ادامه فصل۲
پراش موج و شبکه وارون

- تعمیم تحلیل فوریه به توابع دوره ای سه بعدی
- بردارهای شبکه وارون
- شرایط پراش
- ترسیم اوالد

تعمیم تحلیل فوریه به توابع دوره ای سه بعدی

تعمیم تحلیل فوریه به توابع دوره‌ای سه‌بعدی ساده است. در این حالت، مجموعه‌ای از بردارهای $\mathbf{G}$ را به‌گونه‌ای پیدا می‌کنیم که تابع

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} n_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \qquad (۹)$$

تحت اثر تمامی انتقالهای شبکهٔ $\mathbf{T}$، که بلور را ناوردا باقی می‌گذارند، ناوردا بماند. در زیر نشان خواهیم داد که مجموعهٔ ضرایب فوریهٔ $n_{\mathbf{G}}$ دامنهٔ پراکندگی پرتو x را تعیین می‌کند.

وارون سازی رشته فوریه

$$n(x) = \sum_p n_p \exp(i2\pi px/a) \qquad (5)$$

وارون‌سازی رشتهٔ فوریه. اکنون نشان می‌دهیم که ضریب فوریهٔ n_p در رشتهٔ (۵) با

$$n_p = a^{-1} \int_0^a dx\, n(x) \exp(-i2\pi px/a) \qquad (10)$$

بیان می‌شود. با درج رشتهٔ (۵) در معادلهٔ (۱۰) داریم

$$n_p = a^{-1} \sum_{p'} n_{p'} \int_0^a dx \exp[i2\pi(p'-p)x/a] \qquad (11)$$

اگر $p' \neq p$ مقدار انتگرال برابر است با

$$\frac{a}{i2\pi(p'-p)}(e^{i2\pi(p'-p)} - 1) = 0$$

وارون سازی رشته فوریه

زیرا $p' - p$ عددی درست است و $1 = [(\text{عدد درست})\exp[i2\pi$. برای جملهٔ $p = p'$ انتگرالده برابر $1 = \exp(i0)$ و مقدار انتگرال برابر است با a، در نتیجه $n_p = a^{-1}n_p a = n_p$، که یک اتحاد است، بنابراین معادلهٔ (۱۰) یک اتحاد است.

همانند رابطهٔ (۱۰)، وارون‌سازی معادلهٔ (۹) به رابطهٔ زیر منجر می‌شود:

$$n_{\mathbf{G}} = V_c^{-1} \int_{\text{یاخته}} dV \; n(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}) \qquad (12)$$

در اینجا V_c حجم یاختهٔ بلور است.

بردارهای شبکه وارون

برای تکمیل رشتهٔ فوریه مربوط به غلظت الکترون باید بردارهای $\mathbf{G}$ مجموع فوریهٔ $\sum n_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r})$ را در رابطهٔ (۹) به‌دست آوریم. روشی مؤثر و تا حدودی انتزاعی برای این کار وجود دارد. این روش اصول نظری را در مورد اغلب کارهای فیزیک حالت جامد، که در آن استفاده از تحلیل فوریه رایج است، تشکیل می‌دهد.

بردارهای محوری $\mathbf{b}_1$، $\mathbf{b}_2$، و $\mathbf{b}_3$ی شبکهٔ وارون به طریق زیر بنا می‌شوند:

$$\boxed{\mathbf{b}_1 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_2\times\mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{a}_2\times\mathbf{a}_3};\quad \mathbf{b}_2 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_3\times\mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{a}_2\times\mathbf{a}_3};\quad \mathbf{b}_3 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_1\times\mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1\cdot\mathbf{a}_2\times\mathbf{a}_3}} \quad (۱۳)$$

ضریبهای 2π را بلورشناسان به کار نمی‌برند ولی در فیزیک حالت جامد مفیدند.

بردارهای شبکه وارون

اگر $\mathbf{a}_1$، $\mathbf{a}_2$، و $\mathbf{a}_3$ بردارهای بسیط شبکهٔ بلور باشند، $\mathbf{b}_1$، $\mathbf{b}_2$، و $\mathbf{b}_3$ بردارهای بسیط شبکهٔ وارون خواهند بود. هر بردار در رابطهٔ (۱۳) بر دو بردار محوری شبکهٔ بلور عمود است. به این ترتیب $\mathbf{b}_1$، $\mathbf{b}_2$، و $\mathbf{b}_3$ دارای این ویژگی‌اند

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij} \qquad (۱۴)$$

که در آن $\delta_{ij} = 1$، اگر $i = j$ و $\delta_{ij} = 0$، اگر $i \neq j$.

