

بردارهای انتقال شبکه و شبکه؟

بلور ایده آل از آرایش (اتمها) بلوری یک شبکه تشکیل می شود. شبکه ب ویدیه ۳ بردار انتقال  $a, b, c$  - گزینی

تعریف می شود که آرایش اتمها از دید هر نقطه ۲ از دید نقطه ۱  $r' = r + ua + vb + wc$  (۱)

از هر جهت یکسان به نظر آید.  $a, b, c$  و  $w$  اعداد صحیح مثبت دلخواه هستند. مجموعه نقاط  $r'$  شبکه را تعریف می کند.

شبکه یک آرایش منظم و دوره ای از نقاط در فضاست

مساحت بلوری زمانی شکل می گیرد که بایستی از اتمها به طور یکسان به هر نقطه شبکه وصل شوند.

رابطه منطقی عبور: پایه + شبکه مرکز = مساحت بلور

شبکه بردارهای انتقال  $a, b, c$  در صورت مسطح نامیده می شوند که هر دو نقطه ۲ از آنرا آرایش اتمها

هستند. نظر می آید همواره رابطه (۱) را با گزینش اعداد درست  $a, b, c, w$  (مثلا ۱) کند.

این بردارهای انتقال بسط تقسیم می کند که یافته ای با حجم کمتر را می توان به عنوان شبکه بلوری به کار برد. غالباً از همین

بردارهای انتقال بسط برای توصیف مجرایی بلور استفاده می کنیم. در صورتی که مجرایی غیر مسطح ساده تر باشد از آنها استفاده

می کنند. بسط نشان یک تقوای شبکه است و صدها اعداد صحیح از شیب بسط: شامل شش اتمک تقیاً از و هنرهای اعدادی غیر صحیح نیز

تا زمانی که شبکه و مجرایی مورد نظر انتخاب نشده اند باید رانی توان برگزیده در صورتی که بایستی مربوط به مجرایی اختیار شده بلور به

طور صحیحی برگزیده شود، در آخر چه چیز درست در می آید مثل نقشه براس بر روی  $x$ .

به هر نقطه ای شبکه بایستی از اتمها متصل است. پایه در ترکیب آرایش و همگی یکسانند

مساحت بلوری با ابعاد یک پایه به هر نقطه شبکه شکل می گیرد.

در بسیاری از بلورات و مجرایی بحب تعداد اتمها در پایه یک ۱. مثل مس. توده.  $Al$ . بلورات تکلیبی. در بلورهای معرین

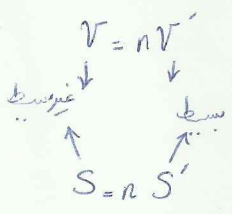
این تعداد ۱۰۰ و در بلورهای پررشتی به ۱۰۰۰۰ می رسد.

موقعیت مرکز اتم  $x, y, z$  پایه نسبت به یک نقطه شبکه به صورت

$$r_j = x_j a + y_j b + z_j c$$

می توان ترکیبی اتخاذ کرد  $\langle x, y, z \rangle$  و  $\langle x, y, z \rangle$  باشد.

در مساحت غیر مسطح مساحت و حجم آن نسبتاً از یافته بسط است یعنی



بلور آرایش منظم و متناهی از (اتمها) در فضا

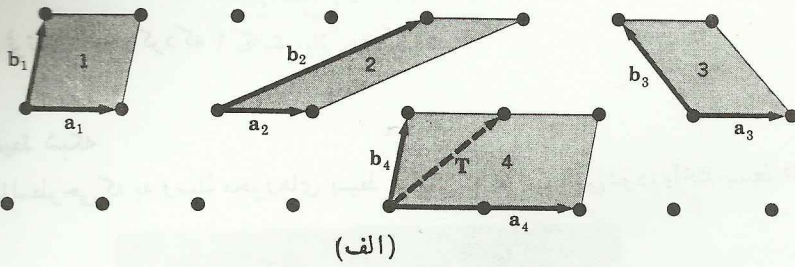
شبکه: " " " " متناهی در نقاط بیانی که پیرامون هر نقطه با نقاط دیگر یکسان است.

حجم یافته  $a, b, c$  توصیف می شود  $V_c = |a \times b \cdot c|$  قدر طول  $L$

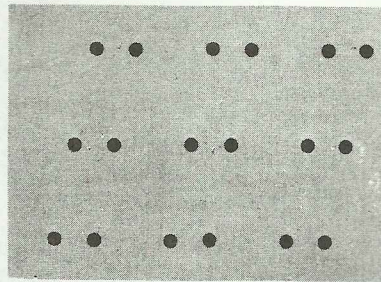
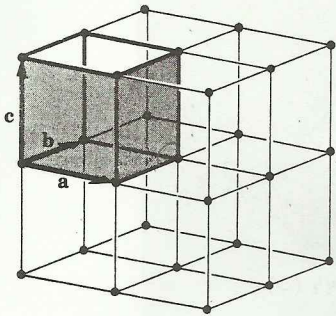
تعداد اتمهای صحیح پایه ای از تعداد اتمهای پایه بسط کمتر نیست.

عسل  
1

(شکل ۵ ب). یاخته بسیط نوعی یاخته یا یاخته یکه است. با اعمال عملهای انتقال بلور مناسب، یاخته تمام فضا را پر می کند. یاخته بسیط، یاخته کمین-حجم است. در یک شبکه معین، محورهای بسیط و یاخته بسیط را می توان به طرق مختلف برگزید. در همه این گزینشها، تعداد اتمهای پایه بسیط یکسان است. چگالی نقاط شبکه در هر یاخته بسیط برابر یک است. نقاط شبکه بر روی هشت گوشه متوازی السطوح قرار دارند، ولی هر گوشه بین هشت یاخته ای که در آن گوشه با هم در تماسند، مشترک است.



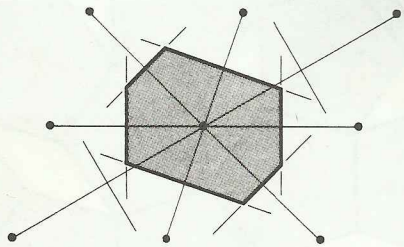
(الف)



(ب) پایه بسیط در ۳ بعد

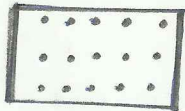
(ج)

شکل ۱. (الف) نقاط شبکه یک شبکه فضایی در دو بعد. تمام زوج بردارهای  $a$ ،  $b$  بردارهای انتقال شبکه اند. ولی  $a$ ،  $b$  بردارهای انتقال بسیط نیستند، زیرا نمی توانیم به کمک ترکیبات درست  $a$  و  $b$ ، انتقال شبکه  $T$  را تشکیل دهیم. تمام زوجهای نشان داده شده دیگر  $a$  و  $b$  را می توان به عنوان بردارهای انتقال بسیط شبکه در نظر گرفت. متوازی الاضلاعهای ۱، ۲، ۳ از نظر مساحت با هم برابرند و هر یک از آنها را می توان به عنوان یاخته بسیط در نظر گرفت. مساحت متوازی الاضلاع ۴ در برابر مساحت یک یاخته بسیط است. (ب) یاخته بسیط یک شبکه فضایی در سه بعد. (ج) فرض کنید که این نقاط اتمهای همانندند؛ روی شکل یک مجموعه از نقاط شبکه، گزینشی از محورهای بسیط، یک یاخته بسیط و پایه وابسته به یک نقطه شبکه را رسم کنید.



شکل ۶. یاخته بسیط را می توان با دنبال کردن روش زیر نیز برگزید: (۱) خطوطی رسم کنید که یک نقطه مفروض شبکه را به تمام نقاط شبکه نزدیک به آن متصل سازد؛ (۲) در وسط این خطوط، و عمود بر آنها، خطوط یا صفحات جدیدی رسم کنید. کوچکترین حجمی که بدین ترتیب محاط می شود یاخته بسیط و دیگر سایش نام دارد. این یاخته ها، درست مانند یاخته های شکل ۵، می توانند تمام فضا را پر کنند.

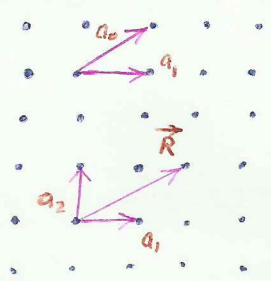
چرخه‌ای است که ماده جابجایی صورت بگیرد فقط می‌گذرد و نیزه‌های یونزی هستند اگر نیزه‌های یونزی توانستند غلبه داشتند  
 گذر تپلی به نام می‌شود، که اگر با حجم توانست در حالت مایع در آن غلبه کند تپلی به گاز می‌شوند  
 این نیزه‌های یونزی باید برای تمام نقاط شبکه براده باید یکسان باشند  
 نقاطی که در شکل دیده در مرکز قرار دارند با چهار اتم در ارتباط هستند ولی نقاط کناری ممکن است با یکی یا دو اتم در ارتباط باشند



هر چه به سطح نزدیکتر می‌شویم تپلی سردتر می‌شود و فاصله اتم‌ها از سطح می‌باید در تمام اولیه رادارانیستند و تغییر می‌کنند کمتر از وسط است  
 رتان به علت سطح خارجی است و این یکی از ناملی بلور است.

اگر در بلور که تعداد اتمها در سطح آن کم باشد در سطح بلور هم آن کمترین است سطح می‌تواند

هر چه بلور ریزتر باشد نسبت سطح به حجم اتم‌ها می‌باید و نظم بیشتر به هم می‌خورد در طی ماده سبک و سنگین می‌شود و نظم جفتی به هم می‌خورد و قابل لمس و مشاهده است همین توان به آن بلور گفت. اگر قابل لمس و مشاهده باشد می‌توان بلور گفت ولی اگر هر چه ریزتر باشد برای تقاطعها می‌توان برداری انتقال در نظر گرفت که اینها گروه انتقالی است که در بلورهای انتقالی در شبکه براده بینهایت عضو دارد



بردارهای انتقال را می‌توان ترکیب خطی کرد و به هر بردار دلخواه برسیم \* برای تشخیص بردارهای انتقال

$$① \vec{R} = n_1 \hat{a}_1 + n_2 \hat{a}_2$$

برای بردارهای انتقال بینهایت بردارهای بنیادی انتقال می‌توانیم داشته باشیم

در انتخاب بردارهای بنیادی انتقال 3 شرط داریم

1- کوتاهترین بردار را انتخاب می‌کنیم

2- در جهتی که امکان داشته باشد بردارهای بنیادی که عمود باشند را انتخاب می‌کنیم

3- طولهای برابر داشته باشد و در نظر می‌گیریم مثلاً در سیستمی که امکان برابر نیست

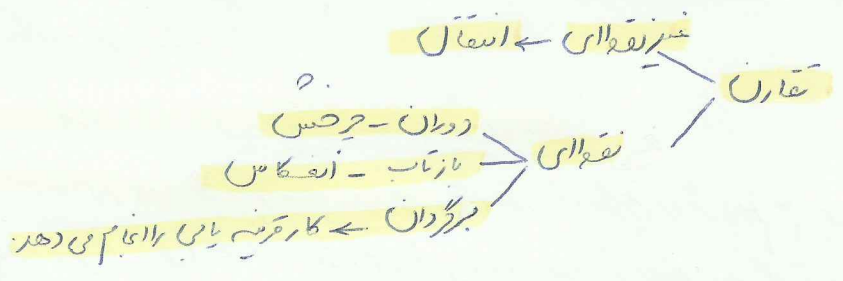
\* راه دیگر تشخیص بردارهای انتقال بر اساسی در بردار انتقال یک ستاره‌ای اصطلاح می‌سازیم بر روی می‌کنیم غیرتقطعی داخل آن قرار گرفته است از یک نقطه در آن قرار بگیرد آن بردارهای بنیادی است که سلول درستی می‌شود یا همه واحدهای بنیادی می‌گردد

برداران  $R = n_1 \hat{a}_1 + n_2 \hat{a}_2 + n_3 \hat{a}_3$

$S = |\hat{a}_1 \times \hat{a}_2|$

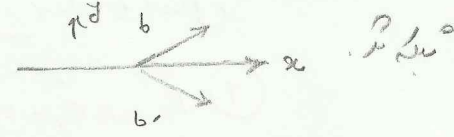
$V = |\hat{a}_1 \cdot (\hat{a}_2 \times \hat{a}_3)|$

سه بردار یه بعدی از یک سیستم یه بعدی است - مورد استفاده در نوع 1 رهن - همگرا و غیره



مجموعه عمل‌های تقارن و غیره برای اگر به یک بردار اعمال شود آن را بدون تغییر مابقی نگه می‌دارد

تصور هر دو نسبت - خط و خط آینه آن تقارن است و در واقع معنی هر دو یکسان است و نسبت آن‌ها همان نسبت است که در تبدیل - تبدیل این کنیم و تقارن این دارد اگر تقارن  $x$  را در نظر بگیریم - تبدیل  $x$  را به  $x'$  تبدیل می‌کند



1  $b' = n_1 \hat{a}_1 + n_2 \hat{b}_2$   
 2  $b = b_x \hat{i} + b_y \hat{j}$   
 3  $b' = b_x \hat{i} - b_y \hat{j}$  تصویر آینه‌ای

طبی در رابطه 1)  $b' = n_1 \hat{a}_1 + n_2 (b_x \hat{i} + b_y \hat{j})$  4) رابطه 2) را با 1) موزن

5)  $b' = n_1 \hat{a}_1 + n_2 b_x \hat{i} + n_2 b_y \hat{j} \Rightarrow b' = (n_1 \hat{a}_1 + n_2 b_x \hat{i}) + n_2 b_y \hat{j}$

$\Rightarrow$  2, 5  $\rightarrow \begin{cases} n_1 \hat{a}_1 + n_2 b_x \hat{i} = b_x \hat{i} & 5) \\ n_2 b_y = -b_y \Rightarrow n_2 = -1 & 6) \end{cases}$

7) بار 5 با 1)  $n_1 \hat{a}_1 - b_x \hat{i} = b_x \hat{i}$   
 $\Rightarrow n_1 \hat{a}_1 = 2 b_x \hat{i} \Rightarrow b_x = \frac{n_1 \hat{a}_1}{2}$

$T = n_1 \hat{a}_1 + n_2 \hat{b}_2$  بردار  $n_1$  ممکن است درجه یا فرکانس عدد صحیح است هر چه  $n_1$  کوچکتر باشد حرکت است. بردار  $b$  می‌تواند هر چه باشد

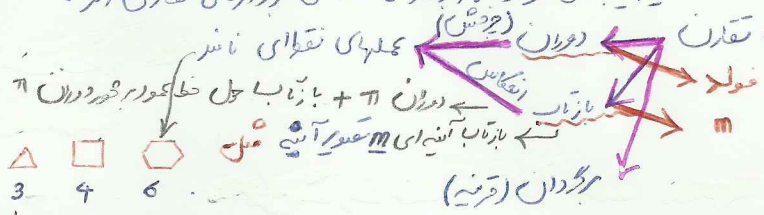
اگر  $n = 2m$   $\rightarrow$   $b = m a \hat{i} + b y \hat{j}$   $\rightarrow$  مستطیلی می‌شود  $\rightarrow$   $\frac{n \hat{a}_1}{2}$   $\rightarrow$  حرکت با طولی  $\hat{i}$  و  $\hat{j}$   $\rightarrow$  حرکت با طولی  $\hat{i}$  و  $\hat{j}$   $\rightarrow$   $n = 2m + 1$   $\rightarrow$  درجه یا فرکانس  $\hat{i}$   $\rightarrow$   $b = \frac{1}{2} \hat{i} + b y \hat{j}$   $\rightarrow$   $m = 0$   $\rightarrow$   $\hat{a} = \hat{a}_1$   $\rightarrow$   $b = 2m + \frac{1}{2} \hat{a}_1 + b y \hat{j}$

انتقال: محل انتقال شبکه به نام توصیف عبارت است از جابجایی بلور به سوازیات خودش به اندازه‌ی بردار انتقال

$$T = ua + vb + wc$$

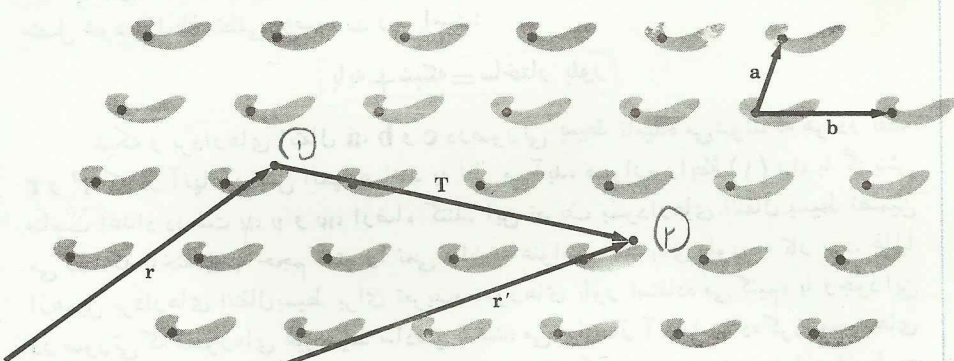
بلور، که هر دو نقطه‌ی شبکه به وسیله‌ی جیب برداری به هم متصل می‌شوند

تقارن: ساختار بلور را به شکل اول خود برمی‌گردانده تغییر در جیب ایجاد می‌کند مثل چرخش 360. اگر در بلور دارای تقارن سه‌گانه است تغییر ایجاد می‌شود. تقارن برداری انتقالی بردارهای تقارن این -

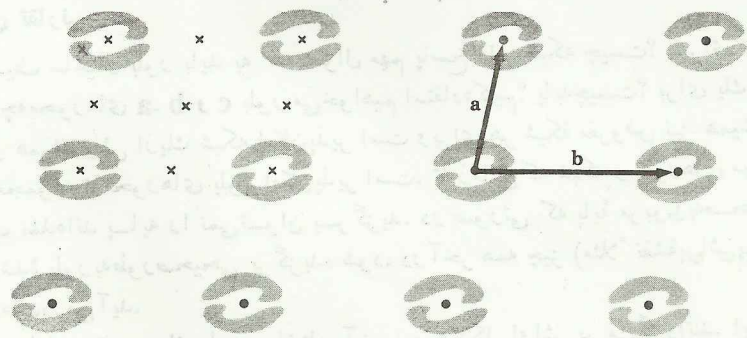


مجموعه‌ی نقطه‌ی مرتب = عمل تقارن نقطه‌ای + انتقال است -  
 دوران: شبکه‌ی گامی را می‌توان یافت که در آن محورهای دوران به صورت زیر وجود دارد که شبکه را به شکل اول برمی‌گرداند که بصورت دوران

ساختار بلور شکل ۲ به گونه‌ای رسم شده است که فقط عملهای تقارنی انتقال داشته باشد. در ساختار بلور شکل ۳ هر دو عمل تقارنی نقطه‌ای و انتقالی مجازند.



محل نقطه‌ی ۱ رفته - ۲ به خط بردار انتقال  $T$  که در شکل ۲ دیده می‌شود. (به این دلیل شکل ۲ قسمتی از بلور یک مولکول فرضی پروتئین در یک دنیای دو بعدی. به این دلیل مولکول پروتئین را برگزیدیم که احتمال نیست این مولکول دارای تقارن ویژه‌ی مربوط به خود باشد.) آرایش آنها در بلور از دید دو ناظر در نقاط  $r$  و  $r'$  به شرطی دقیقاً یکسان به نظر می‌آید، که بتوان بردار  $T$  را، که  $r$  و  $r'$  را به هم متصل می‌کند، به صورت مضارب درستی از بردارهای  $a$  و  $b$  بیان کرد. در شکل فوق،  $T = -a + 2b$ . بردارهای  $a$  و  $b$  بردارهای انتقال بسط شبکه دو بعدی اند. البته شماره‌ی ۱ واحد  $\pi$  درجه‌ی چرخش بوده‌ی نقطه‌ی ۲ است. درجه‌ی چرخش  $\pi$  است.



شکل ۳. شبیه شکل ۲، با این تفاوت که مولکولهای پروتئین به صورت زوج قرار گرفته‌اند.  $a$  و  $b$  بردارهای انتقال بلورند. دورانی برابر با  $\pi$  رادیان حول هر یک از نقاطی که با علامت  $\times$  مشخص شده‌اند، بلور را به حالت اول خود بر می‌گرداند. این موضوع در مورد نقاط معادل در سایر یاخته‌ها نیز صادق است، ولی ما فقط نقاط  $\times$  را در داخل یک یاخته مشخص کرده‌ایم. گشایش  $\pi$  و  $2\pi$  در دوران

| ردیف | گشایش            | دوران |
|------|------------------|-------|
| 1    | $2\pi$           | 360   |
| 2    | $\frac{2\pi}{2}$ | 180   |
| 3    | $\frac{2\pi}{3}$ | 120   |
| 4    | $\frac{2\pi}{4}$ | 90    |
| 5    | $\frac{2\pi}{5}$ | 72    |

هیچ شبکه‌ای را نمی‌توان یافت که گشایش دورانی  $\frac{2\pi}{5}$  یا  $\frac{2\pi}{7}$  را داشته باشد. در این - شکل اول برگرداند. ولی یک تک مولکول را می‌توان بدون این طرح رزی کرد که در این هر تقارن دوران نداشته باشد. ولی یک شبکه دوره‌ای می‌تواند را می‌توان بدون این گونه طرح رزی کرد.

