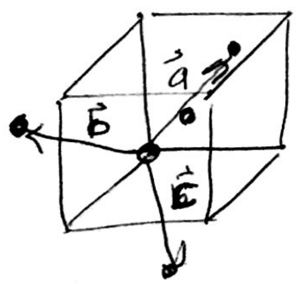
• متجهات الانتقال الاولية لـ SC

$$\vec{a} = a\hat{x}$$
$$\vec{b} = a\hat{y}$$
$$\vec{c} = a\hat{z}$$



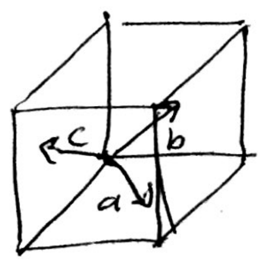
• متجهات الانتقال الاولية لـ bcc

$$\vec{a} = \frac{a}{2}(\hat{y}+\hat{z}-\hat{x})$$
$$\vec{b} = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{z}-\hat{y})$$
$$\vec{c} = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}-\hat{z})$$



• متجهات الانتقال الاولية لـ fcc

$$\vec{a} = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y})$$
$$\vec{b} = \frac{a}{2}(\hat{y}+\hat{z})$$
$$\vec{c} = \frac{a}{2}(\hat{z}+\hat{x})$$



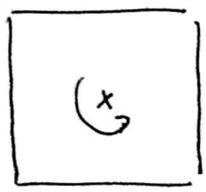
التماثل البلوري Crystal symmetry

هنالك عاملين في التماثل البلوري :

١. عنصر التماثل symmetry element : هو عبارة عن المحور او المستوي الذي تجري حوله عملية التماثل.

٢. عملية التماثل symmetry operation : يشمل العمليات التالية الانتقال ، الدوران ، الانعكاس ، الانقلاب.

يعرف التماثل في البلورات على انه تكرار او تطابق اجزاء الشكل عند اجراء مجموعة من عمليات التماثل ، مثال ذلك دوران مربع حول محور يمر في مركز المربع وعمودي عليه



الدوران بزاوية $\frac{\pi}{2}$ يجعل المربع ينطبق على نفسه وكذلك الدوران π يجعله ينطبق على نفسه ايضا مرة اخرى

عناصر التماثل :

١. محور التماثل Axis of symmetry
٢. مركز التماثل Center of symmetry
٣. مستوي التماثل plane of symmetry
٤. محور التماثل الانقلابي Inversion axis of symmetry

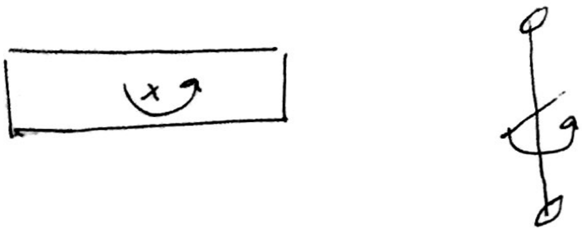
- **محور التماثل :** هو عبارة عن مستقيم اذا ما دار الشكل حوله بزاوية معينه حل الشكل محل نفسه

$$\boxed{n = \frac{360}{\theta}}$$

n درجة محور التماثل.

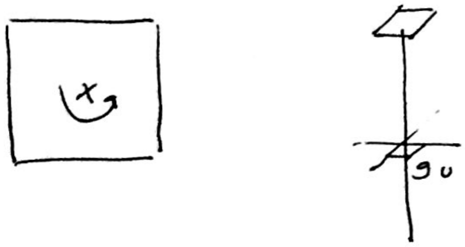
وتعرف درجة محور التماثل بانها عدد المرات التي يحل فيها الشكل محل نفسه عند دورانه حول محور التماثل بزاوية 360° . يقال لمحور التماثل الدوراني بانه احادي التماثل one fold axis اذا كان تكرار الشكل مرة واحدة في الدورة الكاملة - ويقال بانه ثنائي التماثل اذا كان تكرار الشكل مرتين في الدورة الكاملة.

1 - fold

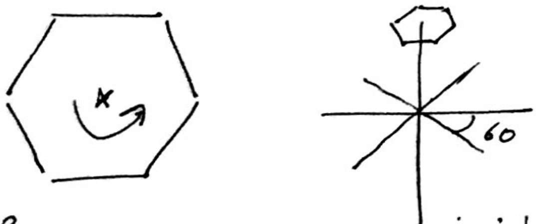


2 - fold

3 - fold



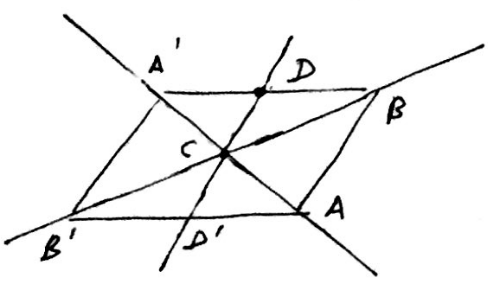
4 - fold



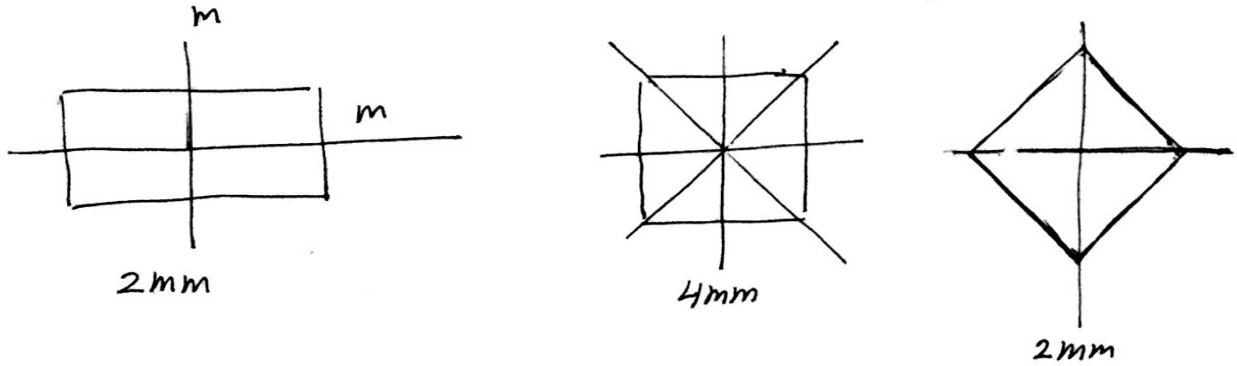
6 - fold

ملاحظة : لا يوجد تماثل دوراني خماسي او سباعي او ثماني لان ذلك يتناقض مع التماثل الانتقالي

- مركز التماثل Center of symmetry : وهو عبارة عن نقطة داخل الشكل اذا مر مستقيم ما خلالها فانه سوف يقابل نقطة مشابهه تماماً على الجزء المقابل وعلى مسافة متساوية

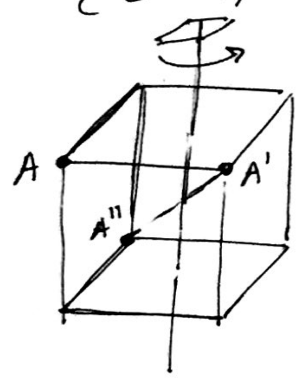


○ مستوى التماثل plane of symmetry : يعرف بانه مستوى وهمي
يقسم الجسم او البلورة الى نصفين متساويين ومتشابهين بحيث يكون
احد النصفين صورة مرآة للنصف الاخر.

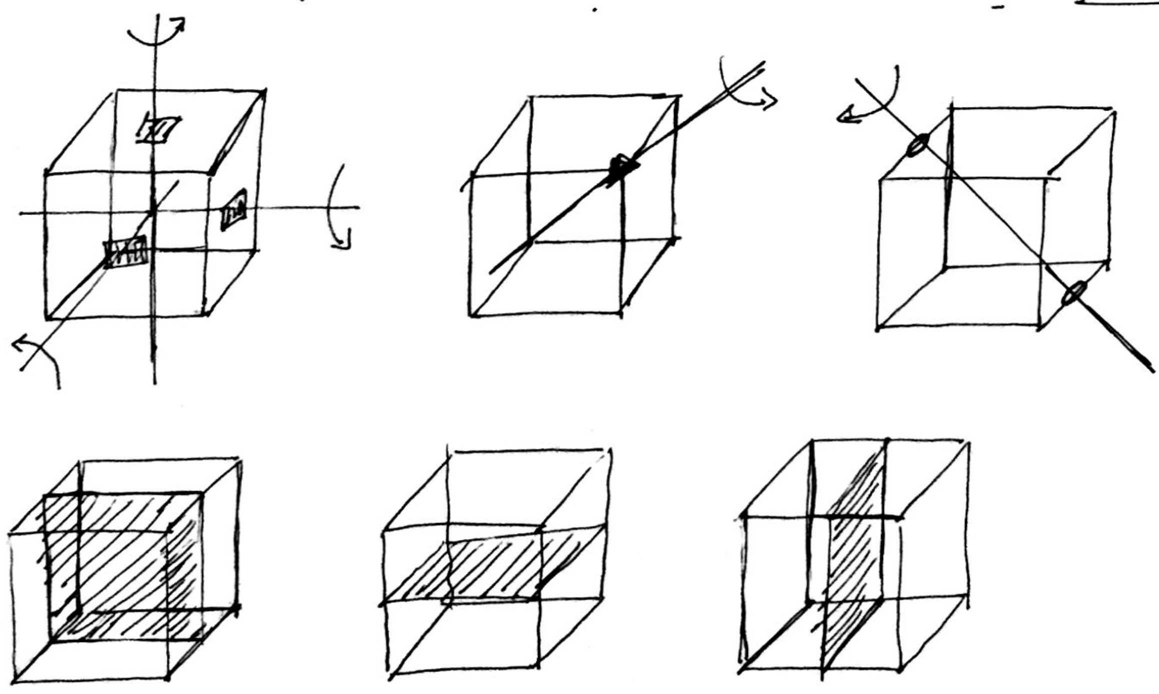


○ محور التماثل الانقلابي Inversion axis of symmetry

يعرف محور التماثل الانقلابي بانه عبارة عن مستقيم اذا ما دار
الشكل حوله بزاوية معينة وانعكس كل الشكل محل نفسه
ويرمز لهذه المحاور $\{\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}\}$



مثال : بعض عناصر التماثل للمكعب



تماثل المكعب symmetry of a cube

للمكعب التماثلات التالية

* تماثل دوراني رباعي حول اي محور يمر خلال مركزي وجهين متقابلين للمكعب (ثلاثة محاور دورانية رباعية الطية)

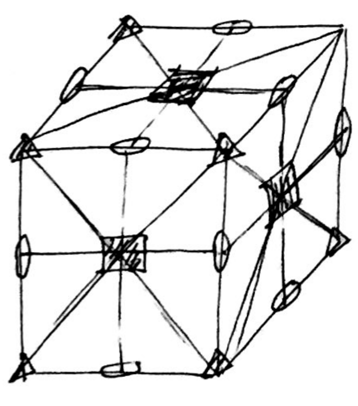
* تماثل دوراني انقلابي $\bar{3}$ حول اي محور من المحاور الاربعة باتجاه اقطار المكعب الاربعة (4 محاور دورانية انقلابية ثلاثية الطية)

* تماثل دوراني ثنائي الطية حول المحاور القطرية موازية لاقطار اوجه المكعب ومارة بمركز المكعب (6 محاور)

* تماثل انعكاسي m خلال تسعة مستويات للتماثل
  - ثلاثة مستويات محورية axial planes
  - ستة مستويات قطرية diagonal planes

* للمكعب مركز تماثل انقلابي $\bar{1}$ هو مركز المكعب

وبذلك يكون للمكعب (23) عنصر تماثل.



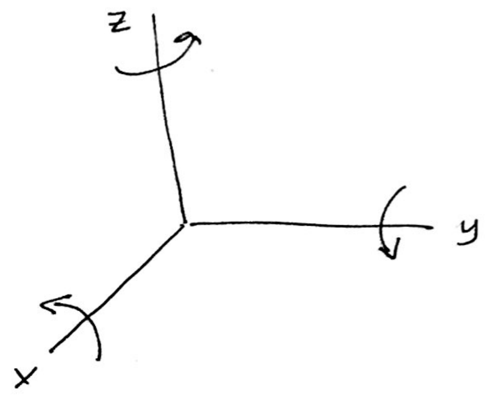
عمليات التماثل Symmetry operation

اهم ما يميز البناء البلوري هو العمليات التماثلية وذلك باجرائها لتعود البناء البلوري الى وضعه الاصلي في هذه العمليات

1. الانتقال Translation
2. الدوران Rotation
3. الانعكاس Reflection
4. الانقلاب Inversion

تمكن اجراء عمليات الدوران والانعكاس والانقلاب في وقت واحد عند نقطة معينة لوحدة الخلية البلورية بحيث تعود البلورة الى وضعها الاصلي وعندها تسمى هذه العملية بالعملية النقطية point operation

• الدوران

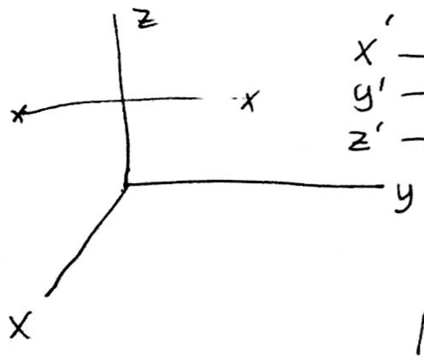


$$R_x = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & C & S \\ 0 & -S & C \end{bmatrix} \; ; \quad C = \cos\theta \quad S = \sin\theta$$

$$R_y = \begin{bmatrix} C & 0 & -S \\ 0 & 1 & 0 \\ S & 0 & C \end{bmatrix}$$

$$R_z = \begin{bmatrix} C & S & 0 \\ -S & C & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

• الانعكاس

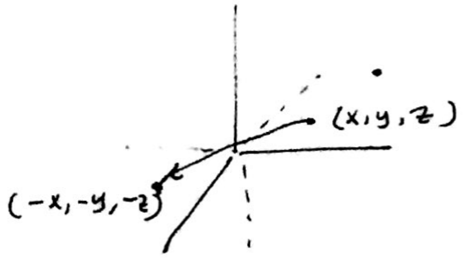


$x' \rightarrow x$
$y' \rightarrow -y$
$z' \rightarrow z$

$$Ref_{xz} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} ;$$

$$Ref_{yz} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \; ; \; Ref_{xy} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

• الانقلاب



$x' \rightarrow -x$
$y' \rightarrow -y$
$z' \rightarrow -z$

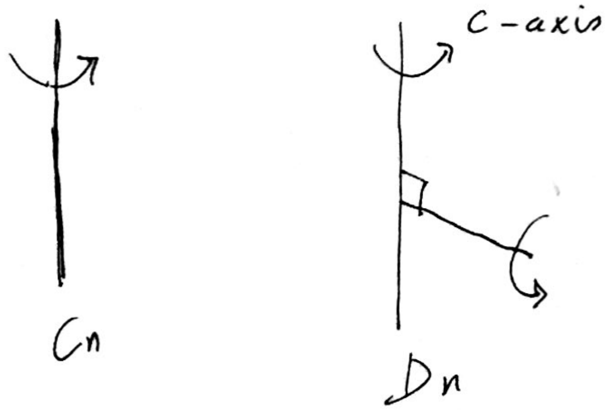
$$Inv = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

مجاميع نقطة point group :

تعرف مجاميع نقطة بانها عبارة عن مجموعة العمليات بواسطة عنصر التماثل التي تترك نقطة واحدة في البلورة على مكانها ، ومجاميع نقطة عبارة عن عدد محدود من عمليات الدوران والانعكاس والانقلاب التي تنقل الشبيكة الى نفسها حيث كل محاور الدوران او مستويات الانعكاس تحوي نقاط لا تتأثر بهذه العمليات . شبيكات برافيز الـ 14 لها 32 عملية من مجاميع النقطة

مثال :

C_n – n-fold rotation about axis
σ – reflection
S_n – n-fold rotation – inversion
D_n – double rotation, n-fold rotation about c-axis & 2 fold rotation about an axis at right angle to C



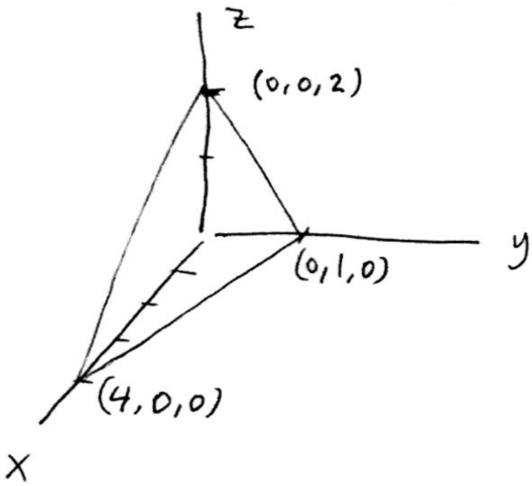
مجاميع الفضاء space group

عندما يتم الجمع بين التماثلات الدورانية لمجاميع النقطة مع التماثلات الانتقالية translation symmetries يمكننا الحصول على تماثل مجاميع الفضاء وهنالك 230 عملية من مجاميع الفضاء .

معاملات ميلر Miller indices

يمكن تحديد اتجاه اي مستوي في البلورة من خلال احداثيات ثلاث نقاط لا تقع على خط مستقيم ، وجد ميلر انه يمكن تحديد ميل المستويات بمعاملات (معاملات ميلر) والتي يمكن تحديدها بطريقة بسيطة وكما يلي :

اذا كان لدينا مستوي يقطع المحاور عند النقاط (0,0,2) ، (0,1,0) ، (4,0,0)

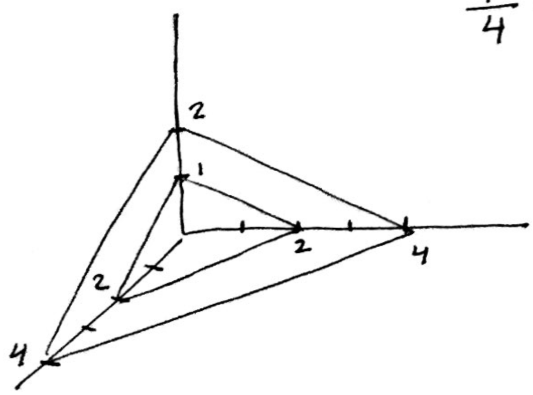


1. تعيين اطوال المسافات بدلالة ثابت الشبيكة على المحاور الاساسية
2. نأخذ مقلوب هذه الاعداد ونختزلها الى اقرب عدد صحيح شرط ان يكون القاسم المشترك مساوياً الى واحد فيكون الناتج معاملات ميلر (hkl)

مثال ذلك المستوي اعلاه

$$\frac{1}{4}\ \frac{1}{1}\ \frac{1}{2} \times 4 \Rightarrow \boxed{1\ 4\ 2}$$

h k l



مثال : جد معاملات ميلر

$$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{1}$$

العامل المشترك 2 نحصل على

$$\boxed{1\ 1\ 2}$$

كذلك

$$\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2} \times 4$$

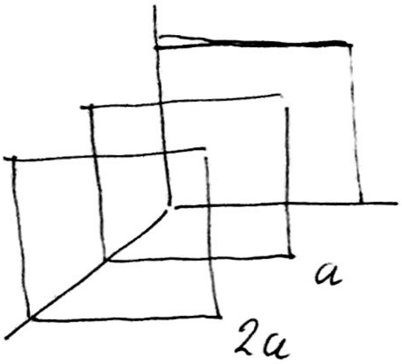
$$\boxed{1\ 1\ 2}$$

معاملات ميلر للمستوي الثاني هو 112 وذلك لان المستوي الثاني // المستوي الاول

بعض الرموز ومعناها

الرمز	المعنى
(hkl)	المستوى hkl
$\{hkl\}$	المستويات المناظرة
$[hkl]$	الاتجاه hkl
$\langle hkl \rangle$	الاتجاهات المناظرة

مثال: نقاط التقاطع مع المحاور الاساسية



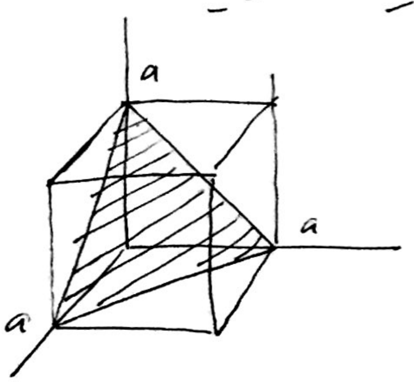
$$a, \infty, \infty$$

$$\frac{1}{a}, \frac{1}{\infty}, \frac{1}{\infty} \Rightarrow 100$$

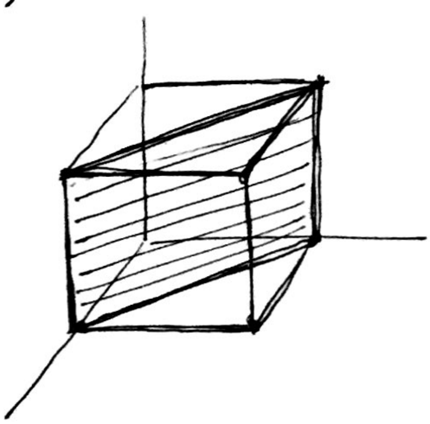
$$(2a, \infty, \infty)$$

$$\left(\frac{1}{2a}, \frac{1}{\infty}, \frac{1}{\infty}\right) \Rightarrow 100$$

مثال: داخل الخلية المكعبة جد معاملات ميلر للمستوى



$$\frac{1}{a}\ \frac{1}{a}\ \frac{1}{a} \Rightarrow (111)$$

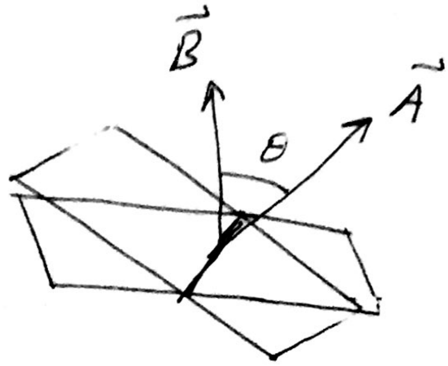


$$a, a, \infty$$

$$\frac{1}{a}\ \frac{1}{a}\ \frac{1}{\infty} \Rightarrow 110$$

الزاوية بين مستويين

لايجاد الزاوية بين مستويين ، يجب معرفة معاملات ميلر لكل مستوى



$$\vec{A} = h_1 \hat{x} + k_1 \hat{y} + l_1 \hat{z}$$

$$\vec{B} = h_2 \hat{x} + k_2 \hat{y} + l_2 \hat{z}$$

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = |\vec{A}||\vec{B}| \cos\theta$$

$$\cos\theta = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \cdot \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}$$

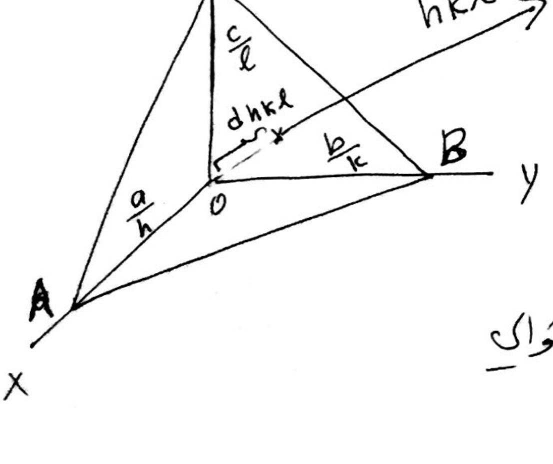
م/ احسب الزاوية بين المستويين (100) و (010)
ثم جد الزاوية بين المستويين (100) و (111)

1. $$\cos\theta = \frac{0+0+0}{\sqrt{1} \cdot \sqrt{1}} = 0 \Rightarrow \theta = \frac{\pi}{2}$$

2. $$\cos\theta = \frac{1+0+0}{\sqrt{3} \cdot \sqrt{1}} = \frac{1}{\sqrt{3}} \Rightarrow \theta =$$

المسافة بين المستويات :

يمكن حساب المسافة بين المستويات التي لها نفس معاملات ميلر (المستويات المتوازية) ويرمز لها بـ d_{hkl}



اذا كانت a ، b ، c تمثل محاور البلورة و (hkl) مجموعة المستويات التي تقطع المحور a الى h من الاجزاء و المحور b الى k من الاجزاء والمحور الى l من الاجزاء ، فان هذه المقاطع تتقاطع مع المحاور عند $\frac{a}{h}, \frac{2a}{h}, \frac{3a}{h}, \ldots$ و $\frac{b}{k}, \frac{2b}{k}, \frac{3b}{k}, \ldots$ و $\frac{c}{l}, \frac{2c}{l}, \frac{3c}{l}, \ldots$ على التوالي

المستوى A, B, C يقطع محاور البلورة ، لذا فان المقاطع هي

$$OA = \frac{a}{h}$$

$$OB = \frac{b}{k}$$

$$OC = \frac{c}{l}$$

لذا فان الزوايا بين المستقيم ON مع المحاور هي على التوالي α ، β ، γ
اذا كان $ON \perp$ على المستوي ويكون باتجاه (hkl) ، الزوايا α ، β ، γ
تحقق المعادلة التالية

$$\cos^2\alpha + \cos^2\beta + \cos^2\gamma = 1 \qquad (1)$$

$$\cos\alpha = \frac{d_{hkl}}{\left(\frac{a}{h}\right)} \; ; \; \cos\beta = \frac{d_{hkl}}{\left(\frac{b}{k}\right)} \; ; \; \cos\gamma = \frac{d_{hkl}}{\left(\frac{c}{l}\right)}$$

بالتعويض في المعادلة (1) نحصل على

$$d_{hkl}^2\left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}\right) = 1$$

$$\therefore \boxed{d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}}} \qquad (2)$$

هذه المعادلة عامة يمكن تطبيقها على الانظمة البلورية التالية :

١. المعيني القائم حيث $a \neq b \neq c$

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}} \qquad (3)$$

٢. الرباعي القائم : $a = b \neq c$

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}}} \qquad (4)$$

٣. المكعب : $a = b = c$

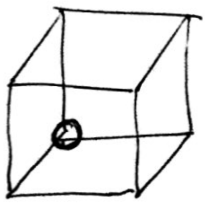
$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \quad \text{—— (5)}$$

٤. النظام السداسي

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{4}{3}\left(\frac{h^2+hk+k^2}{a^2}\right)+\frac{l^2}{c^2}}} \quad \text{—— (6)}$$

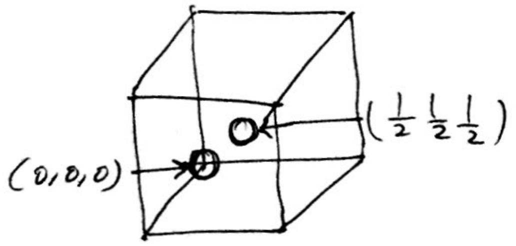
Position in the cell — موقع الاساس في الخلية

١. المكعب البسيط (SC)



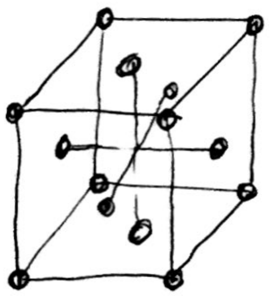
$(0,0,0)$

٢. المكعب مركز الجسم bcc



$$\boxed{\begin{array}{c}(0,0,0)\\ \left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)\end{array}}$$

٣. المكعب مركز الاوجه fcc

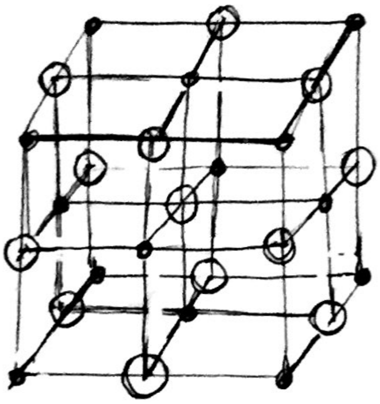


رؤوس المكعب	الاوجه
$(0,0,0)$	$(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})$
$(1,0,0)$	$(1,\frac{1}{2},\frac{1}{2})$
$(1,1,0)$	$(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})$
$(0,1,0)$	$(\frac{1}{2},1,\frac{1}{2})$
$(0,0,1)$	$(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$
$(1,0,1)$	$(\frac{1}{2},\frac{1}{2},1)$
$(1,1,1)$	
$(0,1,1)$	

Some crystal structures. بعض التراكيب البلورية

تركيب كلوريد الصوديوم

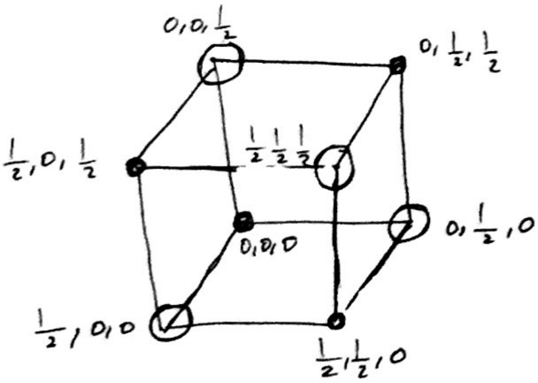
○ Cl^-
• Na^+



NaCl structure
(تركيب ناتج من تداخل خليتين fcc احداها Na والاخرى Cl)

تعد وحدة الخلية لتركيب كلوريد الصوديوم من الخلايا غير الاولية
ويمكن تصور هذه الخلية ناتجة من تداخل خليتين fcc احدهما تحوي Na^+ والاخرى Cl^- وحزاحة الواحدة عن الاخرى بمقدار $\frac{1}{2}$ على الخط الذي يربط ركنيين متقابلين.

