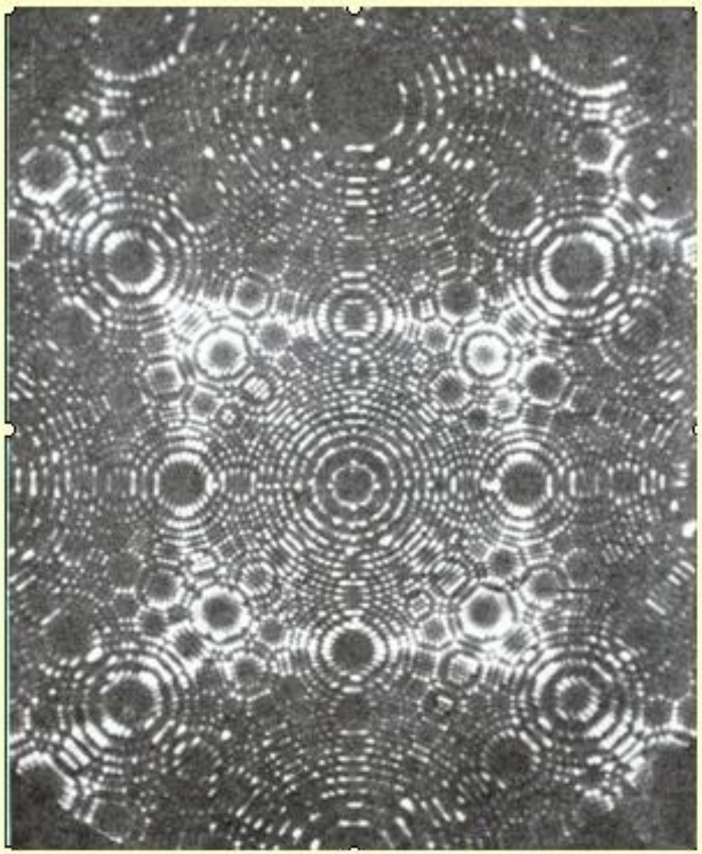
فصل۲
پراش موج و شبکه وارون



پراش امواج توسط بلورها

دامنهٔ موج پراکنده‌شده

منطقه‌های بریلوئن

تحلیل فوریهٔ پایه

پراش توسط بلور

- برای یافتن مکان اتمها در یک بلور دو روش است :

- ۱– روش مستقیم : استفاده از میکروسکوپ الکترونی و تصویر برداری مستقیم

- ۲– روش غیر مستقیم : پراش امواج توسط بلور و بررسی طرح پراشی

پراش توسط بلور

- امواج مورد استفاده برای تعیین ساختار بلوری و مکان اتمها می تواند فوتونها ، نوترونها و الکترونها باشد.

- طول موج پرتو تابیده شده به بلور ، برای تعیین ساختار آن ، باید درحدود ابعاد شبکه باشد