بازتاب آینه ای  $m$

محال دایره سازی از یک دوران  $\pi$  در روی آن یک بازتاب از صفحه عمود بر محور دوران - محورهای آینه و محور کلی آن این است که ۲ برابر

$r$  - تبدیل می کند.

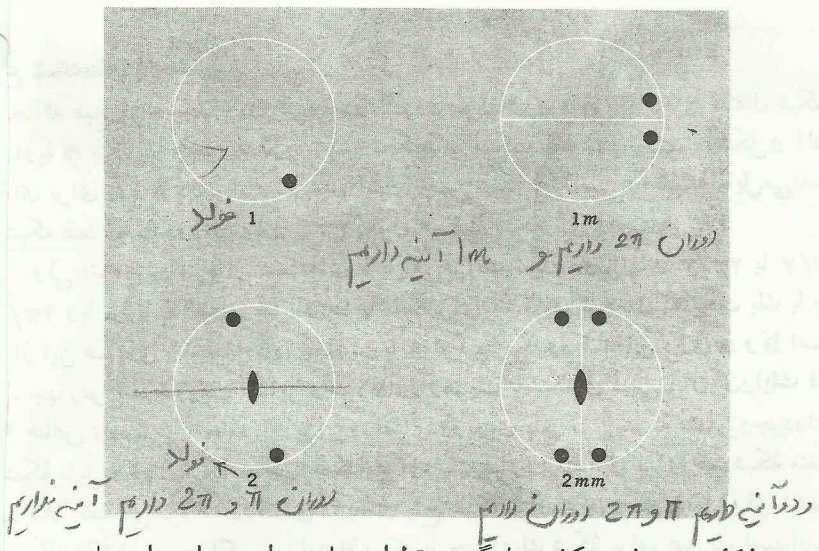
دوران  $n = \frac{2\pi}{\theta}$   $\theta$  - کمترین زاویه که در طی ۳ دورش بیفتد

بگردان  $\leftarrow$  قرینه

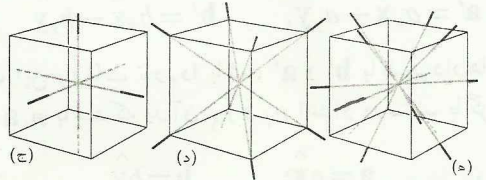
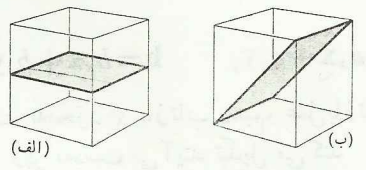
انعکاس  $\leftarrow$  غیر نقیص

انجالی آینه - شکل مورب یا مستطیلی می اندازد

مستطیلی مرکز دارد.



شکل ۸ - در این شکل چهار گروه نقطه ای نمایش داده شده اند. دایره های توپر نقاط معادل را مشخص می کنند. گروه نقطه ای ۱ هیچ عنصر تقارنی ندارد، لذا در اینجا یک نقطه هیچ نقطه معادلی ندارد. گروه ۱mm یک صفحه آینه ای دارد؛ یکی از نقاط در اثر بازتاب از صفحه آینه ای به نقطه دیگر تبدیل می شود. در گروه ۲، که یک محور دوتاییه دارد، دوران  $\pi$  یکی از نقاط را به نقطه دیگر می برد. همراه با یک محور دوتاییه و یک صفحه آینه ای، خود بخود، صفحه آینه ای دومی عمود بر صفحه آینه ای اول وجود خواهد داشت، و گروه نقطه ای ۲mm را با چهار نقطه معادل خواهیم داشت.



شکل ۹ - (الف) یک صفحه تقارن به موازات وجوه مکعب. (ب) یک صفحه تقارن قطری در مکعب. (ج) سه محور چهارتاییه مکعب. (د) چهار محور سه تاییه مکعب. (ه) شش محور دوتاییه مکعب.

S : حول خط عمود بر شعاع اگر بحر خواستیم شعاع 180 درجه برای خود برمی گردود . پس شعاع 180 درجه  
 برای خود بر انداخته یعنی  $\pi$

—  $\frac{2\pi}{\theta}$  تعداد فولاد را - ما می دهیم  
 $\theta$  زاویه چرخش که میم را در خودش می آورند

پس  $\frac{2\pi}{\pi} = 2$  در نتیجه S دارای 2 فولاد است .

□ : مربع : شعاع چرخش حول محور عمود بر آن شعاع 90 درجه خود بر می گردود یعنی  $\frac{\pi}{2}$  در نتیجه

$\frac{2\pi}{\frac{\pi}{2}} = 4$  که مربع دارای 4 فولاد است . البته 4 دارد 2 فولاد است چون برهم در  $\pi$  و  $2\pi$  نیز روی

خودش می افتد مابستری مقدار را در نظر می گیریم .

○ : دایره دارای بی نهایت فولاد است .

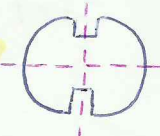
شش ضلعی : دارای 6, 3, 2 و 1 فولاد است که ما این آنها را در نظر می گیریم .

هشت ضلعی : 8 فولاد دارد .

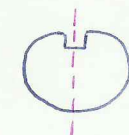
دایره محوری چرخش در یک محور با توجه به عمل وجود انتقال نمی تواند غیر از 1 2 3 4 6 فولاد داشته

مابستر

دو فولاد یعنی دو چرخش یکی  $2\pi$  و  $\pi$  و آینه ای و محوری هم دارد . پس 2mm درجه

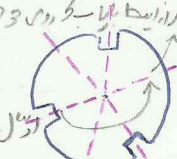


یک فولاد دارد یک چرخش  $2\pi$   
 و یک آینه دارد 1m



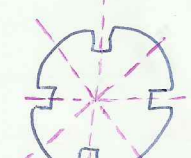
مقدار انتقال را به دور می و پس می افتد یعنی آینه است

خط چین آینه هفتد 3m آینه دارد . و 3 فولاد دارد یکی 50 درجه و 120 درجه



و 360 درجه که به حالت اولیه برمی گردوند یا  $3 = \frac{2\pi}{\frac{2\pi}{3}}$  توجه کن  $\pi$  درجه است و اولی بعد از آن همان محور  
 مابستری کن اگر روی خودش افتد آینه است

— برای 4 فولاد هم 4 آینه داریم .  
 $\frac{2\pi}{\frac{\pi}{2}} = 4$  پس 4 فولاد دارد



4 تا هم آینه دارد 4mm درجه

آهنی که محور چرخش آهنی سطح زرد یک گروه راسخون و یک رسته آهنی را تشکیل می دهد. مجموعه اعمال تقوای که بر یک جسم اعمال می گنجد گروه تقوای می شود.

شکل الف و ب که الف 2mm و ب 1m است. در شکل ج 3m و در شکل د 4mm است

چون 4 فولاد وی در رسته آهنی است

سپس 2mm یعنی یک رسته آهنی

4mm " " " " 4 تا آهنی

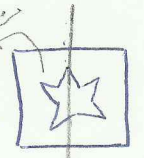
راولین یک مرکز بزرگ در آهنی است چون اگر از آن جسم هر تقوای را برداریم خود آن بر می گردد. **رنگ فولاد دارد**

**رودرستی** - سراج مرکز بزرگ در آهنی است چون یافته واحد سبکی یا سبکی بیشتر است یک یافته سبکی - رنگ برادر انتقال تا آهنی بیشتر را با سبکی می گنجد. سبکی شرط که نه هم پوشانی لازم و نه طبعی خالی می ماند. در فضای 3 سبکی هم هستی طواری است نه هم پوشانی و نه طبعی خالی برای برسی بلور یافته واحد سبکی را با سبکی می گنجد. سبکی کلی برکتول

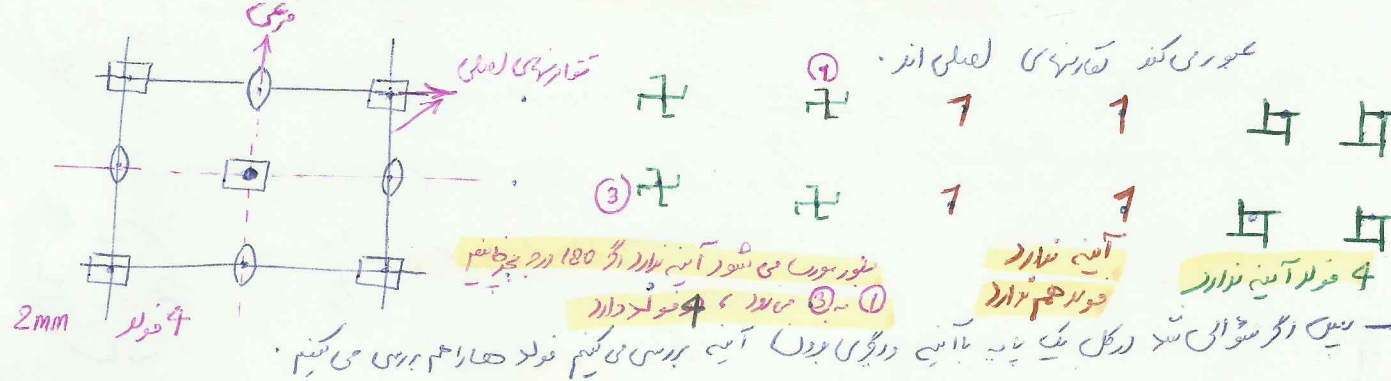
Z : اگر 180 درج بچرخانیم - خود بر می گردد پس  $2 = \frac{2\pi}{\pi}$  دو فولاد در آهنی نزارند و در فضای 2 سبکی در بلور هم مشاهده نمی شود.

X : در آهنی سبکی نزاریم محور چرخش 4 فولاد دارد. X زاویه بین آنها  $\frac{\pi}{2}$  است.  $4 = \frac{2\pi}{\frac{\pi}{2}}$  2mm آهنی داریم

در آهنی 3 فولاد است اگر این را بگردانیم در آهنی سبکی که 4mm برد در آهنی حالت یا سبکی سبکی - 1 تفسیر می کند



شماره متعادل است. فرس کنند وسط هم شماره داشته باشیم. سبکی براده آهنی آرایه راسخون کند. ج: سبکی براده آهنی 4mm و 4 فولاد. اگر شماره را در وسط هم قرار دهیم فولاد داریم 1m آهنی داریم اگر 72 درج شماره را بچرخانیم می توانیم محور چرخش داشته باشیم  $2 = \frac{2\pi}{\pi}$  اگر شماره را در وسط هم قرار دهیم سبکی - حالت از آهنی بر می گردد - تقوای آهنی که در فلز نقاط سبکی هم در هر تقوای آهنی اند فیتهم در گروه اند. تمام تقوای آهنی که در فلز سبکی



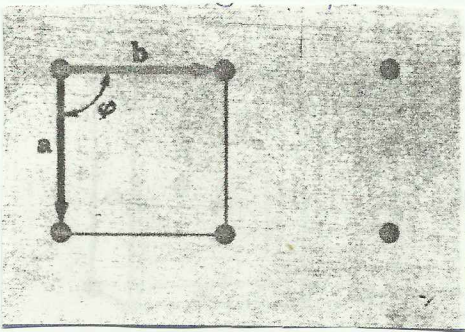


انواع شبکه های برابره

۲ مربعی

شبه مربعی

$|a| = |b|$  و  $\phi = 90^\circ$   
 حداقل تقارن ممکن 4  
 حرکت تقارن 4mm



1

square lattice

شبه مربعی

rectangular lattice

مستطیلی

Oblique lattice

مایل

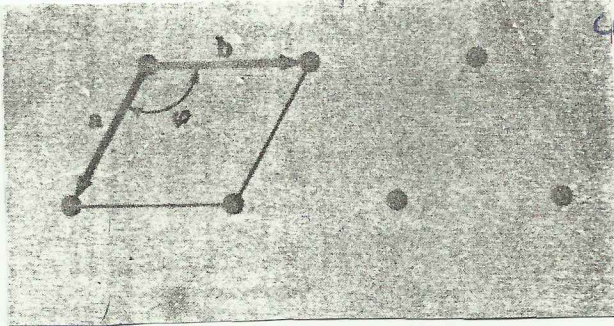
Hexagonal lattice

هگزاگونال

شبه منش گوی

$|a| = |b|$  و  $\phi = 120^\circ$

حداقل تقارن 3  
 حرکت تقارن 5mm

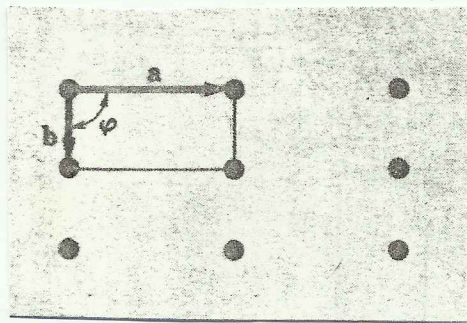


2

شبه مستطیلی غیر مرکز دار

$|a| \neq |b|$  و  $\phi = 90^\circ$

مستطیلی بی نظری  
 حداقل تقارن 2  
 حرکت تقارن 2mm

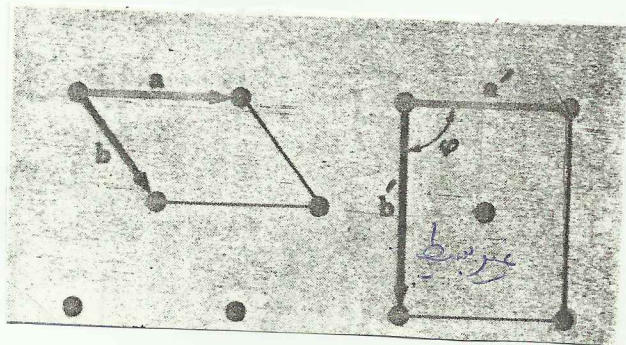


3

شبه مستطیلی مرکز دار

$|a| \neq |b|$  و  $\phi = 90^\circ$

حداقل تقارن 4  
 حرکت تقارن 2mm



4

شبه های 2 بعدی از آنجایی که هیچ محدودیتی در طول ابعاد و زاویه بین آنها نداریم تعداد شبکه های ممکن نامحدود است شکل 1 شبکه های مایل هستند که ابعاد و زاویه رسم شده اند. این شبکه فقط تحت تاثیر درازنای  $\pi$  و  $2\pi$  مورد احصاء است

خوب هر فضای شبکه 4 نوع خاصی از شبکه های مایل می تواند تحت درازنای  $\frac{2\pi}{3}$  و  $\frac{2\pi}{4}$  و نیز درازنای آنجایی نیز درازا باشد. بنابراین از محدودیت های اعمال کنیم  $\leftarrow$  4 نوع محدودیت متمایز وجود دارد. و حرکت - شبکه ای می توان آن را نوع خاص مایل، مرکز دار، یا مایل.

- سهی در فضای 2 بعدی، 5 نوع شبکه متمایز وجود دارد. یک شبکه مایل و 4 شبکه خاص.

- در فضای دو بعدی، 5 شبکه برابره (شبکه متمایز) وجود دارد.

شبه مربعی 1 حداقل تقارن 4mm

2 حرکت تقارن ممکن

$a \neq b$

$\phi \neq \frac{\pi}{2}$

شبه مایل

5

3

1 عمل نقطای 4 یعنی  $\frac{2\pi}{4}$  سببه برسی را ایجاب می کند ممکن صفتی مثل

2 // // 3 // 4 //  $\frac{2\pi}{3}$  ،  $\frac{2\pi}{5}$  ، سببه شش گوشه . یک شبکه تحت دوران  $\frac{2\pi}{6} = 60^\circ$  حول محور که از یک نقطه سببه می گذرد ، ناورداست .

3 اگر بازتاب آینه ای امکان پذیر باشد:  $a = a_x \hat{X} + a_y \hat{Y}$  و  $b = b_x \hat{X} + b_y \hat{Y}$  (1)

$a' = a'_x \hat{X} - a'_y \hat{Y}$  و  $b' = b'_x \hat{X} - b'_y \hat{Y}$  (2) بازتاب نسبت به محور  $X$  → بازتاب نسبت به محور  $Y$  →

باگزنش \*  $a = a_x \hat{X}$  و  $b = b_y \hat{Y}$  → با بر - شکل  $n_1 a + n_2 b$  اعداد صحیح  $n_1, n_2$  باشند →  $a'$  و  $b'$  برابری شبکه اند → اگر ناورداستی باشد → در این صورت داریم  $\begin{cases} b' = -b \\ a' = a \end{cases}$  ← شبکه - خودش برگرداننده می شود

شبکه ای که با رابطه \* بین خود مستطیلی است

4 حال اگر  $b' = a - b$  یعنی با یکدیگر در رابطه (2) :  $b_x = \frac{1}{2} a_x$  و  $a_x = 0$   $\begin{cases} b'_x = a_x - b_x = b_x \\ b'_y = a_y - b_y = -b_y \end{cases}$  جواب دهنده

یک گزنش ممکن برای برابری انتقال نسبت شبکه های متقابل آینه ای  $\begin{cases} a = a_x \hat{X} \\ b = \frac{1}{2} a_x \hat{X} + b_y \hat{Y} \end{cases}$  →

کوان گزنش - شبکه مستطیلی مرکز دار منحرف می شود

- حجمی از فضا که در آن برابری شبکه براده انتقال مایه تا مقادیر در آن حجم اتفاق می افتد نسبت های خاص را برقرار می یابد یا فضا یک سطح است
- یا فضا یک سطح دارد دقیقاً یک نقطه شبکه است حجم یافته سطح - انتخاب یافته سطح شکل ندارد
- یا فضا یک ناحیه است که در آن نواحی از برابری شبکه انتقال می یابد و مقادیر در آن برج اتفاق می افتد یک در آن طوری انتخاب می شود که فضا سطح باشد و در آن مقادیر مورد نیاز باشد بنابراین علاوه شبکه کلی مرکز حقی را در صفت یک یافته یک کلی توصیف می کنیم که در برج برگشته یافته یک سطح bcc است و شبکه کلی مرکز سطح یافته یک کلی آن چهار برابر برگشته از حجم یافته یک سطح fcc است.

- یافته یک سطح یک یافته سطح است . و - اندازه یک براده مکان است . در آن مرکز حقی یک شش وجه برج و مرکز سطح (وارد شده و کلی)

انواع شبکه های

۳ بوری

مکعبی بیفا

چهارگوشی

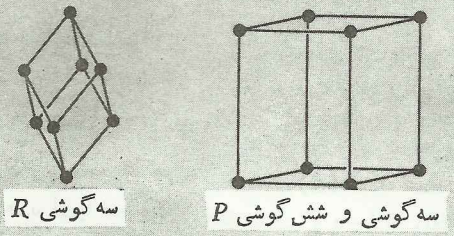
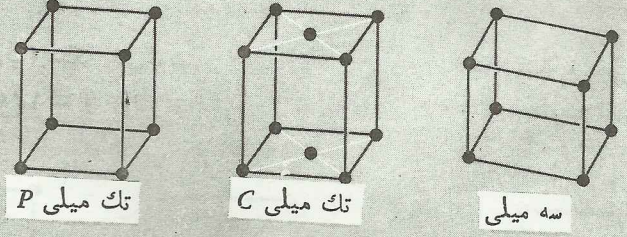
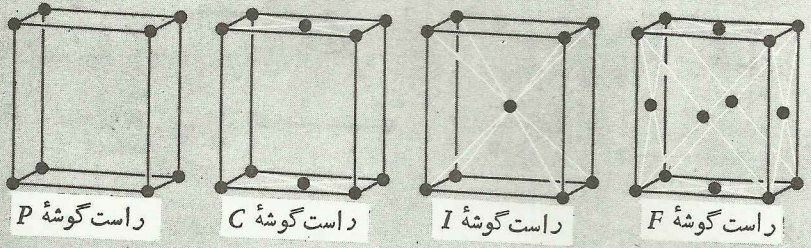
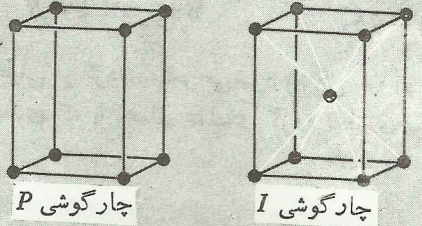
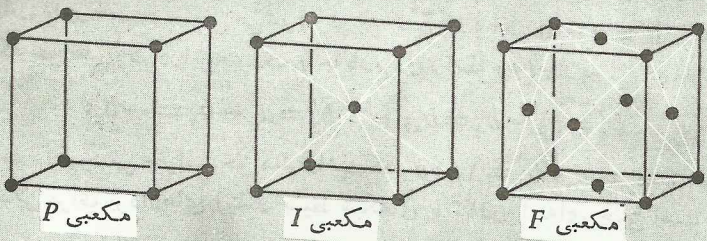
راست گوشه

تک میلی

۳ میلی

۳ گوشه

سه گوشه



شکل ۱۴-۱۱ شبکه براره یا فضایی در این شکل نشان داده شده اند. یاخته های نشان داده شده یاخته های قراردادی که در همه موارد یاخته بسیط نیستند.