نقاط شبکهٔ وارون را مجموعهٔ بردارهای $\mathbf{b}$ ترسیم می‌کنند

$$\mathbf{G} = v_1\mathbf{b}_1 + v_2\mathbf{b}_2 + v_3\mathbf{b}_3 \qquad (۱۵)$$

که v_1، v_2، و v_3 اعداد درست‌اند. هر بردار $\mathbf{G}$ که به این شکل باشد بردار شبکهٔ وارون نامیده می‌شود.

سئوال: آیا با تعریف G بصورت فوق می توان انتظار داشت n(r) تحت انتقال بلور ناوردا باشد؟

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} n_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}) \qquad (۹)$$

$$\mathbf{G} = v_۱\mathbf{b}_۱ + v_۲\mathbf{b}_۲ + v_۳\mathbf{b}_۳ \qquad (۱۵)$$

بردارهای G در رشتهٔ فوریهٔ (۹) درست بردارهای شبکهٔ وارون رابطهٔ (۱۵)اند، زیرا در این صورت نمایش رشتهٔ فوریه برای چگالی الکترونها تحت اثر انتقال بلور $\mathbf{T} = u_۱\mathbf{a}_۱ + u_۲\mathbf{a}_۲ + u_۳\mathbf{a}_۳$ دارای ناوردایی مطلوب خواهد بود. از معادلهٔ (۹) داریم

$$n(\mathbf{r}+\mathbf{T}) = \sum_{\mathbf{G}} n_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{G}\cdot\mathbf{T}) \qquad (۱۶)$$

سئوال: آیا با تعریف G بصورت فوق می توان انتظار داشت n(r) تحت انتقال بلور ناوردا باشد؟

ولی $\exp(i\mathbf{G}\cdot\mathbf{T}) = ۱$، زیرا

$$\exp(i\mathbf{G}\cdot\mathbf{T}) = \exp[i(v_۱\mathbf{b}_۱ + v_۲\mathbf{b}_۲ + v_۳\mathbf{b}_۳)\cdot(u_۱\mathbf{a}_۱ + u_۲\mathbf{a}_۲ + u_۳\mathbf{a}_۳)] \qquad (۱۷)$$
$$= \exp[i۲\pi(v_۱u_۱ + v_۲u_۲ + v_۳u_۳]$$

از آنجا که $v_۱u_۱ + v_۲u_۲ + v_۳u_۳$ مجموع حاصلضربهای اعداد درست است و بنابراین خود یک عدد درست است، شناسهٔ تابع نمایی فوق به‌صورت حاصلضرب $۲\pi i$ در یک عدد درست است. بنابراین با استفاده از رابطهٔ (۹) نتیجه می‌شود ناوردایی مطلوب، یعنی $n(\mathbf{r}+\mathbf{T}) = n(\mathbf{r}) = \sum n_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r})$، وجود دارد.

مقایسه شبکه بلور و شبکه وارون

به هر ساختار بلوری دو نوع شبکه، یکی شبکهٔ بلور و دیگری شبکهٔ وارون، مربوط می‌شود. همان‌گونه که خواهیم دید نقشهٔ پراش بلور، نقشهٔ شبکهٔ وارون آن است. در حالی‌که تصویر حاصل از میکروسکوپ، اگر بتوان آن را بر روی مقیاسی نسبتاً ظریف تفکیک کرد، نقشهٔ ساختار بلور در فضای واقعی است. تعریفهای (۱۳) این دو شبکه را به هم مربوط می‌کنند. وقتی بلوری را با نگهدارنده‌اش بچرخانیم، هر دو شبکهٔ مستقیم و وارون می‌چرخند.

بردارهای شبکهٔ مستقیم ابعاد [طول] دارند؛ در حالی‌که بردارهای شبکهٔ وارون ابعاد [۱/طول] دارند.

$$\boxed{\mathbf{b}_1 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}; \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}; \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}} \quad (13)$$

شبکهٔ وارون، شبکه‌ای در فضای فوریهٔ وابسته به بلور است. انگیزهٔ استفاده از جملهٔ فضای فوریه در ادامه آمده است. بردارهای موج همیشه در فضای فوریه رسم می‌شوند. هر مکانی در فضای فوریه ممکن است به معنی توصیفی از موج باشد، ولی نقاطی که مجموعهٔ بردارهای $\mathbf{G}$ تعریف می‌کنند، اهمیت ویژه‌ای دارند.