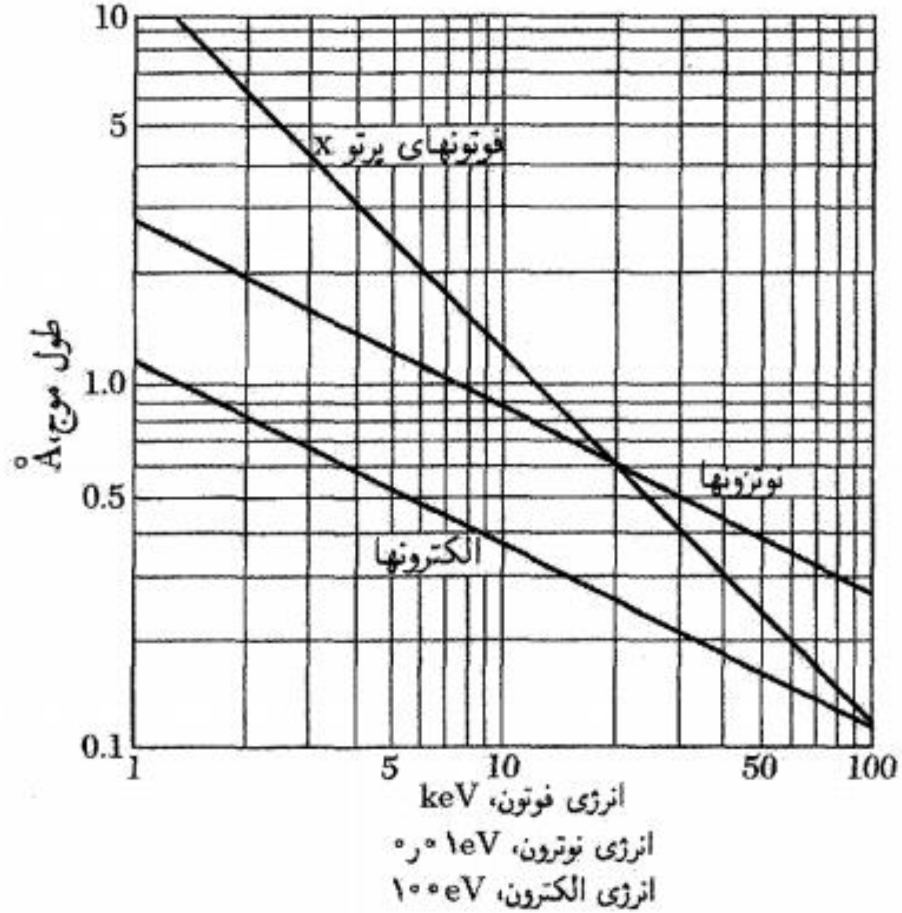
$$\lambda \leq d$$

پراش امواج توسط بلورها – قانون براگ

ساختار بلور را از طریق پراش فوتونها، نوترونها، و الکترونها بررسی می‌کنیم (شکل ۱). پراش به ساختار بلور و طول موج بستگی دارد. در طول موجهای اپتیکی مانند $5000\,\text{Å}$، برهم‌نهی امواجی که اتمهای این بلور به‌طور کشسان پراکنده می‌کنند، به شکست اپتیکی معمولی منجر می‌شود. اگر طول موج تابش با ثابت شبکه مقایسه‌پذیر یا کوچکتر از آن باشد، می‌توان باریکه‌های پراشیده را در جهتهای کاملاً متفاوت با جهت فرودی به‌دست آورد.

و. ل. براگ در مورد باریکه‌های پراشیده از بلور توضیح ساده‌ای ارائه کرد. با وجود اینکه محاسبهٔ براگ ساده است، فقط به این دلیل که به نتیجهٔ صحیح منجر می‌شود، متقاعدکننده است. فرض کنید امواج فرودی توسط صفحات اتمی موازی در بلور بازتاب آینه‌ای بیابند، به‌گونه‌ای که هر صفحه، مانند آینه‌ای که کمی نقره‌اندود شده باشد، فقط بخش کوچکی از پرتوها را بازتاب دهد. در بازتاب آینه‌ای زاویهٔ فرودی با زاویهٔ بازتاب برابر است. همان‌طورکه در شکل ۲ نشان داده شده است، وقتی بازتابهای ناشی از صفحات اتمی موازی به‌طور سازنده تداخل کنند، باریکه‌های پراشیده ظاهر می‌شوند. در اینجا پراکندگی کشسان را، که در آن انرژی پرتو x در اثر بازتاب تغییر نمی‌کند، بررسی می‌کنیم.