یک مکعب و تقارنهای دارد و و آینه دارد ۹ محور دارد ۱۲ میل دارد

شکله مستطیل مرکز دار است و ۳ محور فضایی سنگ دارد مثل آتما ۸ در شبکه مستطیلی مرکز دار و سه چترایی در عفا قرار گرفته است در این شبکه ۶ ساختمان بلوری ← مستطیلی بنیادی است

پایه مجموعه ای از آتما و ما را در این شکل را در نظر می گیریم

- در فضای 3 بعدی گره‌های تعدادی تقوایی، (14) نوع شبکه‌ی گزینش (بسیار همگام و منبسطه خاص) را می‌توانیم کسر  
 شکل صفر تکرار. نوع همگامی شبکه، شبکه 3 بعدی است. این 14 نوع شبکه - طوری - به جهت دستگاه، مطابق شکل  
 زیر مطابق با جهت نوع یا فته یک برادرانی زیر (دسته نویی نه از).

جدول 0.1 چهارده نوع شبکه سه بعدی.

| محدودیت‌های موجود در مورد محورها و زوایای یاخته قراردادی              | نماد شبکه‌ها                    | تعداد شبکه‌ها | دستگاه         |
|---|---------------------------------|---------------|----------------|
| $a \neq b \neq c$<br>$\alpha \neq \beta \neq \gamma$                  | P                               | 1             | سه میلی همگامی |
| $a \neq b \neq c$<br>$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$          | P, C                            | 2             | تک میلی        |
| $a \neq b \neq c$<br>$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$             | P, C, I, F                      | 4             | راست گوشه      |
| $a = b \neq c$<br>$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$                | P, I                            | 2             | چار گوشه       |
| $a = b = c$<br>$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$                   | SC یا P<br>bcc یا I<br>fcc یا F | 3             | مکعبی          |
| $a = b = c$<br>$\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$   | R                               | 1             | سه گوشه        |
| $a = b \neq c$<br>$\alpha = \beta = 90^\circ$<br>$\gamma = 120^\circ$ | P                               | 1             | شش گوشه        |

- P: فضای از تقوا
- C: تقوا در بالا و پایین اصناع
- I: تقوا درون
- F: تقوا در هر 4 ضلع
- Sc: شبکه مکعبی ساده
- fcc: شبکه " مرکز سطحی
- bcc: " " مرکز جعبی

یاخته‌های بیست فقط شامل یک نقطه شبکه هستند در bcc شامل 2 نقطه و fcc شامل 4 نقطه شبکه می‌باشند.

| جدول مشخصات شبکه‌های مکعبی <sup>۱</sup>   |                          |                  |
|---|--------------------------|------------------|
| fcc   | bcc                      | Sc               |
| مرکز سطحی<br>شماره  | مرکز حجمی<br>شماره       | ساده<br>شماره    |
| $a^3$   | $a^3$                    | $a^3$            |
| حجم یاخته قراردادی مکعبی ساده   |                          |                  |
| تعداد نقاط شبکه در هر یاخته   | ۱                        | ۱                |
| حجم یاخته بسیط (شماره) $\left\{ \begin{array}{l} \text{یک نقطه} \\ \text{در مرکز و در هر گوشه} \end{array} \right.$ | $\frac{1}{4}a^3$         | $a^3$            |
| تعداد نقاط شبکه در واحد حجم   | $\frac{1}{4}a^3$         | $\frac{1}{4}a^3$ |
| تعداد همسایه‌های اول $\rightarrow$ (عدد هم‌آرایی)   | ۶                        | ۶                |
| فاصله همسایه اول  | $a$                      | $a$              |
| تعداد همسایه‌های دوم  | ۱۲                       | ۱۲               |
| فاصله همسایه دوم  | $2^{1/2}a$               | $2^{1/2}a$       |
| کسر به هم پکیدگی <sup>۲</sup>   | $\frac{1}{8}\pi\sqrt{3}$ | $\frac{1}{6}\pi$ |
| $0.740$   | $0.680$                  | $0.524$          |

۱. جدولهایی در مورد تعداد همسایه‌ها و فاصله آنها در ساختارهای sc ، bcc ، fcc ، hcp و الماسی در صفحات ۱۰۳۷ تا ۱۰۳۹ [۱] داده شده است.
۲. بیشترین کسری از حجم موجود را که می‌توان توسط کوره‌های سخت پر کرد کسر به هم پکیدگی می‌نامند.

fcc و bcc هر دو لایه هم‌ترازی هستند ولی لایه‌های آنها با هم متفاوت است لایه‌های هم‌ترازی یا هم‌ترازی گوناگون

کھنق: نشان دهنده کاربرد فرکانس از مدار دهنده تقابل های اصلی (فقط یک) معبر - برد مدارهای سری (فقط غیر یک) می شود در دهنده

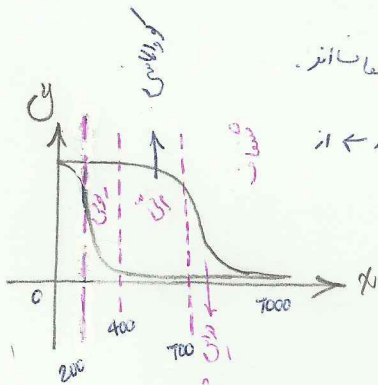
کھنق: تحقیق کنید فضای دریا بهر کسی - یونی فونری خود را است؟

به هر کسی - نشان اند بر حجم کسب بر ترازیک مدار در از طرف دیگر ظاهر می شود. فردی می بیند کم بهر کسی و هر کسی تسکین می شود.

کھنق: نشان برای ارتباط گروه فضای شبکه براده و پاید بهر کسی است آری. در 3 بعد 14 شبکه براده در 7 رده بهر کسی

$$S = |a \times b|$$

$$V = |a \cdot (b \times c)|$$

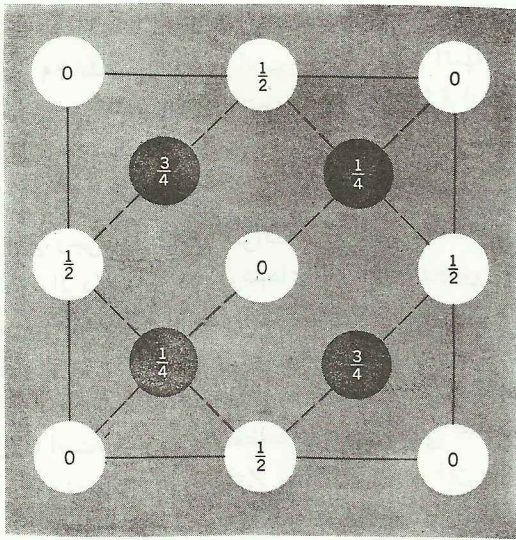


نمودارهای گواناسی تا طول سوهارا در 7 در حاکم بازتاب کننده در تراس با پس تراز 7000 نشان اند. چون بهر کسی بین فونون ما نشان تسکین دهنده باه صورت می گیرد، بهر کسی گواناسی در کسب سری که ← از 0 تا 200 کمر و از 200 به بعد نشان اند.

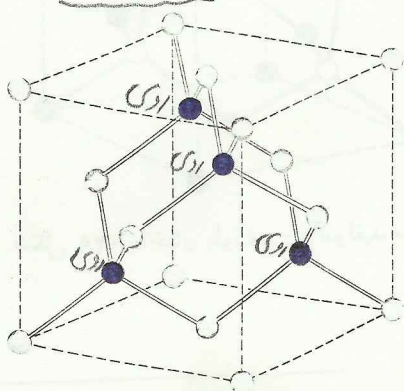
کھنق: چرا قدره بازتابنده های خوبی برای اجزای سری دارند؟

با این انرژی دهنده های سری اجزای می کنند و فونونها با شبکه فونری بر حجم کسب کردن در حاکم بازتاب به حالت پای این اثری با بهر کسی فونون پس می دهند

کھنق: تحقیق کنید چرا برخی مدارها در برخی لا کوری می بینیم؟ طول سوم فونونی که انرژی کسب شده است است. حالت پای این گردد یعنی است طول سوم کمتر (انرژی بیشتر) - با پس بهر کسی همین کم اتفاق می افتد. زمانی با جریای فونونی کوچک  $\downarrow \lambda \downarrow \epsilon$  کوان طول سوم در مداره - سری نسبت در کمر اند.



شکل ۲۷. تصویر مکان آنها در یاخته مکعبی ساختار الماسی بر روی یک وجه مکعب؛ کسرها ارتفاع از قاعده را بر حسب طول یک ضلع مکعب مشخص می کنند. نقاط ۰ و ۱/۲ روی شبکه fcc واقعند و آنهایی که در ۱/۴ و ۳/۴ هستند، روی شبکه مشابهی که در امتداد قطر اصلی مکعب به اندازه ۱/۴ طول آن جا جا شده است واقعند. باید که شبکه فضایی fcc، پایه شامل دو اتم یکسان در ۰۰۰ و ۱/۴ ۱/۴ ۱/۴ است.



شکل ۲۸. ساختار بلور الماس که در آن آرایش پیوند چهار وجهی نشان داده شده است. تمامی زاویه ها یکسان اند و هر کربن دو پیوند دیگر را در نظر بگیریم.

شبکه فضایی fcc است

هر اتم دارای چهار همسایه اول و ۱۲ همسایه دوم دارد.

در هر مکعب یک جهت اتم وجود دارد.

شبکه الماسی تقریباً خالی است.

مستقیم کسری از حجم موجود کربن توان از توسط کره های سخت

پرسود فقط ۱/۳۴ است که در حدود ۱/۴۵

ضریب پرتوگیری تک بلیکده ترین ساختار است. عناصر زیر

|               |      |               |
|---------------|------|---------------|
| کربن          | 3,56 | A°            |
| Si            | 5,43 |               |
| Ge            | 5,65 |               |
| فلز خاکستری   | 6,64 |               |
|               | ↓    |               |
| عناصر گروه IV | A°   | شماره ای شبکه |

با ساختار الماسی سلولوس توئین. ساختار الماسی نتیجه

پیوند کووالانسی را نشان می دهد.

الماس از در شبکه بر اساس یک سطحی ساخته شده است که

در هم نفوذ کرده در انتهای قطر اصلی یافته به اندازه ۱/۴ قطر

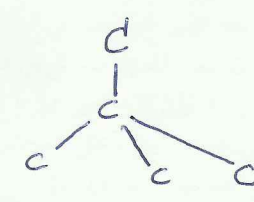
حاصل شده اند. می توان آن را به صورت شبکه مکعبی با

یا بی در تقوای در ۰ و  $\frac{a}{4}(x+y+z)$

نظر گرفت عدد هم آرای ۰. شبکه الماسی یک شبکه براده نیست

زیرا استقراری محیط اطراف هر تقوای محیط اطراف نزدیکترین

همسایگان آن نبرد می کند



شکل (شکل هندسی چهار وجهی)

کربن با ۰ اتم کربن دیگر در اطرافش تشکیل یک ۴ وجهی را می دهد

مس نمی توانیم آن را با یک اتم نایب هم آرای چهار وجهی که هر اتم

یکی نیست و دیگران ۱/۴ بالاتر

ساختار الماسی را می توان به صورت در ساختار fcc کوبیت به بکریگر به اندازه ای یک چهارم قطر اصلی حاصل شده اند

در نظر گرفت ← ساختار الماسی می رسم. نسبت بلندی طول فلز a و فاصله (فاصله) بین اتم از هم  $\frac{a\sqrt{3}}{4}$  باید ۲ اتمی متعلق به fcc است

ساختار الماسی در وسط هر قطر که اتمهای همسایه اول را به هم وصل می کند دارای عنصر تقارنی مرکز وارون سازی است

در امتداد قطر اصلی دنباله به صورت CC... CC... CC است که نقطه ها طاقس خالی را نشان می دهند

ساختار مستقیم کربن الماس در شبکه ای کوبیت و به صورت مغز مغز ساخته. شکل ساختار مکعبی الماس دارای

پیوندهای کووالان چهار وجهی است. در حالتی در هر در ساختار یکسان

ساختار سولفید روی: ساختار مکعبی سولفید روی (بلور روی) همان گونه که در شکل صفت قبل برای اساس نشان داده شده است در نظر بگیرید. در این نوع روی همسند و توخالی سولفید. وی در ساختار اساس همگی کریستالین است. مثل شکل امروزی Zn روی یک شبکه fcc و S روی شبکه fcc ریختن می شود. یافته ترادادی یک مکعب است.

$\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$  : Zn معنقات روی  $\frac{1}{2}$   
 S معنقات گوگرد  $\frac{1}{4}$   $\frac{1}{4}$   $\frac{1}{4}$   $\frac{1}{4}$   $\frac{3}{4}$   $\frac{3}{4}$   $\frac{3}{4}$   $\frac{3}{4}$   $\frac{1}{4}$   $\frac{3}{4}$   $\frac{3}{4}$   $\frac{1}{4}$

شبه فضای fcc. گزین ۱۴

در هر یافته ترادادی 4 مولکول ZnS وجود دارد. مثل fcc

براطراف هر اتم. در فاصله های مساوی از آن چهار اتم از نوع مخالف ترادادیز که در گوشه های یک چهار وجهی متعامت سه اتم از

برخلاف اساس ZnS دارای تقارن دارند سازی است

در ZnS دنباله - صورت ZnS ... ZnS ... ZnS ... که در این عمل دارند سازی نامرد است

در ساختار شش گوشه سولفید روی با توجه به اشکال زیر ZnS. مکعبی و با توجه برای از پیوندهای چهار وجهی در وجهی

عمودی نشان می دهد در این نمایی

هر دو ساختار مکعبی و شش گوشه از

زوج های مشابه یک صفحه Zn

یک صفحه S ساخته شده است. در هر دو

ساختار زوج های مشابه بالایی درونی

قرار گرفته زوج های مشابهی به طور

افتی تا با هم شده اند. برای حفظ پیوند

چهار وجهی یک جای لازم است. برای

جایابی دنباله S-Zn-S برای

یک خط مستقیم و آری گیرد.

در شش گوشه زوج های مشابهی 0, 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18, 20, 22, 24, 26, 28, 30, 32, 34, 36, 38, 40, 42, 44, 46, 48, 50, 52, 54, 56, 58, 60, 62, 64, 66, 68, 70, 72, 74, 76, 78, 80, 82, 84, 86, 88, 90, 92, 94, 96, 98, 100