شرایط پراش

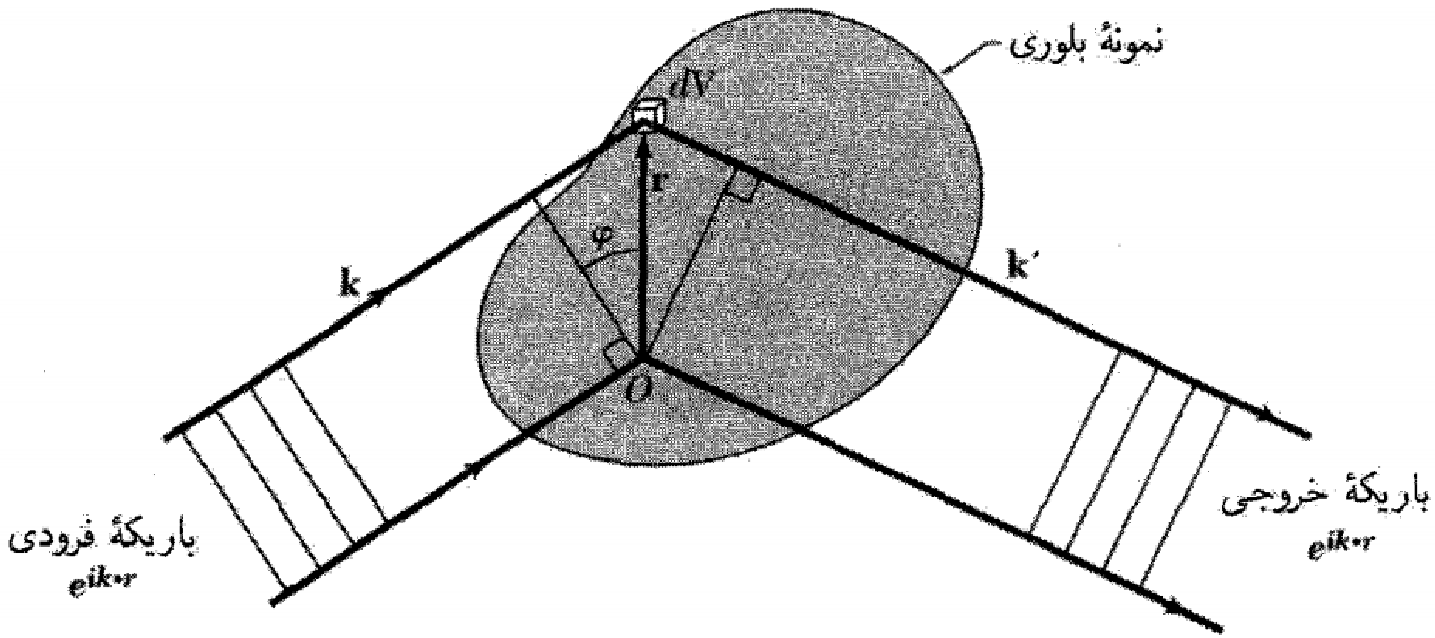
قضیه. مجموعهٔ بردارهای شبکهٔ وارون $\mathbf{G}$ بازتابهای ممکن پرتو x را تعیین می‌کند.

در شکل ۶ مشاهده می‌کنیم که اختلاف ضریبهای فاز بین دو باریکهٔ پراکنده‌شده از دو عنصر حجم که به فاصلهٔ $\mathbf{r}$ از یکدیگر واقع‌اند برابر است با $\exp[i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}]$. $\mathbf{k}$ و $\mathbf{k}'$ بردارهای موج باریکه‌های ورودی و خروجی‌اند. دامنهٔ موج پراکنده‌شده از هر عنصر حجم با تراکم موضعی الکترونها، $n(\mathbf{r})$، متناسب است. دامنهٔ کل موج پراکنده‌شده در جهت $\mathbf{k}'$ با انتگرال حاصلضرب $n(\mathbf{r})dV$ در فاکتور فاز $\exp[i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}]$ روی تمامی بلور متناسب است.