يحيط بكل ايون Cl ستة ايونات من Na (والعكس صحيح)
تحوي وحدة الخلية من NaCl على اربعة ايونات Na واربعة ايونات Cl.



مواقع ايونات Na^+ وايونات Cl^- هي

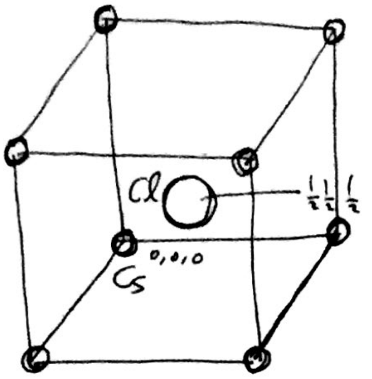
Na^+: $0,0,0$, $\frac{1}{2},\frac{1}{2},0$, $\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}$, $0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}$

Cl^-: $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$, $0,0,\frac{1}{2}$, $0,\frac{1}{2},0$, $\frac{1}{2},0,0$

قيمة ثابت الشبيكة a وهو 5.63 Å
ونصف قطر ذرة الصوديوم 0.45 Å
ونصف قطر ذرة الكلور 1.81 Å

هنالك العديد من البلورات لها نفس تركيب كلوريد الصوديوم منها

Crystal	a (Å)	Crystal	a (Å)
LiH	4.08	AgBr	5.77
MgO	4.20	PbS	5.92
MnO	4.43	KCl	6.29
NaCl	5.63	KBr	6.59



تركيب كلوريد السيزيوم CsCl :

يمكن تصور تركيب وحدة الخلية لـ CsCl عبارة عن تداخل شبيكتين مكعبة SC احدهما مكونة من ايونات Cl والاخرى من ايونات الـ Cs وحزاحة احداهما عن الاخرى بمقدار $\frac{1}{2}$ على الخط الذي يربط ركنيين متقابلين . وخلية CsCl هي خلية غير اولية وتتكون هذه الخلية من ذرتين كل ايون Cl محاط بـ 8 ايونات من Cs لوحدة الخلية (ايون Cl وايون Cs)

مواقع الذرات

Cs : (0,0,0)

Cl : $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$

نصف قطر ايون Cs : 1.9 Å

نصف قطر ايون Cl : 1.81 Å

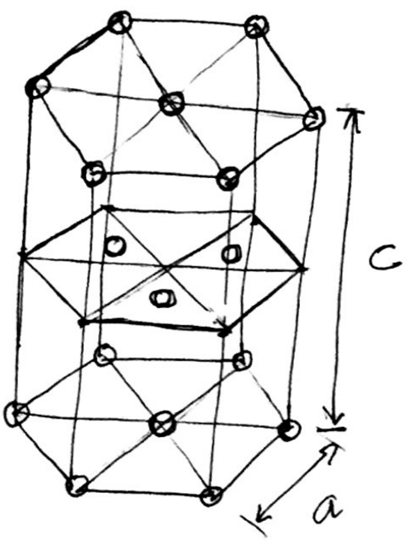
ثابت الشبيكة a = 4.11 Å

بعض البلورات التي لها نفس تركيب CsCl

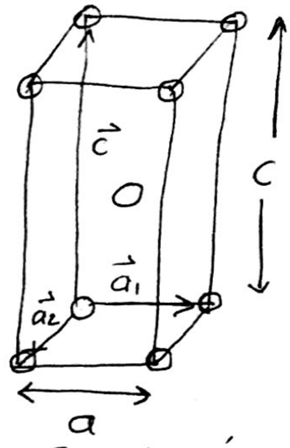
Crystal	a(Å)
BeCu	2.7
CuPb	2.99
AgMg	3.28
LiHg	3.29

التركيب السداسي محكم الرص (Hexagonal closed packed structure) (hcp)

في تركيب (hcp) هنالك ذرات في رؤوس الشكل السداسي وهنالك طبقة اخرى من الذرات في وسط الخلية السداسية وتوصف الخلية بدلالة $\vec{c}$ ، $\vec{a}$ (معاملات الشبيكة)



وحدة الخلية السداسية محكمة الرص
(hcp) unit cell



وحدة الخلية الاولية لـ hcp

القيمة المثالى لـ c هي $\boxed{c = 1.633\,a}$

مواقع الذرات $\boxed{0,0,0}$ و $\boxed{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}}$

احدى الذرات في نقطة الاصل — الذرة في وسط الخلية

بعض البلورات التي تمتلك (hcp)

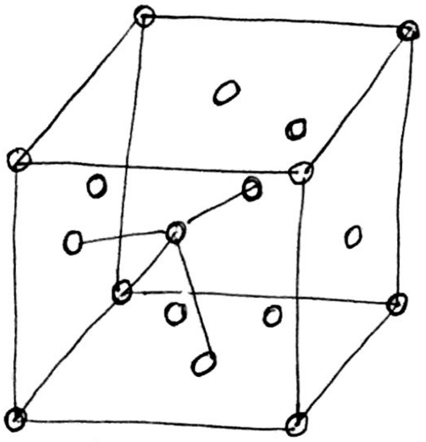
Crystal	c/a
He	1.633
Be	1.581
Mg	1.623
Ti	1.586
Zn	1.861
Cd	1.886
Co	1.622
Y	1.57

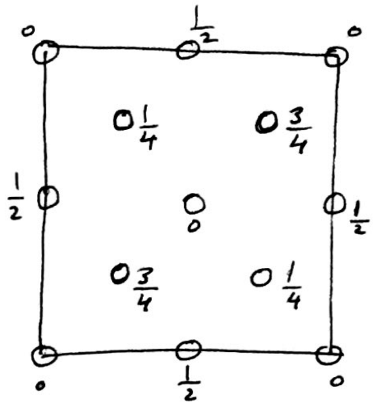
تركيب الماس Diamond structure

خلية الماس من الخلايا غير الاولية وهي ناتجة من تداخل شبيكتين من نوع fcc مزاحة احداهما عن الاخرى بمقدار $\frac{1}{4}$ باتجاه الخط الذي يربط ركنين متقابلين في المكعب كل شبيكة تحوي ذرات من نفس النوع

عامل الملئ لهذه الخلية في حالة الرص المحكم

$$P.f = \frac{\sqrt{3}\,\pi}{16} = 0.34$$





مواقع الذرات !

$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$ ، $\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$ و $0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ و $0,0,0$ ← الشبيكة الاولى

$\frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}$ و $\frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4}$ و $\frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4}$ ، $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ ← الشبيكة الثانية

نصف قطر ذرة الكاربون في شبيكة الماس $0.77\ \AA$ و $a = 3.56\ \AA$

بعض البلورات التي تمتلك تركيب الماس

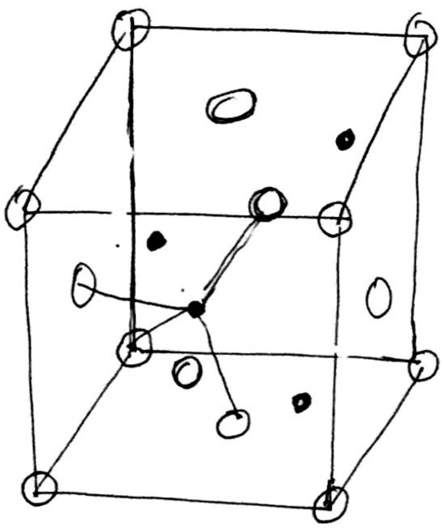
	Crystal	$a(\AA)$
الماس	C	3.567
السليكون	Si	5.43
الجرمانيوم	Ge	5.658
القصدير	Sn	6.49

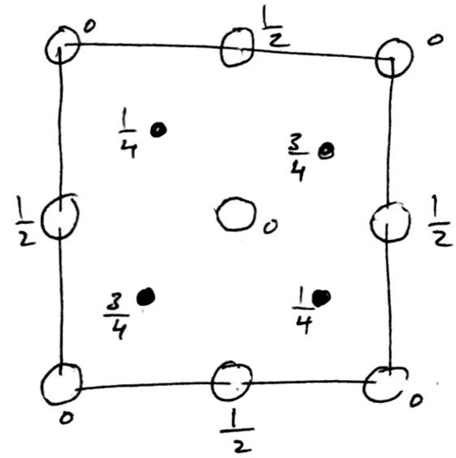
Zinc sulfide structure (Zinc Blends structure)

تركيب كبريتيد الخارصين ZnS

وحدة الخلية لهذا التركيب غير اوليه وهي ناتجة من تداخل شبيكتين من نوع fcc احدهما مكونه من ايونات Zn والاخرى من S مزاحة احداهما عن الاخرى بمقدار $\frac{1}{4}$ باتجاه القطر الرئيسي للمكعب.

هذا التركيب يشبه تركيب الماس الا انه مكون من نوعين من الذرات بدلاً من نوع واحد في تركيب الماس.





• S
○ Zn

مواقع الذرات

Zn : $(0,0,0)$, $(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})$, $(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})$

S : $(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4})$, $(\frac{1}{4},\frac{3}{4},\frac{3}{4})$, $(\frac{3}{4},\frac{1}{4},\frac{3}{4})$, $(\frac{3}{4},\frac{3}{4},\frac{1}{4})$

بعض البلورات التي تمتلك تركيب كبريتيد الخارصين ZnS

Crystal	a (Å)
CuF	4.26
GaP	5.45
ZnS	5.41
GaAs	5.65
CdS	5.82
AlAs	5.66
ZnSe	5.65

التآصر وتصنيف المواد الصلبة (The bonding & classification of Solid)

يطلق على القوى التي تربط الذرات او الجزيئات مع بعضها البعض بالاصرة (bond) ومن معرفة نوع وطبيعة الآصرة يمكن تفسير العديد من خصائص البلورات او المواد الصلبة . ومن هذه الخصائص التي تعتمد على طاقة الترابط الانضغاطية والصلابة وسهولة الذوبان والتمدد الحراري ودرجة حرارة الانتقال من حالة الى اخرى .

تصنف الأواصر الى : اواصر رئيسية واواصر ثانوية

الاواصر الرئيسية :

١. الايونية Ionic
٢. التساهمية Covalent
٣. الفلزية Metalic

الاواصر الثانوية

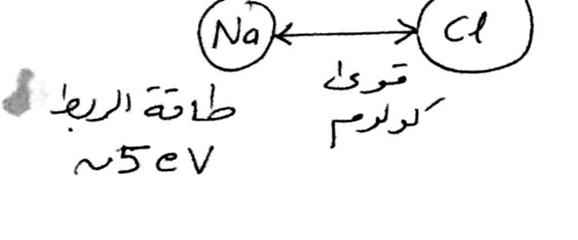
١. قوى فاندرفالز Van der Waals
٢. اواصر اخرى ضعيفة

الآصرة الايونية (Ionic bond)

تطلق هذه الاصرة على الترابط بين الايون الموجب والايون السالب (قوى كولوم) مثال ذلك $NaCl$ ، تتكون الاصرة من انتقال الكترون من الصوديوم الى الكلور .

$Na: 1s^2 2s^2 2p^6 \underline{3s^1}$

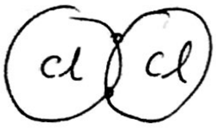
$Cl: 1s^2 2s^2 2p^6 \underline{3s^2 3p^5}$



* من خصائص الترابط الايوني
١. صلابة متوسطة
٢. الوزن النوعي متوسط
٣. درجة انصهار عالية
٤. غالبا رديئة التوصيل للكهربائية والحرارة
٥. عند الاذابة في المحاليل فان المحاليل تكون موصلة للكهربائية

الآصرة التساهمية : (Covalent bond)

تنشأ هذه الآصرة عند اشتراك ذرتان متجاورتان في الكتروناتها لإشباع غلافيها الخارجيين ليصبح تركيبها مستقراً . شرط ان لايحدث انتقال للالكترونات . مثال ذلك Cl_2 ، C ، Si ، Ge



$\Rightarrow Cl_2$

$$Cl : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$$

اما الكاربون والسليكون والجرمانيوم فانها كل ذرة تشترك مع اربعة ذرات مجاورة لها لتكوين الآصرة التساهمية

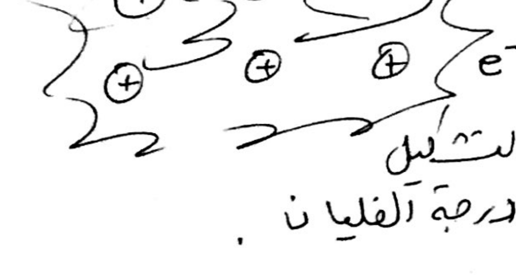
$$\begin{array}{ccccc} & & Si & & \\ & & \| & & \\ Si & = & Si & = & Si \\ & & \| & & \\ & & Si & & \end{array}$$

* من خصائص هذه المواد :

١. غير قابلة للذوبان بشكل عام .
٢. مستقرة .
٣. ذات درجات انصهار وغليان عاليتين جداً .
٤. لاتعطي محاليلها اي ايونات
٥. رديئة التوصيل للكهربائية في حالتها الصلبة والسائلة

الآصرة الفلزية او المعدنية (Metalic bond)

عندما تحوي الذرات على الكترونات تكافوء الكترون ، الكترونين او ثلاثة الكترونات فانها تتآصر بشكل مختلف عن الآصرة التساهمية وذلك بان الكترونات التكافوء تنفصل عن الذرات لتكوين الغاز الالكتروني السالب الشحنة وتبقى الذرات بشكل قلوب ايونية موجبة وهذا النوع من الآصرة يسمى بالآصرة الفلزية

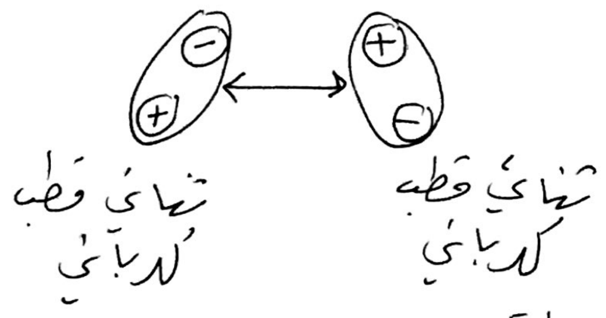


* من خصائص هذه المواد

١. التوصيل الحراري والكهربائي للفلز
٢. القابلية على الطرق والسحب وسهولة التشكيل
٣. انخفاض الصلابة ودرجة الانصهار ودرجة الغليان .

آصرة فان درفالز (Van der Waals bond)

هذه الاصرة ضعيفة مقارنة بالاصرة الايونية والتساهمية والفلزية وتنشأ من تفاعل ثنائي قطب كهربائي مع ثنائي قطب كهربائي اخر.



طبيعة قوى الترابط في البلورات

هنالك نوعين من القوى بين الذرات تبقي ذرات المادة الصلبة مع بعضها البعض وهذه القوى هي: قوى التجاذب التي تبقي الذرات مع بعضها عندما تكبر المسافة بين الذرات وقوى التنافر التي تمنع الذرات من ان تتقرب من بعضها بشكل قريب جداً. حيث ان الذرات تبقى في حالة توازن بين هذه القوى مما يعطي استقراراً للبلورة. وتعتمد طبيعة هذه القوى على نوع البلورات ان كانت ايونية او تساهمية او فلزية وغيرها من القوى الضعيفة الاخرى.

الطاقة الكلية U تساوي

$$\boxed{U = U_{att.} + U_{rep.}}$$

حيث ان

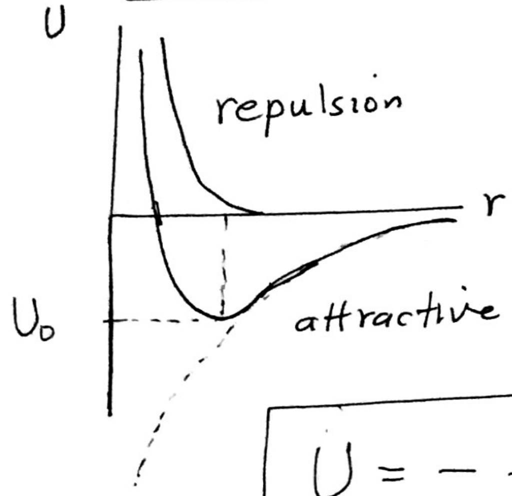
$$U_{att.} = \frac{-A}{r^n} \quad ; \quad U_{rep.} = \frac{B}{r^m}$$

A ، B ثوابت ، $U_{att.}$ قوى التجاذب و U_{rep} قوى التنافر

اغلب قوى التجاذب نتيجة تفاعل كولوم او نتيجة تفاعل ثنائي القطب الكهربائي للذرات مع بعضها البعض. اما قوى التنافر فتنشئ نتيجة تداخل توزيع الشحنة ومبدأ الاستبعاد لباولي فينشئ ميل من الكترونات الذرة a لتشغل مستويات الذرة b المشغولة اساساً (او العكس صحيح) ويمنع ذلك مبدأ الاستبعاد لباولي الاشغال المضاعف للمستويات فتنشأ قوى التنافر.

تعطى القوة F بين الذرات من العلاقة التالية :

$$\boxed{F = -\frac{\partial U}{\partial r}}$$



من الشكل :
F +ve for $r<r_0$
repulsive
F -ve for $r>r_0$
attractive

$$\boxed{U = -\frac{A}{r^n} + \frac{B}{r^m}}$$

$$\boxed{F = -\frac{nA}{r^{n+1}} + \frac{mB}{r^{m+1}}}$$

لايجاد مسافة التوازن r_0 اي المسافة التي يكون الجهد في النهاية الصغرى ويحقق الشروط التالية

1. $$\left.\frac{\partial U}{\partial r}\right|_{r=r_0} = 0$$

2. $$\left.\frac{\partial^2 U}{\partial r^2}\right|_{r=r_0} > 0$$

من الشرط الاول نحصل على :

$$\frac{-nA}{r_0^{n+1}} + \frac{mB}{r_0^{m+1}} = 0$$

$$\therefore \boxed{r_0^{m-n} = \frac{m}{n}\frac{B}{A}} \qquad (1)$$

من الشرط الثاني

$$-\frac{n(n+1)A}{r_0^{n+2}} + \frac{m(m+1)B}{r_0^{m+2}} > 0$$

$$\therefore \boxed{r_0^{m-n} < \frac{B}{A}\frac{m(m+1)}{n(n+1)}} \qquad (2)$$

من المعادلة (1) و (2) نحصل على ان

$$\boxed{m>n}$$

وهذا يعني ان قوى التنافر تكون اقصر مدى من قوى التجاذب.

طاقة الشبكة البلورية (Crystal lattice energy)

يمكن تعريف طاقة الشبكة البلورية بأنها الطاقة المتحررة عندما يترتب مول واحد من الايونات الموجبة ومول واحد من الايونات السالبة بشكل هندسي معين (الشبكة البلورية) وحساب الطاقة يعتمد على نوع الاواصر بين الذرات او الايونات في حالة طاقة الجذب الكهربائي

$$\boxed{U_{att.} = \frac{-Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}} \quad (1)$$

حيث ان Z_1e شحنة الايون الموجب و Z_2e شحنة الايون السالب

طاقة التجاذب للمزدوج الايوني

$$\boxed{U_{att.} = \frac{-A Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}} \quad (2)$$

A ثابت مادلونك (Madelung const.)

هذا الثابت يعتمد مقداره على بنية البلورة فقط ولا يعتمد على حجم او شحنة الايونات.

$$U_{rep.} = \frac{B}{r^n} \quad \text{(طاقة التنافر)}$$

الطاقة الكلية

$$U = U_{att.} + U_{rep.}$$

$$U = \frac{-NAZ_1Z_2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + \frac{NB}{r^n}$$

N عدد افوكادرو $N = 6.0225\times10^{23}\ mole^{-1}$

يمكن حساب مسافة التوازن r_0 بتطبيق الشرط

$$\left.\frac{\partial U}{\partial r}\right|_{r=r_0} = 0$$

$$\left.\frac{\partial U}{\partial r}\right|_{r=r_0} = \frac{NAZ_1Z_2e}{4\pi\varepsilon_0 r_0^2} - \frac{NnB}{r_0^{n+1}} = 0$$

$$B = \frac{AZ_1Z_2e^2 r_0^{n-1}}{4\pi\varepsilon_0 n}$$

$$\boxed{U_0 = \frac{-NAZ_1Z_2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}\left(1-\frac{1}{n}\right)}$$

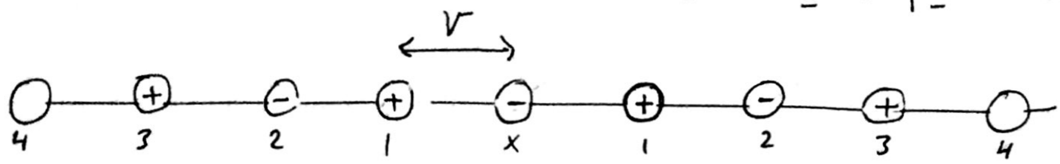
Born - Lande equation

يمكن تحديد قيم n لعدد من الايونات كما في الجدول التالي :

n	Ions
7	Na^+
9	Cu^+, Cl^-
10	Ag^+
12	Au^+

حساب ثابت مادلونك للسلسلة ببعد واحد :

حساب ثابت مادلونك A لشحنات متساوية في المقدار q ومتعاكسة بالإشارة على خط مستقيم كما في الشكل



نحسب طاقة التجاذب (من جيران المرتبة الاولى) :

$$U_{att} = -\frac{2q^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

طاقة التنافر (من جيران الاقرب من المرتبة الثانية)

$$U_{rep} = \frac{2q^2}{4\pi\varepsilon_0 (2r)}$$

طاقة التجاذب (من جيران المرتبة الثالثة)

$$U_{att} = -\frac{2q^2}{4\pi\varepsilon_0 (3r)}$$

وهكذا فان الطاقة الكلية هي

$$U = \frac{-2q^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\left[\frac{1}{1} - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \frac{1}{5} - \cdots\right]$$

لايجاد قيمة السلسلة ، لدينا

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \cdots$$

اذا كانت $x=1$ لدينا

$$\ln(2) = 1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \cdots$$

$$\therefore \boxed{U = \frac{-2q^2 \ln 2}{4\pi\varepsilon_0 r}} \quad \Rightarrow \quad A = 2\ln 2$$

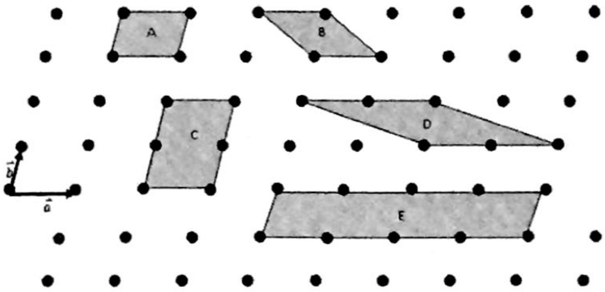
ثابت مادلونك للسلسلة الخطية

أسئلة ومسائل فيزياء الحالة الصلبة / التركيب البلوري

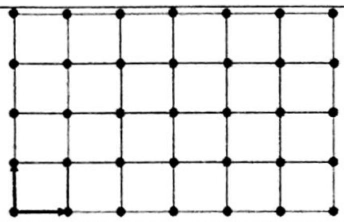
س1/ ارسم الشبيكة البلورية إذا كانت المتجهات الاساسية للشبيكة:

1. $\vec{a} = 2\,\hat{x}\ ;\ \vec{b} = 2\,\hat{y}$
2. $\vec{a} = 2\,\hat{x}\ ;\ \vec{b} = \hat{x} + 2\,\hat{y}$
3. $\vec{a} = \hat{x}\ ;\ \vec{b} = \hat{x} + \hat{y}$

س2/ في الشكل المجاور و بدلالة المتجهات $\vec{a}$ و $\vec{b}$ بين اي من الخلايا اولية واي منها غير اولية، ثم جد عدد النقاط لوحدة الخلية ومساحة كل خلية.