در مکعبی زوج های مشابهی 0, 3, 6, 9, 12, 15, 18, 21, 24, 27, 30, 33, 36, 39, 42, 45, 48, 51, 54, 57, 60, 63, 66, 69, 72, 75, 78, 81, 84, 87, 90, 93, 96, 99, 102, 105, 108, 111, 114, 117, 120, 123, 126, 129, 132, 135, 138, 141, 144, 147, 150, 153, 156, 159, 162, 165, 168, 171, 174, 177, 180, 183, 186, 189, 192, 195, 198, 201, 204, 207, 210, 213, 216, 219, 222, 225, 228, 231, 234, 237, 240, 243, 246, 249, 252, 255, 258, 261, 264, 267, 270, 273, 276, 279, 282, 285, 288, 291, 294, 297, 300, 303, 306, 309, 312, 315, 318, 321, 324, 327, 330, 333, 336, 339, 342, 345, 348, 351, 354, 357, 360, 363, 366, 369, 372, 375, 378, 381, 384, 387, 390, 393, 396, 399, 402, 405, 408, 411, 414, 417, 420, 423, 426, 429, 432, 435, 438, 441, 444, 447, 450, 453, 456, 459, 462, 465, 468, 471, 474, 477, 480, 483, 486, 489, 492, 495, 498, 501, 504, 507, 510, 513, 516, 519, 522, 525, 528, 531, 534, 537, 540, 543, 546, 549, 552, 555, 558, 561, 564, 567, 570, 573, 576, 579, 582, 585, 588, 591, 594, 597, 600, 603, 606, 609, 612, 615, 618, 621, 624, 627, 630, 633, 636, 639, 642, 645, 648, 651, 654, 657, 660, 663, 666, 669, 672, 675, 678, 681, 684, 687, 690, 693, 696, 699, 702, 705, 708, 711, 714, 717, 720, 723, 726, 729, 732, 735, 738, 741, 744, 747, 750, 753, 756, 759, 762, 765, 768, 771, 774, 777, 780, 783, 786, 789, 792, 795, 798, 801, 804, 807, 810, 813, 816, 819, 822, 825, 828, 831, 834, 837, 840, 843, 846, 849, 852, 855, 858, 861, 864, 867, 870, 873, 876, 879, 882, 885, 888, 891, 894, 897, 900, 903, 906, 909, 912, 915, 918, 921, 924, 927, 930, 933, 936, 939, 942, 945, 948, 951, 954, 957, 960, 963, 966, 969, 972, 975, 978, 981, 984, 987, 990, 993, 996, 999, 1002, 1005, 1008, 1011, 1014, 1017, 1020, 1023, 1026, 1029, 1032, 1035, 1038, 1041, 1044, 1047, 1050, 1053, 1056, 1059, 1062, 1065, 1068, 1071, 1074, 1077, 1080, 1083, 1086, 1089, 1092, 1095, 1098, 1101, 1104, 1107, 1110, 1113, 1116, 1119, 1122, 1125, 1128, 1131, 1134, 1137, 1140, 1143, 1146, 1149, 1152, 1155, 1158, 1161, 1164, 1167, 1170, 1173, 1176, 1179, 1182, 1185, 1188, 1191, 1194, 1197, 1200, 1203, 1206, 1209, 1212, 1215, 1218, 1221, 1224, 1227, 1230, 1233, 1236, 1239, 1242, 1245, 1248, 1251, 1254, 1257, 1260, 1263, 1266, 1269, 1272, 1275, 1278, 1281, 1284, 1287, 1290, 1293, 1296, 1299, 1302, 1305, 1308, 1311, 1314, 1317, 1320, 1323, 1326, 1329, 1332, 1335, 1338, 1341, 1344, 1347, 1350, 1353, 1356, 1359, 1362, 1365, 1368, 1371, 1374, 1377, 1380, 1383, 1386, 1389, 1392, 1395, 1398, 1401, 1404, 1407, 1410, 1413, 1416, 1419, 1422, 1425, 1428, 1431, 1434, 1437, 1440, 1443, 1446, 1449, 1452, 1455, 1458, 1461, 1464, 1467, 1470, 1473, 1476, 1479, 1482, 1485, 1488, 1491, 1494, 1497, 1500, 1503, 1506, 1509, 1512, 1515, 1518, 1521, 1524, 1527, 1530, 1533, 1536, 1539, 1542, 1545, 1548, 1551, 1554, 1557, 1560, 1563, 1566, 1569, 1572, 1575, 1578, 1581, 1584, 1587, 1590, 1593, 1596, 1599, 1602, 1605, 1608, 1611, 1614, 1617, 1620, 1623, 1626, 1629, 1632, 1635, 1638, 1641, 1644, 1647, 1650, 1653, 1656, 1659, 1662, 1665, 1668, 1671, 1674, 1677, 1680, 1683, 1686, 1689, 1692, 1695, 1698, 1701, 1704, 1707, 1710, 1713, 1716, 1719, 1722, 1725, 1728, 1731, 1734, 1737, 1740, 1743, 1746, 1749, 1752, 1755, 1758, 1761, 1764, 1767, 1770, 1773, 1776, 1779, 1782, 1785, 1788, 1791, 1794, 1797, 1800, 1803, 1806, 1809, 1812, 1815, 1818, 1821, 1824, 1827, 1830, 1833, 1836, 1839, 1842, 1845, 1848, 1851, 1854, 1857, 1860, 1863, 1866, 1869, 1872, 1875, 1878, 1881, 1884, 1887, 1890, 1893, 1896, 1899, 1902, 1905, 1908, 1911, 1914, 1917, 1920, 1923, 1926, 1929, 1932, 1935, 1938, 1941, 1944, 1947, 1950, 1953, 1956, 1959, 1962, 1965, 1968, 1971, 1974, 1977, 1980, 1983, 1986, 1989, 1992, 1995, 1998, 2001, 2004, 2007, 2010, 2013, 2016, 2019, 2022, 2025, 2028, 2031, 2034, 2037, 2040, 2043, 2046, 2049, 2052, 2055, 2058, 2061, 2064, 2067, 2070, 2073, 2076, 2079, 2082, 2085, 2088, 2091, 2094, 2097, 2100, 2103, 2106, 2109, 2112, 2115, 2118, 2121, 2124, 2127, 2130, 2133, 2136, 2139, 2142, 2145, 2148, 2151, 2154, 2157, 2160, 2163, 2166, 2169, 2172, 2175, 2178, 2181, 2184, 2187, 2190, 2193, 2196, 2199, 2202, 2205, 2208, 2211, 2214, 2217, 2220, 2223, 2226, 2229, 2232, 2235, 2238, 2241, 2244, 2247, 2250, 2253, 2256, 2259, 2262, 2265, 2268, 2271, 2274, 2277, 2280, 2283, 2286, 2289, 2292, 2295, 2298, 2301, 2304, 2307, 2310, 2313, 2316, 2319, 2322, 2325, 2328, 2331, 2334, 2337, 2340, 2343, 2346, 2349, 2352, 2355, 2358, 2361, 2364, 2367, 2370, 2373, 2376, 2379, 2382, 2385, 2388, 2391, 2394, 2397, 2400, 2403, 2406, 2409, 2412, 2415, 2418, 2421, 2424, 2427, 2430, 2433, 2436, 2439, 2442, 2445, 2448, 2451, 2454, 2457, 2460, 2463, 2466, 2469, 2472, 2475, 2478, 2481, 2484, 2487, 2490, 2493, 2496, 2499, 2502, 2505, 2508, 2511, 2514, 2517, 2520, 2523, 2526, 2529, 2532, 2535, 2538, 2541, 2544, 2547, 2550, 2553, 2556, 2559, 2562, 2565, 2568, 2571, 2574, 2577, 2580, 2583, 2586, 2589, 2592, 2595, 2598, 2601, 2604, 2607, 2610, 2613, 2616, 2619, 2622, 2625, 2628, 2631, 2634, 2637, 2640, 2643, 2646, 2649, 2652, 2655, 2658, 2661, 2664, 2667, 2670, 2673, 2676, 2679, 2682, 2685, 2688, 2691, 2694, 2697, 2700, 2703, 2706, 2709, 2712, 2715, 2718, 2721, 2724, 2727, 2730, 2733, 2736, 2739, 2742, 2745, 2748, 2751, 2754, 2757, 2760, 2763, 2766, 2769, 2772, 2775, 2778, 2781, 2784, 2787, 2790, 2793, 2796, 2799, 2802, 2805, 2808, 2811, 2814, 2817, 2820, 2823, 2826, 2829, 2832, 2835, 2838, 2841, 2844, 2847, 2850, 2853, 2856, 2859, 2862, 2865, 2868, 2871, 2874, 2877, 2880, 2883, 2886, 2889, 2892, 2895, 2898, 2901, 2904, 2907, 2910, 2913, 2916, 2919, 2922, 2925, 2928, 2931, 2934, 2937, 2940, 2943, 2946, 2949, 2952, 2955, 2958, 2961, 2964, 2967, 2970, 2973, 2976, 2979, 2982, 2985, 2988, 2991, 2994, 2997, 3000, 3003, 3006, 3009, 3012, 3015, 3018, 3021, 3024, 3027, 3030, 3033, 3036, 3039, 3042, 3045, 3048, 3051, 3054, 3057, 3060, 3063, 3066, 3069, 3072, 3075, 3078, 3081, 3084, 3087, 3090, 3093, 3096, 3099, 3102, 3105, 3108, 3111, 3114, 3117, 3120, 3123, 3126, 3129, 3132, 3135, 3138, 3141, 3144, 3147, 3150, 3153, 3156, 3159, 3162, 3165, 3168, 3171, 3174, 3177, 3180, 3183, 3186, 3189, 3192, 3195, 3198, 3201, 3204, 3207, 3210, 3213, 3216, 3219, 3222, 3225, 3228, 3231, 3234, 3237, 3240, 3243, 3246, 3249, 3252, 3255, 3258, 3261, 3264, 3267, 3270, 3273, 3276, 3279, 3282, 3285, 3288, 3291, 3294, 3297, 3300, 3303, 3306, 3309, 3312, 3315, 3318, 3321, 3324, 3327, 3330, 3333, 3336, 3339, 3342, 3345, 3348, 3351, 3354, 3357, 3360, 3363, 3366, 3369, 3372, 3375, 3378, 3381, 3384, 3387, 3390, 3393, 3396, 3399, 3402, 3405, 3408, 3411, 3414, 3417, 3420, 3423, 3426, 3429, 3432, 3435, 3438, 3441, 3444, 3447, 3450, 3453, 3456, 3459, 3462, 3465, 3468, 3471, 3474, 3477, 3480, 3483, 3486, 3489, 3492, 3495, 3498, 3501, 3504, 3507, 3510, 3513, 3516, 3519, 3522, 3525, 3528, 3531, 3534, 3537, 3540, 3543, 3546, 3549, 3552, 3555, 3558, 3561, 3564, 3567, 3570, 3573, 3576, 3579, 3582, 3585, 3588, 3591, 3594, 3597, 3600, 3603, 3606, 3609, 3612, 3615, 3618, 3621, 3624, 3627, 3630, 3633, 3636, 3639, 3642, 3645, 3648, 3651, 3654, 3657, 3660, 3663, 3666, 3669, 3672, 3675, 3678, 3681, 3684, 3687, 3690, 3693, 3696, 3699, 3702, 3705, 3708, 3711, 3714, 3717, 3720, 3723, 3726, 3729, 3732, 3735, 3738, 3741, 3744, 3747, 3750, 3753, 3756, 3759, 3762, 3765, 3768, 3771, 3774, 3777, 3780, 3783, 3786, 3789, 3792, 3795, 3798, 3801, 3804, 3807, 3810, 3813, 3816, 3819, 3822, 3825, 3828, 3831, 3834, 3837, 3840, 3843, 3846, 3849, 3852, 3855, 3858, 3861, 3864, 3867, 3870, 3873, 3876, 3879, 3882, 3885, 3888, 3891, 3894, 3897, 3900, 3903, 3906, 3909, 3912, 3915, 3918, 3921, 3924, 3927, 3930, 3933, 3936, 3939, 3942, 3945, 3948, 3951, 3954, 3957, 3960, 3963, 3966, 3969, 3972, 3975, 3978, 3981, 3984, 3987, 3990, 3993, 3996, 4000

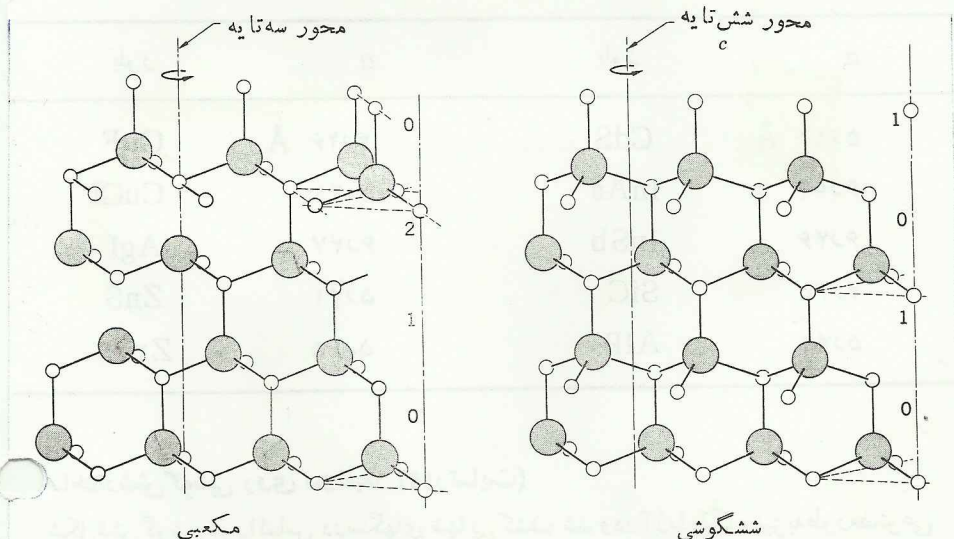
درست با هم دارند و در دنباله آنها به هم

... 012012012 است

اگر فقط های اول مادر بخار بگیریم می توان گفت که با بلور مکعبی سرد کار داریم یا با بلور شش گوشه ولی هنگامی که

امروزی های دوم را در نظر بگیریم این در ساختار همسری داریم. طول پیوندهای Zn-S پس حساب های اول در این دو

ساختار تفاوت بسیار خوبی برابر است.



شکل ۳۰. نحوه رویهم چینی لایه های چهار وجهی در ZnS مکعبی و شش گوشه. اتمهای بزرگ S و اتمهای کوچک Zn می باشند. محور قائم در ساختار ZnS ششگوشی یک محور پیچی شش تاییه است که متضمن انتقالی برابر با نصف c برای هر ۶۰ درجه دوران است. دنباله های رویهم چینی مکعبی ۰۱۲۰۱۲ و ششگوشی ۰۱۰۱۰۱۰۱۰ مشابه دنباله در ساختارهای fcc و hcp است. شکل چهاراد وضعیت عمومی نشان داریم.



— مثالهایی از ساختار بلوری سولفید روی

| $a$    | بلور | $a$    | بلور |
|--------|------|--------|------|
| ۵۷۸۲ Å | CdS  | ۴۷۲۶ Å | CuF  |
| ۶۷۰۴   | InAs | ۵۷۴۱   | CuCl |
| ۶۷۴۶   | InSb | ۶۷۴۷   | AgI  |
| ۴۷۳۵   | SiC  | ۵۷۴۱   | ZnS  |
| ۵۷۴۲   | AlP  | ۵۷۶۵   | ZnSe |

— مثالهایی از ساختار شش گوشه سولفید روی

| $c$    | $a$    | بلور          | $c$    | $a$    | بلور |
|--------|--------|---------------|--------|--------|------|
| ۵۷۲۱ Å | ۳۷۲۵ Å | SiC           | ۵۷۱۲ Å | ۳۷۲۵ Å | ZnO  |
| ۴۷۱۲   | ۲۷۵۲   | الماس شش گوشه | ۶۷۲۳   | ۳۷۸۱   | ZnS  |
| ۶۷۷۵   | ۴۷۱۳   | CdS           | ۶۷۵۳   | ۳۷۹۸   | ZnSe |
| ۷۷۰۲   | ۴۷۳۰   | CdSe          | ۶۷۹۹   | ۴۷۲۷   | ZnTe |

- صحیح دلیلی وجود ندارد حالت min انرژی امپا در بلور در صورتی که با

- ساختاری fcc و hcp مثل صفحات تنگ یکدیگر از انرژی سبز. فقط در دنیای رویم جیبی صفحات با یکدیگر تفاوت دارند

دنیای fcc - صورت ABC ABC و در hcp به صورت ACAC است.

- ساختاری با ABCBACBABC وجود دارد که کاتوره‌های است ← روی هم جیبی کاتوره‌های گویند ← کربان رخ می‌دهد.

- کمالات دو شکل بلوری مترادف دارد یکی hcp در دمای پایین تر از 400 پایداری در دمای اتاق افتاد انرژی بین این fcc " " بالاتر از 400 پایداری در دمای اتاق است.

- کاتوره‌ای ← بلوری ← در دو

ششگونی گویند در 3 بعد که در هر 3 بعد کاتوره‌ای است. ششگونی در 3 بعد کسبل

لاصق 40 کسبل  
ص 48

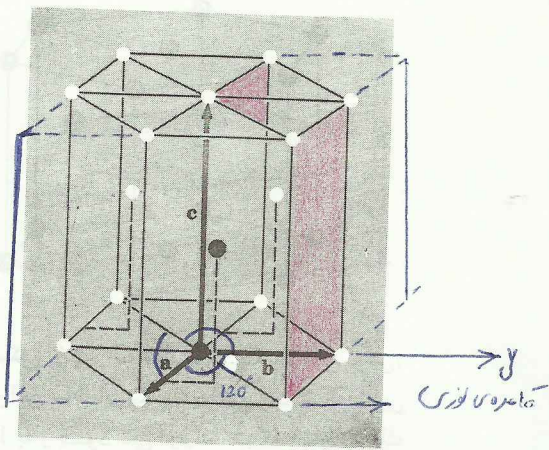
- Na: در دمای اتاق bcc است. این بلور در نتیجه سرد کاری - دمای پایین از 36K یا تفسیر شکل در دمای پایین 51K به hcp تبدیل

- Li: " " " " در دمای 78K hcp و bcc توأم. باز hcp با سرد کاری تبدیل به fcc می‌شود

- Co کربان. به صورت بلورهای fcc. گرانبه. اساس ششگونی و آئرف کوهه اساساً در دمای اتاق پایداری بیشتر

- آهن تا 910°C، bcc، بین 910 تا 1400 fcc است و بالای 1400، bcc است.

یاخته مراداری منشور متوازی است که ماعده آن یک لوزی با زاویه رأس  $50^\circ$  . بسط است . که در شکل زیر باطلی  
 من این یافته با ماعده لوزی منشور شش گوش آفره است . علامتهای خطکار در شکل .



شکل ۲۶. در باخته بسط  $a=b$  و زاویه بین  
 نصف آن  $50^\circ$  است  $\rightarrow$  آنها  $120^\circ$  است. محور  $c$  بر صفحه  $a$  و  $b$   
 عمود است. در ساختار ایده آل hcp ،  
 $c = 1.633 a$  . در این شکل دو اتم مربوط  
 به یک پایه با دایره‌های سیاه نشان داده  
 شده اند. یک اتم پایه در مبدأ ، و اتم  
 دیگر در  $\frac{1}{3}a, \frac{1}{3}b, \frac{1}{2}c$  ، یعنی در

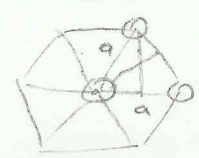
$$r = \frac{1}{3}a + \frac{1}{3}b + \frac{1}{2}c$$

قرار دارد.

ایجاب  $\frac{c}{a} = 1.633$  در یک  
 ساختار شش گوش ایده آل ،  
 شش گوش .

توجه : اگر این نسبت سبتر از این مقدار  
 باشد ، ساختار بلورانی توان به  
 صورت صفحه های از اتمی  
 شش گوش در نظر گرفت که بصورت  
 نسبت روی هم قرار گرفته اند .

اگر هسته پایه یک شش گوش  
 در بصورت زیر در نظر بگیرد .



$$\frac{a \cos(50)}{\cos} = a \tan(50) = \frac{q}{\sqrt{3}}$$

از هر دو از 3 نقطه می توانست اتمی که منتهی شده از در مرکز که در این شکل باطلی

$$a^2 = \left(\frac{a}{\sqrt{3}}\right)^2 + \left(\frac{q}{2}\right)^2$$

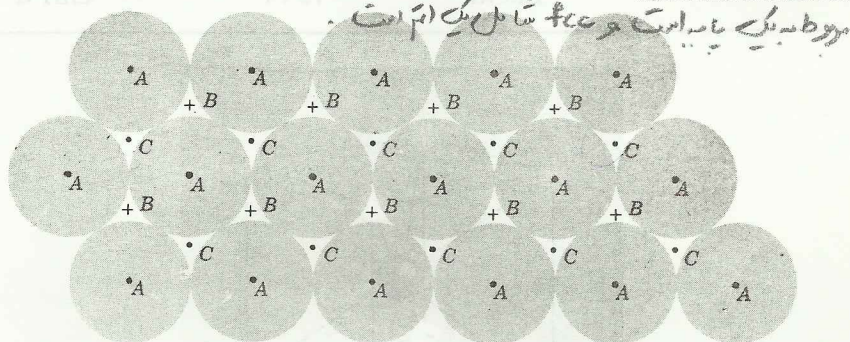
$$\frac{2}{3}a^2 = \frac{1}{4}c^2$$

$$\frac{c}{a} \sqrt{\frac{3}{2}} = 1.633$$

**ساختار تنگ پکیده شش گوشه (hcp)**

به دو روش می توان کره های معادل را به گونه ای در یک آرایه منظم مرتب کرد که حجم میانین می نیمم شود (شکل ۲۴). یکی از این دو روش به ساختار مکعبی مرکز سطحی (تنگ پکیده مکعبی) منجر می شود و دیگری دارای تقارن شش گانه است و ساختار (تنگ چین) تنگ پکیده شش گوشه (hcp) نامیده می شود (شکل ۲۵). در هر دو ساختار fcc و hcp کسری از حجم کل که توسط کره ها اشغال می شود ۷۴٪ است.

کره ها را می توان با در تماس قرار دادن هر کره با شش کره دیگر در یک لایه تنگ پکیده مرتب کرد. چنین لایه ای می تواند یا صفحه قاعده برای ساختار hcp و یا صفحه (۱۱۱) برای ساختار fcc باشد. لایه مشابه دوم را می توان، مانند شکل ۲۴، به گونه ای روی این لایه قرار داد که هر کره با سه کره از لایه زیر در تماس باشد. لایه سوم را می توان به دو طریق اضافه کرد: در ساختار fcc کره های لایه سوم بالای حفره هایی از لایه اول که توسط لایه دوم اشغال نشده اند قرار می گیرند؛ در ساختار hcp کره های لایه سوم درست بالای کره های لایه اول واقع می شوند. می توان گفت که نحوه پکیدن در ساختار fcc به صورت ABCABC... است، در حالی که در ساختار hcp به صورت ABABAB... است. ساختار hcp دارای یاخته بسیط شش گوشه است و همان طور که در شکل ۲۶ نشان داده شده است پایه شامل دو اتم



**شکل ۲۴.** یک لایه تنگ پکیده از کره ها که مراکز آنها با A مشخص شده است. لایه دوم یکسانی از کره ها را می توان به گونه ای روی این لایه قرار داد که مراکز آنها بالای نقاطی که با B مشخص شده است (یا، به طور معادل، بالای نقاطی که با C مشخص شده است) قرار گیرند، اگر مراکز کره های لایه دوم بالای نقاط B قرار گیرند، دوگنیش غیر معادل برای لایه سوم موجود خواهد بود. مراکز کره های این لایه می توانند یا بالای نقاط A و یا بالای نقاط C قرار گیرند. اگر بالای A قرار گیرند دنباله ABABAB... به وجود می آید و ساختار به صورت تنگ پکیده شش گوشه می شود. اگر مراکز کره های لایه سوم روی C قرار گیرند دنباله ABCABCABC... به وجود خواهد آمد و ساختار به گونه مکعبی مرکز سطحی درمی آید؛ این صفحه مطابق شکل ۱۹ یک صفحه (۱۱۱) است.

- hcp یک شبکه براره است، عدد ۱/۵۰ عنصر - شکل تنگ پکیده شش گوشه شش گوشه می شود.

- بر اساس ساختار hcp یک شبکه براره شش گوشه ساده است با زاویه شبکه در هر دو جهت ۱۲۰ درجه و در جهت عمود بر این دو جهت ۹۰ درجه.

درست می آید. جهت این روش هم چنین - محور C معرفت است. در بردار سطح مربوط عبارتند از

$$a_1 = a\hat{x} \quad a_2 = \frac{a}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{y} \quad a_3 = c\hat{z}$$

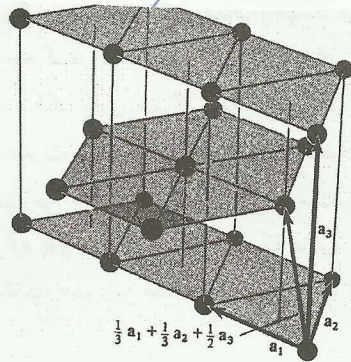
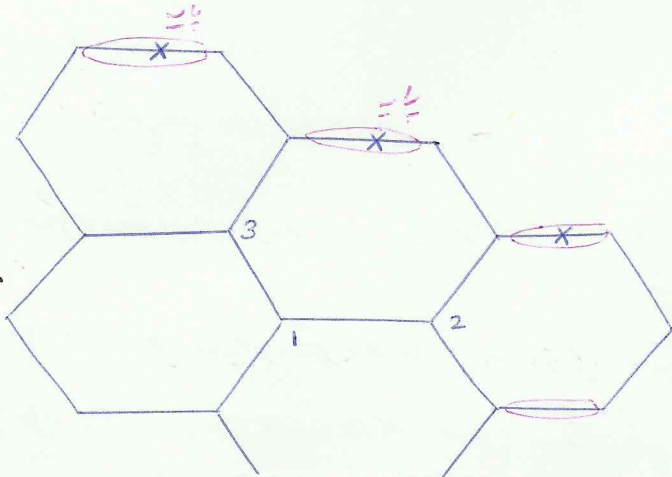
I نام اول شبکه سطحی در صفحه است. در سازند سوزنی صحت را - با توجه C بالای هم قرار می دهد



مثال: شکل زیر را در نظر بگیرید این شکل شبکه براده است چون نقطه‌های 1 سمت راست 2 است و در 3 هم این اتفاق می‌افتد. ولی اگر فقط مرکز آن برداریم براده می‌شود.