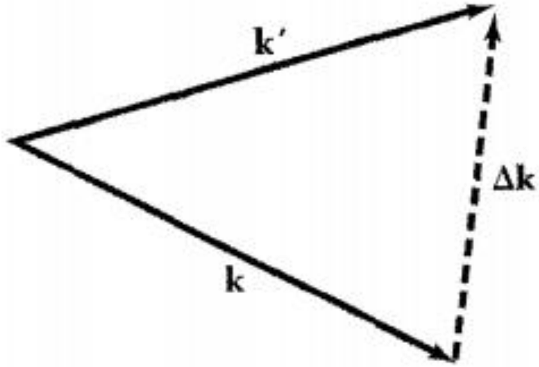
به زبان دیگر، دامنهٔ بردارهای میدان الکتریکی یا مغناطیسی در موج الکترومغناطیسی پراکنده‌شده متناسب با انتگرال زیر است که کمیت F به‌نام **دامنهٔ پراکندگی** را تعریف می‌کند:

$$F = \int dV\, n(\mathbf{r}) \exp[i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}] = \int dV\, n(\mathbf{r}) \exp(-i\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \qquad (۱۸)$$

شرایط پراش



شکل ۶. اختلاف راه بین موج فرودی $\mathbf{k}$ در نقاط O و $\mathbf{r}$ برابر $r \sin\varphi$ و اختلاف زاویهٔ فاز بین این دو نقطه برابر است با $(۲\pi r \sin\varphi)/\lambda$ که با $\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}$ برابر است. در مورد موج پراشیده اختلاف زاویهٔ فاز برابر $-\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}$ است. اختلاف کل در زاویهٔ فاز برابر $(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}$ است و موج پراکنده‌شده از dV در $\mathbf{r}$ فاکتور فاز $\exp[i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}]$ را نسبت به موج پراکنده‌شده از عنصر حجم واقع در مبدأ Oدار است.



شکل ۷. تعریف بردار پراکندگی $\mathbf{\Delta k}$ به‌گونه‌ای که $\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k} = \mathbf{k}'$. در پراکندگی کشسان بزرگی بردارهای موج در رابطهٔ $k' = k$ صدق می‌کند. علاوه بر این، در پراکندگی براگ از یک شبکهٔ دوره‌ای هر $\Delta\mathbf{k}$ی مجاز باید با یک بردار شبکهٔ وارون $\mathbf{G}$ برابر باشد.

که در آن $\mathbf{k} - \mathbf{k}' = -\Delta\mathbf{k}$، یا

$$\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k} = \mathbf{k}' \qquad (۱۹)$$

در اینجا $\Delta\mathbf{k}$ تغییر بردار موج در اثر پراکندگی است و بردار پراکندگی نام دارد (شکل۷). برای به‌دست آوردن بردار موج باریکهٔ پراکنده‌شدهٔ $\mathbf{k}'$، $\Delta\mathbf{k}$ را با $\mathbf{k}$ جمع می‌کنیم.

مؤلفه‌های فوریهٔ $n(\mathbf{r})$، رابطهٔ (۹)، را در رابطهٔ (۱۸) قرار می‌دهیم و عبارت زیر را برای دامنهٔ پراکندگی به‌دست می‌آوریم

$$F = \sum_{\mathbf{G}} \int dV\, n_{\mathbf{G}} \exp[i(\mathbf{G} - \Delta\mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}] \qquad (۲۰)$$

هنگامی که بردار پراکندگی $\Delta\mathbf{k}$ با بردار شبکهٔ وارون $\mathbf{G}$ برابر باشد،

$$\boxed{\Delta\mathbf{k} = \mathbf{G}} \tag{۲۱}$$

شناسهٔ تابع نمایی برابر صفر می‌شود و $F = Vn_G$. به‌صورت تمرینی ساده (مسئلهٔ ۴) می‌توان نشان داد که هر گاه $\Delta\mathbf{k}$ با هر بردار شبکهٔ وارون اختلاف عمده‌ای داشته باشد، F چشم‌پوشیدنی خواهد بود.