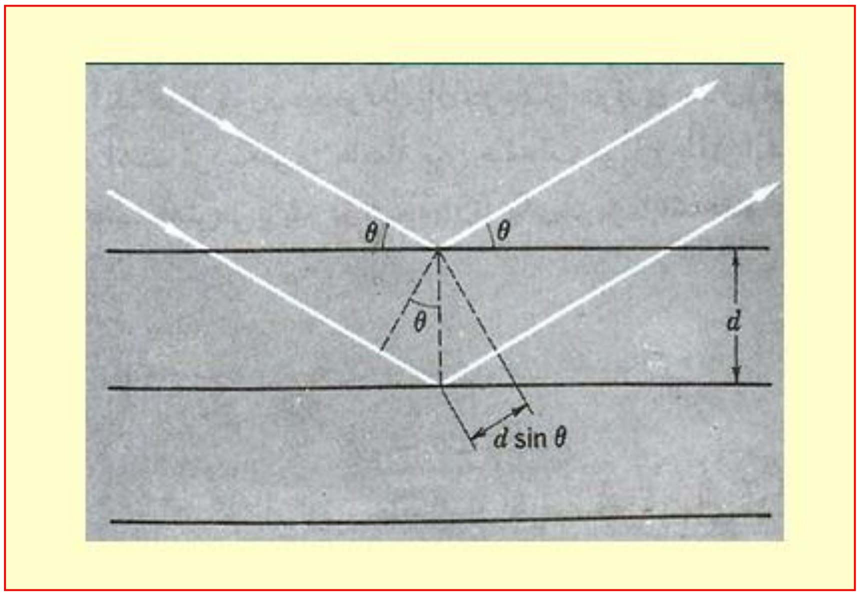
طول موج بر حسب انرژی، برای فوتون ها، نوترون ها والکترون ها



شکل ۱. طول موج برحسب انرژی، برای فوتونها، نوترونها، و الکترونها.

قانون براگ

- به دست آوردن معادله براگ، در اینجا **d** فاصله بین صفحات اتمی موازی است و اختلاف فاز بین بازتاب های ناشی از صفحات متوالی برابر ۲πn است.

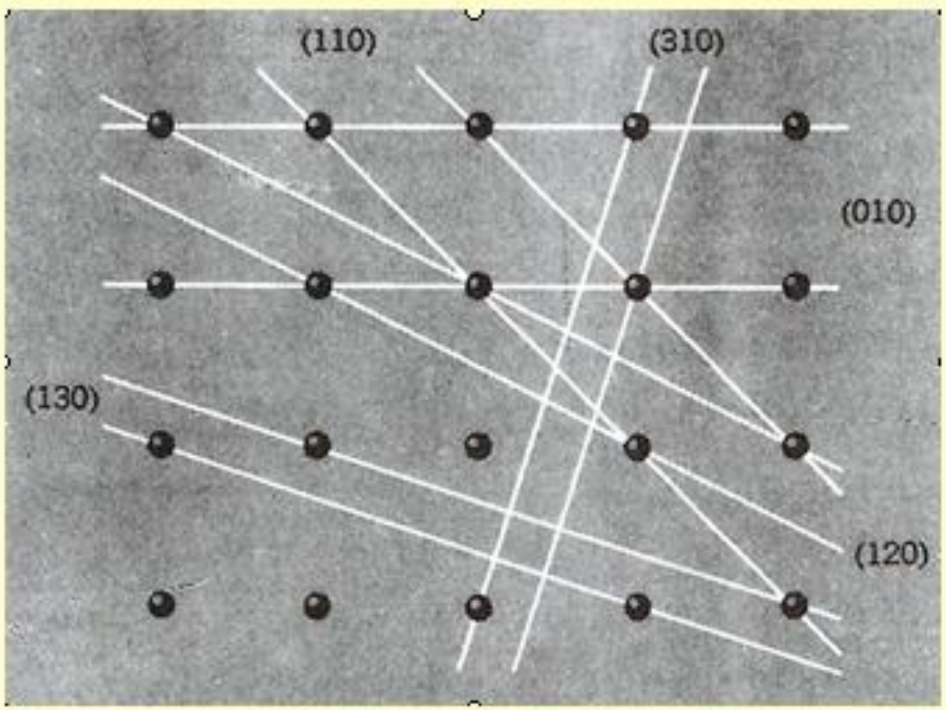


$$۲d\sin\theta = n\lambda$$

شکل ۲. به‌دست آوردن معادلهٔ براگ، $۲d\sin\theta = n\lambda$؛ در اینجا d فاصلهٔ بین صفحات اتمی موازی و اختلاف فاز بین بازتابهای ناشی از صفحات متوالی برابر $۲\pi n$ است. صفحات بازتابنده هیچ ارتباطی با سطوح خارجی نمونه ندارند.