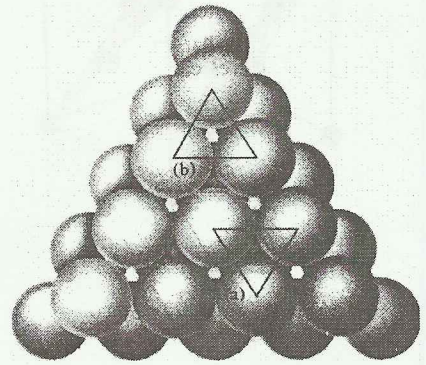
در این شبکه کندی و عسل پایه‌ای را در نظر بگیرید می‌توانیم شبکه براده داشته باشیم همان علامت  $x$  اگر این را بررسی کنیم می‌بینیم این یک دهگرا مثلث است.

ص ۹۱ مرصع



شکل ۴-۲۰ ساختار بلوری شش گوشه تنگ پکیده. این ساختار را می‌توان به صورت دو شبکه براده شش گوشه ساده فرورفته در هم، دید که به فاصله  $c/2$  در امتداد محور مشترک  $c$  جابه‌جا شده‌اند، و همچنین دارای یک جابه‌جایی افقی به گونه‌ای باشند که نقاط یک لایه مستقیماً در بالای مراکز مثلث تشکیل شده به وسیله نقاط لایه دیگر قرار گیرد.

شکل ۴-۲۱ منظر از بالا از دو لایه اول در انباشته‌ای از توپ‌های صلب. اولین لایه در یک شبکه مثلثی تخت مرتب شده است. توپ‌های لایه دوم به طور یک در میان در جاهای خالی لایه اول قرار می‌گیرند. اگر توپ‌های لایه سوم مستقیماً روی اولی‌ها قرار گیرند، که در شکل در قسمت (a) نشان داده شده، و لایه چهارم هم درست بالای لایه دوم باشد، الی آخر، ساختار حاصل شش گوشه تنگ پکیده است. ولی اگر توپ‌های لایه سوم مستقیماً روی جاهای خالی لایه اول که توسط توپ‌های لایه دوم پر نشده‌اند قرار گیرند، یعنی در جاهایی که در (b) نشان داده شده‌اند و توپ‌های لایه چهارم درست بالای اولی‌ها باشد، توپ‌های پنجم هم بالای دومی‌ها و به همین ترتیب الی آخر، ساختار حاصل مکعبی مرکز سطحی می‌شود (که در آن قطر اصلی مکعب به صورت قائم قرار گرفته است).



ولی به دلیل آن که تقارن شبکه تنگ پکیده شش گوشه مستقل از نسبت  $c/a$  است، این نام‌گذاری محدود به همین مورد نمی‌شود. گاهی مقدار  $c/a = \sqrt{\frac{8}{3}}$  را «ایده‌آل» خوانده و یک ساختار واقعاً تنگ پکیده با مقدار ایده‌آل  $c/a$  را ساختار hcp ایده‌آل می‌نامند. اما به جز آن که واحدهای فیزیکی در ساختار hcp، کره‌های واقعاً تنگ پکیده باشند، هیچ دلیلی وجود ندارد که چرا  $c/a$  باید ایده‌آل باشد (جدول ۴-۴ را ببینید).

توجه داشته باشید که شبکه hcp، مانند مورد ساختار الماسی، یک شبکه براده نیست، به این دلیل که سمتگیری محیط اطراف یک نقطه در طول محور  $c$ ، از لایه‌ای به لایه دیگر تغییر می‌کند. همچنین توجه کنید که هنگامی که به این ساختار در طول محور  $c$  نگاه کنیم، دو نوع صفحه‌ی یاد شده آرایه کندی و عسل دوبعدی شکل ۴-۳ را تشکیل می‌دهند که یک شبکه براده نیست.

- گروه نقطای ۱۷ عضو دارد و گروه انتقال ۵۵ عضو دارد. اگر دو نقطه را انتقال ۵۵ عضو دارند که فقط ۱۷ عضو نقطای است

- وقتی گروه نقطای را با مجموعه  $S_n$  کنیم سرانجام یافته ۵۵ را می بینیم. برای ضرب یافته حاصل حاصل می شود.  $S_n$  است

- چرا یافته ۵۵ را می توانیم از  $S_n$  است؟ چون یک نقطه را در آن است.

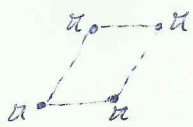
- وزن ۱۰ عضو 1 2 3 4 5 1 m 2mm 3m 4mm 5mm

مستطیل باید آینه داشته باشد.

- حول نقطای وسط اگر جبر ضایع روی فرس می خورد.

**گفتار** : نشان دهد در جبر از تعداد وجود تعدادی لای لای منفرجه. هر دو تعدادی لای لای می شود.

- یک شبکه بلوری مربع در یک پایه آن  $2 \times 2$  می شود و طول هر دو برابر است. یا به بلوری مجموعاً از آن است. زمین منفرجه طوری دارد که در یک شبکه بلوری ۵ را دارد.



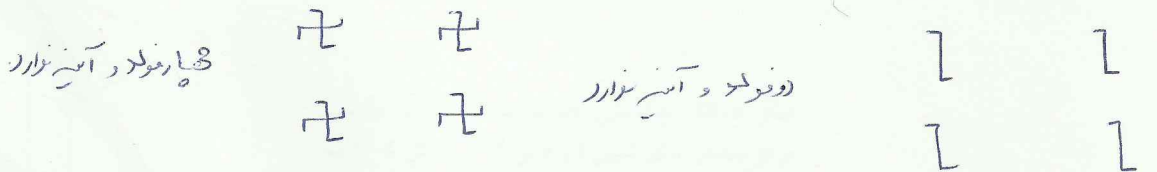
در شبکه اگر حول مرکز جبر ضایع روی فرس می خورد مسطح و فاصله هر دو فقط یک فاصله دارد. پس قرار دادن پایه در یک شبکه می تواند منفرجه باشد. با همین تعداد می شود پس در اصل تعداد لازم یک فاصله است.

- در یک عاری 4 فولد

" پایه در مربع ← آینه قرار 2 فولد

مستطیل الضلع یا پایه در مربع 1 فولد

" " عاری " 2 فولد

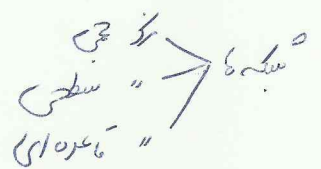


**گفتار** : قانونی برای اسیطرس گروه نقطای شبکه براده پایه بلوری را درست آید.

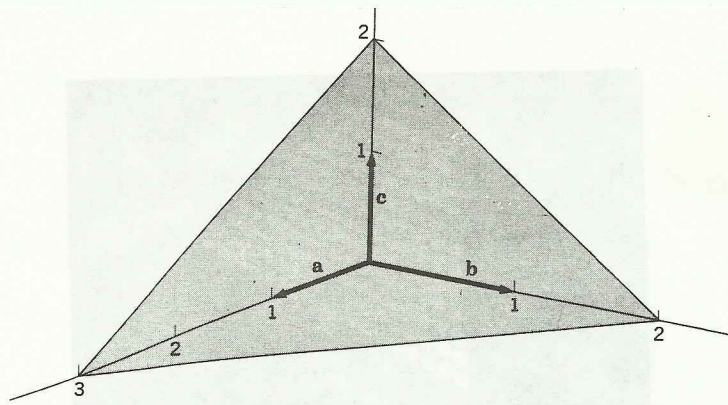
پایه بلوری که می توانیم گروه نقطای 8 بلور حاصله چیست؟

$$S = |axb|$$

- کاسینس شکل یافته داده در جدولی می توانیم از ضلع بودن در مربع



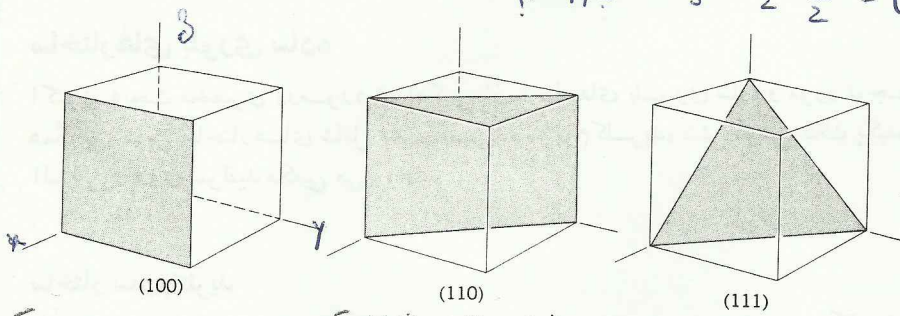
**گفتار** : نشان لوری رخ است  $R$  را به پایه  $R$  وجود لوری رخ باشد در پایه لوری که کمتر از ۱۲۰ باشد. چرا باید  $120 < \alpha$



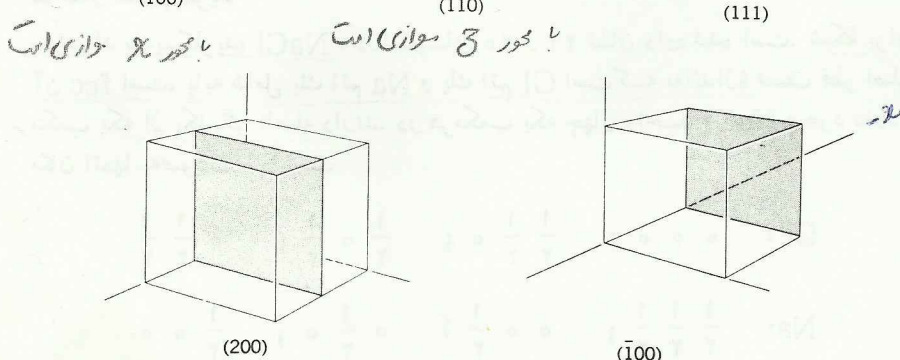
ابتدا سن این صفحه و صفحه بعد را با هم مقایسه کنید

شکل ۱۷. این صفحه محورهای  $a$ ،  $b$  و  $c$  را در  $3a$  و  $2b$  و  $2c$  قطع می کند. وارونه این اعداد عبارتند از  $1/3$ ،  $1/2$ ،  $1/2$  که کوچکترین سه عدد درستی که دارای همین نسبتها باشند عبارتند از  $2$ ،  $3$  و  $3$ . در نتیجه شاخصهای این صفحه برابر با  $(233)$  می شود.

$$3, 2, 2 \rightarrow \frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \xrightarrow{\text{مربوط به ۲۳۳}} \frac{2}{3}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2} = (2, 3, 3)$$



قطر اصلی مجاورت بر آن  
ساخته شده است ۱۲۵ درجه  
آن می تواند به هم گوناگون باشد  
موازی نیستند



شکل ۱۸. شاخصهای چند صفحه مهم در یک بلور مکعبی. صفحه  $(200)$  با صفحات  $(100)$  و  $(\bar{1}00)$  موازی است.

رنگه ششگانه گوناگون صفحات بلور. اعداد میلر  $(hkl)$

۱. محل تقاطع صفحه را با محورهای  $a$ ،  $b$  و  $c$  بر حسب ششگانه میلر پیدا کنید

۲. اعداد حاصل را وارونه می کنیم و آنگاه آنها را در عدد درستی که در آن همان نسبتها با هم تقابل می دهیم معمولاً کوچکترین ۳ عدد را به صورت  $(hkl)$  در می آوریم.

مثال  $(4, 4, 2)$

$$\left(\frac{4}{4}, \frac{4}{4}, \frac{2}{2}\right) = \left(\frac{1}{1}, \frac{1}{1}, \frac{1}{1}\right) \Rightarrow (1, 1, 1)$$

عدد درستی هر ۳ در صورت  
هم می باشد

توجه کنید که مخروط بی بی به هر ۳ تقاطع بر روی محورهای  $a$ ،  $b$  و  $c$  می خورد  
هم ضرب کرده و در صورت هر کدام ضرب می کنیم بعد  $hkl$  را می آوریم

$$\Rightarrow (hkl) = (2, 4, 1)$$



— ساختن مربوط به تقاطعی که در بینهایت رخ می دهد، صفر است.

— مشاهده‌های  $(hkl)$  می تواند نمایانگر یک صفحه یا مجموعه‌ای از صفحات موازی باشد.

— اگر صفحه‌ای عمودی را در طول منطبق کند ساختن مربوط منطبق بوده و این امر را تراو دادن (-) در بالای ساختن مربوط مشخص کرد  $(h\bar{k}l)$ .

— وقتی از صفحه (200) صحبت می شود مقصود صفحه‌ای است که با صفحه (100) موازی است ولی فاصله  $a$  را در  $\frac{1}{2}a$  قطع می کند.

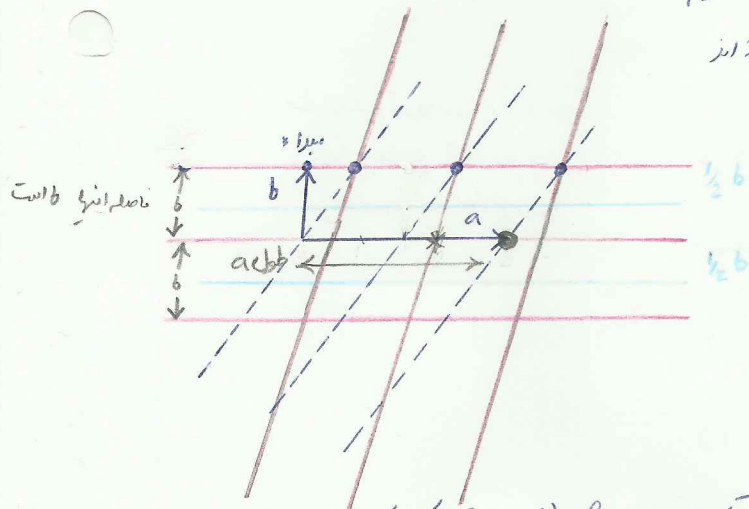
— در بلورهای مکعبی جهت  $(hkl)$  بر معنوی  $(hkl)$  که دارای همان خاصیت است عمود است ولی این با این رگرگرتگاهی بلور در جهت نیست.

باید دید  $hkl$  می تواند نمایانگر یک صفحه یا مجموعه‌ای از صفحات موازی باشد. به شکل زیر توجه کنید.

همه نوع صفحه موازی مربع و ... داریم. و نوعهای دیگری نیز می توانیم داشته باشیم

برای اینکه مشخص کنیم صفحات چگونه اند (صفحات یا مربع) چگونه قرار گرفته اند

به روش سیر ابداع کرد می پردازیم.



1- جهت بردار و نیمه فضا را با مشخص کردن بردارهای سازشی بلور را ابتدا مشخص می کنیم. من راسته صفحه خطکار آبی --- را انتخاب می کنیم

2- محل تلاقی یکی از صفحات موجود در هر صفحه را با محورهای سازشی

موجب تا برای شبکه پیدا می کنیم وقت کند صفحه مورد نظر از صفحه

عبور نکند باشد. بردار  $a$  را در  $+a$  و  $b$  را در  $-b$  قطع کرده است.

توجه کرده اند من سیر است  $(\bar{1} \bar{1} 1)$

— سوراخ صفحه خاکستری: با \* علامت ده ام را در نظر می گیریم:  $\frac{2}{3}$  از  $a$  یا معبوده و  $-b$  می شود

$$\left(\frac{2}{3}, -1, 1\right) \rightarrow (2, -3, 3)$$

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

حالا اگر بخواهیم نامی این صفحات را پیدا کنیم  $d_{hkl} = 9 \Rightarrow 56$  در شبکه بلور مستطیل به صورت  $\frac{a}{b}$  می شود.

در دره‌های بلور 3 سی و یک سی در صوبه در  $d_{hkl} = 9$

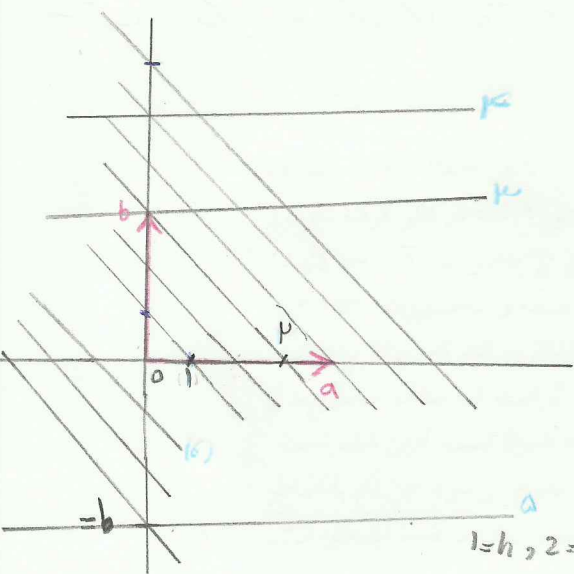
(1)  $(4, 3) = (\frac{1}{4}, \frac{1}{3}) =$  برای نقطه (1)

(2) " " =  $(\frac{3}{4}, 1) = (\frac{4}{3}, 1) = (4, 3)$

(3) " " =  $(\infty, 1) = (\frac{1}{\infty}, 1) = (0, 1)$

(4) " " =  $(\infty, \frac{5}{3}) = (\frac{1}{\infty}, \frac{3}{5}) = (0, \frac{3}{5}) = (0, 3)$

(5) " " =  $(\infty, -1) = (0, -1) = (0, \infty)$



فاصله از راستی آن

فاصله a محور x

نتیجه 1:  $(1, 2, 0) \leftarrow$  بردارهای عمود بر  $h, k, l$  است. اینها از  $h=1, k=2, l=0$

نتیجه 2: هر دو بردار هم‌جهت هستند که باید متلا موازی با  $h, k$  میلر بر روی آن صفر است. شماره 5 موازی با آن است.

میلر آن صفر شد (آره).

اگر اندیس  $hk$  درست آمده باشد یعنی ضرب کنیم همان نتیجه را خواهد داشت. مثلاً شماره 1 (1) میلر آن شد  $(4, 3)$  حال میلر آن را به دست ضرب کنیم  $(3, 4)$  و آن می‌شود  $(-\frac{1}{4}, -\frac{1}{3})$  که دو بردار موازی با هم هستند. شماره 1 (1) در خلاف آن است یعنی خط شماره 6

سه بردار در یک صفحه قرار می‌گیرند  $(h, k) = (h, k)$  موازی و یکی در 3 بردار صحت ندارد

-  $(1, 0, 0)$  با محور x موازی است.

-  $(0, 1, 0)$  با محور y موازی است.

-  $(1, 1, 1) \leftarrow$  قطر اصلی عمود است بر هر دو آن و زاویه 120 درج را خواهد داشت. هیچ کدام بردار موازی نیست.

تئوری: راستی با ج. فارسی نامش می‌دهند. همچنین یک سری راستی و یک سری صحت هم از داریم و این را می‌خواهیم بدانیم.

مباحثهای میلر یک صفحه شبکه؟ معنی کوتاهترین بردار شبکه درون عمود بر آن صفر است. مجموعه‌ای معنی از برداری

سه بردار شبکه درون این صفحه‌ها می‌تواند باشد.  $h, k, l$  بردار بردار شبکه درون  $hb_1 + kb_2 + lb_3$  است.

- مباحثهای 2 - انتخاب گروهی برداری بی‌خطی دارند.

جدول ۷-۴ نام‌گذاری بعضی از گروه‌های فضایی ساده

| دستگاه    | تعداد گروه‌های نقطه‌ای | تعداد شبکه‌های براوه | حاصل ضرب |
|-----------|------------------------|----------------------|----------|
| مکعبی     | ۵                      | ۳                    | ۱۵       |
| چهارگوش   | ۷                      | ۲                    | ۱۴       |
| راست گوشه | ۳                      | ۴                    | ۱۲       |
| تک‌میلی   | ۳                      | ۲                    | ۶        |
| سه‌میلی   | ۲                      | ۱                    | ۲        |
| شش‌گوشی   | ۷                      | ۱                    | ۷        |
| سه‌گوشی   | ۵                      | ۱                    | ۵        |
| جمع       | ۳۲                     | ۱۴                   | ۶۱       |

— محورهای  $a$ ،  $b$  و  $c$  برای یافته کربن — حجم  $|a \cdot b \cdot c|$  بسط از یک عمود انتقال شبکه‌ی  $T$  و یک پایه (هم‌تقطعی) یک

می‌توان ساختار بلور را از این یافته — دست آورد.