در پراکندگی کشسان انرژی $\hbar\omega$ی فوتون پایسته می‌ماند، در نتیجه بسامد، $\omega' = ck'$، باریکهٔ خروجی با بسامد باریکهٔ فرودی برابر است. بنابراین بزرگیهای k و k' مساوی‌اند، و $k^۲ = k'^۲$، نتیجه‌ای که در مورد پراکندگی کشسان باریکه‌های الکترونی و نوترونی معتبر است. با استفاده از رابطهٔ (۲۱) دیدیم $\Delta\mathbf{k} = \mathbf{G}$ یا $\mathbf{k} + \mathbf{G} = \mathbf{k}'$ در نتیجه شرط پراش به‌صورت $(\mathbf{k} + \mathbf{G})^۲ = k^۲$ یا

$$\boxed{۲\mathbf{k}\cdot\mathbf{G} + G^۲ = ۰} \tag{۲۲}$$

در می‌آید.

این رابطه نتیجهٔ اصلی نظریهٔ پراکندگی کشسان امواج در شبکهٔ دوره‌ای است. اگر $\mathbf{G}$ بردار شبکهٔ وارون باشد، $-\mathbf{G}$ نیز برداری از شبکهٔ وارون خواهد بود؛ بنابراین رابطهٔ (۲۲) را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$\boxed{۲\mathbf{k}\cdot\mathbf{G} = G^۲} \tag{۲۳}$$

این رابطهٔ بخصوص غالباً به‌منزلهٔ شرط پراش به‌کار می‌رود.

معادلهٔ (۲۳) گزارهٔ دیگری از شرط براگ (۱) است. از مسئلهٔ ۱ نتیجه می‌شود که فاصلهٔ $d(hkl)$ بین صفحات موازی شبکه، که بر جهت $\mathbf{G} = h\mathbf{b}_۱ + k\mathbf{b}_۲ + l\mathbf{b}_۳$ عمودند، به‌صورت $d(hkl) = ۲\pi/|\mathbf{G}|$ است. بدین ترتیب، نتیجهٔ $۲\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} = G^۲$ را می‌توان به‌صورت زیر نوشت

$$۲\left(\frac{۲\pi}{\lambda}\right)\sin\theta = \frac{۲\pi}{d(hkl)}$$

یا $۲d(hkl)\sin\theta = \lambda$. در اینجا θ زاویهٔ بین باریکهٔ فرودی و صفحهٔ بلور است.

اعداد درست hkl که $\mathbf{G}$ را تعریف می‌کنند، الزاماً با شاخصهای یک صفحهٔ واقعی بلور یکسان نیستند. اعداد درستی که $\mathbf{G}$ را تعریف می‌کنند، ممکن است شامل عامل مشترک n باشند، در حالی‌که در تعریف شاخصهای صفحات در فصل ۱، عامل مشترک حذف شده است. بنابراین، نتیجهٔ براگ را به‌دست می‌آوریم:

$$۲d\sin\theta = n\lambda \qquad (۲۴)$$

که در آن d فاصلهٔ بین صفحات موازی مجاوری است که شاخصهایشان h/n، k/n و l/n هستند.

صفحه ۹ فصل دوم - جلسه هفتم

اثبات رابطه براگ از $2\vec{K}\cdot\vec{G}=G^2$

در کتاب نوشته شده

$$2KG\sin\theta = G^2$$

$$K=\frac{2\pi}{\lambda} \longrightarrow 2\,\frac{2\pi}{\lambda}\sin\theta = G \longrightarrow 2\,\frac{2\pi}{\lambda}\sin\theta=\frac{2\pi}{d} \rightarrow \lambda=2d\sin\theta$$

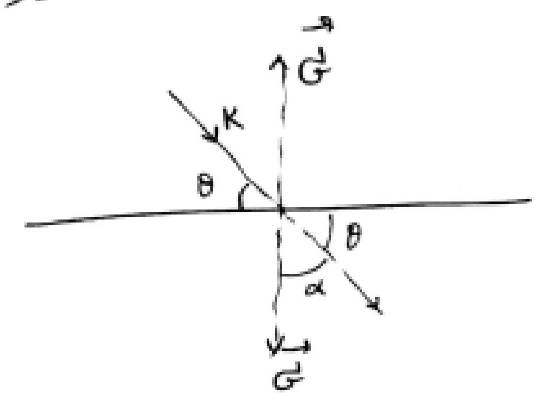
$G=\frac{2\pi}{d}$ (طبق سوال ۱)

سوالی که پیش می آید این است که چگونه زاویه بین $\vec K$ و $\vec G$ اینجا تشخیص داده شده است؟

پاسخ:

می دانیم مولفه های بردار $\vec G$ با بردارهای پایه شبکه وارون یعنی $\vec b_1$، $\vec b_2$ و $\vec b_3$ بر بردارهای پایه بلور عمودند که در نتیجه کل بردار $\vec G$ یعنی $\vec G=u\vec b_1+v\vec b_2+w\vec b_3$ بر بردارهای شبکه که حداقل دوتا از آنها در صفحه بلور واقعند عمود است لذا می توان $\vec G$ را عمود بر صفحه بلور (نه سطح بلور) در نظر گرفت

(وقتی می گوییم $\vec G$ بر صفحه بلور عمود است البته هر دو حالت زیر می تواند متصور باشد که ما حالت پایینی را در نظر می گیریم)



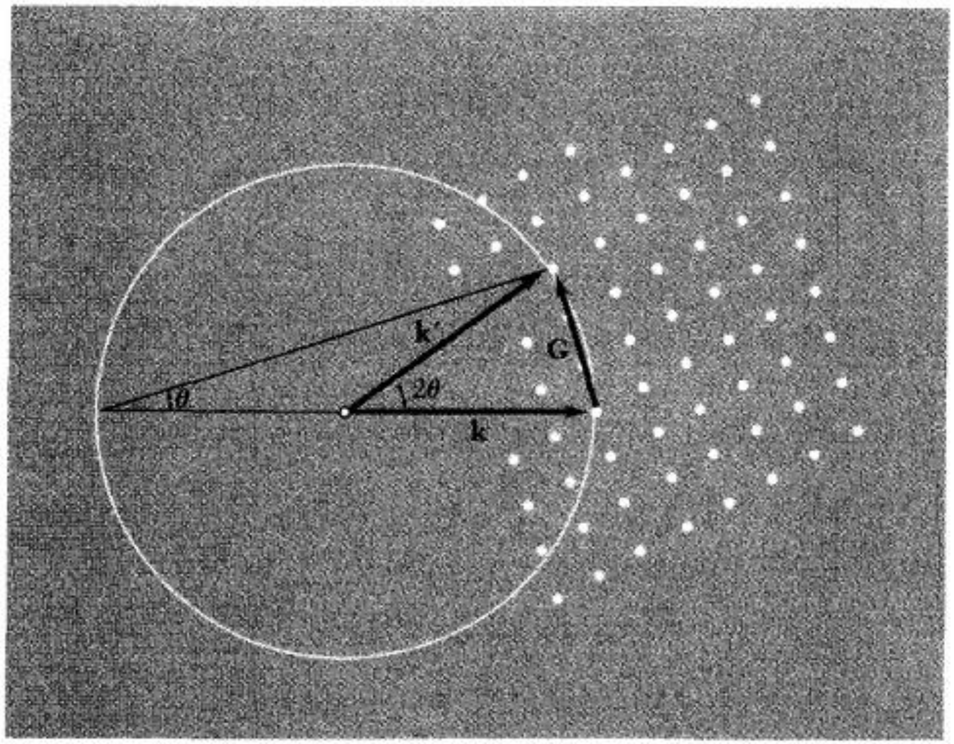
در اینصورت

$$\vec K\cdot\vec G = KG\cos\alpha = KG\cos\left(\frac{\pi}{2}-\theta\right)$$
$$= KG\sin\theta$$

از همین نتیجه در محاسبه روابط اول صفحه استفاده شده است.