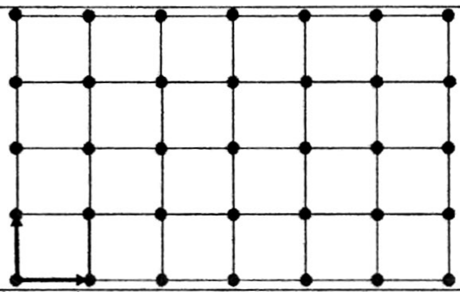


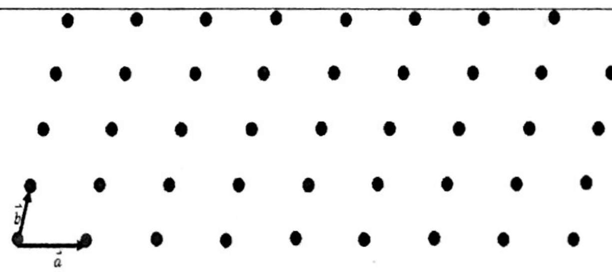
س3/ في الشبيكة المربعة في بعدين، حدد نقطة معينة في وسط الشكل، ثم جد عدد ومسافة الجيران الأقرب من المرتبة الاولى والثانية والثالثة والرابعة، ضع النتائج كما في الجدول ادناه.



المرتبة	العدد	المسافة
1		
2		
3		
4		
5		

س4/ عين خلية ويكنر ستز لشبيكة الثنائية المائلة والمربعة





س5/ اذا كانت متجهات الانتقال الاولية لشبيكة في الفضاء الثلاثي ، عين نوع النظام البلوري لكل حالة ثم جد حجم الخلية الاولية

a) $\vec{a} = 3\hat{x} + \hat{y} - \hat{z},\ \vec{b} = 6\hat{x} - \hat{y} + 2\hat{z},\ \ \vec{c} = \hat{x} + 3\hat{y} + 5\hat{z}$

b) $\vec{a} = 3\hat{x} + 3\hat{y},\ \vec{b} = 3\hat{x} - 3\hat{y},\ \ \vec{c} = 5\hat{z}$

c) $\vec{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + \hat{y}),\ \vec{b} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} - \hat{y}),\ \ \vec{c} = \hat{z}$

d) $\vec{a} = 4\hat{x},\ \ \vec{b} = -2\hat{x} + 2\sqrt{3}\hat{y},\ \ \vec{c} = 6\hat{z}$

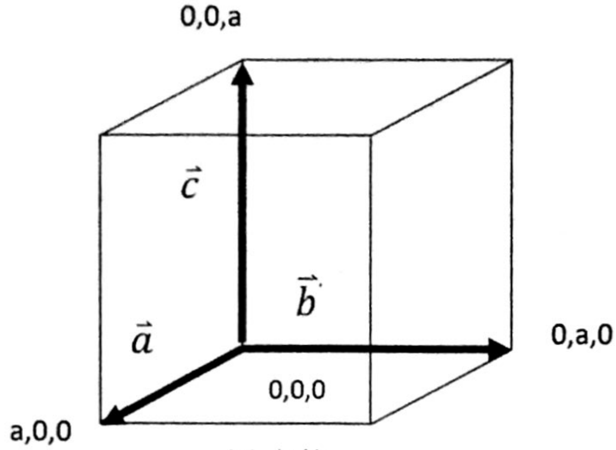
س6/ متجهات الخلية السداسية الاولية : $\vec{a} = \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{x} - \frac{1}{2}\hat{y}\ \ ,\vec{b} = a\hat{y}\ \ \vec{c} = c\hat{z}$

ارسم الخلية السداسية البدائية جد حجم وحدة الخلية البدائية وقارن ذلك مع حجم الخلية السداسية غير البدائية.

س7/ في النظام الرباعي القائم tetragonal system $(\alpha = \beta = \gamma = 90, a = b \neq c)$ حجم وحدة الخلية $V{=}a^2c$ اكتب متجهات الانتقال لهذه الخلية ، ارسم هذه الخلية ثم عين متجهات الانتقال الأولية لهذه الخلية ثم جد حجم الخلية الأولية.

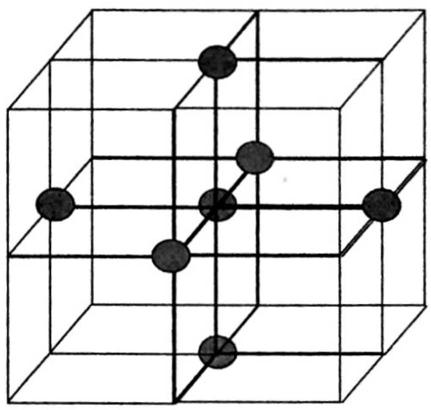
س8/ في النظام الرباعي القائم ممركز الجسم tetragonal system $(\alpha = \beta = \gamma = 90, a = b \neq c)$ ، ارسم هذه الخلية ثم عين متجهات الانتقال الأولية لهذه الخلية ثم جد حجم الخلية الأولية. وقارن هذا الحجم مع حجم وحدة الخلية $V{=}a^2c$.

س9/ من الشكل (1) جد متجهات الانتقال الاساسية للمكعب البسيط ، ثم جد حجم الخلية ، جد مجموعتين جديدتين لمتجهات الانتقال الاساسية للمكعب البسيط وجد حجم الخلية لكل حالة ثم قارن بين النتائج. ارسم وحدة الخلية في كل حالة.

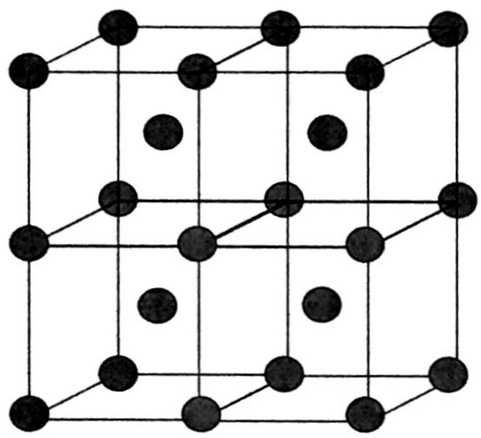


الشكل (1)

س10/ في الشكل (2) ، لدينا عدة خلايا متراصة من المكعب البسيط ، فاذا كانت نقطة الشبيكة الوسطية تبعد بمسافة a عن الجيران الاقرب من المرتبة الاولى، جد اماكن الجيران الاقرب من المرتبة الثانية على الشكل واحسب مسافة الجيران الاقرب من المرتبة الثانية . جد اماكن الجيران الاقرب من المرتبة الثالثة على الشكل واحسب مسافة الجيران الاقرب من المرتبة الثالثة.



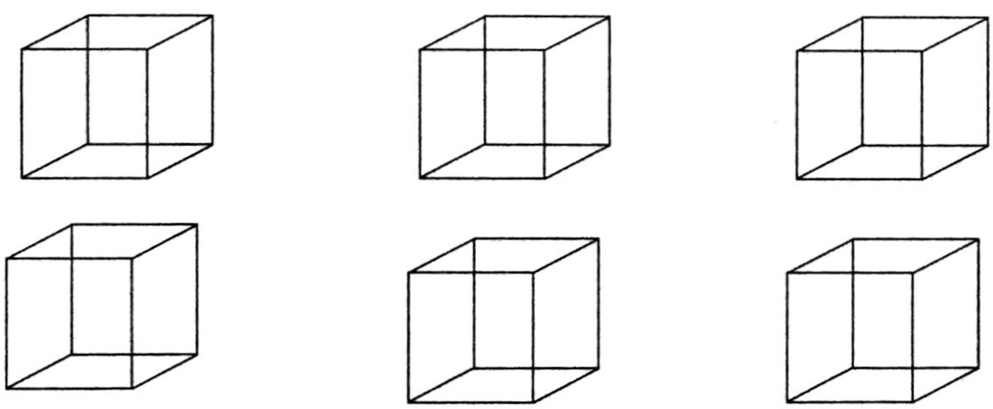
الشكل (2)



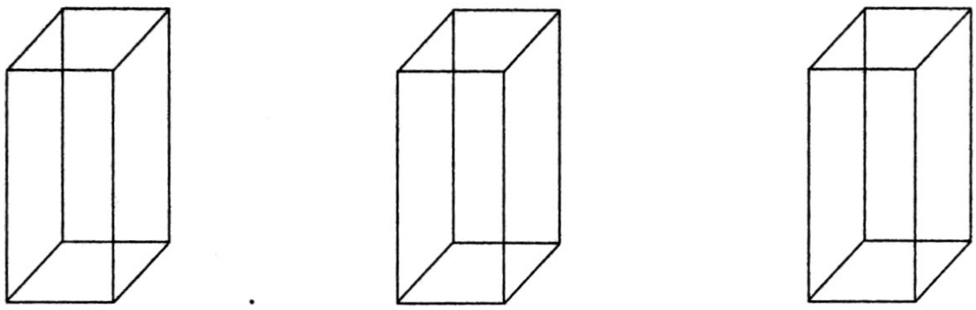
الشكل(3)

س11/ في الشكل (3)، لدينا عدة خلايا متراصة من المكعب الممركز الجسم ، اذا كان طول الضلع للمكعب a عين الجيران الاقرب من المرتبة الاولى و الثانية و الثالثة على الشكل واحسب مسافة الجيران الاقرب من المرتبة الاولى و الثانية و الثالثة.

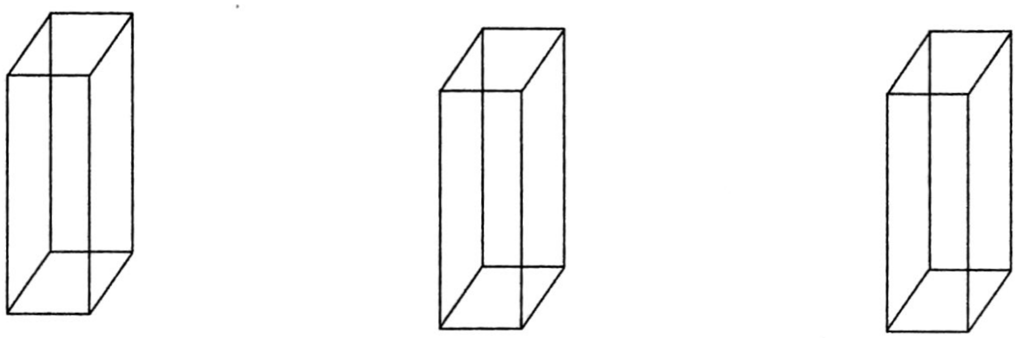
س12/ في الشكل التالي عين عناصر التماثل الخاصة بالمكعب الدورانية والانعكاسية على الشكل



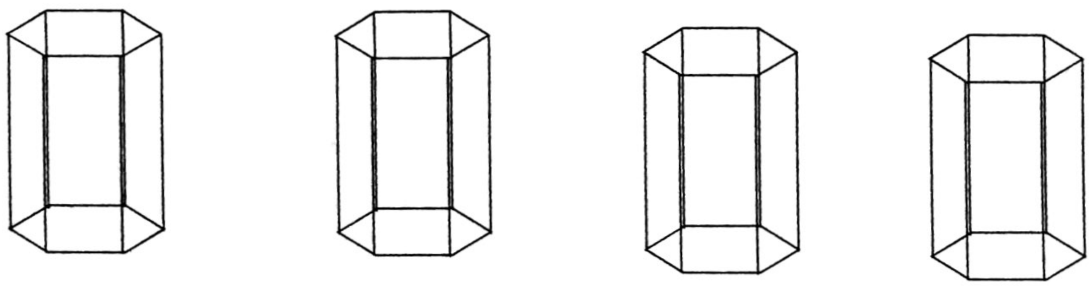
س13/ في الشكل التالي عين عناصر التماثل الخاصة بالرباعي القائم الدورانية والانعكاسية على الشكل



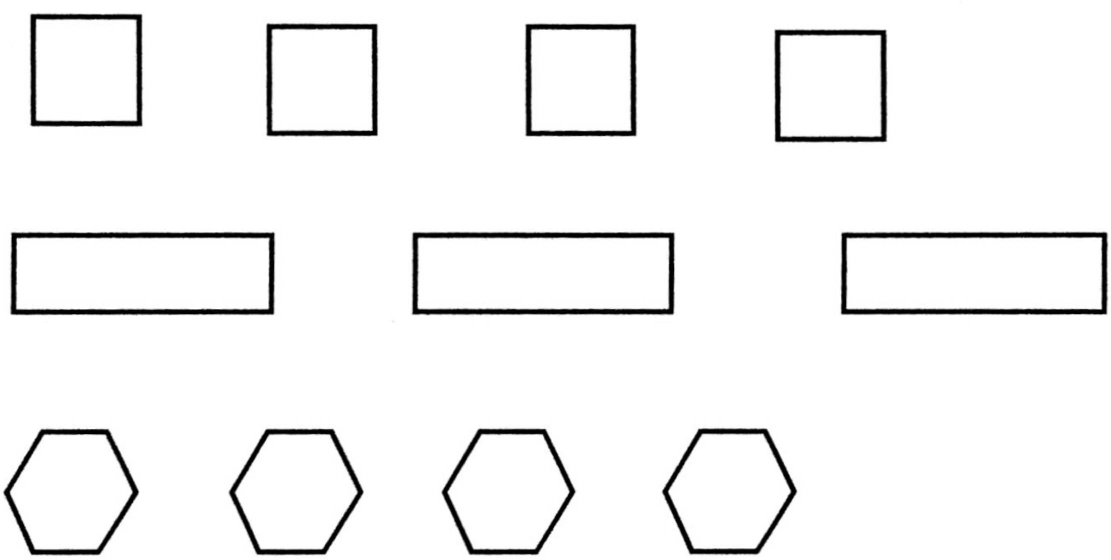
س14/ في الشكل التالي عين عناصر التماثل الخاصة بالمعيني القائم الدورانية والانعكاسية على الشكل



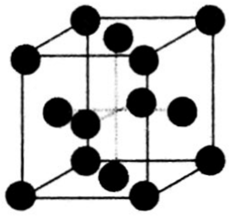
س15/ ارسم محاور التماثل الدوراني كافة لهذه للخلية السداسية .



س16/ في الشكل التالي عين عناصر التماثل الخاصة الدورانية والانعكاسية على الاشكال : المربع والمستطيل والسداسي



س17/ جد عامل الملئ packing ratio ، الذي يعرف بانه النسبة بين حجم الذرات التي تشغل وحدة الخلية الى حجم الخلية الكلي، في النظام المكعب الممركز الاوجه fcc

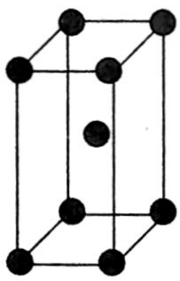


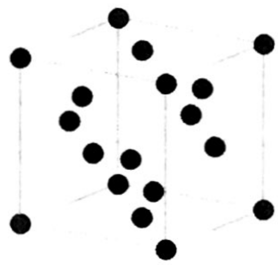
س18/ أستخدم الجدول التالي لحساب الكثافة للمواد الصلبة التالية :

الوزن الذري Atomic weight	$c(A^o)$	$a(A^o)$	التركيب البلوري Structure	اسم العنصر Elements
26.98		4.04	Fcc	Al
55.85		2.86	Bcc	Fe
65.37	4.94	2.66	Hcp	Zn
28.09		5.43	Diamond	Si

س19/ في النظام الرباعي القائم tetragonal system $(\alpha = \beta = \gamma = 90, a = b \neq c)$ حجم وحدة الخلية $V=a^2c$ إذا كان لدينا خلية I ممركزة الجسم جد عامل الملء لهذه الخلية وكم تكون النسبة بين a و c في حالة الرص المحكم .

س20/ الجرمانيوم له تركيب الماس Diamond ، جد عامل الملء لهذه الخلية.



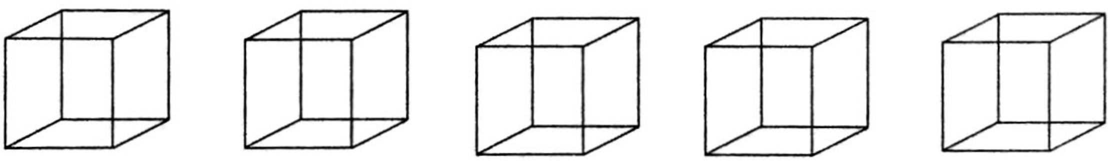


س21/ جد معاملات ميلر للمستويات التالية والتي تتقاطع مع المحاور الاساسية في النقاط

1. $x = 1, y = 1, z = 1$
2. $x = 2, y = 2, z = 2$
3. $x = 1, y = 2, z = 3$
4. $x = 2, y = 2, z = 4$
5. $x = 4, y = 3, z = 6$
6. $x = 3, y = 8, z = 2$

س22/ عين المستويات التالية داخل الخلية المكعبة

a) 100
b) 110
c) 111
d) 010
e) 122



س23/ في الخلية المكعبة جد الزاوية بين المستويات

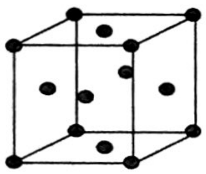
a) 100 و 111
b) 111 و 110
c) 122 و 111
d) 011 و 101
e) 110 و 121

س24/ جد المسافات البينية بين المستويات في الخلية المكعبة في الاتجاهات التالية:

a) 100
b) 110
c) 111
d) 121
e) 321
f) 512

س25/ عين معاملات ميلر لأوجه الست لـ

1. خلية مكعبة
2. خلية رباعي قائم
3. خلية المعيني القائم

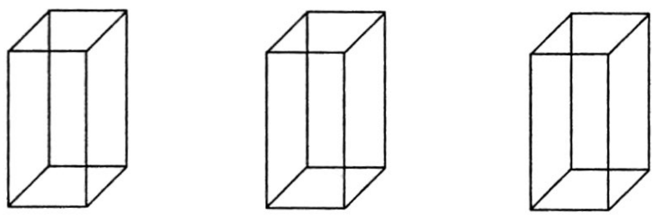


س26/ ارسم خلية مكعبة نوع fcc ثم عين المستويات التالية (100) ، (110) ، (111)

ثم جد كثافة النقاط السطحية للمستويات الثلاث.

س27/ ارسم خلية مكعبة ثم عين الاتجاهات التالية : [100], [110], [111], [011], [133], [124]

س28/ عين المستويات التالية داخل خلية الرباعي القائم [111], [110], [100]

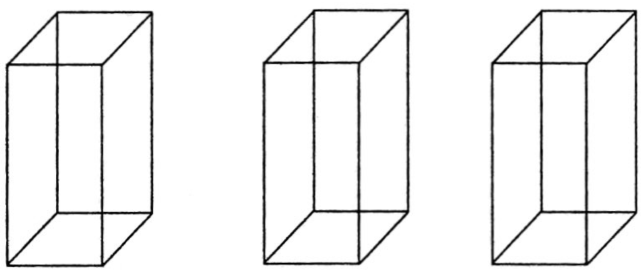


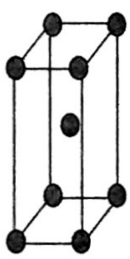
س29/ جد المسافة بين المستويات في بلورة من النظام الرباعي القائم بالاتجاهات 110 و 111 و 100 علما بان a=4.2A°، c=7.3A°.

س30/ جد المسافة بين المستويات في بلورة من النظام المعيني القائم بالاتجاهات 110 و 111 و100 علما بان a=4.1A° ، b=5.3A° c=7.5A°.

س31/ عين المستويات التالية داخل خلية المعيني القائم

a) 100
b) 110
c) 111

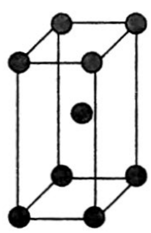




س31/ في النظام الرباعي القائم tetragonal system $(\alpha = \beta = \gamma = 90, a = b \neq c)$

الخلية في الشكل غير اولية ، اذا كانت متجهات الانتقال للخلية $\vec{a} = a\hat{x}$; $\vec{b} = a\hat{y}$; $\vec{c} = c\hat{z}$

بين ان حجم هذه الخلية : $V=a^2c$ عين متجهات الانتقال الاساسية للخلية ثم جد حجم وحدة الخلية الاولية



س32/ في النظام الرباعي القائم : اذا كانت : $|\vec{a}| = \frac{1}{2}|\vec{c}|$; $|\vec{a}| = |\vec{b}|$

جد مسافة وعدد الجيران الاقرب من المرتبة

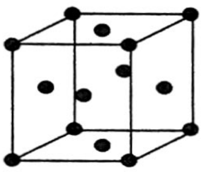
الاولى والثانية والثالثة . عين ذلك على الخلية

س24/ جد المسافات البينية بين المستويات في الخلية المكعبة في الاتجاهات التالية:

100 (a
110 (b
111 (c
121 (d
321 (e
512 (f

س25/ عين معاملات ميلر لأوجه الست لـ

1. خلية مكعبة
2. خلية رباعي قائم
3. خلية المعيني القائم

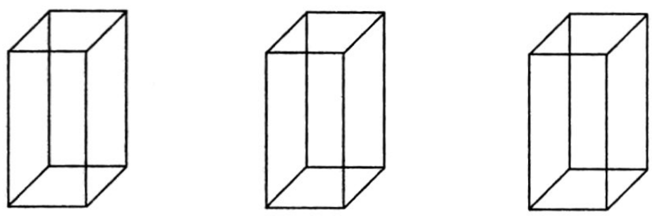


س26/ ارسم خلية مكعبة نوع fcc ثم عين المستويات التالية (100) ، (110) ، (111)

ثم جد كثافة النقاط السطحية للمستويات الثلاث.

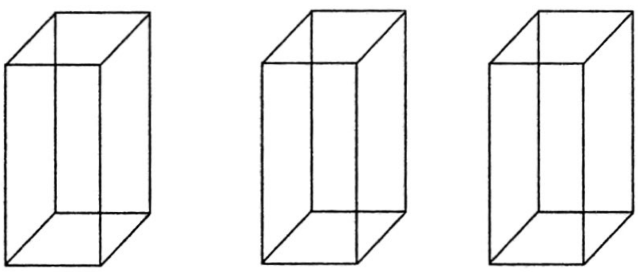
س27/ ارسم خلية مكعبة ثم عين الاتجاهات التالية : [124] ,[133] ,[011] ,[111] ,[110] ,[100]

س28/ عين المستويات التالية داخل خلية الرباعي القائم [111] ,[110] ,[100]



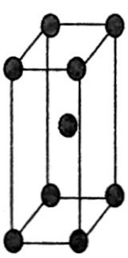
س29/ جد المسافة بين المستويات في بلورة من النظام الرباعي القائم بالاتجاهات 110 و 111 و 100 علما بان $a=4.2A^o$ ، $c=7.3A^o$.

س30/ جد المسافة بين المستويات في بلورة من النظام المعيني القائم بالاتجاهات 110 و 111 و100 علما بان $a=4.1A^o$ ، $b=5.3A^o$ $c=7.5A^o$.