— یک یافته تراداری، با حجمی که مفرد صحیحی از حجم یافته بسط یافته، می‌تواند برای توصیف برخی بلورهای (به ویژه بلورهای مکعبی) مناسب باشد.

— یک صفحه در بلور نشان‌دهنده‌ی  $(hkl)$  و یک خط توسط  $(uvw)$  نشان داده می‌شود.

$\Delta ABY$ :

$\cos 30^\circ = \frac{AY}{AB} \Rightarrow AY = a \cos 30^\circ = \frac{a\sqrt{3}}{2}$

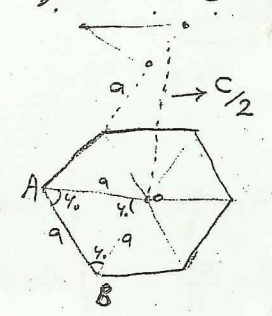
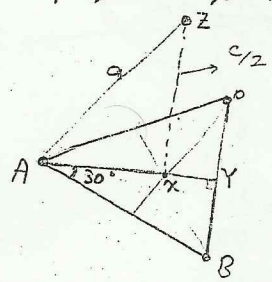
$(AZ)^2 = (AX)^2 + (ZX)^2$

$\Delta AXZ$ :  $AX = \frac{2}{3} AY = \frac{2}{3} a \frac{\sqrt{3}}{2} = \frac{a}{\sqrt{3}}$

$\Rightarrow AZ^2 = AX^2 + ZX^2 \Rightarrow a^2 = \frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}$

$\frac{c^2}{a^2} = \frac{8}{3} \Rightarrow \frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} \Rightarrow \boxed{c = \sqrt{\frac{8}{3}} a}$

نسبت سبب c بر حسب a در ساختار fcc



$a = 2r$

نسبت سبب c بر حسب a در ساختار fcc

نسبت  $\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}}$

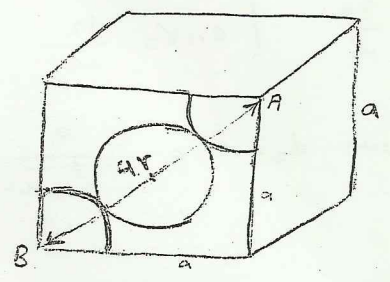
نسبت سبب c بر حسب a در ساختار fcc

$AB^2 = a^2 + a^2 = 2a^2$

$AB = 4r$

$16r^2 = 2a^2 \rightarrow a^2 = 8r^2$

$\boxed{a = 2\sqrt{2} r}$



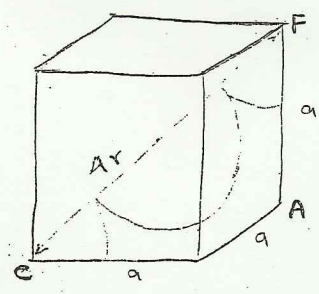
$(AC)^2 = a^2 + a^2 = 2a^2$

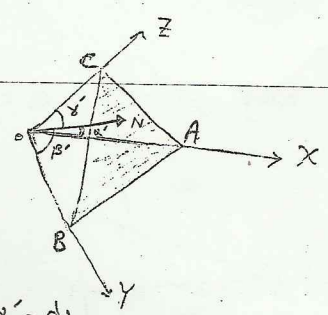
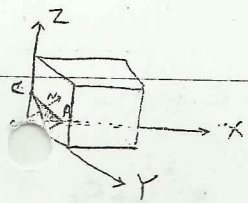
$(FC)^2 = (AC)^2 + (AF)^2 = 2a^2 + a^2 = 3a^2$

$FC = 4r \Rightarrow (4r)^2 = 3a^2$

$a = \frac{4r}{\sqrt{3}} \Rightarrow (2r) = \frac{a\sqrt{3}}{2}$

bcc





صفاات هم از جبره تقين مي سوزند

$$\cos^2 \alpha' + \cos^2 \beta' + \cos^2 \gamma' = 1$$

$$\left(\frac{d_1}{OA}\right)^2 + \left(\frac{d_1}{OB}\right)^2 + \left(\frac{d_1}{OC}\right)^2 = 1$$

$$\frac{d_1^2}{a^2} (h^2 + k^2 + l^2) = 1$$

$$d_1 = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

$$\begin{cases} OA = \frac{a}{h} \\ OB = \frac{a}{k} \\ OC = \frac{a}{l} \end{cases}$$

$$\begin{cases} \cos \alpha' = \frac{d_1}{OA} \\ \cos \beta' = \frac{d_1}{OB} \\ \cos \gamma' = \frac{d_1}{OC} \end{cases}$$

فرصت، صفحه PQR موازي با صفا ABC در فاصله عمودي  $d_2$  از آن قرار گرفته باشد:

$$\begin{cases} OA' = \frac{2a}{h} \\ OB' = \frac{2a}{k} \\ OC' = \frac{2a}{l} \end{cases}$$

$$\begin{cases} \cos \alpha' = \frac{d_2}{OA'} \\ \cos \beta' = \frac{d_2}{OB'} \\ \cos \gamma' = \frac{d_2}{OC'} \end{cases}$$

$$\frac{d_2^2}{4a^2} (h^2 + k^2 + l^2) = 1$$

$$d_2 = \frac{2a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

$$d_2 - d_1 = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = d$$

دسته صفاات متوازي با اين فاصله دو صفا متوازي از آن

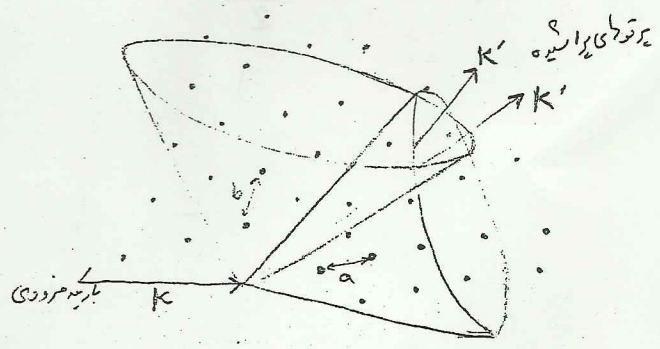
با انديس هاي ميلر (hkl) در صفا تقين برابر باشد و براي هر زوج صفا متوازي موازي برابر مقدار ثابت d باشد.

$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2} < 120^\circ$$

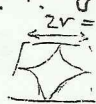
چهار روي هم در حال زواياي برابر و هم از جبره از 120 درجه

هر دو از وي بستن ذرات در وي برابر



حجمی بسته بندی برای شبکه ای برآورد و معکوس در موردی دایره ای واقع به دلیل توانایی همپوشانی کرده ای است؟ چگالی بسته بندی اتمی را با این

فضای اشغال شده توسط اتم =  $\frac{4}{3} \pi r^3$   
 فضای اشغال شده توسط بلور یا بسته بندی =



SC

$$\text{حجم اتم} = \text{تعداد اتم} \times \text{حجم کره} = 1 \times \frac{4}{3} \pi r^3$$

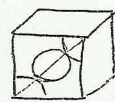
حجم بسته بندی =  $a^3$

$$\text{چگالی بسته بندی} = \frac{4}{3} \frac{\pi r^3}{a^3}, \quad a = 2r \Rightarrow \text{چگالی بسته بندی} = 0,52$$

FCC:

$$\text{حجم اتم} = 4 \times \frac{4}{3} \pi r^3 = \frac{16}{3} \pi r^3$$

$$\text{حجم بسته بندی} = \frac{a^3}{4}; \quad \sqrt{2} a = 4r$$



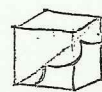
$$4r = \sqrt{2} a$$

FCC

$$\text{چگالی بسته بندی} = \frac{16 \pi r^3}{3} \frac{2\sqrt{2}}{64 r^3} \Rightarrow \text{چگالی بسته بندی} = 0,74$$

$$\text{حجم اتم} = 2 \times \frac{4}{3} \pi r^3 = \frac{8}{3} \pi r^3$$

$$\text{حجم بسته بندی} = \frac{a^3}{2}; \quad a = \frac{4}{\sqrt{3}} r$$



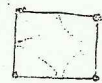
$$4r = \sqrt{3} a$$

BCC

$$\text{چگالی بسته بندی} = \frac{8 \pi r^3}{3} \frac{3\sqrt{3}}{64 r^3} = 0,68$$

$$\text{حجم اتم} = \pi r^2$$

$$\text{چگالی بسته بندی} = \frac{\pi r^2}{4r^2} = \frac{\pi}{4}$$



$$a = 2r$$

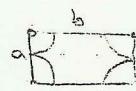
دو بعدی  
مربع

$$\text{حجم بسته بندی} = a^2$$

$$\text{حجم اتم} = \pi r^2$$

$$\text{حجم بسته بندی} = ab = (2r)(2r + c) = 4r^2 + 2rc$$

$$\text{چگالی بسته بندی} = \frac{\pi r^2}{4r^2 + 2rc}$$



$$a = 2r$$

$$b = 2r + c$$

سه بعدی

مربع و مستطیل  
?

حجم دایره است  $\frac{8\pi^3}{V}$  (حجم مستطی است)

$$\begin{cases} \vec{A} = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})} \\ \vec{B} = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})} \\ \vec{C} = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \vec{A} \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) &= \frac{(2\pi)^3}{V^3} \left[ (\vec{b} \times \vec{c}) \cdot [(\vec{c} \times \vec{a}) \times (\vec{a} \times \vec{b})] \right] \\ &= \frac{(2\pi)^3}{V} V^2 = \frac{(2\pi)^3}{V} \end{aligned}$$

$$\begin{cases} \vec{A} = \frac{2\pi}{a} \hat{i} \\ \vec{B} = \frac{2\pi}{a} \hat{j} \\ \vec{C} = \frac{2\pi}{a} \hat{k} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} A \cdot (B \times C) &= \frac{2\pi}{a} \hat{i} \cdot \left( \left( \frac{2\pi}{a} \right)^2 (\hat{j} \times \hat{k}) \right) = \frac{(2\pi)^3}{a^3} (\hat{i} \cdot \hat{i}) \\ &= \frac{8\pi^3}{a^3} = \frac{8\pi^3}{V} \end{aligned}$$

بالاتر اول تا سوم بر هم ضرب کردیم  
برای هر یک از اینها

\* وکتورهای (1, 2, 3) در این راستا

در این راستا وکتورهای (1, 2, 3) در این راستا  
در این راستا وکتورهای (1, 2, 3) در این راستا

⊗ روتر عدال 120 < زاویه

1 هر دو شبکه یکسخت هستند و یافته واحد آن  $V = a^3$  است، و چون  $a=b=c$  و  $\alpha=\beta=\gamma$

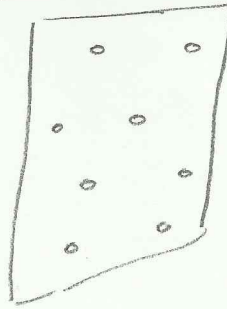
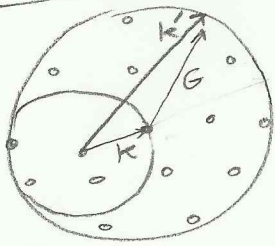
عدد حتماً  $f_{cc} = 12$  و  $bcc = 8$    
 فشرده ترین شکل بلوری

تعداد نقاط شبکه  $f_{cc} = 4$  و  $bcc = 2$

عمق که به هر نقطه یافته تعلق می‌تورد  $f_{cc} = \frac{a^3}{4}$  و  $bcc = \frac{a^3}{2}$

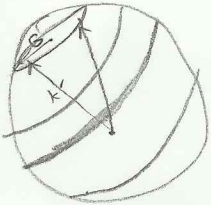
2

اواله

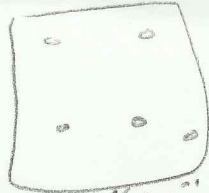


نقاط غیر یوگیته روی پرده تشکیل می‌دهند که مشخصات شبکه را در بر دارد

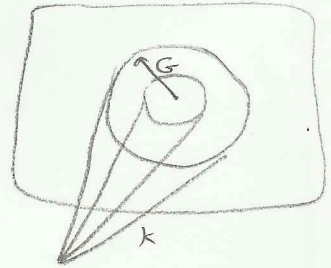
بلور حتماً



نقاط شبکه یکسان را درون



بلورهای دایره‌های هم مرکز







$$b_2 \times b_3 = 2\pi \frac{(a_3 \times a_1)}{a_1 (a_2 \times a_3)} \times \frac{2\pi (a_1 \times a_2)}{a_1 (a_2 \times a_3)} = \left( \frac{2\pi}{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)} \right)^2 \left\{ \frac{(a_3 \times a_1)}{A} \times \frac{(a_1 \times a_2)}{B} \right\}$$

$$b_2 \times b_3 = \left( \frac{2\pi}{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)} \right)^2 \left\{ \frac{a_1 (a_2 \cdot (a_3 \times a_1))}{a_1 (a_2 \times a_3)} - a_2 (a_1 \cdot (a_3 \times a_1)) \right\}$$

(BAC - CAB) ⇒

$$= \frac{(2\pi)^2}{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)} a_1 = b_2 \times b_3 \Rightarrow b_1 (b_2 \times b_3)$$

$$= \frac{2\pi}{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)} (a_2 \times a_3) \cdot a_1 \frac{(2\pi)^2}{a_1 (a_2 \times a_3)} = \frac{2\pi^3}{a_1}$$

$$\Rightarrow b_1 (b_2 \times b_3) = \frac{(2\pi)^3}{a_1 (a_2 \times a_3)}$$

$$b_2 \times b_3 = \frac{2\pi^2}{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)} a_1$$

$$b_1 \cdot (b_2 \times b_3) = \frac{(2\pi)^3}{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)}$$

$$\Rightarrow \frac{2\pi}{b_1 (b_2 \times b_3)} = \frac{(2\pi)^3 a_1}{(2\pi)^3} = a_1$$

ایں نشان بھی (ہر) کے دائرے میں لکھیں اور ان کے ساتھ ہی اس

تینہ لکھیں۔

$$-1 < \cos \theta < 1$$

$$|\cos \theta| < 1$$

$$\cos \theta = \left| \frac{1-m}{r} \right| < 1 \Rightarrow \frac{|1-m|}{r} < 1$$

$$\theta = \left( \frac{\pi r}{\lambda} \right)$$

$$\Rightarrow \frac{|1-m|}{r} < 1$$

$$\begin{cases} 1-m < r & \Rightarrow m > -1 \\ -1+m < r & \Rightarrow m < r+1 \end{cases}$$

$$m \in (-1, 0, 1, r, r+1)$$

$$\cos \theta = \frac{1-(-1)}{r} = \frac{1-0}{r} = \frac{1-1}{r} = \frac{1-r}{r}$$

$$\left( \frac{1-r}{r} \right)$$

$$\cos \theta = (1, 1/r, 0, -1/r, -1)$$

$$\theta = (0, \pi/r, \pi/r, (\pi - \pi/r), \pi)$$

$$\theta < \frac{\pi r}{\lambda}$$

$$\frac{\pi r}{\lambda} = \frac{\pi}{r} \Rightarrow r < \lambda$$

$$\frac{\pi r}{\lambda} = \frac{\pi}{r} \Rightarrow r < \lambda$$

$$\frac{\pi r}{\lambda} = \frac{\pi}{r} \Rightarrow r < \lambda$$

$$\frac{\pi r}{\lambda} = \frac{\pi}{r} \Rightarrow r < \lambda$$



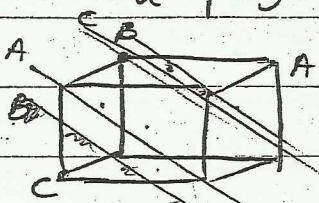


$AX = \frac{1}{3} AY = \frac{1}{3} a \cdot \frac{1}{2} = \frac{a}{6}$

$\rightarrow AZ^2 = AX^2 + ZX^2 \rightarrow a^2 = a^2/3 + c^2/4$

$c^2/a^2 = 8/3 \rightarrow c/a = \sqrt{8/3} \rightarrow c = \sqrt{8/3} a$

$c/a \text{ in } \rightarrow c/a = \sqrt{8/3}$



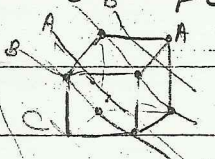
$AB^2 = a^2 + a^2 = 2a^2$

$AB = 4r$

$16r^2 = 2a^2 \rightarrow a^2 = 8r^2$

$a = 2\sqrt{2} r$

نسبت مساحت مربع به ضلع  $c$  در  $fcc$



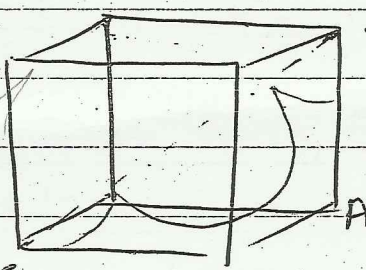
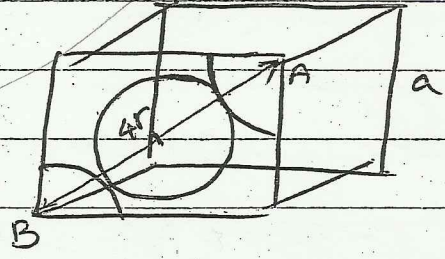
$c = 4r = \frac{2a}{\sqrt{2}} = 2\sqrt{2} a$

محور  $ACA$

$(\frac{a}{2})^2 + a^2 = \frac{5a^2}{4}$

$\frac{5a^2}{4} + \frac{a^2}{4} = \frac{6a^2}{4}$

$c = \sqrt{\frac{6a^2}{4}} = \sqrt{6} \frac{a}{2}$



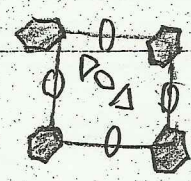
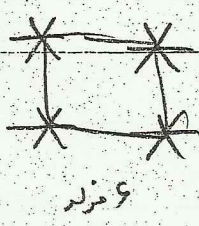
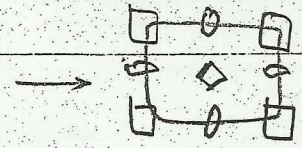
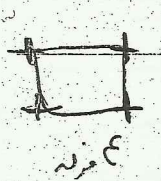
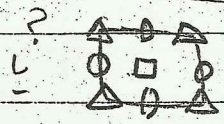
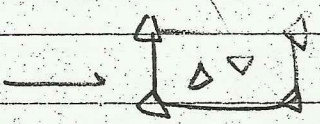
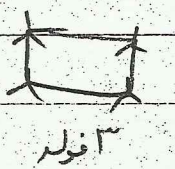
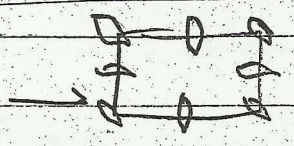
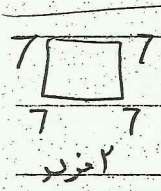
bcc

$(AC)^2 = a^2 + a^2 = 2a^2$

$(FC)^2 = (AC)^2 + (AF)^2 = 2a^2 + a^2 = 3a^2$

$FC = 4r \rightarrow (4r)^2 = 3a^2$

$a = \frac{4r}{\sqrt{3}}, (2r) = \frac{a\sqrt{3}}{2}$



تحقیق کنید شبکه بلوری که می بینید بر روی جدول  $d_{hkl}$  با طرح صورت است

$$\frac{1}{d^2} = \frac{1}{\sin^2 \beta} \left( \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2 \sin^2 \beta}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} - \frac{2hl \cos \beta}{ac} \right)$$

$$\frac{1}{d^2} = \frac{1}{r^2} (S_{11} h^2 + S_{22} k^2 + S_{33} l^2 + 2S_{12} hk + 2S_{13} hl + 2S_{23} kl)$$

که در آنجا  $a, b, c$  طول یازاد  $\alpha, \beta, \gamma$  زاویه بین آنها است

تقریب کنید صفت هم ارز خود را بنویسید؟

صفحه اول اندیس های Miller  $hkl$  متناظره بردار شبکه را درون  $ka_1 + kb_2 + lc_3$  است که

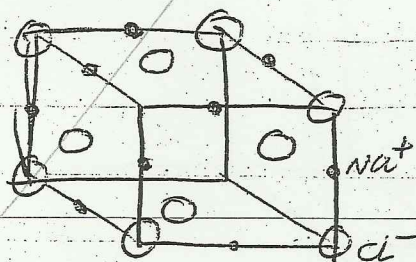
این بردار، بردار منتهی الیه است بنابراین مختصات آن از مختصات یک بردار منتهی الیه است.  $h, k, l$  مختصات هم ارز است.