ترسیم اوالد

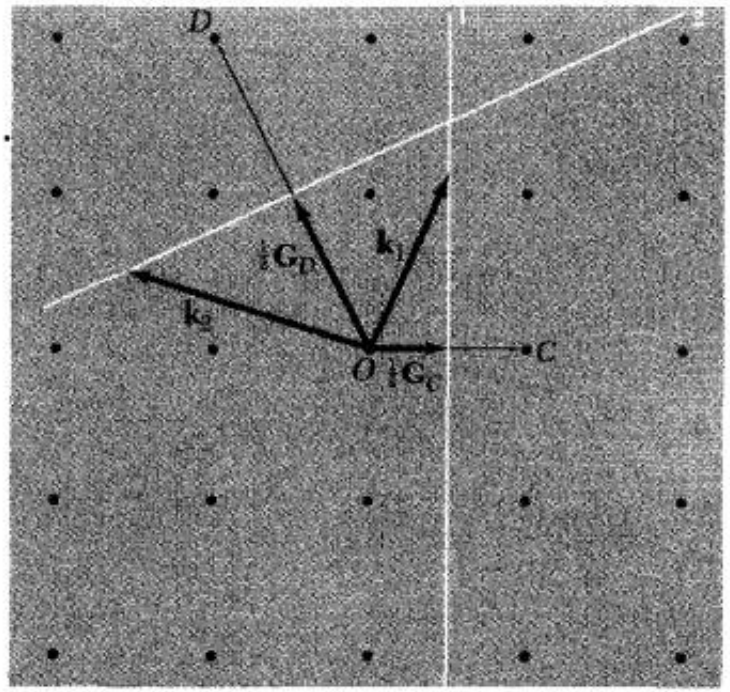
یک ترسیم هندسی مفید، به نام ترسیم اوالد، در شکل ۸ نشان داده شده است. ترسیم اوالد ما را در تجسم طبیعت تصادفی، که باید برای برآورده شدن شرط پراش در سه بعد رخ دهد، یاری می‌کند.



شکل ۸. نقاط سمت راست، نقاط شبکهٔ وارون بلورند. بردار **k** در جهت باریکهٔ x فرودی رسم شده است. مبدأ به‌گونه‌ای برگزیده شده است که **k** به یک نقطهٔ شبکهٔ وارون منتهی می‌شود. کره‌ای به شعاع $k = 2\pi/\lambda$ حول **k** رسم می‌کنیم. اگر این کره از هر نقطهٔ دیگری از شبکهٔ وارون بگذرد، باریکهٔ پراشیده‌ای تشکیل خواهد شد. کره‌ای که در شکل رسم شده است، از نقطهٔ دیگری می‌گذرد که بردار شبکهٔ وارون **G** آن را به انتهای **k** وصل می‌کند. باریکهٔ پرتو x پراشیده در جهت $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G}$ خواهد بود. θ زاویهٔ براگ در شکل ۲ است. این ترسیم را پ. پ. اوالد ابداع کرده است.

اهمیت صفحاتی که عمود منصف بردارهای شبکه وارون اند

در نظریهٔ انتشار امواج در بلورها، مجموعهٔ صفحاتی که عمودمنصف بردارهای شبکهٔ وارون‌اند اهمیت اساسی دارند، زیرا موجی که بردار موج آن از مبدأ شروع و به یکی از این صفحات ختم شود، شرایط پراش را برآورده می‌کند.



شکل ۹. الف. نقاط شبکهٔ وارون. در نزدیکی نقطهٔ O در مبدأ شبکهٔ وارون. بردار شبکهٔ وارون $\mathbf{G}_C$ نقاط O و C و بردار $\mathbf{G}_o$ نقاط O و D را به‌هم متصل می‌کند. دو صفحهٔ ۱ و ۲ به ترتیب عمودمنصفهای $\mathbf{G}_C$ و $\mathbf{G}_D$اند. هر برداری مانند $\mathbf{k}_1$ که از مبدأ شروع و به صفحهٔ ۱ ختم شود، در شرط پراش $\mathbf{k}_1 \cdot (\frac{1}{2}\mathbf{G}_c) = (\frac{1}{2}\mathbf{G}_c)^2$ صدق می‌کند. هر برداری، مانند $\mathbf{k}_2$، که از مبدأ شروع و به صفحهٔ ۲ ختم شود، شرط پراش $\mathbf{k}_2 . (\frac{1}{2}\mathbf{G}_D) = (\frac{1}{2}\mathbf{G}_D)^2$ را برآورده می‌کند.

اثبات رابطه $K_1 \cdot (\frac{1}{2} G_c) = (\frac{1}{2} G_c)^2$

از رابطه (۲۲) :

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

$$\Rightarrow \vec{K}_1 \cdot \vec{G}_c = \frac{1}{2} G_c^2$$

$$\Rightarrow \vec{K}_1 \cdot (\frac{1}{2}\vec{G}_c) = \frac{1}{2} \frac{1}{2} G_c^2$$

$$\Rightarrow \vec{K}_1 \cdot (\frac{1}{2}\vec{G}_c) = \frac{1}{2^2} G_c^2$$

$$\Rightarrow \vec{K}_1 \cdot (\frac{1}{2}\vec{G}_c) = (\frac{G_c}{2})^2$$

صحت این رابطه از روی شکل ۹ قابل اثبات است.