س31/ عين المستويات التالية داخل خلية المعيني القائم

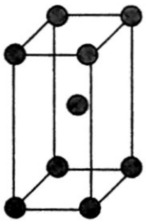
100 (a
110 (b
111 (c



س31/ في النظام الرباعي القائم tetragonal system $(\alpha = \beta = \gamma = 90, a = b \neq c)$

الخلية في الشكل غير اولية ، اذا كانت متجهات الانتقال للخلية $\vec{c} = c\hat{z}$; $\vec{b} = a\hat{y}$; $\vec{a} = a\hat{x}$

بين ان حجم هذه الخلية : $V=a^2c$ عين متجهات متجهات الانتقال الاساسية للخلية ثم جد حجم وحدة الخلية الاولية



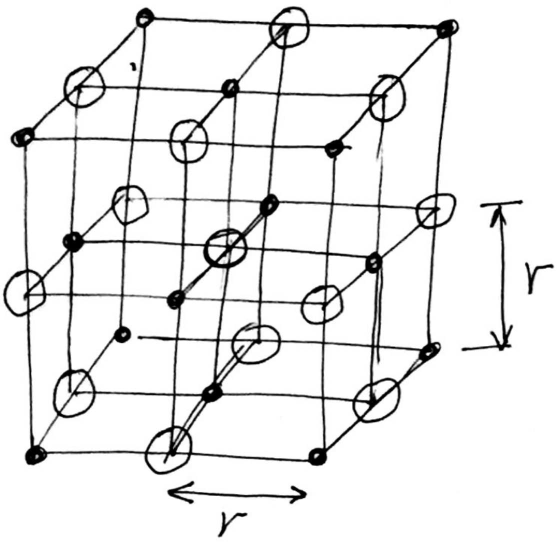
س32/ في النظام الرباعي القائم : اذا كانت : $|\vec{a}| = \frac{1}{2}|\vec{c}|$; $|\vec{a}| = |\vec{b}|$

جد مسافة وعدد الجيران الاقرب من المرتبة

الاولى والثانية والثالثة . عين ذلك على الخلية

حساب ثابت مادلونك في الابعاد الثلاثة :

لحساب ثابت مادلونك في شبيكة ثلاثية الابعاد نأخذ بلورة كلوريد الصوديوم نختار ايون الكلور في وحدة الخلية كنقطة مرجعية (الايون الوسطي) وهو محاط بـ 6 ايونات صوديوم Na



$$U_{att} = \frac{-6q^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

وطاقة التنافر بين ايون Cl وايونات Cl (الجيران الاقرب من المرتبة الثانية)

$$U_{rep.} = \frac{12q^2}{4\pi\varepsilon_0\sqrt{2}\,r}$$

وطاقة التجاذب مع Na (الجيران الاقرب من المرتبة الثالثة)

$$U_{att.} = \frac{-8q^2}{4\pi\varepsilon_0\sqrt{3}\,r}$$

وهكذا ، يمكن حساب طاقة التجاذب والتنافر لبقية الايونات بنفس الطريقة وبجمع الحدود نحصل على السلسلة

$$U = \frac{-q^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\left[\frac{6}{1} - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \cdots\right]$$

$\therefore$ ثابت مادلونك A يساوي

$$A = \left[6 - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \frac{6}{2} + \cdots\right] \simeq 1.74756$$

حيود الاشعة السينية والبنية البلورية :

لدينا ثلاثة طرق للحصول على معلومات حول البنية البلورية وتحديد التركيب البلوري للبلورات . وهذه الطرق هي

١. حيود الاشعة السينية
٢. حيود الالكترونات
٣. حيود النيوترونات

باستخدام هذه الطرق يمكن معرفة التركيب البلوري ومعرفة ثابت الشبيكة ومواقع الذرات في الشبيكة البلورية . كما هو معلوم ان الطول الموجي لاشعة X مقارب للمسافة بين الذرات في الشبيكة البلورية $\sim 1\,\mathring{A}$ لذا فان البلورة تسلك سلوك محزز الحيود بالنسبة لاشعة X من دراسة الاشعة الحادة يمكن معرفة التركيب البلوري وثابت الشبيكة .

- العلاقة بين طاقة الفوتون للاشعة السينية والطول الموجي هي

$$\boxed{\lambda(\mathring{A}) = \frac{12.4}{E(KeV)}} \quad \text{—— } (1)$$

λ الطول الموجي للاشعة السينية ، E طاقة الاشعة السينية .

- في حالة حيود الالكترونات فان العلاقة بين طاقة الالكترون والطول الموجي للالكترونات (طول موجة دي بروكلي)

$$\boxed{\lambda(\mathring{A}) = \frac{12}{\sqrt{E(eV)}}} \quad \text{—— } (2)$$

λ طول موجة دي بروكلي للالكترون و E طاقة الالكترون بـ (eV)

- في حالة النيوترونات

$$\boxed{\lambda(\mathring{A}) = \frac{0.28}{\sqrt{E(eV)}}} \quad \text{—— } (3)$$

λ طول موجة دي بروكلي للنيوترون ، E طاقة النيوترون بـ (eV)

قانون براك للحيود (The Bragg Diffraction Law) .

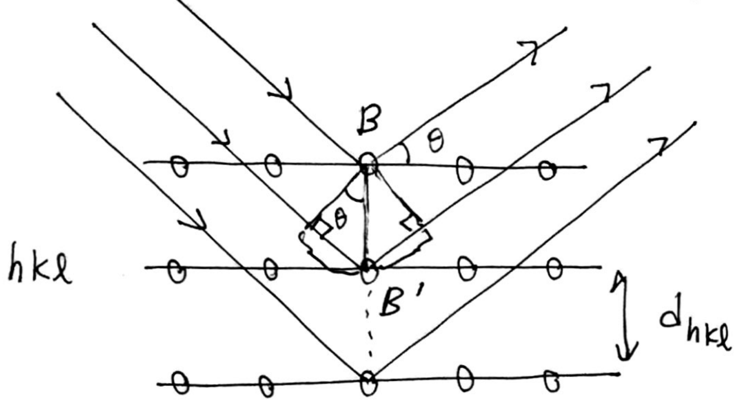
وضع براك علاقة تربط المسافة البينية بين المستويات البلورية والطول الموجي للاشعة X . وهذه العلاقة

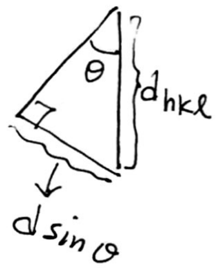
$$\boxed{2\, d_{hkl} \sin\theta = n\lambda} \quad \text{Bragg Law —— } (4)$$

يمكن اشتقاق هذا القانون بسهولة من ملاحظة فرق المسار بين الشعاع الساقط على النقطة B و B' وهو

$$2d_{hkl}\sin\theta$$

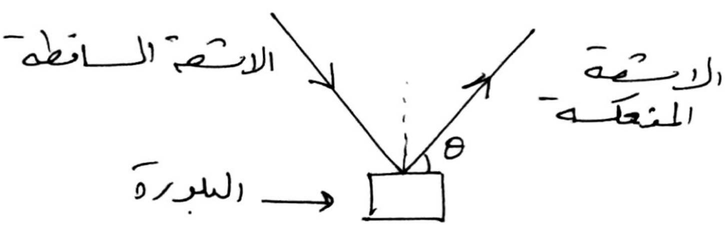
وهذا الفرق يساوي اعداد صحيحة من الطول الموجي $n\lambda$ للحصول على تداخل بناء

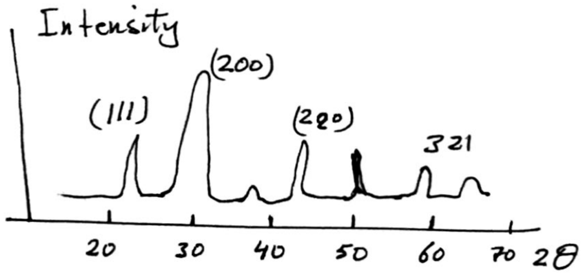




شرط براك لحدوث الانعكاس بين المستويات المتعاقبة تفصلها المسافة d_{hkl} هو

شرط براك $\boxed{\lambda \le 2d_{hkl}}$ —— (5)





معادلة براك $\boxed{2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda}$ والعلاقة بين الشدة والزوايا في الشكل تمثل حالات التداخل البناء في تلك الاتجاهات ويمكن تحديد المستويات التي تمثل هذه الحالات بالرجوع الى قانون براك والمسافة بين المستويات d_{hkl}.

- في حالة البلورات المكعبة لدينا

$$\boxed{d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}} \quad —— (6)$$

بالتعويض بالمعادلة (4) نحصل على ($n=1$)

$$\boxed{\sin^2\theta_{hkl} = \frac{\lambda^2}{4a^2}(h^2+k^2+l^2)} \quad —— (7)$$

من تحديد زوايا الحيود عملياً من المستويات hkl يمكن تحديد ثابت الشبيكة a للبلورة. مثال ذلك.

في الاتجاه 110 لدينا

$$\boxed{\sin^2\theta_{110} = \frac{\lambda^2}{2a^2}}$$

θ تحدد عملياً و λ معلومة
يمكن تحديد a .

• في النظام الرباعي القائم لدينا

$$\boxed{\sin^2\theta_{hkl} = \frac{\lambda^2}{4}\left(\frac{h^2+k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}\right)}$$

• يمكن الحصول على علاقات اخرى لبقية الانظمة البلورية بوضع d_{hkl} المناسبة وايجاد $\sin^2\theta_{hkl}$ لكل نظام.

* في دراسة الحيود في البلورات يجب التمييز بين الاستطارة او التشتت والحيود فالاستطارة هي انحراف الشعاع عن مساره نتيجة تفاعله مع المادة وتكون الاستطارة مرنة اذا حصل الانحراف بدون فقدان طاقة. وغير مرنة اذا كان هنالك فقدان للطاقة اثناء الاستطارة. اذا مر شعاع في وسط مادي فانه يستطيع وتعمل جسيمات الوسط كمرآيا تولد انعكاس عشوائي. وتحدث هذه الحالة عندما تكون ابعاد الجسم كبيرة مقارنة مع الطول الموجي للشعاع الساقط.
اما اذا كانت ابعاد الجسيمات للوسط اصغر من الطول الموجي للشعاع الساقط فان هذا التشتت يسمى بالحيود وتتصرف جسيمات الوسط كمراكز للاشعاع وتشتت الشعاع الساقط في كل الاتجاهات لذا وبذلك يمكن اعتبار الحيود كحالة خاصة من الاستطارة.

* في حيود الالكترونات وبسبب الشحنة للالكترونات فانها تتفاعل بقوة مع المادة ولا تستطيع خرق المادة اكثر من بضع مئات من الـ Å قبل ان تعاني من التشتت ، لذا تستخدم في دراسة سطوح البلورات والاغشية الرقيقة .

* اما في حيود النيوترونات ، فالنيوترونات متعادلة الشحنة ولكنها تمتلك عزم مغناطيسي لذا تستخدم في دراسة التركيب البلوري للبلورات المغناطيسية حيث يتفاعل النيوترون مع الالكترونات في هذه البلورات اضافة الى تفاعله مع نوى الذرات اما في البلورات غير المغناطيسية فان النيوترون يتفاعل مع نوى الذرات فقط لان محصلة العزوم المغناطيسية للالكترونات تساوي صفراً . لذا فان من دراسة حيود النيوترونات يمكن التمييز بين العناصر المتجاورة في الجدول الدوري والتمييز بين نظائر العنصر الواحد. وكذلك حيود النيوترونات يكون مفيد جداً في دراسة الاهتزازات البلورية .

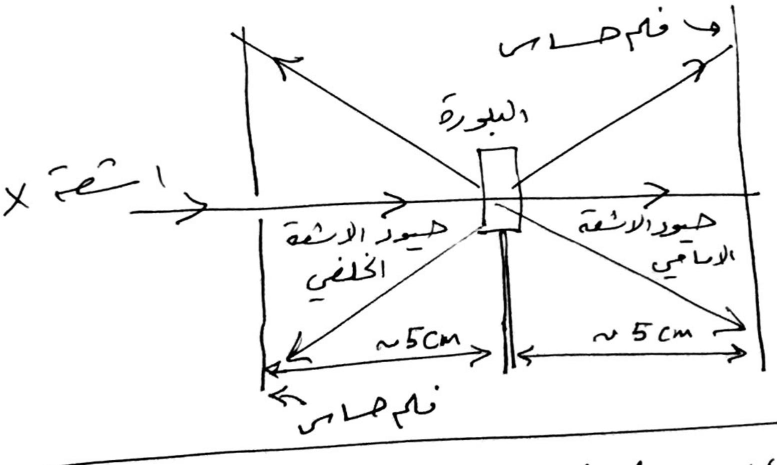
* في حيود الاشعة السينية التي تستخدم لدراسة التركيب البلوري حيث ان الطول الموجي بحدود (Å 1 nm) ويمكن التمييز بين نوعين من الاشعة السينية وحسب آلية التوليد لهذه الاشعة حيث ان سقوط الالكترونات السريعة على الهدف الفلزي ينتج عنه

- طيف مستمر من فوتونات الاشعة السينية نتيجة تباطؤ الالكترونات وانحرافها بسبب شحنات النويات لذرات الهدف .
- طيف خطي نتيجة التصادم غير المرن بين الالكترونات الساقطة والالكترونات القريبة من نوى الذرات للهدف .

الطرق التجريبية لدراسة حيود الاشعة السينية :

١. طريقة لاوي Laue Method

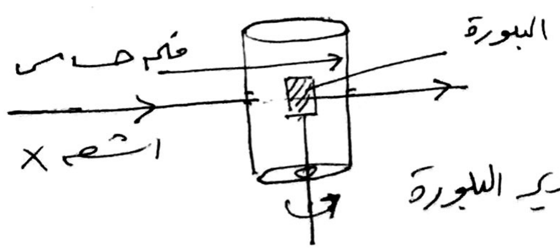
في هذه الطريقة تبقى البلورة ساكنة لا تتحرك عند سقوط الاشعة عليها بصورة عمودية والطول الموجي للاشعة غير احادي . لذا فان كل مجموعة من المستويات تختار احد الاطوال الموجية المناسبة لها والتي تحقق قانون براك للحيود ، والحزمة المحادة تسقط على فلم حساس وتظهر الاشعة بشكل بقع وشكل البقع يحدده التركيب البلوري للعينة . وتعد هذه الطريقة اسهل الطرق للتعرف على التماثل البلوري ويمكن تحديد وحدة الخلية ولكن لا تستطيع هذه الطريقة تحديد القيمة العددية لحجم وحدة الخلية .



طريقة لاوي

٢. طريقة تدوير البلورة Rotating Crystal Method

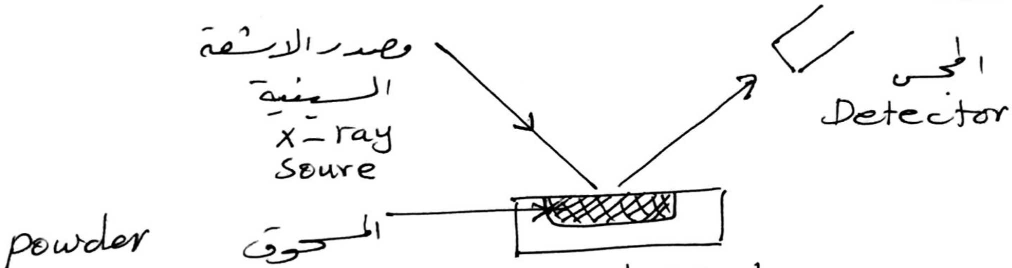
في هذه الطريقة يتم تدوير البلورة بشكل مستمر حول محور ثابت عمودي على اتجاه الاشعة حيث تتغير زاوية السقوط باستمرار وباستخدام طول موجي احادي للاشعة يتم استلام الاشعة المحادة على فلم حساس داخل الاسطوانة ونحصل على صورة الحيود بشكل بقع على الفلم الحساس .



طريقة تدوير البلورة

٣. طريقة المسحوق Powder method :

يتم في هذه الطريقة وضع البلورة بشكل مسحوق ويتم تسليط الاشعة السينية (مصدر احادي) على المسحوق ويتم استلام الاشعة المحادة من النموذج ويتم تسجيل هذه الاشعة بواسطة مجس موضوع في مكان محدد



طريقة المسحوق

في هذه الطريقة يستخدم مصدر احادي الموجة و الموجة المنعكسة لعدة قيم لزوايا براك في آن واحد وذلك بسبب التوجه العشوائي لحبيبات المسحوق حيث يتحقق قانون براك . وهذه الطريقة تعطي قيم ل ه للسطوح المختلفة ثم يتم مقارنة هذه النتائج بجداول خاصة لغرض معرفة معاملات ميلر لها . ثم يتم معرفة تركيب المادة .

مقارنة بين الطرق الثلاث لحيود الاشعة السينية .

الاستعمال	طريقة لاوي	طريقة تدوير البلورة	طريقة المسحوق
التعرف على نظام البلورة	غير ممكن	ممكن تحت شروط خاصة	ممكن
معاملات او احداثيات الشبيكة	غير ممكن	ممكن	ممكن
معاملات السطوح	صعب	ممكن	صعب
توجيه البلورة	ممكن	ممكن تحت شروط	غير ممكن

الشبيكة المقلوبة (Reciprocal lattice)

لكل شبيكة حقيقية هنالك شبيكة مقلوبة لها و يعتمد شكل الشبيكة المقلوبة على شكل الشبيكة الحقيقية. سميت الشبيكة المقلوبة بهذا الاسم لان ابعاد الشبيكة لها وحدات هي معكوس وحدة الطول (في الشبيكة الحقيقية) والشبيكة المقلوبة يمكن اعتبارها بانها في الفضاء K اي فضاء متجه الموجه ورياضياً يمكن التعبير عن ذلك بدلالة تحويلات فوريه Fourier transformation

$$\boxed{\begin{array}{c}\text{real space}\\ \vec{R}\\ \vec{a},\vec{b},\vec{c}\end{array}} \xrightarrow[\text{Transform}]{\text{Fourier}} \boxed{\begin{array}{c}\text{Reciprocal space}\\ \vec{G}\\ \vec{a}^*,\vec{b}^*,\vec{c}^*\end{array}}$$

الفضاء الحقيقي

الفضاء المقلوب
k - space
فضاء متجه الموجة

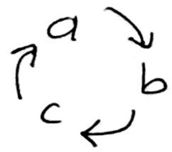
- اذا كانت $\vec{a},\vec{b},\vec{c}$ متجهات الانتقال الاولية في الفضاء الحقيقي، فان $\vec{a}^*,\vec{b}^*,\vec{c}^*$ هي متجهات الانتقال الاولية في الفضاء المقلوب وتحقق الشروط التالية:

$$\boxed{\begin{aligned}\vec{a}\cdot\vec{a}^* &= 2\pi\\ \vec{b}\cdot\vec{b}^* &= 2\pi\\ \vec{c}\cdot\vec{c}^* &= 2\pi\end{aligned}} \quad \text{—— (1)}$$

$$\boxed{\begin{aligned}\vec{a}\cdot\vec{b}^* &= \vec{a}\cdot\vec{c}^* = 0\\ \vec{b}\cdot\vec{a}^* &= \vec{b}\cdot\vec{c}^* = 0\\ \vec{c}\cdot\vec{a}^* &= \vec{c}\cdot\vec{b}^* = 0\end{aligned}} \quad \text{—— (2)}$$

• العلاقة بين متجهات الشبيكة الحقيقية $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ ومتجهات الشبيكة المقلوبة $\vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*$ هي

$$\left.\begin{aligned} \vec{a}^* &= 2\pi \frac{\vec{b}\times\vec{c}}{\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})} \\ \vec{b}^* &= 2\pi \frac{\vec{c}\times\vec{a}}{\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})} \\ \vec{c}^* &= 2\pi \frac{\vec{a}\times\vec{b}}{\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})} \end{aligned}\right\} \quad \text{—— (3)}$$



• لكل شبيكة في الفضاء الحقيقي متجه انتقال $\vec{R}$ يمكن بواسطته الوصول الى اي نقطة في الشبيكة.

$$\boxed{\vec{R} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}} \quad \text{—— (4)}$$

كذلك فان متجه الانتقال في الشبيكة المقلوبة $\vec{G}$ والذي يمكن بواسطته الوصول الى اي نقطة شبيكة في الفضاء المقلوب

$$\boxed{\vec{G} = h\,\vec{a}^* + k\,\vec{b}^* + l\,\vec{c}^*} \quad \text{—— (5)}$$

• صورة الحيود للبلورة هي عبارة عن خريطة للشبيكة المقلوبة للبلورة. اما الصورة المجهرية للبلورة هي عبارة عن خريطة للشبيكة الحقيقية. ابعاد الشبيكة الحقيقية هي ابعاد الطول اما ابعاد الشبيكة المقلوبة هي ابعاد مقلوب الطول (لذا تسمى بالشبيكة المقلوبة)، اذا كانت متجهات الفضاء الحقيقي متعامدة مع بعضها البعض فان متجهات الفضاء المقلوب هي متعامدة مع بعضها البعض ايضاً.

• تحويل فورييه

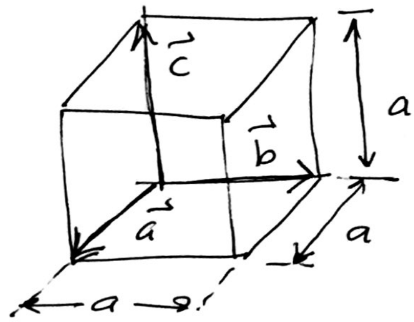
$$\boxed{F(k) = \int f(r)\, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\, d^3r}$$

وتحويل فورييه المعكوس

$$\boxed{f(r) = \int F(k)\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\, d^3k}$$

رياضياً يمكن الانتقال من الفضاء الحقيقي الى الفضاء المقلوب باجراء تحويل فورييه Fourier transform يمكن استخدام الشبيكة المقلوبة للتعبير عن قانون براك بشكل بسيط كما سيأتي لاحقا.

<u>مثال</u>: جد الشبيكة المقلوبة للمكعب البسيط. اذا كان لدينا متجهات الانتقال الاولية في المكعب البسيط



$$\boxed{\begin{aligned} \vec{a} &= a\,\hat{x} \\ \vec{b} &= a\,\hat{y} \\ \vec{c} &= a\,\hat{z} \end{aligned}}$$

حجم وحدة الخلية

$$V = |\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})| = a^3$$

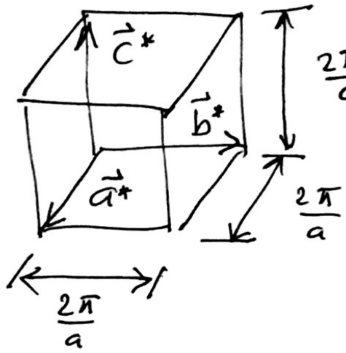
ومتجهات الشبيكة المقلوبة

$$\vec{a}^* = 2\pi\,\frac{\vec{b}\times\vec{c}}{\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})} = \frac{2\pi}{a}\,\hat{x}$$

$$\vec{b}^* = 2\pi\,\frac{\vec{c}\times\vec{a}}{\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})} = \frac{2\pi}{a}\,\hat{y}$$

$$\vec{c}^* = 2\pi\,\frac{\vec{a}\times\vec{b}}{\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})} = \frac{2\pi}{a}\,\hat{z}$$

هنا نلاحظ ان الشبيكة المقلوبة للمكعب البسيط هو ايضا مكعب وطول حرفه $\left(\frac{2\pi}{a}\right)$

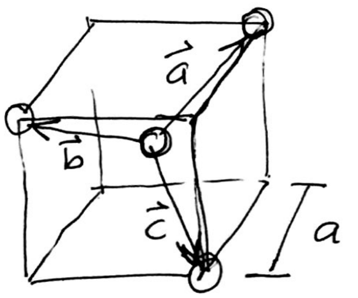


حجم وحدة الخلية في الفضاء المقلوب

$$V^* = |\vec{a}^* \cdot (\vec{b}^* \times \vec{c}^*)|$$

$$V^* = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 = \frac{8\pi^3}{a^3}$$

مثال : في حالة المكعب مركزي الجسم bcc



$$\vec{a} = \frac{a}{2}(-\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})$$
$$\vec{b} = \frac{a}{2}(\hat{x}-\hat{y}+\hat{z})$$
$$\vec{c} = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}-\hat{z})$$

$$V = |\vec{a}\cdot\vec{b}\times\vec{c}| = \frac{1}{2}a^3$$

متجهات الشبيكة المقلوبة :

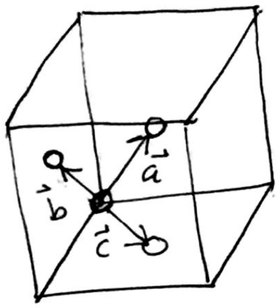
$$\vec{a}^* = 2\pi\frac{\vec{b}\times\vec{c}}{\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})} = \frac{2\pi}{a}(\hat{y}+\hat{z})$$

$$\vec{b}^* = 2\pi\frac{\vec{c}\times\vec{a}}{\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x}+\hat{z})$$

$$\vec{c}^* = 2\pi\frac{\vec{a}\times\vec{b}}{\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x}+\hat{y})$$

$$V^* = |\vec{a}^*\cdot(\vec{b}^*\times\vec{c}^*)| = 2\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$$

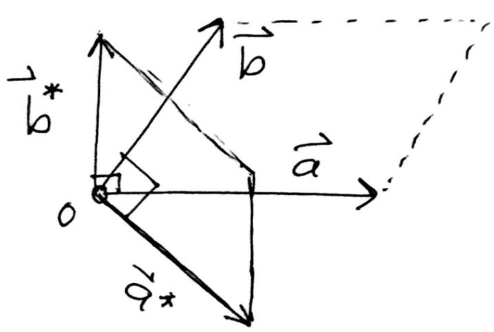
مثال: في حالة المكعب مركز الاوجه fcc



$$\left.\begin{aligned}\vec{a} &= \frac{a}{2}(\hat{y}+\hat{z})\\ \vec{b} &= \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{z})\\ \vec{c} &= \frac{a}{2}(x+\hat{y})\end{aligned}\right\} \Rightarrow V = |\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})| = \frac{a^3}{4}$$

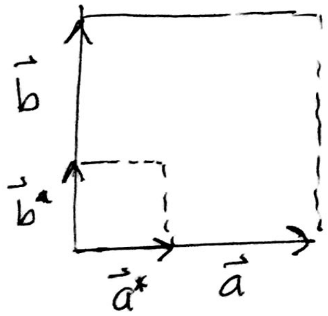
$$\left.\begin{aligned}\vec{a}^* &= \frac{2\pi}{a}(-\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})\\ \vec{b}^* &= \frac{2\pi}{a}(\hat{x}-\hat{y}+\hat{z})\\ \vec{c}^* &= \frac{2\pi}{a}(\hat{x}+\hat{y}-\hat{z})\end{aligned}\right\} \Rightarrow V^* = |\vec{a}^*\cdot(\vec{b}^*\times\vec{c}^*)| = 4\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$$

في حالة الشبيكة ببعدين يمكن تحديد الشبيكة المقلوبة وذلك برسم نقطة اصل مشتركة باعتبارها نقطة مرجعية ثم نرسم المتجهات الاولية للشبيكة الحقيقية $\vec{a}$ ، $\vec{b}$ ثم نرسم عمود على $\vec{a}$ والذي يمثل $\vec{b}^*$ ثم نرسم عمود على $\vec{b}$ الذي يمثل $\vec{a}^*$ بحيث ان طول a^* هو $\frac{2\pi}{a}$ وطول b^* يساوي $\frac{2\pi}{b}$



الشبيكة المائلة في الفضاء الحقيقي
والشبيكة المائلة في الفضاء المقلوب

في حالة الشبيكة المربعة في الفضاء الثنائي



الشبيكة المربعة في الفضاء المقلوب هي مربعة ايضاً .