قانون براگ

- چند نوع از صفحات بازتابنده در شبکه بلوری مکعبی ساده.
صفحات بازتابنده هیچ ارتباطی با سطوح خارجی نمونه ندارند.



قانون براگ

صفحات موازیی از شبکه را در نظر می‌گیریم، که به فاصلهٔ d از یکدیگر قرار دارند. تابش در صفحهٔ کاغذ فرود می‌آید. اختلاف راه پرتوهایی که از دو صفحهٔ متوالی بازتاب می‌یابند برابر $2d\sin\theta$ است، که در آن θ زاویهٔ پرتو فرودی با این صفحه‌هاست. تابشهای حاصل از صفحات متوالی هنگامی با یکدیگر تداخل سازنده می‌کنند که اختلاف راهشان برابر مضرب درست n از طول موج λ باشد، بنابراین

$$\boxed{2d\sin\theta = n\lambda} \tag{1}$$

این قانون براگ است، که فقط برای طول موجهای $\lambda \leq 2d$ برآورده می‌شود.

با اینکه بازتاب حاصل از هر صفحه آینه‌ای است، بازتابهای ناشی از همهٔ صفحات موازی فقط برای مقادیر معینی از زاویهٔ θ به‌طور همفاز با یکدیگر جمع می‌شوند و باریکهٔ بازتابیدهٔ قوی ایجاد می‌کنند. اگر هر صفحه بازتابندهٔ کامل می‌بود، فقط نخستین صفحه از مجموعهٔ صفحات موازی، تابش را می‌دید و هر طول موجی بازتاب می‌یافت. ولی هر صفحه کسری برابر 10^{-3} تا 10^{-5} از پرتوهای فرودی را بازتاب