آیا  $NaCl$  دارای شبکه بلوری است؟ اگر این شبکه بلوری چیست؟ آیا این شبکه ساده

شده یا نه؟  $NaCl$  و  $FCC$  هم مختصات یک است  $Na$  و یک است  $Cl$  است که با هم در یک صفت یکدیگر هستند و در هر دو یک یک  $NaCl$  وجود دارد در هر دو است؟ صورت بر اینست:

$$Cl \left( 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) \left( \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \right) \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0 \right) (0, 0, 0)$$

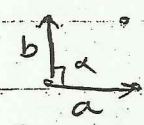
$$Na \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) \left( 0, 0, \frac{1}{2} \right) \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0 \right) \left( \frac{1}{2}, 0, 0 \right)$$



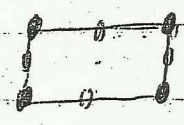
حاصل داریم 4  $Na$  و 4  $Cl$  در هر یک از این واحدها  
 در این محور هر دو یک  $NaCl$  است  
 ساده است.

5

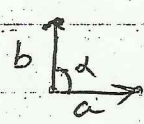
ل



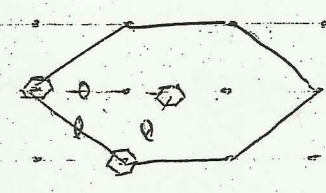
مستطیل  $|a| \neq |b|$   $\alpha = 90^\circ$   
2mm



$\alpha = \pi$   $n = 2$   
مستطیل 2mm



$|a| = |b|$   $\alpha = 120^\circ$   
هندسه مثلث

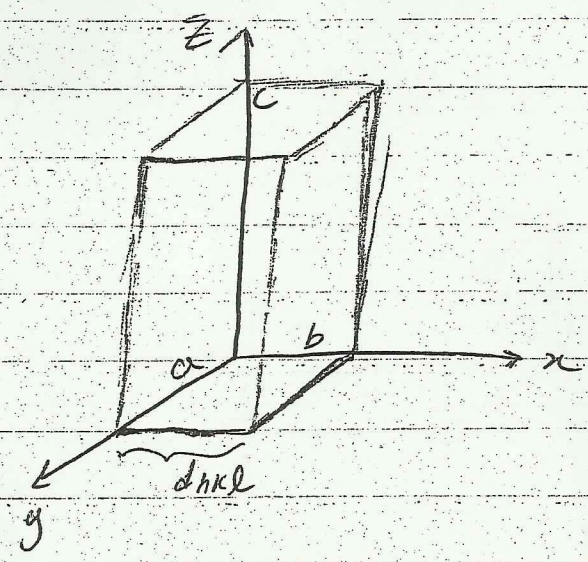


9mm

$G = h_1 a_1^* + h_2 a_2^* + h_3 a_3^*$   $\checkmark$  مستطیل

$G = n_1 a_1^* + n_2 a_2^* + n_3 a_3^*$   $\checkmark$  مستطیل

$\vec{a} = a \vec{j}$   
 $\vec{b} = b \vec{i}$   
 $\vec{c} = c \vec{k}$

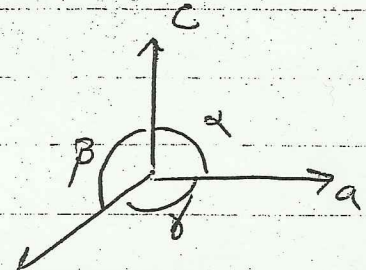




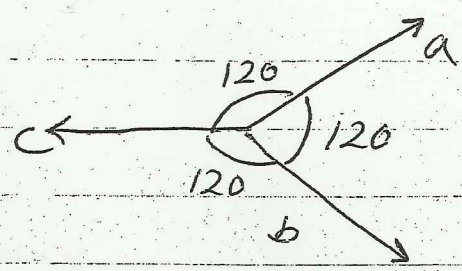
۴  
 P  
 ۱۲.  $a = b = c$   $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$

اگر  $a = b = c$  و  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$  بود، متعلق به مکعب است.

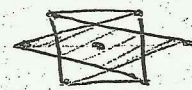
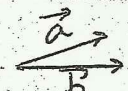
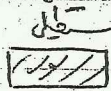
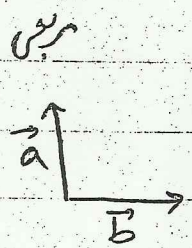
$\vec{a} \cdot \vec{b} = ab \cos \alpha$   $b = a = c = 90^\circ$   
 $\vec{a} \cdot \vec{c} = ac \cos \alpha$   
 $\vec{b} \cdot \vec{c} = bc \cos \beta$   
 $\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1$



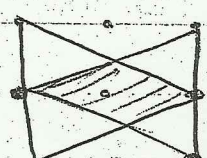
اگر  $a = b = c$  و  $\alpha = \beta = \gamma = 120^\circ$  بود، متعلق به مثلث منفرجه است.



\* بردارهای متساوی‌الطول و متساوی‌الزاویه

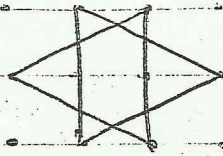
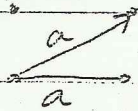


لوزی



مستطیل یونیزدار

خیزش



\* خیزش در جهت  $k'$  است

$$a \cdot G = 2\pi n$$

$$a(k - k') = 2\pi n$$

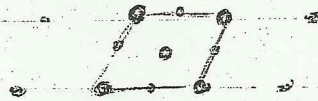
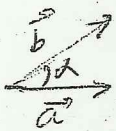
$$ak' - ak = 2\pi n$$

$$ak' = 2\pi n + ka \cos \theta$$

$$(2kG + G^2 = 0) \times \frac{1}{4} \Rightarrow \frac{k \cdot G}{2} + \frac{G^2}{4} = 0$$

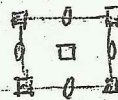
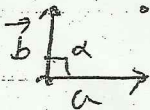
$$\frac{k \cdot G \cos \theta}{2} + \frac{G^2}{4} = 0 \Rightarrow \boxed{k \cos \theta = \frac{G}{2}}$$

\*  $n=2$  است و  $\theta = \pi/2$



$$|a| \neq |b| \quad \alpha \neq 90$$

$$\theta = \pi \quad \frac{2\pi}{\theta} = n \Rightarrow n=2$$



$$|a| = |b| \quad \alpha = 90$$

$$\theta = \pi/2 \Rightarrow n=4 \quad \text{Fmm}$$

\* مسائل 1 و 2 ← مثال 5-1 را بسین و مسائل 2 را با توجه به آن حل کن

\* مسئله 7 ← 5 ← 2-5 " " " 5 " " " 5

352 نموده سوال زیری مطرح آخر ابوابی 1

343 سوال 5 =  $\int \frac{du}{(a^2+u^2)^{3/2}}$  انتگرالی را در کتابی و در صورت سوال 5

سوال 5 سمت ب را نوشته است

مسئله  $\frac{l-2}{(a^2+(l-2)^2)^{1/2}}$  سمت ب

\* مسائل 4-5 در کتاب حلشون را بنویس بر این حل مسئله I

سوال 8 این سمت آخری را تفهیم خطور شد. به طریقی  $A_2$  جلوه  $\eta = \frac{10-l}{4\pi}$  در است و فصل 3 را خوب بخوان بدان سوال را حل کن

12  $Y_{2m}(0,0) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-1)!}{4\pi(2l+1)!}} P_0^l(\cos 0)$

سوال 10 را 11، 12، 13 را در جزوه این فصل و بخوان

فصل 1 ← به رابطه 2-2 مراجعه کرده و در این حل بنویس

سوال 10 سمت ج مانده است  $\frac{1}{1} \frac{1}{1} \frac{1}{1}$  سمت

8 راهم خواند " " " " " " " " " " " "

فصل 4 سوال 1 سمت ب مع و ج ← محمد یادگیر

۱- الف) ثابت کنید که بردارهای بسط شبکه وارون که با (۳-۵) تعریف شدند در رابطه زیر

صدق می کنند

$$\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \quad (15-5)$$

(راهنمایی:  $\mathbf{b}_1$  (و نه  $\mathbf{b}_2$  و  $\mathbf{b}_3$ ) را برحسب  $\mathbf{a}_i$  ها بنویسید و از رابطه های راست هنجاری (۴-۵) استفاده کنید.)

(ب) فرض کنید که بردارهای بسط به همان روشی (معادله (۳-۵)) که  $\mathbf{b}_i$  ها از  $\mathbf{a}_i$  ها ساخته شدند از  $\mathbf{b}_i$  ها ساخته شوند. ثابت کنید که این بردارها دقیقاً خود  $\mathbf{a}_i$  ها هستند، یعنی نشان دهید که:

$$2\pi \frac{\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3}{\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3)} = \mathbf{a}_1 \quad \text{الی آخر،} \quad (16-5)$$

(راهنمایی:  $\mathbf{b}_3$  (و نه  $\mathbf{b}_2$ ) در مخرج را برحسب  $\mathbf{a}_i$  ها نوشته و از اتحاد برداری  $\mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = \mathbf{B}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) - \mathbf{C}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})$  استفاده کرده و روابط راست هنجاری (۴-۵) و (۱۵-۵) را به کار برید.)

(پ) ثابت کنید که حجم یک یاخته بسط شبکه براوه چنین است

$$V = |\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)| \quad (17-5)$$

**جدول ۴. چگالی و تراکم اتمی عناصر.**

این داده‌ها برای فشار جو و دمای اتاق داده شده‌اند و در غیر این صورت دما بر حسب کلویین بیان شده است. (ساختارهای بلوری مانند جدول ۳ است.)

|  |                            |                             |                             |                             |                             |                             |                             |                             |                             |                             |                                 |                             |                             |                            |                            |                            |                               |                             |                            |                             |                               |                             |    |    |    |    |    |    |    |    |
|--|----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|---------------------------------|-----------------------------|-----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|-------------------------------|-----------------------------|----------------------------|-----------------------------|-------------------------------|-----------------------------|----|----|----|----|----|----|----|----|
| H 4K<br>0.088  |                            |                             |                             |                             |                             |                             |                             |                             |                             |                             |                                 |                             |                             |                            |                            |                            | He 2K<br>0.205<br>(at 37 atm) |                             |                            |                             |                               |                             |    |    |    |    |    |    |    |    |
| Li 78K<br>0.542<br>4.700<br>3.023  | Be<br>1.82<br>12.1<br>2.22 |                             |                             |                             |                             |                             |                             |                             |                             |                             |                                 |                             |                             |                            |                            | B<br>2.47<br>13.0          | C<br>3.516<br>17.6<br>1.54    | N 20K<br>1.03               | O                          | F                           | Ne 4K<br>1.51<br>4.36<br>3.16 |                             |    |    |    |    |    |    |    |    |
| Na 5K<br>1.013<br>2.652<br>3.659   | Mg<br>1.74<br>4.30<br>3.20 |                             |                             |                             |                             |                             |                             |                             |                             |                             |                                 |                             |                             |                            |                            | Al<br>2.70<br>6.02<br>2.86 | Si<br>2.33<br>5.00<br>2.35    | P                           | S                          | Cl 93K<br>2.03<br>2.02      | Ar 4K<br>1.77<br>2.66<br>3.76 |                             |    |    |    |    |    |    |    |    |
| چگالی بر حسب $\text{gcm}^{-3}$ ، $(10^3 \text{kgm}^{-3})$ ←<br>تراکم بر حسب $10^{22} \text{cm}^{-3}$ ، $(10^{28} \text{m}^{-3})$ ←<br>فاصله همسایه اول بر حسب $(10^{-10} \text{m}) \text{Å}$ ← |                            |                             |                             |                             |                             |                             |                             |                             |                             |                             |                                 |                             |                             |                            |                            |                            |                               |                             |                            |                             |                               |                             |    |    |    |    |    |    |    |    |
| K 5K<br>0.910<br>1.402<br>4.525  | Ca<br>1.53<br>2.30<br>3.95 | Sc<br>2.99<br>4.27<br>3.25  | Ti<br>4.51<br>5.66<br>2.89  | V<br>6.09<br>7.22<br>2.62   | Cr<br>7.19<br>8.33<br>2.50  | Mn<br>7.47<br>8.18<br>2.24  | Fe<br>7.87<br>8.50<br>2.48  | Co<br>8.9<br>8.97<br>2.50   | Ni<br>8.91<br>9.14<br>2.49  | Cu<br>8.93<br>8.45<br>2.56  | Zn<br>7.13<br>6.55<br>2.66      | Ga<br>5.91<br>5.10<br>2.44  | Ge<br>5.32<br>4.42<br>2.45  | As<br>5.77<br>4.65<br>3.16 | Se<br>4.81<br>3.67<br>2.32 | Br 123K<br>4.05<br>2.36    | Kr 4K<br>3.09<br>2.17<br>4.00 |                             |                            |                             |                               |                             |    |    |    |    |    |    |    |    |
| Rb 5K<br>1.629<br>1.148<br>4.837   | Sr<br>2.58<br>1.78<br>4.30 | Y<br>4.48<br>3.02<br>3.55   | Zr<br>6.51<br>4.29<br>3.17  | Nb<br>8.58<br>5.56<br>2.86  | Mo<br>10.22<br>6.42<br>2.72 | Tc<br>11.50<br>7.04<br>2.71 | Ru<br>12.36<br>7.36<br>2.65 | Rh<br>12.42<br>7.26<br>2.69 | Pd<br>12.00<br>6.80<br>2.75 | Ag<br>10.50<br>5.85<br>2.89 | Cd<br>8.65<br>4.64<br>2.98      | In<br>7.29<br>3.83<br>3.25  | Sn<br>5.76<br>2.91<br>2.81  | Sb<br>6.69<br>3.31<br>2.91 | Te<br>6.25<br>2.94<br>2.86 | I<br>4.95<br>2.36<br>3.54  | Xe 4K<br>3.78<br>1.64<br>4.34 |                             |                            |                             |                               |                             |    |    |    |    |    |    |    |    |
| Cs 5K<br>1.997<br>0.905<br>5.235   | Ba<br>3.59<br>1.60<br>4.35 | La<br>6.17<br>2.70<br>3.73  | Hf<br>13.20<br>4.52<br>3.13 | Ta<br>16.66<br>5.55<br>2.86 | W<br>19.25<br>6.30<br>2.74  | Re<br>21.03<br>6.80<br>2.74 | Os<br>22.58<br>7.14<br>2.68 | Ir<br>22.55<br>7.06<br>2.71 | Pt<br>21.47<br>6.62<br>2.77 | Au<br>19.28<br>5.90<br>2.88 | Hg 227<br>14.26<br>4.26<br>3.01 | Tl<br>11.87<br>3.50<br>3.46 | Pb<br>11.34<br>3.30<br>3.50 | Bi<br>9.80<br>2.82<br>3.07 | Po<br>9.31<br>2.67<br>3.34 | At                         | Rn                            |                             |                            |                             |                               |                             |    |    |    |    |    |    |    |    |
| Fr   | Ra                         | Ac<br>10.07<br>2.66<br>3.76 | Ce<br>6.77<br>2.91<br>3.65  | Pr<br>6.78<br>2.92<br>3.63  | Nd<br>7.00<br>2.93<br>3.66  | Pm                          | Sm<br>7.54<br>3.03<br>3.59  | Eu<br>5.25<br>2.04<br>3.96  | Gd<br>7.89<br>3.02<br>3.58  | Tb<br>8.27<br>3.22<br>3.52  | Dy<br>8.53<br>3.17<br>3.51      | Ho<br>8.80<br>3.22<br>3.49  | Er<br>9.04<br>3.26<br>3.47  | Tm<br>9.32<br>3.32<br>3.54 | Yb<br>6.97<br>3.02<br>3.88 | Lu<br>9.84<br>3.39<br>3.43 | Th<br>11.72<br>3.04<br>3.60   | Pa<br>15.37<br>4.01<br>3.21 | U<br>19.05<br>4.80<br>2.75 | Np<br>20.45<br>5.20<br>2.62 | Pu<br>19.81<br>4.26<br>3.1    | Am<br>11.87<br>2.96<br>3.61 | Cm | Bk | Cf | Es | Fm | Md | No | Lr |

**جدول ۳. ساختار بلوری عناصر.**

این داده‌ها برای متداولترین شکلها در دمای اتاق داده شده‌اند و در غیر این صورت دما بر حسب کلویین بیان شده است. برای کسب اطلاعات بیشتر در مورد عناصر به فصل ۲ از جلد ۱ کتاب وایسکف مراجعه کنید، ساختارهایی که با کلمه Complex مشخص شده‌اند در این کتاب شرح داده شده‌اند. نماد ABAC مربوط به دنباله صفحات تنگ پکیده است.

|   |                           |                            |                           |                            |                    |                           |                           |                           |                           |                           |                           |                             |                           |                           |                      |                                     |   |   |                                   |                                     |                      |                            |    |    |    |    |    |    |    |    |
|---|---------------------------|----------------------------|---------------------------|----------------------------|--------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|-----------------------------|---------------------------|---------------------------|----------------------|-------------------------------------|---|---|-----------------------------------|-------------------------------------|----------------------|----------------------------|----|----|----|----|----|----|----|----|
| H <sup>1</sup> 4K<br>hcp<br>3.75<br>6.12                              |                           |                            |                           |                            |                    |                           |                           |                           |                           |                           |                           |                             |                           |                           |                      |                                     | He <sup>4</sup> 2K<br>hcp<br>3.57<br>5.83 |   |                                   |                                     |                      |                            |    |    |    |    |    |    |    |    |
| Li 78K<br>bcc<br>3.491  | Be<br>hcp<br>2.27<br>3.59 |                            |                           |                            |                    |                           |                           |                           |                           |                           |                           |                             |                           |                           |                      | B<br>rhomb.<br>3.567                | C<br>diamond<br>5.66<br>(N <sub>2</sub> ) | N 20K<br>cubic<br>5.66<br>(O <sub>2</sub> ) | O<br>complex<br>(O <sub>2</sub> ) | F                                   | Ne<br>fcc<br>4.46    |                            |    |    |    |    |    |    |    |    |
| Na 5K<br>bcc<br>4.225   | Mg<br>hcp<br>3.21<br>5.21 |                            |                           |                            |                    |                           |                           |                           |                           |                           |                           |                             |                           |                           |                      | Al<br>fcc<br>4.05                   | Si<br>diamond<br>5.430                    | P<br>complex                                | S<br>complex                      | Cl<br>complex<br>(Cl <sub>2</sub> ) | Ar 4K<br>fcc<br>5.31 |                            |    |    |    |    |    |    |    |    |
| ساختار بلور، پارامتر a شبکه، بر حسب Å ←<br>پارامتر c شبکه، بر حسب Å ← |                           |                            |                           |                            |                    |                           |                           |                           |                           |                           |                           |                             |                           |                           |                      |                                     |   |   |                                   |                                     |                      |                            |    |    |    |    |    |    |    |    |
| K 5K<br>bcc<br>5.225  | Ca<br>fcc<br>5.58         | Sc<br>hcp<br>3.31<br>5.27  | Ti<br>hcp<br>2.95<br>4.68 | V<br>bcc<br>3.03           | Cr<br>bcc<br>2.88  | Mn<br>cubic<br>complex    | Fe<br>bcc<br>2.87         | Co<br>hcp<br>2.51<br>4.07 | Ni<br>fcc<br>3.52         | Cu<br>fcc<br>3.61         | Zn<br>hcp<br>2.66<br>4.95 | Ga<br>complex               | Ge<br>diamond<br>5.658    | As<br>rhomb.              | Se<br>hex.<br>chains | Br<br>complex<br>(Br <sub>2</sub> ) | Kr 4K<br>fcc<br>5.64                      |   |                                   |                                     |                      |                            |    |    |    |    |    |    |    |    |
| Rb 5K<br>bcc<br>5.585   | Sr<br>fcc<br>6.08         | Y<br>hcp<br>3.65<br>5.73   | Zr<br>hcp<br>3.23<br>5.15 | Nb<br>bcc<br>3.30          | Mo<br>bcc<br>3.15  | Tc<br>hcp<br>2.74<br>4.40 | Ru<br>hcp<br>2.71<br>4.28 | Rh<br>fcc<br>3.80         | Pd<br>fcc<br>3.89         | Ag<br>fcc<br>4.09         | Cd<br>hcp<br>2.98<br>5.62 | In<br>tetr.<br>3.25<br>4.95 | Sn (α)<br>diamond<br>6.49 | Sb<br>rhomb.              | Te<br>hex.<br>chains | I<br>complex<br>(I <sub>2</sub> )   | Xe 4K<br>fcc<br>6.13                      |   |                                   |                                     |                      |                            |    |    |    |    |    |    |    |    |
| Cs 5K<br>bcc<br>6.045   | Ba<br>bcc<br>5.02         | La<br>hex.<br>3.77<br>ABAC | Hf<br>hcp<br>3.19<br>5.05 | Ta<br>bcc<br>3.30          | W<br>bcc<br>3.16   | Re<br>hcp<br>2.76<br>4.46 | Os<br>hcp<br>2.74<br>4.32 | Ir<br>fcc<br>3.84         | Pt<br>fcc<br>3.92         | Au<br>fcc<br>4.08         | Hg<br>rhomb.              | Tl<br>hcp<br>3.46<br>5.52   | Pb<br>fcc<br>4.95         | Bi<br>rhomb.              | Po<br>sc<br>3.34     | At                                  | Rn  |   |                                   |                                     |                      |                            |    |    |    |    |    |    |    |    |
| Fr  | Ra                        | Ac<br>fcc<br>5.31          | Ce<br>fcc<br>5.16         | Pr<br>hex.<br>3.67<br>ABAC | Nd<br>hex.<br>3.66 | Pm                        | Sm<br>complex             | Eu<br>bcc<br>4.58         | Gd<br>hcp<br>3.63<br>5.78 | Tb<br>hcp<br>3.60<br>5.70 | Dy<br>hcp<br>3.59<br>5.65 | Ho<br>hcp<br>3.58<br>5.62   | Er<br>hcp<br>3.56<br>5.59 | Tm<br>hcp<br>3.54<br>5.56 | Yb<br>fcc<br>5.48    | Lu<br>hcp<br>3.50<br>5.55           | Th<br>fcc<br>5.08                         | Pa<br>tetr.<br>3.92<br>3.24                 | U<br>complex                      | Np<br>complex                       | Pu<br>complex        | Am<br>hex.<br>3.64<br>ABAC | Cm | Bk | Cf | Es | Fm | Md | No | Lr |



انٹی ٹرنز و لائیو  
آن

$$\epsilon = \frac{h^2}{3.M_n \lambda^2}$$

$$M_n = 1.675 \times 10^{-24} \text{ gr}$$

Com

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

$$\epsilon = \frac{p^2}{2m}$$

انٹرا سٹرا سٹریکشن

$$\lambda (\text{Å}) \approx \frac{0.28}{(\epsilon(\text{eV}))^{1/2}}$$

نوٹرز: - (1) گستا در مقاطبی خود می تواند با  $\epsilon$  های مقاطبی یک جا در  $\epsilon$  گستا داشته باشد. در این صورت می تواند (در پی ساختاری پیوسته مقاطبی با  $\epsilon$  گستا نیز در مول (غیر مقاطبی) و نوٹرز فقط با جهت های امری متشکل بر حجم گستا می کنند.