الاستطارة المرنة للموجات :

لا تعطي معادلة براك تفاصيل دقيقة عن ما يحدث داخل البلورة اثناء الحيود ولا تعطي معلومات عن شدة وسعة الموجة المستطارة من البلورة.

لنتصور موجة مستوية ساقطة

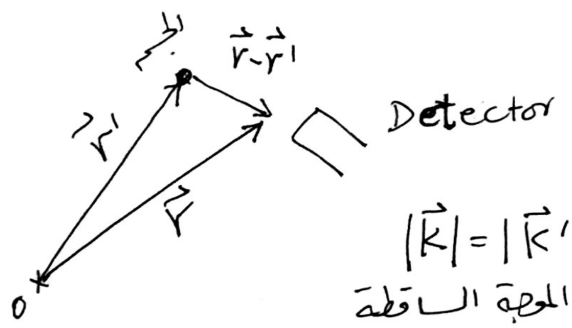
$$\boxed{U(r,t) = A\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}} \quad (1)$$

هنا A سعة الموجة ، $\vec{k}$ متجه الموجة ، ω التردد الزاوي $\vec{r}$ متجه الموقع t الزمن .

والموجة المستطارة من جسم في الموضع $\vec{r}\,'$.

$$\boxed{U_s(\vec{r},t) = \frac{A}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\, e^{i(k|r-r'| - \omega t)}} \quad (2)$$

وهي موجة كروية



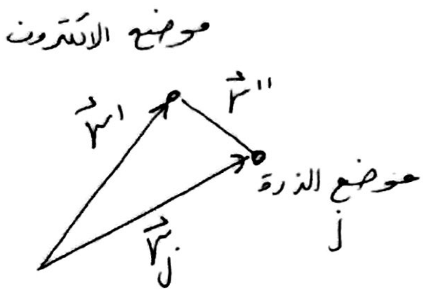
اذا كانت الاستطارة مرنة فان $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$
اي ان $k = k'$ حيث k متجه الموجة الساقطة
و k' متجه الموجة المستطارة .

لايجاد الموجة الكلية المستطارة يجب اجراء الجمع على كافة الجسيمات في المادة التي تستطير منها الاشعة حيث ان الالكترونات تعمل على استطارة الاشعة وكثافة الالكترونات $n(r')$ باجراء الجمع على الموجات المستطارة من خلال التكامل الحجمي

$$\boxed{U_s(r,t) = A\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}\,' - \omega t)} \int e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}\,'}\, n(r')\, d\tau} \quad (3)$$

التكامل هنا على حجم النموذج اي على ذرات النموذج حيث ان نواة الذرة j في الموضع r_j وكثافة الالكترونات التي تحيط بها هي n_j فان المعادلة (3) تصبح بعد التعويض عن

$$\vec{r}\,' = \vec{r}_j + \vec{r}\,''$$



$$U_s(r,t) = A e^{i(\vec{k}'\cdot\vec{r}-\omega t)} \sum_j e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}_j} \int e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}''} n_j(r'')\, d\tau'' \qquad (4)$$

التكامل وهو خاص بالذرة j والذي يمثل تحويل فورييه لدالة التوزيع الالكتروني للذرة j . هذا التكامل يسمى معامل الشكل الذري atomic form factor لتلك الذرة $f_j(\Delta k)$

$$f_j(\Delta k) = \int e^{-i\Delta k\cdot r''} n(r'')\, d\tau'' \qquad (5)$$

بالتعويض في (4)

$$U_s = A e^{i(\vec{k}'\cdot\vec{r}-\omega t)} \sum_j f_j e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}_j} \qquad (6)$$

الجمع هنا على جميع الذرات في المادة الصلبة (او وحدة الخلية)

$$F_{\Delta k} = \sum_j f_j e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}_j} \qquad (7)$$

هنا f_j عامل الشكل الذري في حين ان المقدار $F_{\Delta k}$ عامل التركيب الهندسي و Δk قيمة متجه الاستطارة .

من معادلة لاوي

$$\Delta\vec{k} = \vec{G} \qquad (8)$$

$$\therefore\ F_{hkl} = \sum_j f_j e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}_j} \qquad (9)$$

حيث ان

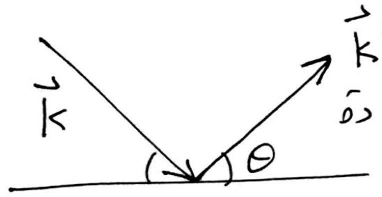
$$\vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

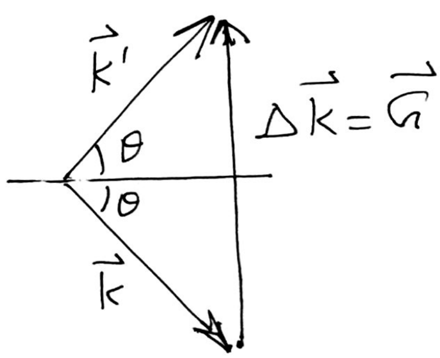
$$\boxed{F_{hkl} = \sum_j f_j \, e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}_j}}$$

لدينا التعريف الرياضي لعامل التركيب F_{hkl}
(structural factor F_{hkl})

وهذا العامل يصف الطريقة التي يستطيع بها الشعاع الساقط من الذرة في وحدة الخلية للبلورة مع الاخذ بنظر الاعتبار قدرة الاستطارة المختلفة للعناصر من خلال الحد f_j في حالة الحيود.

يمكن وضع علاقات مهمة باستخدام الفضاء المقلوب وهذه العلاقات خاصة بالحيود. فاذا كان متجه الموجة $\vec{k}$ للموجة الساقطة فان $\vec{k}'$ تمثل متجه الموجة للموجة الحادة.





شرط الحيود هو

$$\boxed{\Delta\vec{k} = \vec{k}' - \vec{k}} \quad (1)$$

والذي يساوي

$$\boxed{\Delta\vec{k} = \vec{G}} \quad (2)$$

معادلة لاوي في الحيود

يمكن فهم معادلة لاوي بان الفرق بين الموجة الساقطة والمنعكسة هو بالاتجاه G وهو الاتجاه hkl اي ان

$$\boxed{\vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*} \quad (3)$$

$$\vec{k} + \vec{G} = \vec{k}'$$

$$(\vec{k}+\vec{G})\cdot(\vec{k}+\vec{G}) = \vec{k}'\cdot\vec{k}'$$

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

في حالة الاستطارة المرنة $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$ لذا فان

$$\boxed{2\vec{k}\cdot\vec{G} + G^2 = 0}$$

هذه العلاقة تصح لحالة $\vec{G} = -\vec{G}$ اي ان

$$\boxed{2\vec{k}\cdot\vec{G} = G^2} \quad \text{———} \quad (4)$$

هذه العلاقة هي صيغة جديدة لقانون براك

اذا كانت d_{hkl} المسافة بين مستويات الشبيكة المتوازية وعمودية على الاتجاه $\vec{G}$ حيث ان

$$\vec{G} = h\vec{a}^* + k.\vec{b}^* + l\,\vec{c}^*$$

يمكن وضع

$$\boxed{d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}|}} \quad \text{———} \quad (5)$$

ملاحظة : لدينا ثلاثه صيغ لقانون براك (Bragg law)
وهي :

1. $\boxed{2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda}$ قانون براك (Bragg law)

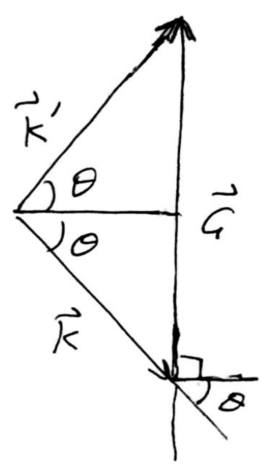
2. $\boxed{2\vec{k}\cdot\vec{G} = G^2}$ قانون براك في الشبيكة المقلوبة (Bragg law in Reciprocal lattice)

3. $\boxed{\Delta\vec{k} = \vec{G}}$ معادلة لاوي (Laue equation)

$$\boxed{2\vec{k}\cdot\vec{G} = G^2}$$

لغرض اثبات ان قانون براك في الفضاء المقلوب هو مكافئ لقانون براك $\boxed{2 d_{hkl} \sin\theta = n\lambda}$

لدينا



$$2\vec{k}\cdot\vec{G} = G^2$$

$$2|k||G|\cos(\theta+\tfrac{\pi}{2}) = G^2$$

الزاوية بين $\vec{k}$ و $\vec{G}$ هي $(\theta+\pi/2)$ من الشكل.

$$2k\cos(\theta+\tfrac{\pi}{2}) = G$$

لدينا

$$\cos(\theta+\tfrac{\pi}{2}) = \cos\theta\,\underbrace{\cos\tfrac{\pi}{2}}_{0} - \sin\theta\sin\tfrac{\pi}{2}$$

$$= -\sin\theta$$

$$\therefore\ -2k\sin\theta = G$$

لدينا $d_{hkl} = \frac{2\pi}{|G|}$ و $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ بأخذ القيمة المطلقة

$$2\cdot\frac{2\pi}{\lambda}\sin\theta = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$$

$$\boxed{2 d_{hkl}\sin\theta = \lambda} \longrightarrow \boxed{2 d_{hkl}\sin\theta = n\lambda}$$

مثال: العلاقة $d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}|}$ للمكعب البسيط، حيث يمكن حساب d_{hkl}

$$\vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{a}\hat{x}\ ;\ \vec{b}^* = \frac{2\pi}{a}\hat{y}\ ;\ \vec{c}^* = \frac{2\pi}{a}\hat{z}$$

$$\therefore\ \vec{G} = \frac{2\pi}{a}(h\hat{x} + k\hat{y} + l\hat{z})$$

$$|\vec{G}| = \frac{2\pi}{a}(h^2+k^2+l^2)^{1/2}$$

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{\frac{2\pi}{a}(h^2+k^2+l^2)^{1/2}} \Rightarrow \boxed{d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}}$$

مثال : جد عامل التركيب للمكعب مركز الاوجه fcc

من التعريف

$$F_{hkl} = \sum_j f_j \, e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}_j}$$

من وحدة المكعب لـ fcc لدينا

$$\vec{r}_0 = 0$$
$$\vec{r}_1 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y})$$
$$\vec{r}_2 = \frac{a}{2}(\hat{y}+\hat{z})$$
$$\vec{r}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{z})$$

$f_j = f \Rightarrow$ (جميع الذرات من نفس النوع)

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{a}(h\hat{x}+k\hat{y}+l\hat{z})$$

$$\therefore F_{hkl} = f\left[e^{-iG\cdot 0} + e^{-iG\cdot\frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y})} + e^{-iG\cdot\frac{a}{2}(\hat{y}+\hat{z})} + e^{-iG\cdot\frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{z})}\right]$$

$$= f\left[1 + (-1)^{h+k} + (-1)^{k+l} + (-1)^{l+h}\right]$$

$$F_{hkl} = \begin{cases} 4f & h,k,l \text{ all even or all odd parity} \\ 0 & \text{mixed parity} \end{cases}$$

مثال : احسب عامل التركيب F_{hkl} لجسم مركز الجسم bcc :

لحالة bcc لدينا r_j

$$\vec{r}_0 = 0,0,0$$
$$\vec{r}_1 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})$$
$$\vec{G} = \frac{2\pi}{a}(h\hat{x}+k\hat{y}+l\hat{z}) \quad ; \quad f_j = f$$

$$F_{hkl} = \sum_j f_j e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}_j} = f\left[e^{-i\vec{G}\cdot 0} + e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}_1}\right]$$

$$= f\left[1 + e^{-i\frac{2\pi}{a}(h\hat{x}+k\hat{y}+l\hat{z})\cdot\frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})}\right]$$

$$= f\left[1 + e^{-i\pi(h+k+l)}\right]$$

$$F_{hkl} = f\left[1 + (-1)^{h+k+l}\right]$$

$$F_{hkl} = \begin{cases} 2f & ; (h+k+l) \text{ even} \\ 0 & ; (h+k+l) \text{ odd} \end{cases}$$

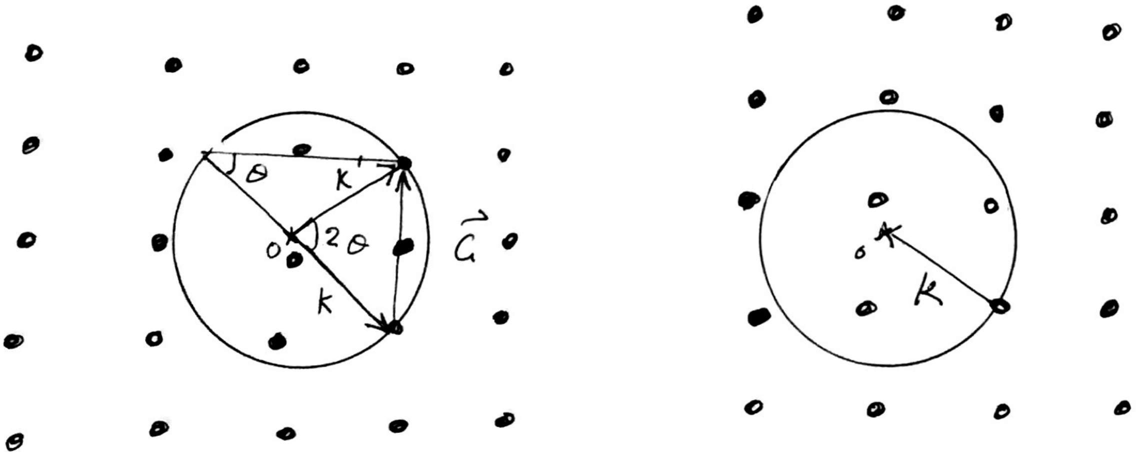
التفسير الهندسي لكرة ايوالد (Ewald construction)

من معادلة لاوي ($\Delta\vec{k}=\vec{G}$) نأخذ الضرب النقطي لـ $\vec{a}$ ، $\vec{b}$ ، $\vec{c}$

$$\boxed{\begin{aligned} \vec{a}\cdot\Delta\vec{k} &= \vec{a}\cdot\vec{G} = 2\pi h \\ \vec{b}\cdot\Delta\vec{k} &= \vec{b}\cdot\vec{G} = 2\pi k \\ \vec{c}\cdot\Delta\vec{k} &= \vec{c}\cdot\vec{G} = 2\pi l \end{aligned}} \quad \text{—— (1)}$$

هذه المعادلات الثلاث لها تفسير هندسي وهي فكرة كرة الانعكاس لتفسير النتائج التجريبية لحيود الاشعة السينية حيث يمكن معرفة المستوي الذي يعمل على استطارة اشعة X من معرفة اتجاه وقيمة متجه الموجة للاشعة الساقطة ($k=\frac{2\pi}{\lambda}$) وكما يلي :

نرسم دائرة نصف قطرها $\frac{2\pi}{\lambda}$ في الشبيكة المقلوبة ونرسم متجه بهذا الطول بحيث ينتهي على نقطة شبيكة ثم نحدد الكرة اذا لم يتحقق هذا الشرط يمكن تغيير موضع المركز للحصول على هذا الشرط ويمكن تحديد المتجه G بين نقطتين تقع على المحيط حيث ان: $|\vec{G}|=\frac{2\pi}{d_{hkl}}$



(b) (a)

يمكن ملاحظة تحقق او عدم تحقق الشرط من الشكل . ففي الشكل (a) لا يتحقق الشرط ولا يصادف سطح الكرة اي نقطة شبيكة مقلوبة .

أما عندما نحرك المركز قليلاً يمكن ان نصادف نقطة شبيكة حيث يتحقق شرط للدوي ويتم الحصول على الاتجاه k' (الشكل b) حيث يتم تحديد اتجاه G ومن G يتم ايجاد d_{hkl} .

مناطق برليون Brillouin Zone :

يمكن تقسيم الفضاء المقلوب الى مناطق هي مناطق برليون الاولى والثانية والثالثة وهكذا وتعرف مناطق برليون الاولى بانها اقرب مسافة الى نقطة شبيكة من اي نقطة اخرى وهذا التعريف يعني ان منطقة برليون الاولى هي خلية ويكنز ستز الاولية في الفضاء المقلوب . ويمكن تحديد مناطق برليون ايضا بطريقة اخرى وذلك بالرجوع الى شرط الحيود

$$\boxed{2\vec{k}\cdot\vec{G} = G^2}$$

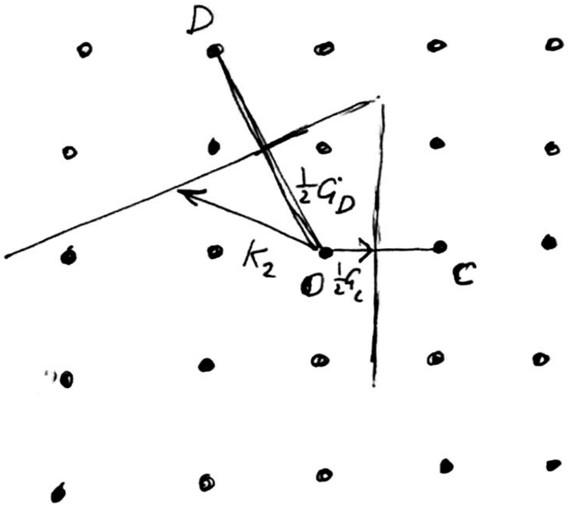
$$\vec{k}\cdot\frac{1}{2}\vec{G} = \left(\frac{G}{2}\right)^2$$

نعمل مستوي عمودي على المتجه في نقطة المنتصف ، اي قيمة k من نقطة الاصل الى المستوي سوف يتحقق شرط الحيود

$$k_1\cdot\left(\frac{1}{2}G_c\right) = \left(\frac{1}{2}G_c\right)^2$$

وكذلك اي متجه أخر مثل k_2 يحقق شرط الحيود

$$k_2\cdot\left(\frac{1}{2}G_D\right) = \left(\frac{1}{2}G_D\right)^2$$



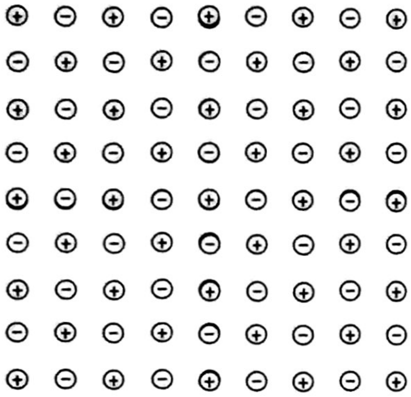
الشكل (1)

عند العمل في الفضاء المقلوب اذا اخذنا قيمة $\vec{G}$ من نقطة الاصل الى نقطة شبيكة مقلوبة ما نكون مستوي عمودي على المتجه $\vec{G}$ من منتصفه يشكل هذا المستوي جزء من حدود منطقة برليون (Brillouin Zone boundary) كما في الشكل (1) فان اي قيمة موجة $\vec{k}$ للاشعة X في البلورة سوف يحيد اذا كانت قيمة واتجاه k تحقق العلاقة التالية

$$\boxed{\vec{k}\cdot\left(\tfrac{1}{2}\vec{G}\right) = \left(\tfrac{1}{2}G\right)^2}$$

الشعاع الحاد له اتجاه $\vec{k}-\vec{G}$ ولدينا ايضاً $\Delta\vec{k} = -\vec{G}$ ، لذا فان حدود مناطق برليون هي المناطق التي يحدث بها انعكاس براك من البلورة

أسئلة ومسائل فيزياء الحالة الصلبة / الاواصر والشبيكة المقلوبة



س1/ في الشكل التالي شبيكة أيونية مربعة ببعدين حيث تتوزع الشحنات الموجبة والسالبة بشكل متناوب في الشبيكة .

احسب ثابت مادلونك لهذه الشبيكة واحسب طاقة الشبيكة.

س2/ الطاقة الكامنة U لزوج من الذرات في بلورة تعطى بدلالة المسافة الفاصلة بينهما r بالصيغة التالية

$$U(r) = \frac{A}{r^9} - \frac{B}{r}$$

إذا كانت مسافة الاتزان $r_o = 2.8 \times 10^{-10} m$ وطاقة التفكك هي 5eV احسب

1. الثوابت A و B.
2. الطاقة الكامنة الكلية لهذا الزوج من الذرات عندما تصبح المسافة بينهما $3 \times 10^{-10} m$

س3/ أفترض أن طاقة التفاعل بين ذرتين تعطى بالعلاقة

$$U(r) = -\frac{A}{r^4} + \frac{B}{r^{12}}$$

اذا علمت ان هاتين الذرتين تشكلان جزيئة مستقرة ذات طاقة تماسك 5eV عندما تكون فسحة الاتزان بين نواتيهما $2 \times 10^{-10} m$ احسب

1. الثوابت A و B.
2. القوة اللازمة لكسر هذه الجزيئة والفسحة بين نواتي الذرتين عند حدوث ذلك.
3. القوة اللازمة لجعل الفسحة بين نواتي الذرتين $1.9 \times 10^{-10} m$
4. درجة الحرارة التي تتفكك عندها هذه الجزيئة.

س4/ جد زوايا الحيود الممكنة في الاتجاهات التالية عندما تكون $\lambda = 1A^o, \quad a = 5A^o$ في بلورة مكعبة

1. 100
2. 110
3. 121
4. 113
5. 021

س5/ جد زوايا الحيود الممكنة في الاتجاهات التالية عندما تكون $\lambda = 1A^o, \quad a = 4A^o, c = 6.5A^o$ في بلورة ذات نظام رباعي قائم

1. 100
2. 110
3. 121
4. 113
5. 021

س6/ أذا كانت متجهات الانتقال الاساسية في المكعب البسيط $\vec{c} = a\hat{z} \;\; , \vec{b} = a\hat{y} \, , \vec{a} = a\hat{x}$

جد متجهات الانتقال الاساسية للشبيكة المقلوبة

س7/ أذا كانت متجهات الانتقال الاساسية في الشكل السداسي البسيط $\vec{c} = c\hat{z} \;\; , \vec{b} = a\hat{y} \; , \; \vec{a} = \frac{\sqrt{3}}{2} a\hat{x} - \frac{1}{2}\hat{y}$

جد متجهات الانتقال الاساسية للشبيكة المقلوبة

س8/ احسب عامل التركيب الهندسي لكل مما يلي

1. خلية الماس
2. مكعب ممركز الجسم
3. مكعب ممركز الاوجه

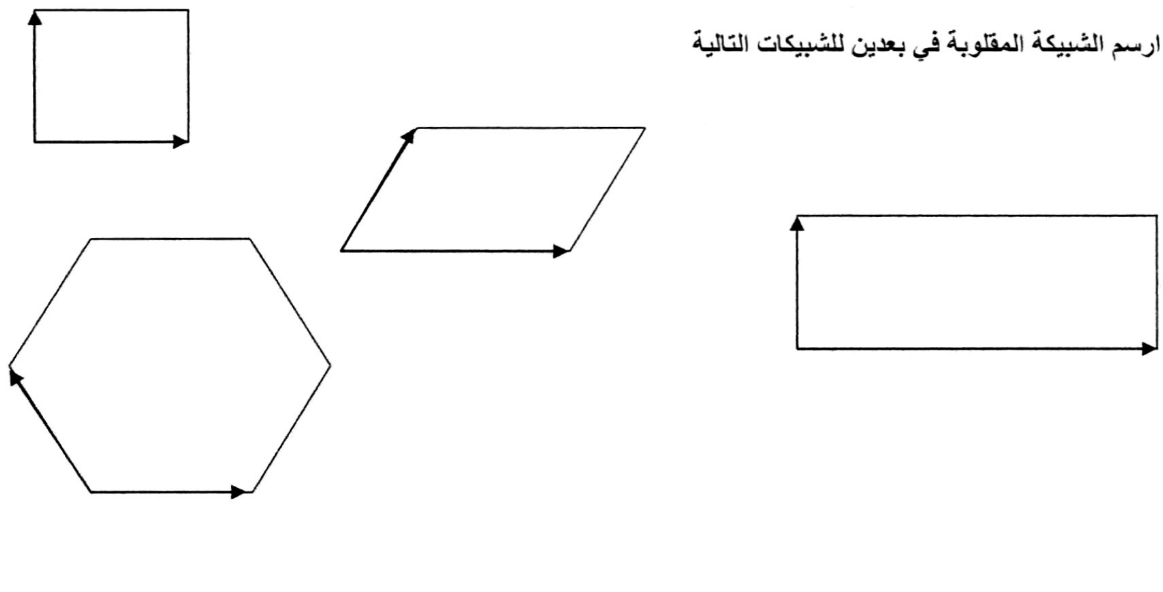
س9/ في مكعب ممركز الاوجه ، بين اي من الاتجاهات التالية يحدث فيها استطارة

1. 110
2. 213
3. 321
4. 114
5. 621
6. 521

س10/ في مكعب ممركز الجسم ، بين اي من الاتجاهات التالية يحدث فيها استطارة

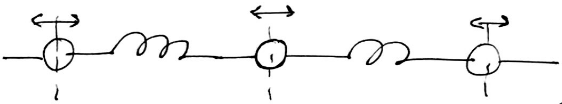
1. 100
2. 213
3. 111
4. 114
5. 331
6. 121

س11/ ارسم الشبيكة المقلوبة في بعدين للشبيكات التالية



حركة الشبكة Lattice dynamics :

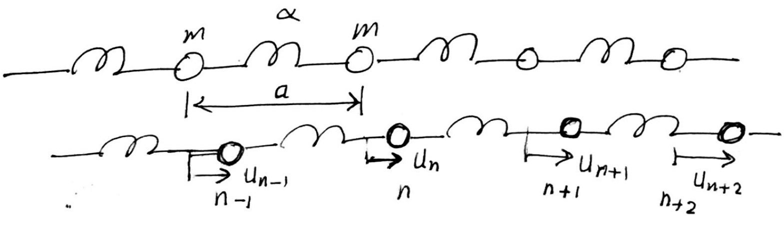
حركية الشبكة تعني دراسة الاهتزازات للشبكة البلورية . وترتبط الاهتزازات البلورية بالعديد من الخصائص المهمة للمواد الصلبة مثل الخصائص الحرارية والبصرية والكهربائية . الذرات في الشبكة البلورية في حالة حركة مستمرة حيث تهتز الذرات حول مواضع اتزانها .