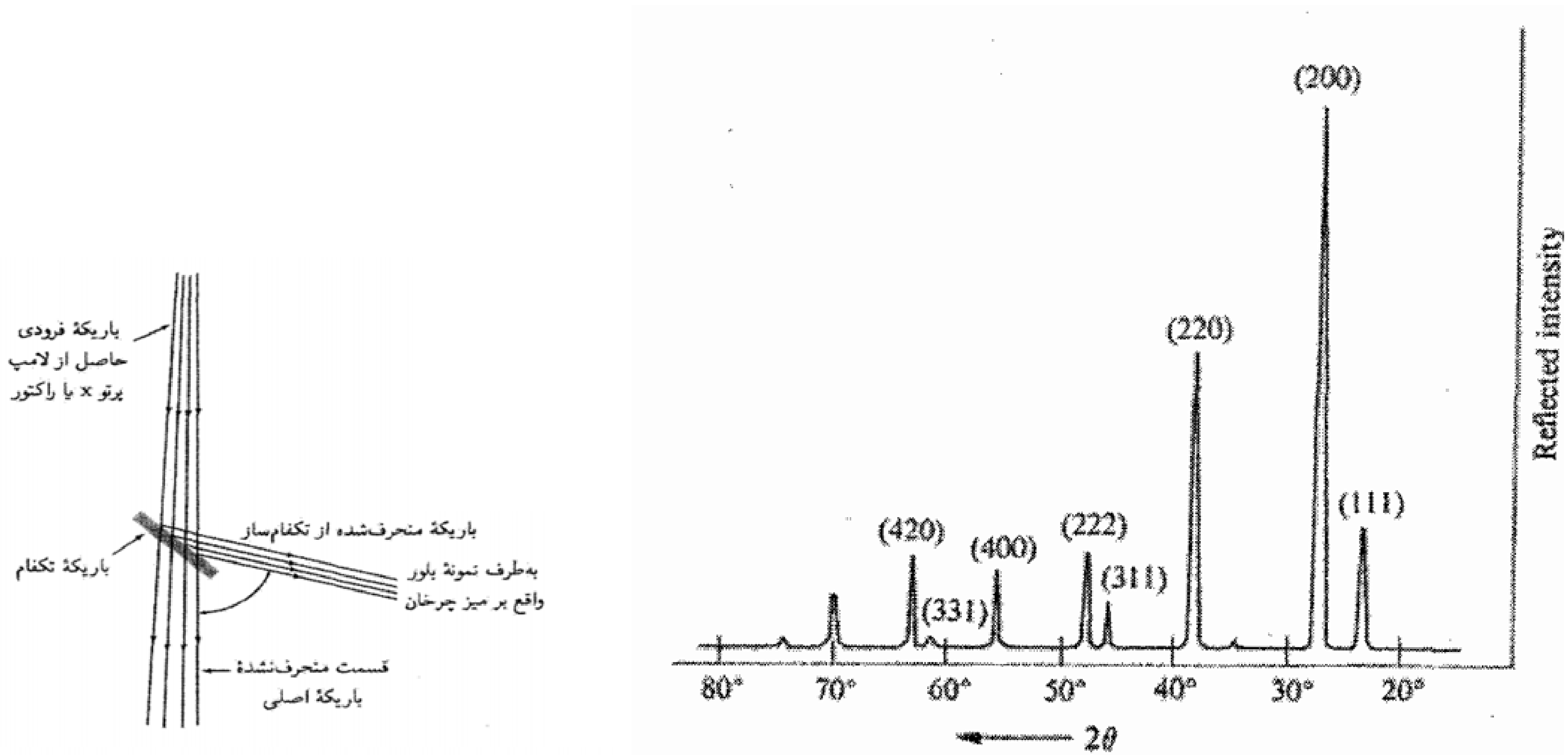
قانون براگ

.

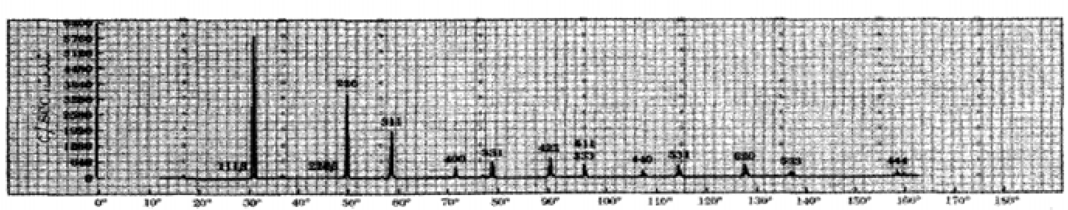
می‌دهد. به‌طوری‌که بلور کامل امکان دارد 10^3 تا 10^5 صفحه در تشکیل باریکهٔ بازتابندهٔ براگ شرکت جویند. بازتاب تک‌صفحهٔ اتمی در فصل ۱۷ با عنوان فیزیک سطح بررسی می‌شود.

قانون براگ نتیجه‌ای از دوره‌ای بودن شبکه است. توجه کنید که این قانون با ترکیب اتمهای پایهٔ وابسته به هر نقطهٔ شبکه‌ای ارتباطی ندارد. خواهیم دید که ترکیب پایه، شدت نسبی مرتبه‌های گوناگون پراش (که در بالا با n نشان داده شد) از مجموعهٔ معینی از صفحات موازی را تعیین می‌کند. نتایج تجربی بازتاب براگ توسط یک تک‌بلور در شکل ۳ و توسط پودر در شکل ۴ داده شده‌اند.