كتقريب اولي يمكن فرض ان الذرات تهتز بحركة توافقية بسيطة (S.H.O.)
هذا التقريب يدعى بالتقريب التوافقي (harmonic approximation)
وهذا التقريب مهم في حساب العديد من خصائص المواد الصلبة اما بقية الخصائص التي لا توصف بهذا التقريب فان الذرات تتبع الاهتزازات اللاتوافقية unharmonic oscillation وهذه الخصائص هي التمدد الحراري .

اهتزازات شبكة احادية الذرة في بعد واحد :

نأخذ حالة بسيطة من الاهتزازات البلورية وهو اهتزاز ذرات في بعد واحد (المحور x مثلا) ، نفرض ان لدينا ذرات من نوع واحد كتلة الذرة m المسافة بين ذرة والاخرى هي a . والذرات مرتبة على المحور الافقي x . نفرض التقريب التوافقي حيث تتناسب القوة بين الذرات مع الازاحة النسبية وهذا التقريب صحيح عندما تكون الازاحة صغيرة جداً. وحسب قانون هوك . ثابت القوى α للنابض وهذا النابض افتراضي لتمثيل القوى بين الذرات ، نفرض ان التفاعل مع الجيران الاقرب فقط



ازاحة الذرة n هي U_n وازاحة الذرة $n+1$ هي U_{n+1} وكذلك ازاحة الذرة $n-1$ هي U_{n-1} . حسب قانون نيوتن الثاني وبفرض التفاعل مع الجيران الاقرب فقط .

$$\boxed{F_n = \alpha(U_{n+1}-U_n) + \alpha(U_{n-1}-U_n)} \quad \text{--- (1)}$$

$$\boxed{m\frac{d^2U_n}{dt^2} = \alpha(U_{n+1}+U_{n-1}-2U_n)} \quad \text{--- (2)}$$

نفرض الحل بشكل موجة متقدمة وكما يلي :

$$\boxed{U_n = U_0 e^{i(q\cdot x_n - \omega t)}} \quad \text{--- (3)}$$

هنا q متجه الموجة و ω التردد الزاوي للموجة .

$$\boxed{\frac{d^2U_n}{dt^2} = -\omega^2 U_n} \quad \text{--- (4)}$$

عند التعويض في المعادلة (2) نحصل على

$$\boxed{-m\omega^2 U_n = \alpha(U_{n+1}+U_{n-1}-2U_n)} \quad \text{--- (5)}$$

ازاحة الذرات المتجاورة من المعادلة (3)

$$U_{n+1} = U_0 e^{i(q(x_n+a)-\omega t)} = U_n e^{iqa} \quad \text{--- (6)}$$

$$U_{n-1} = U_0 e^{i(q(x_n-a)-\omega t)} = U_n e^{-iqa} \quad \text{--- (7)}$$

بوضع (6) و (7) في (5)

$$-m\omega^2 U_n = \alpha(e^{iqa}+e^{-iqa}-2)U_n$$

$$m\omega^2 = -\alpha(2\cos qa - 2)$$

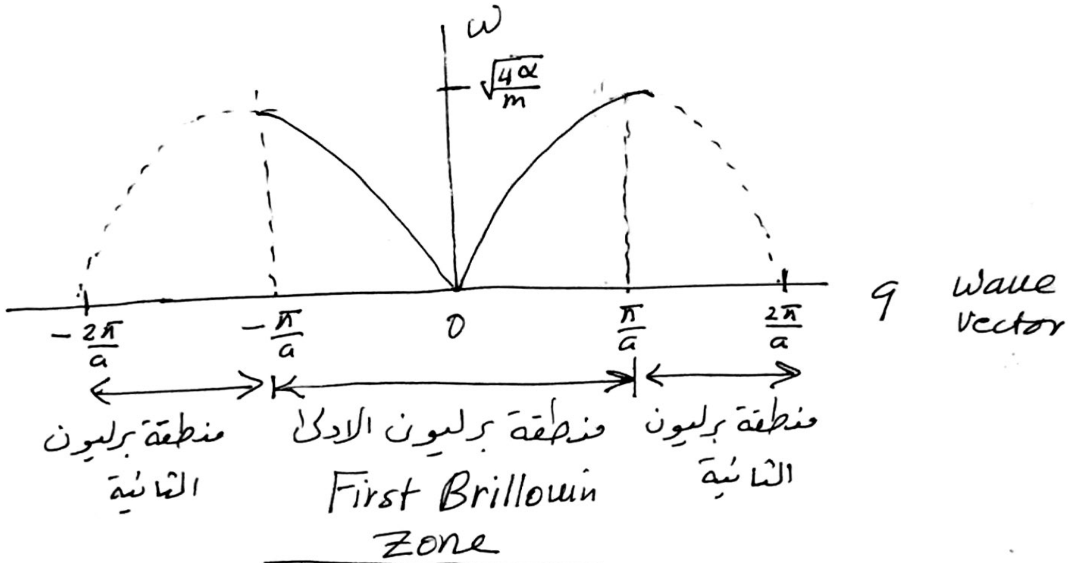
$$m\omega^2 = 2\alpha(1-\cos qa)$$

لدينا $1-\cos(qa) = 2\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)$

$$\therefore \boxed{\omega^2 = \frac{4\alpha}{m}\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)}$$

$$\boxed{\omega = \sqrt{\frac{4\alpha}{m}}\ \sin\left(\tfrac{1}{2}qa\right)} \quad \text{——— (8)}$$

العلاقة الاخيرة (معادلة 8) هي علاقة التفريق dispersion relation وهي العلاقة التي تربط متجه الموجة q بالتردد الزاوي ω



$$\boxed{-\frac{\pi}{a} \leq q \leq \frac{\pi}{a}}$$

يمكن تحديد منطقة برليون الاولى بين قيم $q = \pm\frac{\pi}{a}$ اي ان $-\frac{\pi}{a} < q \leq \frac{\pi}{a}$ ومن خصائص المعادلة (8) وجود قيم عظمى للتردد الزاوي ω ونحصل على هذه القيم عند $q = \pm\frac{\pi}{a}$ او مضاعفاتها الفردية.

$$\omega_m = \sqrt{\frac{4\alpha}{m}}$$

وتعتمد قيمة ω_m على ثابت القوة α وكتلة الذرة m وقيمة ω_m هي بحدود $\omega_m \sim 10^{15}\,Hz$.

ومنطقة برليون الثانية محددة بين $-\frac{2\pi}{a} \leq q \leq -\frac{\pi}{a}$ و $\frac{\pi}{a} \leq q \leq \frac{2\pi}{a}$ وهكذا بالنسبة لبقية مناطق برليون الثالثة والرابعة .. . منطقة برليون الاولى مهمة لانها تحوي كافة قيم متجه الموجة q، اي ان قيم q خارج نطاق المنطقة الاولى يمكن الوصول اليها عن طريق خاصية الدورية باضافة متجه الشبيكة المقلوبة $\vec{G}$ حيث ان

$$\boxed{\vec{q}\,' = \vec{q} + \vec{G}} \quad \text{——— (9)}$$

هنا $G = n\left(\frac{2\pi}{a}\right)$ ، q متجه الموجة داخل منطقة برليون الاولى و q' متجه الموجة خارج برليون الاولى

لاثبات صحة العلاقة (9) نحسب النسبة بين ازاحتي ذرتين متجاورتين

$$\frac{U_{n+1}}{U_n} = e^{iqa}$$
$$= e^{i(q' \pm G)a}$$
$$= e^{iq'a} e^{\pm iGa} \qquad ; G = \left(\frac{2\pi}{a}\right)n$$
$$= e^{iq'a} e^{\pm i2\pi n}$$
$$= e^{iq'a}$$

هذا يعني ان ω_q دالة دورية لمتجه الموجة q بثابت دورة مقداره $\frac{2\pi}{a}$ لهذا فان كل القيم المتاحة لـ q هي ضمن منطقة برليون الاولى اي ان

$$\boxed{\omega\left(q + \frac{2\pi}{a}\right) = \omega(q)} \qquad (10)$$

بالرجوع الى المعادلة

$$\boxed{\omega = \sqrt{\frac{4\alpha}{m}} \sin\left(\frac{qa}{2}\right)} \qquad (11)$$

- اذا كانت قيم q صغيرة يمكن تقريب العلاقة (11) بالشكل التالي

$$\sin\left(\tfrac{1}{2}qa\right) \simeq \tfrac{1}{2}qa$$

$$\therefore \omega = \sqrt{\frac{4\alpha}{m}} \, \frac{1}{2} qa$$

$$\boxed{\omega = \sqrt{\frac{\alpha}{m}}\, qa} \quad ; \quad \boxed{qa \ll 1}$$

هذا التقريب يعني ايضا $q \ll \frac{1}{a}$ او $\boxed{\lambda \gg a}$ اي منطقة الموجات الطويلة. هنا يمكن حساب سرعة الطور phase velocity

$$U_{phase} = \frac{\omega}{q} = \sqrt{\frac{\alpha}{m}}\, a$$

وسرعة المجموعة group velocity

$$U_{group} = \frac{\partial \omega}{\partial q} = \sqrt{\frac{\alpha}{m}}\, a = U_{phase}$$

• اما عندما تصبح قيم q مقاربة لـ $\pm\frac{\pi}{a}$ اي عند القيم العالية لمتجه الموجة فان علاقة التفريق معادلة (11)

$$\omega = \sqrt{\frac{4\alpha}{m}}\ \sin\left(\frac{qa}{2}\right)$$

سرعة الطور

$$V_{phase} = \frac{\omega}{q} = \frac{\sqrt{\frac{4\alpha}{m}}\ \sin\left(\frac{qa}{2}\right)}{q}$$

$$\boxed{V_{phase} = \left(\sqrt{\frac{\alpha}{m}}a\right)\frac{\sin\left(\frac{qa}{2}\right)}{\left(\frac{qa}{2}\right)}}$$

وسرعة المجموعة في هذه الحالة

$$V_{group} = \sqrt{\frac{\alpha}{m}}a\cos\left(\frac{1}{2}qa\right)$$

اي ان سرعة المجموعة تختلف عن سرعة الطور في القيم العالية لـ q منطقة الموجات القصيرة $\boxed{qa >> 1}$ اي منطقة الترددات العالية. وقيمة V_{group} عند حدود منطقة برليون $\pm\frac{\pi}{a}$ تساوي صفراً. وهذا يفسر كما يلي: ان الموجة عند هذه الحدود هي عبارة عن موجة واقفة standing wave وليست موجة متنقلة traveling wave

مما سبق يمكن ملاحظة ما يلي:

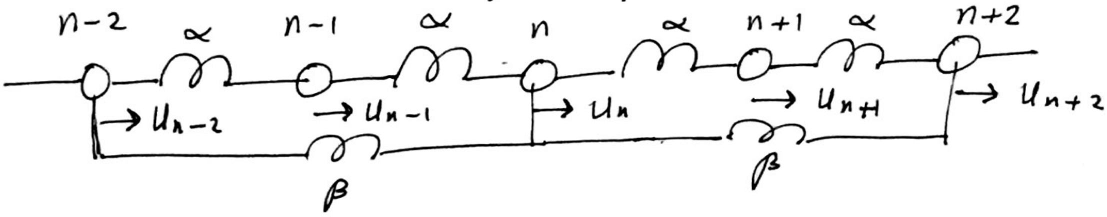
* السلسلة الخطية لها ترددات بين 0 و ω_m ويمكن اعتبارها مرشحاً ميكانيكياً اي يسمح بمرور الترددات بين 0 و ω_m ولا يسمح بمرور الترددات العالية $\omega >> \omega_m$

* اذا كانت $a = 3\times10^{-10} m$ ومعدل سرعة الصوت في المادة الصلبة $V_0 = 5\times10^{3} m/s$ فان اقصى قيمة لمتجه الموجة بحدود $10^{10} m^{-1}$ وبذلك تكون قيمة $\omega_m \sim 10^{13} Hz$

* سرعة الموجة

$$V_0 = \sqrt{\frac{\alpha}{m}}a$$

مسألة : اكتب معادلات الحركة لسلسلة احادية الذرة ، m كتلة الذرة
a ثابت الشبيكة ، α ثابت القوة من المرتبة الاولى و β ثابت
القوة من المرتبة الثانية



$$m\frac{d^2u}{dt^2} = \alpha\left(U_{n+1}-U_n\right)+\alpha\left(U_{n-1}-U_n\right)$$
$$+\beta\left(U_{n+2}-U_n\right)+\beta\left(U_{n-2}-U_n\right)$$

نفرض ان :

$$U_n = A\, e^{i(qx_n-wt)}$$

$$-mw^2U_n = \alpha\left(e^{iqa}+e^{-iqa}-2\right)U_n$$
$$+\beta\left(e^{i2qa}+e^{-i2qa}-2\right)U_n$$

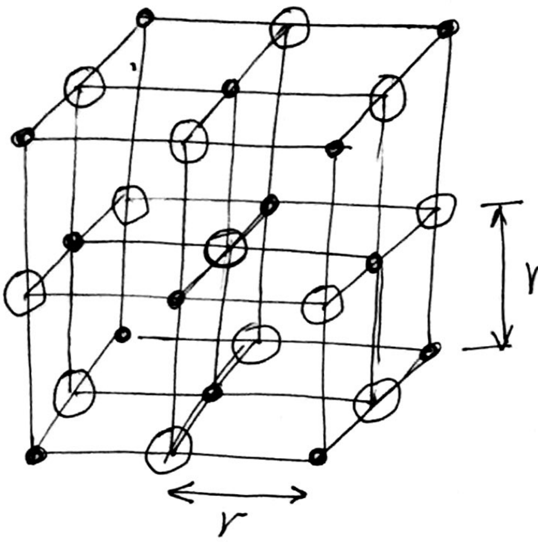
$$-mw^2 = \alpha\left(2\cos(qa)-2\right)+\beta\left(2\cos(2qa)-2\right)$$

$$w^2 = \frac{2\alpha}{m}\left(1-\cos(qa)\right)+\frac{2\beta}{m}\left(1-\cos(2qa)\right)$$

$$\therefore \boxed{w^2 = \frac{4\alpha}{m}\sin\left(\frac{qa}{2}\right)+\frac{4\beta}{m}\sin\left(\frac{2qa}{2}\right)}$$

حساب ثابت مادلونك في الابعاد الثلاثة :

لحساب ثابت مادلونك في شبيكة ثلاثية الابعاد نأخذ بلورة كلوريد الصوديوم نختار ايون الكلور في وحدة الخلية كنقطة مرجعية (الايون الوسطي) وهو محاط بـ 6 ايونات صوديوم Na



$$U_{att} = \frac{-6q^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

وطاقة التنافر بين ايون Cl وايونات Cl (الجيران الاقرب من المرتبة الثانية)

$$U_{rep.} = \frac{12q^2}{4\pi\varepsilon_0 \sqrt{2}\, r}$$

وطاقة التجاذب مع Na (الجيران الاقرب من المرتبة الثالثة)

$$U_{att.} = \frac{-8q^2}{4\pi\varepsilon_0 \sqrt{3}\, r}$$

وهكذا ، يمكن حساب طاقة التجاذب والتنافر لبقية الايونات بنفس الطريقة وبجمع الحدود نحصل على السلسلة

$$U = \frac{-q^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\left[\frac{6}{1} - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \cdots\right]$$

∴ ثابت مادلونك A يساوي

$$A = \left[6 - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \frac{6}{2} + \cdots\right] \simeq 1.74756$$

حيود الاشعة السينية والبنية البلورية :

لدينا ثلاثة طرق للحصول على معلومات حول البنية البلورية وتحديد التركيب البلوري للبلورات . وهذه الطرق هي

1. حيود الاشعة السينية
2. حيود الالكترونات
3. حيود النيوترونات

باستخدام هذه الطرق يمكن معرفة التركيب البلوري ومعرفة ثابت الشبيكة ومواقع الذرات في الشبيكة البلورية . كما هو معلوم ان الطول الموجي لاشعة X مقارب للمسافة بين الذرات في الشبيكة البلورية ~ $1\mathring{A}$ لذا فان البلورة تسلك سلوك محزز الحيود بالنسبة لاشعة X من دراسة الاشعة الحادة يمكن معرفة التركيب البلوري وثابت الشبيكة .

- العلاقة بين طاقة الفوتون للاشعة السينية و الطول الموجي هي

$$\boxed{\lambda(\mathring{A}) = \frac{12.4}{E(KeV)}} \quad (1)$$

λ الطول الموجي للاشعة السينية ، E طاقة الاشعة السينية .

- في حالة حيود الالكترونات فان العلاقة بين طاقة الالكترون والطول الموجي للالكترونات (طول موجة دي بروكلي)

$$\boxed{\lambda(\mathring{A}) = \frac{12}{\sqrt{E(eV)}}} \quad (2)$$

λ طول موجة دي بروكلي للالكترون و E طاقة الالكترون بـ (eV)

- في حالة النيوترونات

$$\boxed{\lambda(\mathring{A}) = \frac{0.28}{\sqrt{E(eV)}}} \quad (3)$$

λ طول موجة دي بروكلي للنيوترون ، E طاقة النيوترون بـ (eV)

قانون براك للحيود (The Bragg Diffraction Law) .

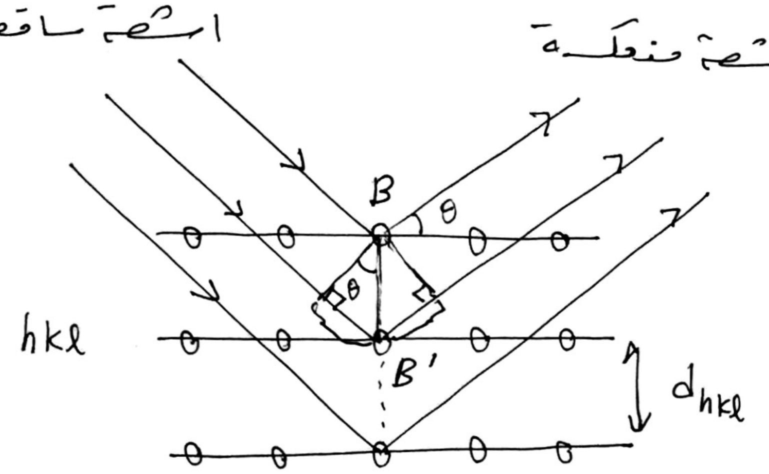
وضع براك علاقة تربط المسافة البينية بين المستويات البلورية والطول الموجي للاشعة X . وهذه العلاقة

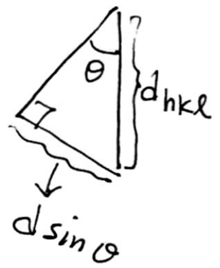
$$\boxed{2 d_{hkl} \sin\theta = n\lambda} \quad \text{Bragg Law} \quad (4)$$

يمكن اشتقاق هذا القانون بسهولة من ملاحظة فرق المسار بين الشعاع الساقط على النقطة B و B' وهو

$$2d_{hkl}\sin\theta$$

وهذا الفرق يساوي اعداد صحيحة من الطول الموجي $n\lambda$ للحصول على تداخل بناء

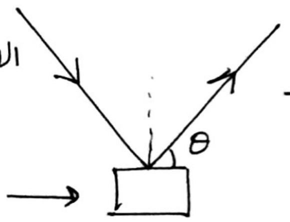


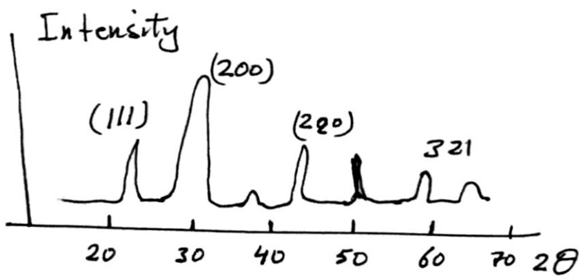


شرط براك لحدوث الانعكاس بين المستويات المتعاقبة تفصلها المسافة d_{hkl} هو

$$\boxed{\lambda \le 2d_{hkl}} \quad \text{(5)}$$

شرط براك





معادلة براك $\boxed{2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda}$ والعلاقة بين الشدة والزوايا في الشكل تمثل حالات التداخل البناء في تلك الاتجاهات ويمكن تحديد المستويات التي تمثل هذه الحالات بالرجوع الى قانون براك والمسافة بين المستويات d_{hkl} .

• في حالة البلورات المكعبة لدينا

$$\boxed{d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}} \quad \text{(6)}$$

بالتعويض بالمعادلة (4) نحصل على ($n=1$)

$$\boxed{\sin^2\theta_{hkl} = \frac{\lambda^2}{4a^2}(h^2+k^2+l^2)} \quad \text{(7)}$$

من تحديد زوايا الحيود عمليا من المستويات hkl يمكن تحديد ثابت الشبكة a للبلورة مثال ذلك .

في الاتجاه 110 لدينا

$$\boxed{\sin^2\theta_{110} = \frac{\lambda^2}{2a^2}}$$

θ تحدد عمليا و λ معلومة
يمكن تحديد a .

- في النظام الرباعي القائم لدينا

$$\boxed{\sin^2\theta_{hkl} = \frac{\lambda^2}{4}\left(\frac{h^2+k^2}{a^2}+\frac{l^2}{c^2}\right)}$$

- يمكن الحصول على علاقات اخرى لبقية الانظمة البلورية بوضع d_{hkl} المناسبة وايجاد $\sin^2\theta_{hkl}$ لكل نظام .

* في دراسة الحيود في البلورات يجب التمييز بين الاستطارة او التشتت والحيود فالاستطارة هي انحراف الشعاع عن مساره نتيجة تفاعله مع المادة وتكون الاستطارة مرنة اذا حصل الانحراف بدون فقدان طاقة . وغير مرنة اذا كان هنالك فقدان للطاقة اثناء الاستطارة . اذا مر شعاع في وسط مادي فانه يستطيع وتعمل جسيمات الوسط كمرايا تولد انعكاس عشوائي . وتحدث هذه الحالة عندما تكون ابعاد الجسم كبيرة مقارنة مع الطول الموجي للشعاع الساقط .
اما اذا كانت ابعاد الجسيمات للوسط اصغر من الطول الموجي للشعاع الساقط فان هذا التشتت يسمى بالحيود وتتصرف جسيمات الوسط كمراكز للاشعاع وتشتت الشعاع الساقط في كل الاتجاهات لذا وبذلك يمكن اعتبار الحيود كحالة خاصة من الاستطارة .

* في حيود الالكترونات وبسبب الشحنة للالكترونات فانها تتفاعل بقوة مع المادة ولاتستطيع خرق المادة اكثر من بضع مئات من الـ Å قبل ان تعاني من التشتت ، لذا تستخدم في دراسة سطوح البلورات والاغشية الرقيقة .

* اما في حيود النيوترونات ، فالنيوترونات متعادلة الشحنة ولكنها تمتلك عزم مغناطيسي لذا تستخدم في دراسة التركيب البلوري للبلورات المغناطيسية حيث يتفاعل النيوترون مع الالكترونات في هذه البلورات اضافة الى تفاعله مع نوى الذرات اما في البلورات غير المغناطيسية فان النيوترون يتفاعل مع نوى الذرات فقط لان محصلة العزوم المغناطيسية للالكترونات تساوي صفراً . لذا فان من دراسة حيود النيوترونات يمكن التمييز بين العناصر المتجاورة في الجدول الدوري والتمييز بين نظائر العنصر الواحد. وكذلك حيود النيوترونات يكون مفيد جداً في دراسة الاهتزازات البلورية .

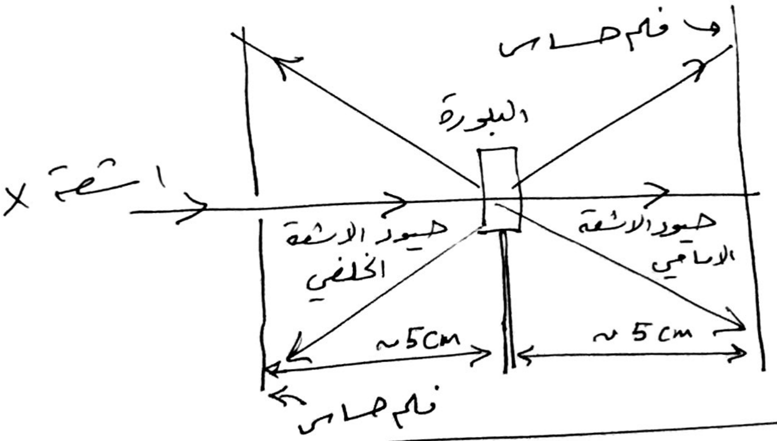
* في حيود الاشعة السينية التي تستخدم لدراسة التركيب البلوري حيث ان الطول الموجي بحدود (Å 1) ويمكن التمييز بين نوعين من الاشعة السينية وحسب آلية التوليد لهذه الاشعة حيث ان سقوط الالكترونات السريعة على الهدف الفلزي ينتج عنه

- طيف مستمر من فوتونات الاشعة السينية نتيجة تباطؤ الالكترونات وانحرافها بسبب شحنات النويات لذرات الهدف .
- طيف خطي نتيجة التصادم غير المرن بين الالكترونات الساقطة والالكترونات القريبة من نوى الذرات للهدف .

الطرق التجريبية لدراسة حيود الاشعة السينية :

١. طريقة لاوي Laue Method

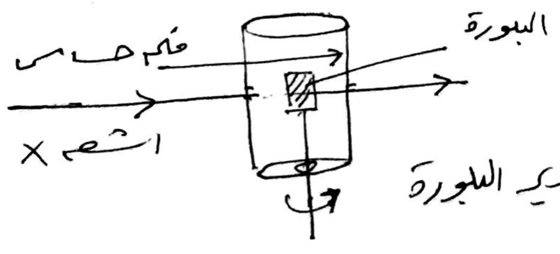
في هذه الطريقة تبقى البلورة ساكنة لا تتحرك عند سقوط الاشعة عليها لصورة عمودية والطول الموجي للاشعة غير احادي . لذا فان كل مجموعة من المستويات تختار احد الاطوال الموجية المناسبة لها والتي تحقق قانون براك للحيود ، والحزمة المحادة تسقط على فلم حساس وتظهر الاشعة بشكل بقع وشكل البقع يحدده التركيب البلوري للعينة . وتعد هذه الطريقة احد الطرق للتعرف على التماثل البلوري ويمكن تحديد وحدة الخلية ولكن لا تستطيع هذه الطريقة تحديد القيمة العددية لحجم وحدة الخلية .



طريقة لاوي

٢. طريقة تدوير البلورة Rotating Crystal Method

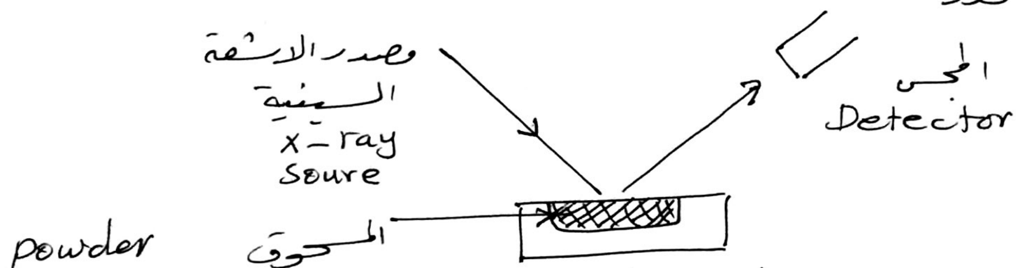
في هذه الطريقة يتم تدوير البلورة بشكل مستمر حول محور ثابت عمودي على اتجاه الاشعة حيث تتغير زاوية السقوط باستمرار وباستخدام طول موجي احادي للاشعة يتم استلام الاشعة المحادة على فلم حساس داخل الاسطوانة وتحصل على صورة الحيود بشكل بقع على الفلم الحساس .



طريقة تدوير البلورة

٣. طريقة المسحوق Powder method :

يتم في هذه الطريقة وضع البلورة بشكل مسحوق ويتم تسليط الاشعة السينية (مصدر احادي) على المسحوق ويتم استقلام الاشعة المحادة من النموذج ويتم تسجيل هذه الاشعة بواسطة مجس موضوع في مكان محدد



طريقة المسحوق

في هذه الطريقة يستخدم مصدر احادي الموجة و الموجة المنعكسة لعدة قيم لزوايا براك في آن واحد وذلك بسبب التوجه العشوائي لحبيبات المسحوق حيث يتحقق قانون براك . وهذه الطريقة تعطي قيم d له للسطوح المختلفة ثم يتم مقارنة هذه النتائج بجداول خاصة لغرض معرفة معاملات ميلر لها . ثم يتم معرفة تركيب المادة .

مقارنة بين الطرق الثلاث لحيود الاشعة السينية .

الاستعمال	طريقة لاوي	طريقة تدوير البلورة	طريقة المسحوق
التعرف على نظام البلورة	غير ممكن	ممكن تحت شروط خاصة	ممكن
معاملات او احداثيات الشبكة	غير ممكن	ممكن	ممكن
معاملات السطوح	صعب	ممكن	صعب
توجيه البلورة	ممكن	ممكن تحت شروط	غير ممكن

الشبيكة المقلوبة (Reciprocal lattice)

لكل شبيكة حقيقية هنالك شبيكة مقلوبة لها ويعتمد شكل الشبيكة المقلوبة على شكل الشبيكة الحقيقية. سميت الشبيكة المقلوبة بهذا الاسم لان ابعاد الشبيكة لها وحدات هي معكوس وحدة الطول (في الشبيكة الحقيقية) والشبيكة المقلوبة يمكن اعتبارها بانها في الفضاء K اي فضاء متجه الموجه ورياضياً يمكن التعبير عن ذلك بدلالة تحويلات فوريه Fourier transformation

real space		Reciprocal space
$\vec{R}$	Fourier Transform $\longrightarrow$	$\vec{G}$
$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$		$\vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*$
الفضاء الحقيقي		الفضاء المقلوب k - space فضاء متجه الموجة

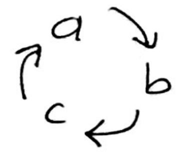
- اذا كانت $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ متجهات الانتقال الاولية في الفضاء الحقيقي، فان $\vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*$ هي متجهات الانتقال الاولية في الفضاء المقلوب وتحقق الشروط التالية:

$$\boxed{\begin{aligned} \vec{a}\cdot\vec{a}^* &= 2\pi \\ \vec{b}\cdot\vec{b}^* &= 2\pi \\ \vec{c}\cdot\vec{c}^* &= 2\pi \end{aligned}} \quad (1)$$

$$\boxed{\begin{aligned} \vec{a}\cdot\vec{b}^* &= \vec{a}\cdot\vec{c}^* = 0 \\ \vec{b}\cdot\vec{a}^* &= \vec{b}\cdot\vec{c}^* = 0 \\ \vec{c}\cdot\vec{a}^* &= \vec{c}\cdot\vec{b}^* = 0 \end{aligned}} \quad (2)$$

• العلاقة بين متجهات الشبيكة الحقيقية $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ ومتجهات الشبيكة المقلوبة $\vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*$ هي

$$\left.\begin{aligned}
\vec{a}^* &= 2\pi \frac{\vec{b}\times\vec{c}}{\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})} \\
\vec{b}^* &= 2\pi \frac{\vec{c}\times\vec{a}}{\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})} \\
\vec{c}^* &= 2\pi \frac{\vec{a}\times\vec{b}}{\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})}
\end{aligned}\right\} \quad \text{—— (3)}$$



• لكل شبيكة في الفضاء الحقيقي متجه انتقال $\vec{R}$ يمكن بواسطته الوصول الى اي نقطة في الشبيكة.

$$\boxed{\vec{R} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}} \quad \text{—— (4)}$$

كذلك فان متجه الانتقال في الشبيكة المقلوبة $\vec{G}$ والذي يمكن بواسطته الوصول الى اي نقطة شبيكة في الفضاء المقلوب

$$\boxed{\vec{G} = h\,\vec{a}^* + k\,\vec{b}^* + l\,\vec{c}^*} \quad \text{—— (5)}$$

• صورة الحيود للبلورة هي عبارة عن خريطة للشبيكة المقلوبة للبلورة. اما الصورة المجهرية للبلورة هي عبارة عن خريطة للشبيكة الحقيقية. ابعاد الشبيكة الحقيقية هي ابعاد الطول اما ابعاد الشبيكة المقلوبة هي ابعاد مقلوب الطول (لذا تسمى بالشبيكة المقلوبة)، اذا كانت متجهات الفضاء الحقيقي متعامدة مع بعضها البعض فان متجهات الفضاء المقلوب هي متعامدة مع بعضها البعض ايضاً.

• تحويل فورييه

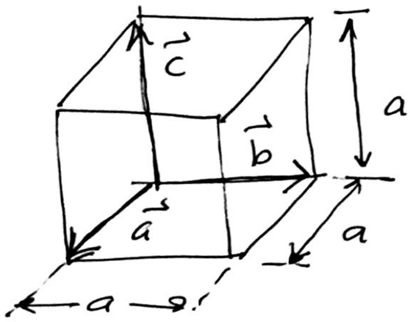
$$\boxed{F(k) = \int f(r)\, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\, d^3r}$$

وتحويل فورييه المعكوس

$$\boxed{f(r) = \int F(k)\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\, d^3k}$$

رياضياً يمكن الانتقال من الفضاء الحقيقي الى الفضاء المقلوب باجراء تحويل فورييه Fourier transform يمكن استخدام الشبيكة المقلوبة للتعبير عن قانون براك بشكل بسيط كما سيأتي لاحقا.

<u>مثال</u>: جد الشبيكة المقلوبة للمكعب البسيط. اذا كان لدينا متجهات الانتقال الاولية في المكعب البسيط



$$\boxed{\begin{aligned}\vec{a} &= a\,\hat{x}\\ \vec{b} &= a\,\hat{y}\\ \vec{c} &= a\,\hat{z}\end{aligned}}$$

حجم وحدة الخلية

$$V = |\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})| = a^3$$

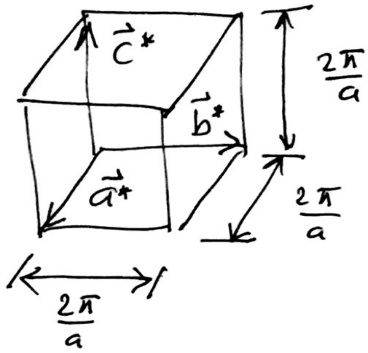
ومتجهات الشبيكة المقلوبة

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi\, \vec{b}\times\vec{c}}{\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})} = \frac{2\pi}{a}\hat{x}$$

$$\vec{b}^* = \frac{2\pi\, \vec{c}\times\vec{a}}{\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})} = \frac{2\pi}{a}\hat{y}$$

$$\vec{c}^* = \frac{2\pi\, \vec{a}\times\vec{b}}{\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})} = \frac{2\pi}{a}\hat{z}$$

هنا نلاحظ ان الشبيكة المقلوبة للمكعب البسيط هو ايضا مكعب وطول حرفه $\left(\frac{2\pi}{a}\right)$

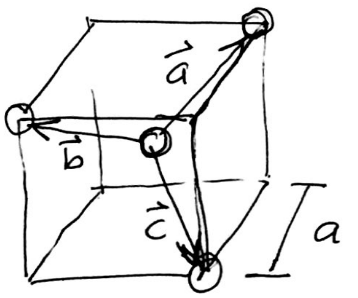


حجم وحدة الخلية في الفضاء المقلوب

$$V^* = |\vec{a}^* \cdot (\vec{b}^* \times \vec{c}^*)|$$

$$V^* = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 = \frac{8\pi^3}{a^3}$$

مثال: في حالة المكعب ممركز الجسم bcc



$$\vec{a} = \frac{a}{2}(-\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})$$
$$\vec{b} = \frac{a}{2}(\hat{x}-\hat{y}+\hat{z})$$
$$\vec{c} = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}-\hat{z})$$

$$V = |\vec{a}\cdot\vec{b}\times\vec{c}| = \frac{1}{2}a^3$$

متجهات الشبيكة المقلوبة :

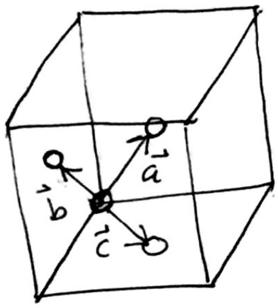
$$\vec{a}^* = 2\pi\frac{\vec{b}\times\vec{c}}{\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})} = \frac{2\pi}{a}(\hat{y}+\hat{z})$$

$$\vec{b}^* = 2\pi\frac{\vec{c}\times\vec{a}}{\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x}+\hat{z})$$

$$\vec{c}^* = 2\pi\frac{\vec{a}\times\vec{b}}{\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x}+\hat{y})$$

$$V^* = |\vec{a}^*\cdot(\vec{b}^*\times\vec{c}^*)| = 2\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$$

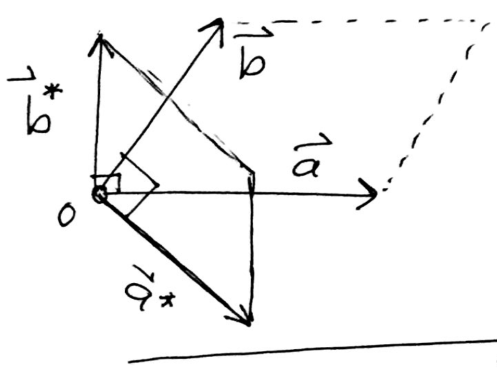
مثال: في حالة المكعب مركز الاوجه fcc



$$\vec a = \frac{a}{2}(\hat y + \hat z)$$
$$\vec b = \frac{a}{2}(\hat x + \hat z)$$
$$\vec c = \frac{a}{2}(x + \hat y)$$
$$\Rightarrow V = |\vec a \cdot (\vec b \times \vec c)| = \frac{a^3}{4}$$

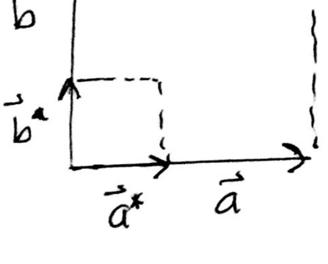
$$\vec a^* = \frac{2\pi}{a}(-\hat x + \hat y + \hat z)$$
$$\vec b^* = \frac{2\pi}{a}(\hat x - \hat y + \hat z)$$
$$\vec c^* = \frac{2\pi}{a}(\hat x + \hat y - \hat z)$$
$$\Rightarrow V^* = |\vec a^* \cdot (\vec b^* \times \vec c^*)| = 4\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$$

في حالة الشبيكة ببعدين يمكن تحديد الشبيكة المقلوبة وذلك برسم نقطة اصل مشتركة باعتبارها نقطة مرجعية ثم نرسم المتجهات الاولية للشبيكة الحقيقية $\vec a$ ، $\vec b$ ثم نرسم عمود على $\vec a$ والذي يمثل $\vec b^*$ ثم نرسم عمود على $\vec b$ الذي يمثل $\vec a^*$ بحيث ان طول a^* هو $\frac{2\pi}{a}$ وطول b^* يساوي $\frac{2\pi}{b}$



الشبيكة المائلة في الفضاء الحقيقي
والشبيكة المائلة في الفضاء المقلوب

في حالة الشبيكة المربعة في الفضاء الثنائي



الشبيكة المربعة في الفضاء المقلوب هي مربعة ايضاً.

الاستطارة المرنة للموجات :

لا تعطي معادلة براك تفاصيل دقيقة عن ما يحدث داخل البلورة اثناء الحيود ولا تعطي معلومات عن شدة وسعة الموجة المستطارة من البلورة.

لنتصور موجة مستوية ساقطة

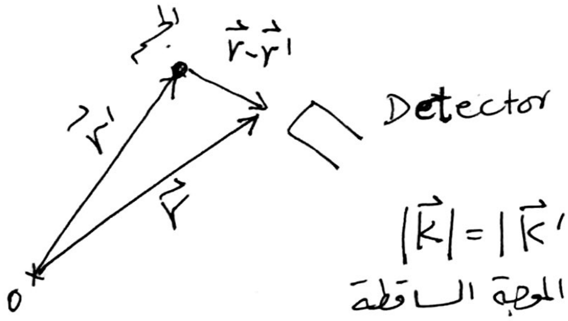
$$\boxed{U(r,t) = A\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}} \quad \text{———} \quad (1)$$

هنا A سعة الموجة ، $\vec{k}$ متجه الموجة ، ω التردد الزاوي $\vec{r}$ متجه الموقع t الزمن .

والموجة المستطارة من جسم في الموضع $\vec{r}'$.

$$\boxed{U_s(\vec{r},t) = \frac{A}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\, e^{i(k|r-r'|-\omega t)}} \quad \text{———} \quad (2)$$

وهي موجة كروية



اذا كانت الاستطارة مرنة فان $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$

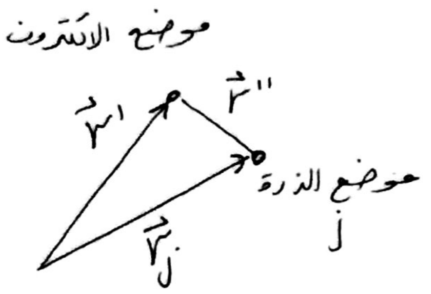
اي ان $k = k'$ حيث k متجه الموجة الساقطة و k' متجه الموجة المستطارة .

لايجاد الموجة الكلية المستطارة يجب اجراء الجمع على كافة الجسيمات في المادة التي تستطير منها الاشعة حيث ان الالكترونات تعمل على استطارة الاشعة وكثافة الالكترونات $n(r')$ باجراء الجمع على الموجات المستطارة من خلال التكامل الحجمي

$$\boxed{U_s(r,t) = A\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}'-\omega t)} \int e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}'}\, n(r')\, d\tau} \quad \text{———} \quad (3)$$

التكامل هنا على حجم النموذج اي على ذرات النموذج حيث ان نواة الذرة j في الموضع r_j وكثافة الالكترونات التي تحيط بها هي n_j فان المعادلة (3) تصبح بعد التعويض عن

$$\vec{r}' = \vec{r}_j + \vec{r}''$$



$$U_s(r,t) = A\, e^{i(\vec{k}'\cdot\vec{r} - \omega t)} \sum_j e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}_j} \int e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}\,''}\, n_j(r'')\, d\tau'' \qquad (4)$$

التكامل وهو خاص بالذرة j والذي يمثل تحويل فورييه لدالة التوزيع الالكتروني للذرة j . هذا التكامل يسمى معامل الشكل الذري atomic form factor لتلك الذرة $f_j(\Delta k)$

$$f_j(\Delta k) = \int e^{-i\Delta k\cdot r''}\, n(r'')\, d\tau'' \qquad (5)$$

بالتعويض في (4)

$$U_s = A\, e^{i(\vec{k}'\cdot\vec{r} - \omega t)} \sum_j f_j\, e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}_j} \qquad (6)$$

الجمع هنا على جميع الذرات في المادة الصلبة (او وحدة الخلية)

$$F_{\Delta k} = \sum_j f_j\, e^{-i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}_j} \qquad (7)$$

هنا f_j عامل الشكل الذري في حين ان المقدار $F_{\Delta k}$ عامل التركيب الهندسي و Δk قيمة متجه الاستطارة .

من معادلة لاوي

$$\Delta\vec{k} = \vec{G} \qquad (8)$$

$$\therefore \quad F_{hkl} = \sum_j f_j\, e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}_j} \qquad (9)$$

حيث ان

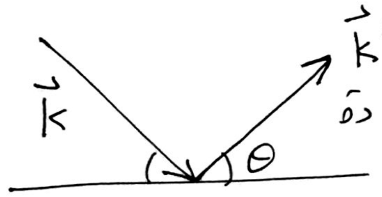
$$\vec{G} = h\,\vec{a}^* + k\,\vec{b}^* + l\,\vec{c}^*$$

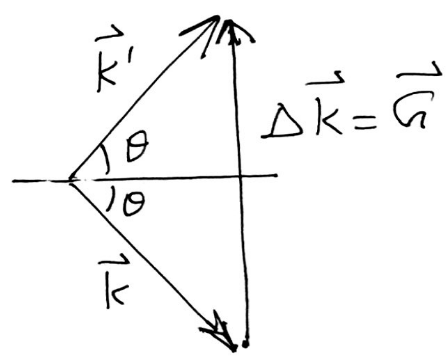
$$\boxed{F_{hkl} = \sum_j f_j \, e^{-i \vec{G} \cdot \vec{r}_j}}$$

لدينا التعريف الرياضي لعامل التركيب F_{hkl}
(structural factor F_{hkl})

وهذا العامل يصف الطريقة التي يستطيرها الشعاع الساقط من الذرة في وحدة الخلية للبلورة مع الاخذ بنظر الاعتبار قدرة الاستطارة المختلفة للعناصر من خلال الحد f_j في حالة الحيود.

يمكن وضع علاقات مهمة باستخدام الفضاء المقلوب وهذه العلاقات خاصة بالحيود. فاذا كان متجه الموجة $\vec{k}$ للموجة الساقطة فان $\vec{k}'$ تمثل متجه الموجة للموجة الحائدة.





شرط الحيود هو

$$\boxed{\Delta\vec{k} = \vec{k}' - \vec{k}} \quad \text{—— (1)}$$

والذي يساوي

$$\boxed{\Delta\vec{k} = \vec{G}} \quad \text{—— (2)}$$

معادلة لاوي في الحيود

يمكن فهم معادلة لاوي بان الفرق بين الموجة الساقطة والمنعكسة هو بالاتجاه G وهو الاتجاه hkl اي ان

$$\boxed{\vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*} \quad \text{—— (3)}$$

$$\vec{k} + \vec{G} = \vec{k}'$$

$$(\vec{k} + \vec{G}) \cdot (\vec{k} + \vec{G}) = \vec{k}' \cdot \vec{k}'$$

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

في حالة الاستطارة المرنة $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$ لذا فان

$$\boxed{2\vec{k}\cdot\vec{G} + G^2 = 0}$$

هذه العلاقة تصح لحالة $\vec{G} = -\vec{G}$ اي ان

$$\boxed{2\vec{k}\cdot\vec{G} = G^2} \quad \text{—— (4)}$$

هذه العلاقة هي صيغة جديدة لقانون براك

اذا كانت d_{hkl} المسافة بين مستويات الشبيكة المتوازية وعمودية على الاتجاه $\vec{G}$ حيث ان

$$\vec{G} = h\vec{a}^* + k.\vec{b}^* + l\,\vec{c}^*$$

يمكن وضع

$$\boxed{d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}|}} \quad \text{—— (5)}$$

ملاحظة : لدينا ثلاثه صيغ لقانون براك (Bragg law) وهي :

1. $\boxed{2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda}$ قانون براك (Bragg law)

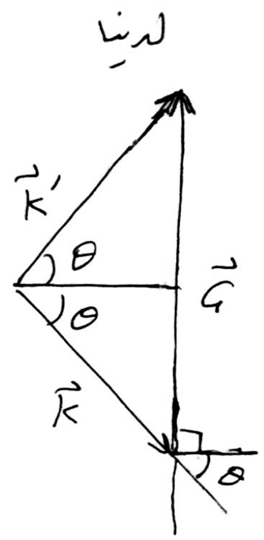
2. $\boxed{2\vec{k}\cdot\vec{G} = G^2}$ قانون براك في الشبيكة المقلوبة (Bragg law in Reciprocal lattice)

3. $\boxed{\Delta\vec{k} = \vec{G}}$ معادلة لاوي (Laue equation)

$\boxed{2\vec{k}\cdot\vec{G} = G^2}$ لغرض اثبات ان قانون براك في الفضاء المقلوب

هو مكافئ لقانون براك $\boxed{2 d_{hkl} \sin\theta = n\lambda}$

لدينا



$$2\vec{k}\cdot\vec{G} = G^2$$

$$2|k||G|\cos(\theta+\tfrac{\pi}{2}) = G^2$$

الزاوية بين $\vec{k}$ و $\vec{G}$ هي $(\theta+\pi/2)$ من الشكل .

$$2k\cos(\theta+\tfrac{\pi}{2}) = G$$

لدينا

$$\cos(\theta+\tfrac{\pi}{2}) = \cos\theta\cos\tfrac{\pi}{2} - \sin\theta\sin\tfrac{\pi}{2}$$

$$= -\sin\theta$$

$$\therefore \quad -2k\sin\theta = G$$

لدينا $d_{hkl} = \dfrac{2\pi}{|G|}$ و $k = \dfrac{2\pi}{\lambda}$ بأخذ القيمة المطلقة

$$2\cdot\frac{2\pi}{\lambda}\sin\theta = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$$

$$\boxed{2 d_{hkl}\sin\theta = \lambda} \longrightarrow \boxed{2 d_{hkl}\sin\theta = n\lambda}$$

مثال : العلاقة $d_{hkl} = \dfrac{2\pi}{|\vec{G}|}$ للمكعب البسيط ، حيث يمكن حساب d_{hkl}

$$\vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{a}\hat{x} \quad ; \quad \vec{b}^* = \frac{2\pi}{a}\hat{y} \quad ; \quad \vec{c}^* = \frac{2\pi}{a}\hat{z}$$

$$\therefore \vec{G} = \frac{2\pi}{a}(h\hat{x} + k\hat{y} + l\hat{z})$$

$$|\vec{G}| = \frac{2\pi}{a}(h^2+k^2+l^2)^{1/2}$$

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{\frac{2\pi}{a}(h^2+k^2+l^2)^{1/2}} \Rightarrow \boxed{d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}}$$

مثال : جد عامل التركيب للمكعب مركز الاوجه fcc

$$F_{hkl} = \sum_j f_j \, e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}_j}$$ من التعريف

من وحدة المكعب لـ fcc لدينا

$\vec{r}_0 = 0$

$\vec{r}_1 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y})$

$\vec{r}_2 = \frac{a}{2}(\hat{y}+\hat{z})$

$\vec{r}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{z})$

$f_j = f \Rightarrow$ (جميع الذرات من نفس النوع)

$\vec{G} = \frac{2\pi}{a}(h\hat{x}+k\hat{y}+l\hat{z})$

$$\therefore F_{hkl} = f\left[e^{-iG\cdot 0} + e^{-iG\cdot\frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y})} + e^{-iG\cdot\frac{a}{2}(\hat{y}+\hat{z})} + e^{-iG\cdot\frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{z})}\right]$$

$$= f\left[1 + (-1)^{h+k} + (-1)^{k+l} + (-1)^{l+h}\right]$$

$$F_{hkl} = \begin{cases} 4f & h,k,l \text{ all even or all odd parity} \\ 0 & \text{mixed parity} \end{cases}$$

مثال : احسب عامل التركيب F_{hkl} لجسم مركز الجسم bcc :

لدينا bcc حالة r_j

$\vec{r}_0 = 0,0,0$

$\vec{r}_1 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})$

$\vec{G} = \frac{2\pi}{a}(h\hat{x}+k\hat{y}+l\hat{z}) \quad ; \quad f_j = f$

$$F_{hkl} = \sum_j f_j e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}_j} = f\left[e^{-i\vec{G}\cdot 0} + e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}_1}\right]$$

$$= f\left[1 + e^{-i\frac{2\pi}{a}(h\hat{x}+k\hat{y}+l\hat{z})\cdot\frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})}\right]$$

$$= f\left[1 + e^{-i\pi(h+k+l)}\right]$$

$$F_{hkl} = f\left[1 + (-1)^{h+k+l}\right]$$

$$F_{hkl} = \begin{cases} 2f & ; (h+k+l) \text{ even} \\ 0 & ; (h+k+l) \text{ odd} \end{cases}$$

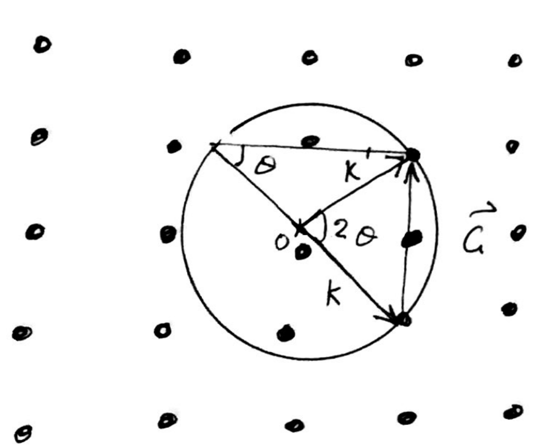
التفسير الهندسي لكرة ايوالد (Ewald construction)

من معادلة لاوي $(\Delta \vec{k} = \vec{G})$ نأخذ الضرب النقطي لـ $\vec{a}$ ، $\vec{b}$ ، $\vec{c}$

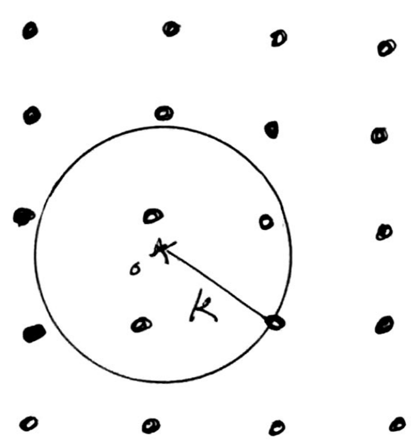
$$\boxed{\begin{aligned} \vec{a}\cdot\Delta\vec{k} &= \vec{a}\cdot\vec{G} = 2\pi h \\ \vec{b}\cdot\Delta\vec{k} &= \vec{b}\cdot\vec{G} = 2\pi k \\ \vec{c}\cdot\Delta\vec{k} &= \vec{c}\cdot\vec{G} = 2\pi l \end{aligned}} \quad (1)$$

هذه المعادلات الثلاث لها تفسير هندسي وهي فكرة كرة الانعكاس لتفسير النتائج التجريبية لحيود الاشعة السينية حيث يمكن معرفة المستوي الذي يعمل على استطارة اشعة X من معرفة اتجاه وقيمة متجه للموجة للاشعة الساقطة $(k = \frac{2\pi}{\lambda})$ وكما يلي :

نرسم دائرة نصف قطرها $\frac{2\pi}{\lambda}$ في الشبيكة المقلوبة ونرسم متجه بهذا الطول بحيث ينتهي على نقطة شبيكة ثم نحدد الكرة اذا لم يتحقق هذا الشرط يمكن تغيير موضع المركز للحصول على هذا الشرط ويمكن تحديد المتجه G بين نقطتين تقع على المحيط حيث ان: $|\vec{G}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$



(b)



(a)

يمكن ملاحظة تحقق او عدم تحقق الشرط من الشكل . ففي الشكل (a)
لا يتحقق الشرط ولا يصادف سطح الكرة اي نقطة شبيكة مقلوبة .