دستگاه X-Ray Diffraction (XRD)



شکل ۳. طرح یک تکفام‌سازکه با استفاده از بازتاب براگ از یک باریکهٔ فرودی با طیف وسیع، طیف باریکی از طول موجهای پرتو x یا نوترون را برمی‌گزیند. قسمت بالایی شکل، بررسی خلوص باریکه‌ای از نوترونهای Å۱٫۱۶را حاصل از بلور تکفام‌سازکلسیم فلوئورید را (که توسط بازتاب از یک بلور دیگر به‌دست آمده است) نشان می‌دهد.



شکل ۴. نتیجهٔ پراش‌سنج پرتو x از سیلیسیم پودرشده که توسط شمارنده ثبت شده است.

دامنه موج پراکنده شده

رهیافت براگ برای به‌دست آوردن شرط پراش (۱) گزاره‌ای دقیق در مورد شرط تداخل سازندهٔ امواجی ارائه می‌دهد، که توسط نقاط شبکه‌ای پراکنده می‌شوند. برای تعیین شدت پراکندگی ناشی از پایه‌ای از اتمها، یعنی توزیع فضایی الکترونها در داخل هر یاخته، به بررسی عمیقتری نیاز است.

$$\boxed{۲d \sin\theta = n\lambda} \qquad (۱)$$

تحلیل فوریه

دیدیم بلور تحت اثر هر انتقالی به‌صورت $\mathbf{T} = u_1\mathbf{a}_1 + u_2\mathbf{a}_2 + u_3\mathbf{a}_3$ ناورداست، که u_1 ، u_2، و u_3 اعداد درست و $\mathbf{a}_1$، $\mathbf{a}_2$، و $\mathbf{a}_3$ محورهای بلورند. هر ویژگی فیزیکی موضعی بلور مانند غلظت بار، چگالی تعداد الکترونها، یا چگالی گشتاور مغناطیسی تحت اثر $\mathbf{T}$ ناورداست. در اینجا مهمترین مسئله برای ما این است که چگالی تعداد الکترونها، $n(\mathbf{r})$، یک تابع دوره‌ای از $\mathbf{r}$ با دوره‌های $\mathbf{a}_1$، $\mathbf{a}_2$، و $\mathbf{a}_3$ در امتداد سه محور بلور است. در این‌صورت:

$$n(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = n(\mathbf{r}) \qquad (2)$$

این دوره‌ای بودن موقعیت مطلوبی برای استفاده از تحلیل فوریه به‌وجود می‌آورد. جالبترین ویژگیهای بلور را می‌توان به مؤلفه‌های فوریهٔ چگالی الکترونها مربوط کرد.

تحلیل فوریه

ابتدا تابع یک‌بعدی $n(x)$ را با دورهٔ a در راستای x در نظر می‌گیریم. این تابع را برحسب یک رشتهٔ سینوسی و کسینوسی فوریه بسط می‌دهیم:

$$n(x) = n_0 + \sum_{p>0}[C_p \cos(2\pi px/a) + S_p \sin(2\pi px/a)] \qquad (۳)$$

که در آن pها اعداد درست و مثبت و C_p و S_p ثابتهای حقیقی‌اند و ضرایب بسط فوریه نامیده می‌شوند. ضریب $2\pi/a$ در شناسه‌ها نشانگر این است که دورهٔ $n(x)$ برابر با a است:

$$n(x+a) = n_0 + \sum[C_p \cos(2\pi px/a + 2\pi p) + S_p \sin(2\pi px/a)] + 2\pi p)]$$

$$= n_0 + \sum[C_p \cos(2\pi px/a) + S_p \sin(2\pi px/a)] = n(x) \qquad (۴)$$

تحلیل فوریه

$2\pi p/a$ را نقطه‌ای در شبکهٔ وارون یا فضای فوریهٔ بلور می‌گویند. در یک بعد این نقاط روی یک خط قرار می‌گیرند. **نقاط شبکهٔ وارون**، جمله‌های مجاز را در رشتهٔ فوریهٔ (۴) یا (۵) به ما می‌دهند. همان‌گونه که در شکل ۵ نشان داده شده است، یک جمله به شرطی که با دوره‌ای بودن بلور سازگار باشد، مجاز است؛ بقیهٔ نقاط فضای وارون، در بسط فوریهٔ تابع دوره‌ای، مجاز نیستند.