أما عندما نحرك المركز قليلاً يمكن ان نصادف نقطة شبيكة حيث
يتحقق شرط لاوي ويتم الحصول على الاتجاه k' (الشكل b)
حيث يتم تحديد اتجاه G ومن G يتم ايجاد d_{hkl} .

مناطق برليون Brillouin Zone :

يمكن تقسيم الفضاء المقلوب الى مناطق هي مناطق برليون الاولى
والثانية والثالثة وهكذا وتعرف مناطق برليون الاولى بانها اقرب
مسافة الى نقطة شبيكة من اي نقطة اخرى وهذا التعريف يعني
ان منطقة برليون الاولى هي خلية ويكنز ستز الاولية في الفضاء
المقلوب . ويمكن تحديد مناطق برليون ايضا بطريقة اخرى
وذلك بالرجوع الى شرط الحيود

$$\boxed{2\vec{k}\cdot\vec{G} = G^2}$$

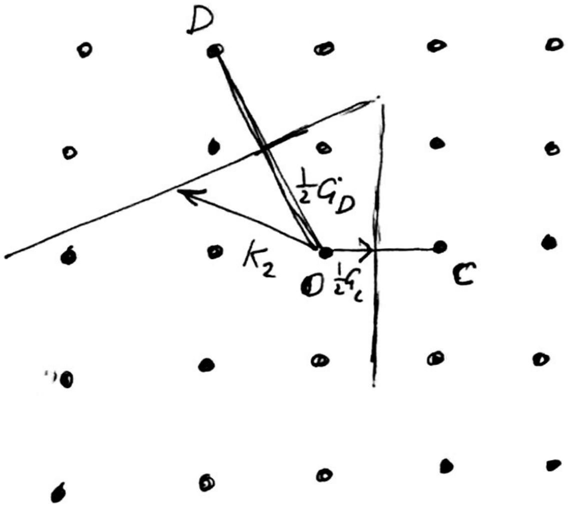
$$\vec{k}\cdot\frac{1}{2}\vec{G} = \left(\frac{G}{2}\right)^2$$

نعمل مستوي عمودي على المتجه في نقطة المنتصف ، اي قيمة k من
نقطة الاصل الى المستوي سوف يتحقق شرط الحيود

$$k_1\cdot\left(\frac{1}{2}G_c\right) = \left(\frac{1}{2}G_c\right)^2$$

وكذلك اي متجه أخر مثل k_2 يحقق شرط الحيود

$$k_2\cdot\left(\frac{1}{2}G_D\right) = \left(\frac{1}{2}G_D\right)^2$$



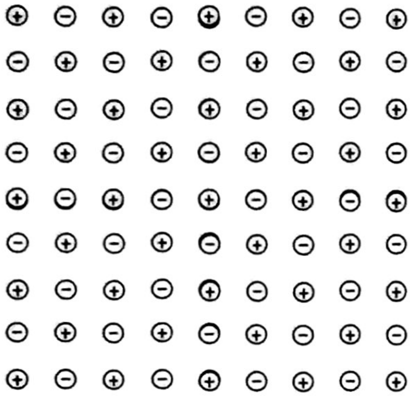
الشكل (1)

عند العمل في الفضاء المقلوب اذا اخذنا قيمة $\vec{G}$ من نقطة الاصل الى نقطة شبيكة مقلوبة ما نكون مستوي عمودي على المتجه $\vec{G}$ من منتصفه يشكل هذا المستوي جزء من حدود منطقة برليون (Brillouin Zone boundary) كما في الشكل (1) فان اي قيمة موجة $\vec{k}$ للاشعة X في البلورة سوف يحيد اذا كانت قيمة واتجاه k تحقق العلاقة التالية

$$\boxed{\vec{k}\cdot\left(\tfrac{1}{2}\vec{G}\right)=\left(\tfrac{1}{2}G\right)^2}$$

الشعاع الحاد له اتجاه $\vec{k}-\vec{G}$ ولدينا ايضاً $\Delta\vec{k}=-\vec{G}$ ، لذا فان حدود مناطق برليون هي المناطق التي يحدث بها انعكاس براك من البلورة

أسئلة ومسائل فيزياء الحالة الصلبة / الاواصر والشبيكة المقلوبة



س1/ في الشكل التالي شبيكة أيونية مربعة ببعدين حيث تتوزع الشحنات الموجبة والسالبة بشكل متناوب في الشبيكة .

احسب ثابت مادلونك لهذه الشبيكة واحسب طاقة الشبيكة.

س2/ الطاقة الكامنة U لزوج من الذرات في بلورة تعطى بدلالة المسافة الفاصلة بينهما r بالصيغة التالية

$$U(r) = \frac{A}{r^9} - \frac{B}{r}$$

إذا كانت مسافة الاتزان $r_o = 2.8 \times 10^{-10} m$ وطاقة التفكك هي 5eV احسب

1. **الثوابت A و B.**
2. **الطاقة الكامنة الكلية لهذا الزوج من الذرات عندما تصبح المسافة بينهما $3 \times 10^{-10} m$**

س3/ أفترض أن طاقة التفاعل بين ذرتين تعطى بالعلاقة

$$U(r) = -\frac{A}{r^4} + \frac{B}{r^{12}}$$

اذا علمت ان هاتين الذرتين تشكلان جزيئة مستقرة ذات طاقة تماسك 5eV عندما تكون فسحة الاتزان بين نواتيهما $2 \times 10^{-10} m$ احسب

1. **الثوابت A و B.**
2. **القوة اللازمة لكسر هذه الجزيئة والفسحة بين نواتي الذرتين عند حدوث ذلك.**
3. **القوة اللازمة لجعل الفسحة بين نواتي الذرتين $1.9 \times 10^{-10} m$**
4. **درجة الحرارة التي تتفكك عندها هذه الجزيئة.**

س4/ جد زوايا الحيود الممكنة في الاتجاهات التالية عندما تكون $\lambda = 1A^o, \quad a = 5A^o$ في بلورة مكعبة

1. **100**
2. **110**
3. **121**
4. **113**
5. **021**

س5/ جد زوايا الحيود الممكنة في الاتجاهات التالية عندما تكون $\lambda = 1A^o, \quad a = 4A^o, c = 6.5A^o$ في بلورة ذات نظام رباعي قائم

1. **100**
2. **110**
3. **121**
4. **113**
5. **021**

س6/ أذا كانت متجهات الانتقال الاساسية في المكعب البسيط $\vec{c} = a\hat{z} \quad , \vec{b} = a\hat{y} \, , \vec{a} = a\hat{x}$

جد متجهات الانتقال الاساسية للشبيكة المقلوبة

س7/ أذا كانت متجهات الانتقال الاساسية في الشكل السداسي البسيط $\vec{c} = c\hat{z} \quad , \vec{b} = a\hat{y} \; , \; \vec{a} = \frac{\sqrt{3}}{2} a\hat{x} - \frac{1}{2}\hat{y}$

جد متجهات الانتقال الاساسية للشبيكة المقلوبة

س8/ احسب عامل التركيب الهندسي لكل مما يلي

1. خلية الماس
2. مكعب ممركز الجسم
3. مكعب ممركز الاوجه

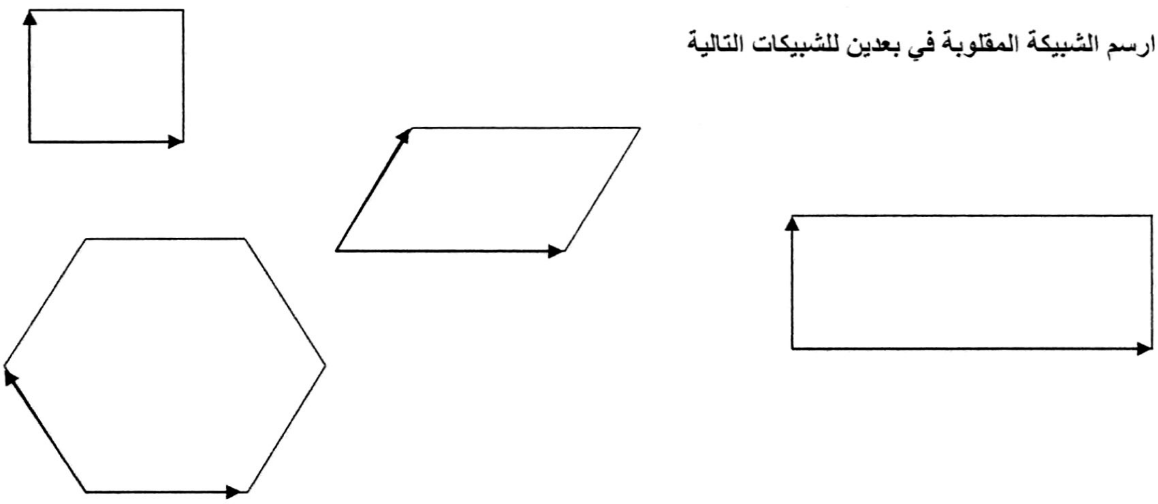
س9/ في مكعب ممركز الاوجه ، بين اي من الاتجاهات التالية يحدث فيها استطارة

1. 110
2. 213
3. 321
4. 114
5. 621
6. 521

س10/ في مكعب ممركز الجسم ، بين اي من الاتجاهات التالية يحدث فيها استطارة

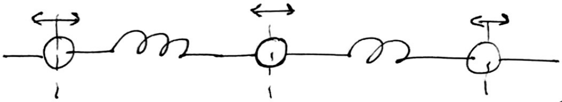
1. 100
2. 213
3. 111
4. 114
5. 331
6. 121

س11/ ارسم الشبيكة المقلوبة في بعدين للشبيكات التالية



حركية الشبكة Lattice dynamics :

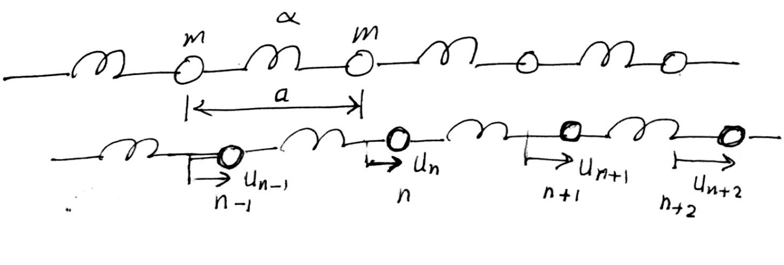
حركية الشبكة تعني دراسة الاهتزازات للشبكة البلورية . وترتبط الاهتزازات البلورية بالعديد من الخصائص المهمة للمواد الصلبة مثل الخصائص الحرارية والبصرية والكهربائية . الذرات في الشبكة البلورية في حالة حركة مستمرة حيث تهتز الذرات حول مواضع اتزانها .



كتقريب اولي يمكن فرض ان الذرات تهتز بحركة توافقية بسيطة (S.H.O.)
هذا التقريب يدعى بالتقريب التوافقي (harmonic approximation)
وهذا التقريب مهم في حساب العديد من خصائص المواد الصلبة اما بقية الخصائص التي لا توصف بهذا التقريب فان الذرات تتبع الاهتزازات اللاتوافقية unharmonic oscillation وهذه الخصائص هي التمدد الحراري .

اهتزازات شبكة احادية الذرة في بعد واحد :

نأخذ حالة بسيطة من الاهتزازات البلورية وهو اهتزاز ذرات في بعد واحد (المحور x مثلا) ، نفرض ان لدينا ذرات من نوع واحد كتلة الذرة m المسافة بين ذرة والاخرى هي a . والذرات مرتبة على المحور الافقي x . نفرض التقريب التوافقي حيث تتناسب القوة بين الذرات مع الازاحة النسبية وهذا التقريب صحيح عندما تكون الازاحة صغيرة جداً. وحسب قانون هوك . ثابت القوى α للنابض وهذا النابض افتراضي لتمثيل القوى بين الذرات ، نفرض ان التفاعل مع الجيران الاقرب فقط



ازاحة الذرة n هي U_n وازاحة الذرة $n+1$ هي U_{n+1} وكذلك ازاحة الذرة $n-1$ هي U_{n-1} . حسب قانون نيوتن الثاني وبفرض التفاعل مع الجيران الاقرب فقط .

$$\boxed{F_n = \alpha(U_{n+1} - U_n) + \alpha(U_{n-1} - U_n)} \quad \text{—— (1)}$$

$$\boxed{m\frac{d^2 U_n}{dt^2} = \alpha(U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n)} \quad \text{—— (2)}$$

نفرض الحل بشكل موجة متقولة وكما يلي :

$$\boxed{U_n = U_0\, e^{i(q\cdot x_n - \omega t)}} \quad \text{—— (3)}$$

هنا q متجه الموجة و ω التردد الزاوي للموجة .

$$\boxed{\frac{d^2 U_n}{dt^2} = -\omega^2 U_n} \quad \text{—— (4)}$$

عند التعويض في المعادلة (2) نحصل على

$$\boxed{-m\omega^2 U_n = \alpha(U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n)} \quad \text{—— (5)}$$

ازاحة الذرات المتجاورة من المعادلة (3)

$$U_{n+1} = U_0\, e^{i(q(x_n + a) - \omega t)} = U_n e^{iqa} \quad \text{—— (6)}$$

$$U_{n-1} = U_0\, e^{i(q(x_n - a) - \omega t)} = U_n e^{-iqa} \quad \text{—— (7)}$$

بوضع (6) و (7) في (5)

$$-m\omega^2 U_n = \alpha(e^{iqa} + e^{-iqa} - 2)U_n$$

$$m\omega^2 = -\alpha(2\cos qa - 2)$$

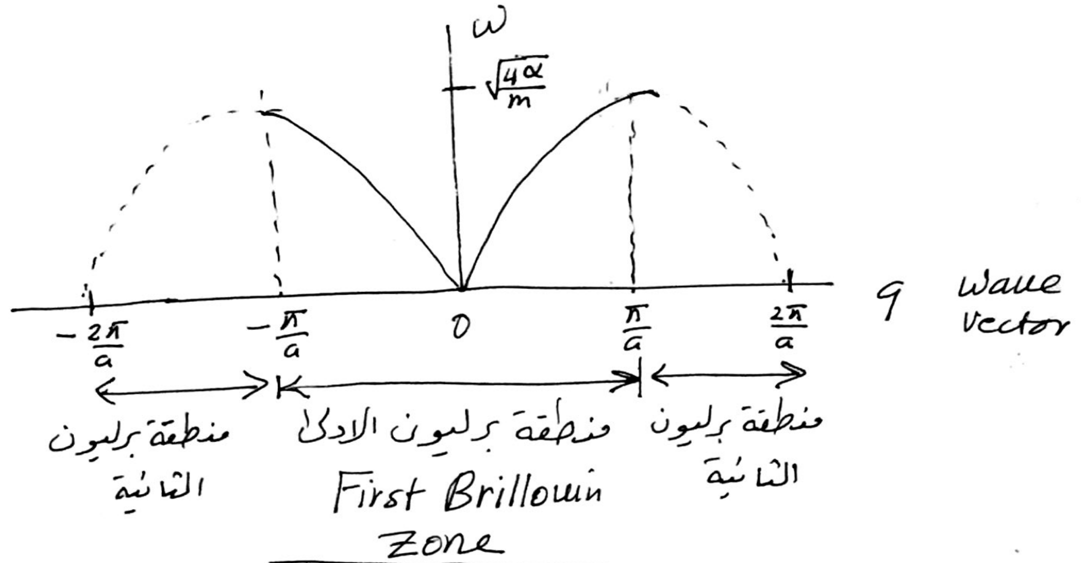
$$m\omega^2 = 2\alpha(1 - \cos qa)$$

لدينا $\quad 1 - \cos(qa) = 2\sin^2(\frac{qa}{2})$

$$\therefore \boxed{\omega^2 = \frac{4\alpha}{m}\sin^2\left(\frac{qa}{2}\right)}$$

$$\boxed{\omega = \sqrt{\frac{4\alpha}{m}}\ \sin\left(\tfrac{1}{2}qa\right)} \qquad (8)$$

العلاقة الاخيرة (معادلة 8) هي علاقة التفرق dispersion relation
وهي العلاقة التي تربط متجه الموجة q بالتردد الزاوي ω



$$\boxed{-\frac{\pi}{a} \le q \le \frac{\pi}{a}}$$

يمكن تحديد منطقة برليون الاولى بين قيم $q=\pm\frac{\pi}{a}$ اي ان $-\frac{\pi}{a} \le q \le \frac{\pi}{a}$
من خصائص المعادلة (8) وجود قيم عظمى للتردد الزاوي ω ونحصل على هذه القيم عند $q=\pm\frac{\pi}{a}$ او مضاعفاتها الفردية.

$$\omega_m = \sqrt{\frac{4\alpha}{m}}$$

وتعتمد قيمة ω_m على ثابت القوة α وكتلة الذرة m وقيمة ω_m هي بحدود $\omega_m \sim 10^{15}\,Hz$.

ومنطقة برليون الثانية محددة بين $-\frac{2\pi}{a} \le q \le -\frac{\pi}{a}$ و $\frac{\pi}{a} \le q \le \frac{2\pi}{a}$
وهكذا بالنسبة لبقية مناطق برليون الثالثة والرابعة .. . منطقة برليون الاولى مهمة لانها تحوي كافة قيم متجه الموجة، اي ان قيم q خارج نطاق المنطقة الاولى يمكن الوصول اليها عن طريق خاصية الدورية باضافة متجه الشبيكة المقلوبة $\vec{G}$ حيث ان

$$\boxed{\vec{q}\,' = \vec{q} + \vec{G}} \qquad (9)$$

هنا $G = n\left(\frac{2\pi}{a}\right)$ ، q متجه الموجة داخل منطقة برليون الاولى
و q' متجه الموجة خارج برليون الاولى

لاثبات صحة العلاقة (9) نحسب النسبة بين ازاحتي ذرتين متجاورتين

$$\frac{U_{n+1}}{U_n} = e^{iqa}$$
$$= e^{i(q' \pm G)a}$$
$$= e^{iq'a}\, e^{\pm iGa} \qquad ; \; G = \left(\frac{2\pi}{a}\right)n$$
$$= e^{iq'a}\, e^{\pm i2\pi n}$$
$$= e^{iq'a}$$

هذا يعني ان ω_q دالة دورية لمتجه الموجة q بثابت دورة مقداره $\frac{2\pi}{a}$ لهذا فان كل القيم المتاحة لـ q هي ضمن منطقة برليون الاولى اي ان

$$\boxed{\omega\left(q + \frac{2\pi}{a}\right) = \omega(q)} \qquad (10)$$

بالرجوع الى المعادلة

$$\boxed{\omega = \sqrt{\frac{4\alpha}{m}}\, \sin\left(\frac{qa}{2}\right)} \qquad (11)$$

- اذا كانت قيم q صغيرة يمكن تقريب العلاقة (11) بالشكل التالي

$$\sin\left(\frac{1}{2}qa\right) \simeq \frac{1}{2}qa$$

$$\therefore \; \omega = \sqrt{\frac{4\alpha}{m}}\, \frac{1}{2}qa$$

$$\boxed{\omega = \sqrt{\frac{\alpha}{m}}\, qa} \qquad ; \; \boxed{qa \ll 1}$$

هذا التقريب يعني ايضا $q \ll \frac{1}{a}$ او $\boxed{\lambda \gg a}$ اي منطقة الموجات الطويلة. هنا يمكن حساب سرعة الطور phase velocity

$$U_{phase} = \frac{\omega}{q} = \sqrt{\frac{\alpha}{m}}\, a$$

وسرعة المجموعة group velocity

$$U_{group} = \frac{\partial \omega}{\partial q} = \sqrt{\frac{\alpha}{m}}\, a = U_{phase}$$

• اما عندما تصبح قيم q مقاربة لـ $\pm\frac{\pi}{a}$ اي عند القيم العالية لمتجه الموجة فان علاقة التفريق معادلة (11)

$$\omega = \sqrt{\frac{4\alpha}{m}}\ \sin\left(\frac{qa}{2}\right)$$

سرعة الطور

$$V_{phase} = \frac{\omega}{q} = \frac{\sqrt{\frac{4\alpha}{m}}\ \sin\left(\frac{qa}{2}\right)}{q}$$

$$\boxed{V_{phase} = \left(\sqrt{\frac{\alpha}{m}}\,a\right)\frac{\sin\left(\frac{qa}{2}\right)}{\left(\frac{qa}{2}\right)}}$$

وسرعة المجموعة في هذه الحالة

$$V_{group} = \sqrt{\frac{\alpha}{m}}\,a\cos\left(\frac{1}{2}qa\right)$$

اي ان سرعة المجموعة تختلف عن سرعة الطور في القيم العالية لـ q منطقة الموجات القصيرة $\boxed{qa \gg 1}$ اي منطقة الترددات العالية. وقيمة V_{group} عند حدود منطقة برليون $\pm\frac{\pi}{a}$ تساوي صفراً. وهذا يفسر كما يلي: ان الموجة عند هذه الحدود هي عبارة عن موجة واقفة standing wave وليست موجة متنقلة traveling wave

مما سبق يمكن ملاحظة ما يلي:

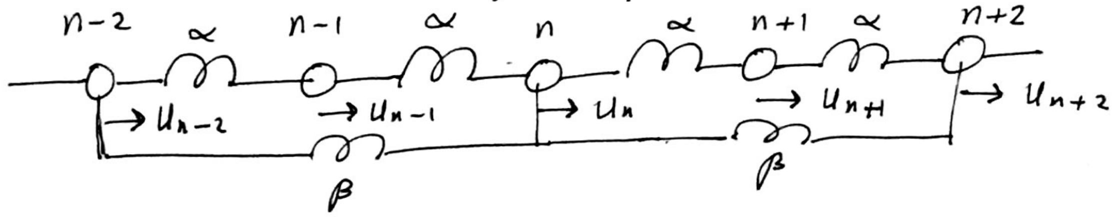
* السلسلة الخطية لها ترددات بين 0 و ω_m ويمكن اعتبارها مرشحاً ميكانيكياً اي يسمح بمرور الترددات بين 0 و ω_m ولا يسمح بمرور الترددات العالية $\omega \gg \omega_m$

* اذا كانت $a = 3\times10^{-10}m$ ومعدل سرعة الصوت في المادة الصلبة $V_0 = 5\times10^{3}\,m/s$ فان اقصى قيمة لمتجه الموجة بحدود $10^{10}\,m^{-1}$ وبذلك تكون قيمة $\omega_m \sim 10^{13}\,Hz$

* سرعة الموجة

$$V_0 = \sqrt{\frac{\alpha}{m}}\,a$$

مسألة : اكتب معادلات الحركة لسلسلة احادية الذرة ، m كتلة الذرة a ثابت الشبيكة ، α ثابت القوة من المرتبة الاولى و β ثابت القوة من المرتبة الثانية



$$m\frac{d^2u}{dt^2} = \alpha\left(U_{n+1}-U_n\right) + \alpha\left(U_{n-1}-U_n\right) + \beta\left(U_{n+2}-U_n\right) + \beta\left(U_{n-2}-U_n\right)$$

نفرض ان :

$$U_n = A\,e^{i(qx_n-\omega t)}$$

$$-m\omega^2 U_n = \alpha\left(e^{iqa}+e^{-iqa}-2\right)U_n + \beta\left(e^{i2qa}+e^{-i2qa}-2\right)U_n$$

$$-m\omega^2 = \alpha\left(2\cos(qa)-2\right) + \beta\left(2\cos(2qa)-2\right)$$

$$\omega^2 = \frac{2\alpha}{m}\left(1-\cos(qa)\right) + \frac{2\beta}{m}\left(1-\cos(2qa)\right)$$

$$\therefore \boxed{\omega^2 = \frac{4\alpha}{m}\sin\left(\frac{qa}{2}\right) + \frac{4\beta}{m}\sin\left(\frac{2qa}{2}\right)}$$