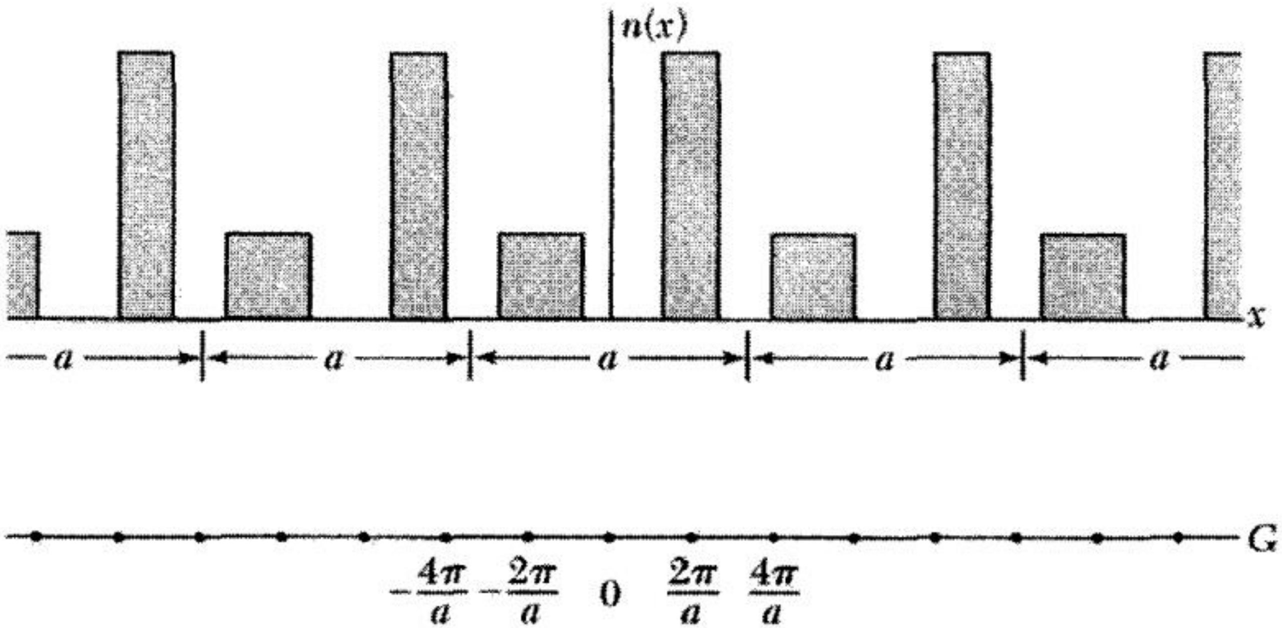
نوشتن رشتهٔ (۴) به شکل فشردهٔ زیر بسیار مناسب است

$$n(x) = \sum_p n_p \exp(i2\pi px/a) \qquad (۵)$$

که در آن جمع روی همهٔ اعداد درست p از مثبت، منفی، و صفر است. در اینجا ضرایب n_p اعداد مختلط‌اند. برای آنکه حقیقی بودن تابع $n(x)$ تضمین شود، لازم است

$$n^*_{-p} = n_p \qquad (۶)$$

تحلیل فوریه



شکل ۵. یک تابع دوره‌ای، $n(x)$، با دورهٔ a و جملات $۲\pi p/a$ که ممکن است در تبدیل فوریهٔ $n(x) = \sum n_p \exp(i۲\pi px/a)$ ظاهر شوند.