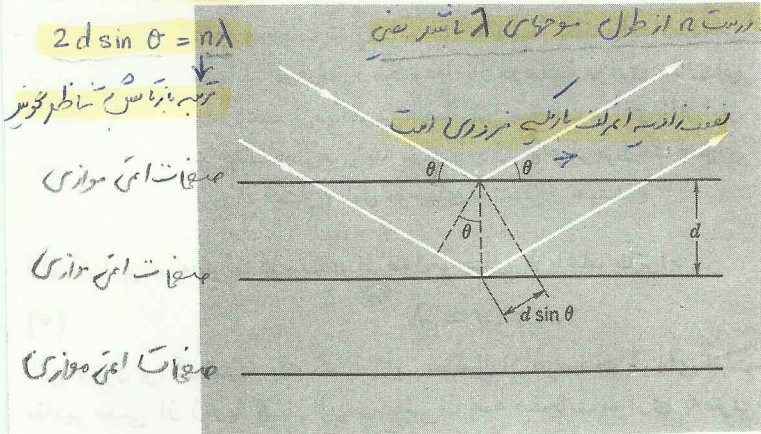




برآگ توضیح ساده‌ای در مورد باریکه‌های پراشیده از یک بلور ارائه کرد. فرض کنید که امواج فرودی توسط صفحات اتمی موازی در بلور بازتاب آینه‌ای ۲ بیابند، به گونه‌ای که هر صفحه، مانند آینه‌ای که کمی نقره اندود شده باشد، فقط بخش خیلی کوچکی از پرتوها را بازتاب دهد. همان‌طور که در شکل ۳ نشان داده شده است، وقتی بازتاب‌های ناشی از صفحات اتمی موازی به‌طور سازنده تداخل کنند، باریکه‌های پراشیده به‌وجود می‌آیند. در اینجا پراکندگی کشسان، که در آن انرژی پرتو در اثر بازتاب تغییر نمی‌کند، را مورد بررسی قرار می‌دهیم. پراکندگی ناکشسان، که با برانگیختگی امواج کشسان همراه است، در آخر این فصل بحث خواهد شد.

صفحات موازی از شبکه را که به فاصله  $d$  از یکدیگر قرار دارند در نظر می‌گیریم، تابش در صفحه کاغذ فرود می‌آید. اختلاف راه پرتوهایی که از دو صفحه متوالی بازتاب می‌یابند برابر  $2d \sin \theta$  است، که در آن  $\theta$  زاویه پرتو فرودی با صفحه است. تابش حاصل از صفحات متوالی هنگامی بایکدیگر تداخل سازنده می‌کنند که اختلاف

$$2d \sin \theta = n\lambda$$



شکل ۳. به دست آوردن معادله برآگ،  $2d \sin \theta = n\lambda$ ؛ در اینجا  $d$  فاصله بین صفحات اتمی موازی است و اختلاف فاز بین بازتاب‌های ناشی از صفحات متوالی برابر  $2\pi n$  است. صفحات بازتابنده هیچ ارتباطی با سطوح خارجی نمونه ندارند.

ولی فقط برای تابش پرتوهای از بازتاب‌های  
 نامی (از هم صفحات موازی با طور هم‌فاز با  
 یکدیگر جمع می‌شوند و یک باریکه‌ی بازتابی  
 قوی ایجاد می‌کنند البته اگر هر صفحه‌ای بازتابنده  
 کامل می‌بود، فقط تقسیمی منور از  
 مجموعی از صفحات موازی تابش را می‌دید  
 هر طول موجی بازتاب می‌یافت. ولی هر منور  
 گسری برابر با  $10^{-3}$  تا  $10^{-5}$  از پرتو تابشی  
 نور را بازتاب می‌دهد.

قانون برگ نتیجه‌ای از دو اصل بودن شبکه است. این قانون - آراسن استرل (ریا) به واسطه با هر فضای شبکه مربوط می‌شود

این

ترکیب پرتوهای مختلف نامی از مجموعی صفحات موازی را تقسیم می‌کنند.

بازتاب برآگ فقط برای طول موجی  $2d \ll \lambda$  رخ می‌دهد. به همین دلیل است که من توان از نور مرئی استفاده کرد.

برای باریکی این از پرتوهای با باندته‌های از طول موج نامی مختلف (نامی سفید) بازتاب‌های متفاوتی می‌دهد. به همین دلیل است که

بازتاب‌های مرتبه بالاتری از یک مجموعی صفحات شبکه درآینه بشیم، بلکه باید سطحی درصم که راه‌های متفاوتی برای تابش یک

بلور - صفحات زوج درآورد که هر کدام بازتاب دیگر مجموعی به خود را اولتر می‌کنند.

به دست آوردن رابطه‌ای برای دامنه موج پراکنده شده

روشی که برای به دست آوردن شرط پراش به کار برد گزاره روشن و صریحی در مورد شرط تداخل سازنده امواجی که توسط بارهای نقطه‌ای واقع در نقاط شبکه پراکنده می‌شوند ارائه می‌دهد. برای تعیین شدت پراکنده‌گی ناشی از یک توزیع فضایی الکترونها در داخل هر یاخته، باید بررسی عمیقتری انجام شود.

در معادله (۲.۱) دیدیم که بلور تحت اثر هر انتقالی به صورت  $T = ua + vb + wc$  ناورداست،  $u$  و  $v$  و  $w$  اعداد درستند و  $a$  و  $b$  و  $c$  محوره‌های بلورند. هر ویژگی فیزیکی بلور تحت تأثیر  $T$  ناورداست. تراکم بارها، چگالی تعداد الکترونها، چگالی جرم و چگالی گشتاور مغناطیسی تحت اثر همه انتقالهای  $T$  ناوردا هستند. بنا بر این، چگالی تعداد الکترونها،  $n(\mathbf{r})$ ، یک تابع دوره‌ای از  $\mathbf{r}$  با دوره‌های  $a$  و  $b$  و  $c$  در امتداد سه محور بلور است، در این صورت:  $n(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = n(\mathbf{r})$ .

تحلیل فوریته: سه سری بسط فوریته

بیشتر ویژگیهای بلور را می‌توان به مؤلفه‌های فوریته چگالی الکترونها مربوط کرد. دوره‌های بودن درسه بعد هیچ مشکل ریاضی ایجاد نمی‌کند، ولی ابتدا تابع یک بعدی  $n(x)$  با دوره  $a$  را در نظر می‌گیریم. این تابع را بر حسب یک رشته سینوسی و کسینوسی فوریته بسط

$$n(x) = n_c + \sum_{p>0} [C_p \cos\left(\frac{2\pi px}{a}\right) + S_p \sin\left(\frac{2\pi px}{a}\right)] \quad (5)$$

که در آن  $p$  ها اعداد درست و مثبت و  $S_p$  و  $C_p$  ثابتهای حقیقی اند و ضرایب بسط فوریته نامیده می‌شوند. فاکتور  $2\pi/a$  در شناسه‌ها تضمین می‌کند که دوره  $n(x)$  برابر با  $a$  باشد

$$n(x+a) = n_c + \sum [C_p \cos(2\pi px/a + 2\pi p) + S_p \sin(2\pi px/a + 2\pi p)] \\ = n_c + \sum [C_p \cos(2\pi px/a) + S_p \sin(2\pi px/a)] = n(x) \quad (6)$$

$2\pi p/a$  را نقطه‌ای در شبکه وارون یا فضای فوریته بلور می‌گویند. در فضای یک بعدی این نقاط بر روی یک خط قرار می‌گیرند. نقاط شبکه وارون، جمله‌های مجاز در رشته فوریته (۵) را به ما می‌دهند. همان گونه که در شکل ۱۲ نشان داده شده است، یک جمله به شرطی مجاز است که با دوره‌های بودن بلور سازگار باشد؛ بقیه نقاط فضای وارون، در بسط فوریته یک تابع دوره‌ای، مجاز نیستند.

نوشتن رشته (۵) به شکل فشرده زیر بسیار مناسب است

$$n(x) = \sum_p n_p e^{i2\pi px/a} \quad (7)$$

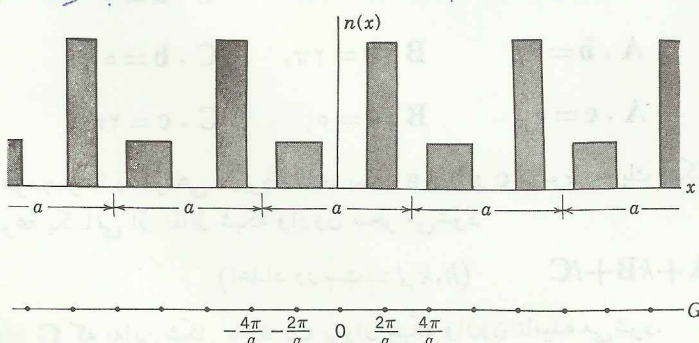
که در آن جمع بر روی تمام اعداد درست  $p$  اعم از مثبت، منفی و صفر است. در اینجا ضرایب  $n_p$  اعداد مختلطند. برای آنکه حقیقی بودن تابع  $n(x)$  تضمین شود، لازم است

$$n_{-p}^* = n_p \quad (8)$$

زیرا، در این صورت حاصل جمع جمله‌های مربوط به  $p$  و  $-p$  حقیقی خواهد بود. با گزینش  $\varphi \equiv 2\pi px/a$ ، این حاصل جمع عبارت است از

$$n_p(\cos \varphi + i \sin \varphi) + n_{-p}(\cos \varphi - i \sin \varphi) \\ = (n_p + n_{-p}) \cos \varphi + i(n_p - n_{-p}) \sin \varphi \quad (9)$$

شکل ۱۲: خورزانی منحنی فضا بردارهای ۸ صحنه‌ای، و بسط حقیقی در برابر است



شکل ۱۲. یک تابع دوره‌ای،  $n(x)$ ، با دوره  $a$  و جملات  $2\pi p/a$  که ممکن است در تبدیل فوریته  $n(x) = \sum n_p \exp(i2\pi px/a)$  ظاهر شوند. مقادیر جمله‌های مجزای  $n_p$  ترسیم نشده‌اند.

$$\rightarrow n(r+T) = n(r)$$

$$T = a$$

$$n(x+a) = n(x)$$

$$\rightarrow 2 \operatorname{Re} \{ n_p \} \cos \varphi + 2 \operatorname{Im} \{ n_p \} \sin \varphi$$

حال مجموعی از بردارهای  $G$  را بگردانیم

$$n(\mathbf{r}) = \sum_G n_G e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}$$

تحت اثر تمام انتقالهای شبکه  $T$  که بلور را ناوردا می‌کند

می‌توانیم، ناوردا جانند. معادله ضریب فوریته تراکم الکترونها

چرا دانسته پراکنده‌گی کسینوس بر تو  $x$  از یک ساختار را

تقسیم می‌کند

### تحليل فوریه پایه

هنگامی که شرط پراش  $\Delta \mathbf{k} = \mathbf{G}$  ارضاء شود، دامنه پراکندگی با رابطه (۱۷) تعیین می شود، که می توان آنرا برای بلوری با  $N$  یاخته به صورت زیر نوشت

$$a_{\mathbf{G}} = N \int_{\text{یاخته}} dV n(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) = N \delta_{\mathbf{G}} \quad (40)$$

کمیت  $\delta_{\mathbf{G}}$  عامل ساختار نامیده می شود و به صورت انتگرالی روی تک یاخته ای که  $\mathbf{r} = \mathbf{0}$

در یک گوشه آن واقع است تعریف می شود. معمولاً بهتر است که تراکم الکترونی را به صورت برهم نهی توابع تراکم الکترونی  $n_j$ ، مربوط به اتم  $j$  در یاخته، بنویسیم. اگر مرکز اتم  $j$  را با بردار  $\mathbf{r}_j$  نشان دهیم، سهم این اتم در تراکم الکترونی در نقطه  $\mathbf{r}$  با تابع  $n_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$  تعریف می شود. تراکم کل مربوط به همه اتمهای یاخته در  $\mathbf{r}$  برابر با مجموع

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^s n_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \quad (41)$$

بر روی  $s$  اتم موجود در پایه است. از آنجا که همیشه نمی توان گفت که چقدر بار به هر اتم وابسته است، تجزیه  $n(\mathbf{r})$  به صورت فوق یکتا نیست. این موضوع مشکل مهمی نیست. اکنون می توان عامل ساختار را، که با رابطه (۴۰) تعریف می شود، به صورت انتگرالی بر روی  $s$  اتم یک یاخته نوشت

$$\begin{aligned} \delta_{\mathbf{G}} &= \sum_j \int dV n_j(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \\ &= \sum_j \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_j) \int dV n_j(\rho) \exp(-i\mathbf{G} \cdot \rho) \quad (42) \end{aligned}$$

که در آن  $\rho \equiv \mathbf{r} - \mathbf{r}_j$  است. حال عامل شکل اتمی را به طریق زیر تعریف می کنیم

$$f_j = \int dV n_j(\rho) \exp(-i\mathbf{G} \cdot \rho) \quad (43)$$

انتگرال گیری بر روی تمام فضا است. این عامل بیشتر یک ویژگی اتمی است. عامل ساختار پایه به صورت زیر در می آید

$$\delta_{\mathbf{G}} = \sum_j f_j \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_j) \quad (44)$$

شکل معمولی این نتیجه با استفاده از رابطه (۳-۱)،  $\mathbf{r}_j = x_j \mathbf{a} + y_j \mathbf{b} + z_j \mathbf{c}$ ، به دست می آید. بنا بر این برای بازتاب  $hkl$  خواهیم داشت

$$\mathbf{r}_j \cdot \mathbf{G} = (x_j \mathbf{a} + y_j \mathbf{b} + z_j \mathbf{c}) \cdot (h\mathbf{A} + k\mathbf{B} + l\mathbf{C}) = 2\pi(x_j h + y_j k + z_j l) \quad (45)$$

و

$$\delta(hkl) = \sum_j f_j \exp[-i 2\pi(x_j h + y_j k + z_j l)] \quad (46)$$

عامل ساختار لزومی ندارد حقیقی باشد؛ توان پراکندگی به کمیت حقیقی  $f_j^*$  وابسته است، که در آن  $f_j^*$  همیوگ مختلط  $f_j$  است. هنگامی که  $f_j$  صفر باشد، شدت یک بازتاب  $\mathbf{G}$ ،

نسبت به بقیه ضرایب مجاز است و صغیر است عامل ساختار می تواند حقیقی یا کمپلکس باشد

صغیر حقیقی مجاز است. بازتابی صغیر است. بازتابی کمپلکس می تواند

تعریف شبکه وارون: مجموعه‌ای همبند بردار نرم‌های  $K$  که منجر به انجام تحت با دوره‌ی  $n$  یک شبکه‌ی برابره  
 می‌شوند، شبکه وارون آن شبکه نامیده می‌شوند. به طور کلی  $K \subseteq \mathbb{R}^n$  متعلق است به شبکه وارون یک شبکه‌ی

براده از نقاط  $R$ ، بشرطی که رابطه زیر برای هر  $r \in R$  برقرار باشد.  $R$  حاد شبکه براده بردار است.  
 شبکه وارون  $K$  یا  $G$  در نظر بگیرد کتاب  $G$  است (نکته  $K$ )  
 ←  $R$ : مجموعه از نقاط است که یک شبکه براده را می‌سازد و اگر

$$e^{i\theta \cdot (r+R)} = e^{i\theta \cdot r} \quad (1)$$

موج تحت  $e^{ikr}$  را در نظر بگیریم برای یک  $k$  عمومی این موج  
 البته دارای شبکه براده نخواهد بود. می‌توانیم بردارهای  
 ویژه‌ای این امواج را به شکل تعریف ما

اگر فرض  $e^{ikr}$  را از رابطه (1) حذف کنیم شبکه وارون را به صورت مجموعه‌ای از بردار موازی  $K$  در نظر بگیریم

$$e^{i\theta \cdot R} = 1 \quad (2)$$

↓  
نکته 45  
اثبات 46

برای همبندی  $R$ های شبکه‌ی براده صورت می‌گیرد در نظر بگیریم

نکته: هر شبکه وارون با ارجاع به یک شبکه براده‌ی خاص تعریف می‌شود.

نکته: شبکه براده‌ای که یک شبکه‌ی وارون را معلوم می‌کند، در رابطه با وارونش اغلب شبکه‌ی مستقیم نامیده می‌شود.  
 نکته: شبکه وارون یک شبکه براده است. ← اثبات کنید.

اثبات ✓

اگر  $k_1$  و  $k_2$  در رابطه برود صورت کند، به وضوح مجموع در فضا  $\mathbb{R}^n$  می‌شود.  $e^{i\theta \cdot R} = 1$

فرض کنید  $a_1, a_2, a_3$  مجموعه بردارهای بیض شبکه مستقیم باشد در این صورت شبکه وارون را می‌توان با  $b_1, b_2, b_3$  بردار

$$b_1 = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{a_1 \cdot (a_2 \times a_3)}$$

$$b_2 = 2\pi \frac{a_3 \times a_1}{a_2 \cdot (a_2 \times a_3)} \quad (3)$$

$$b_3 = 2\pi \frac{a_1 \times a_2}{a_3 \cdot (a_2 \times a_3)}$$

برای اثبات این بردارهای موازی  $b_1, b_2, b_3$  مجموعه‌ای از بردارهای بیض شبکه وارون را می‌دهد، با توجه به این که  
 $b_i$ ها در رابطه زیر صدق می‌کند

$$b_i \cdot a_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (4)$$

که در آن  $\delta_{ij}$  عددی کم‌تر است.

$$\left. \begin{array}{l} \delta_{ij} = 0 \Rightarrow i \neq j \\ \delta_{ij} = 1 \Rightarrow i = j \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{برای } i \neq j \text{ رابطه (4) برابری هر دو در آنجا عدد است} \\ \text{فاصله هر دو در آنجا عدد است} \\ \text{فاصله هر دو در آنجا عدد است} \end{array}$$

اکنون هر دو را  $k$  را می‌شود به صورت ترکیب خطی  $b_i$  نوشت:

$$k = k_1 b_1 + k_2 b_2 + k_3 b_3 \quad (5)$$

این موضوع برای هر دو برداری که در یک صفحه هستند درست است. اثبات این موضوع نیز ساده است که در یک صفحه باشد  $b_i$  ها هم هستند.

$$R = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3 \quad (7)$$

اگر  $R$  یک بردار شبکه مسطح باشد: آنگاه:

$n_i$  اعداد صحیح

از رابطه 1 نتیجه می‌شود:

$$k.R = 2\pi (k_1 n_1 + k_2 n_2 + k_3 n_3) \quad (8)$$

برای اینکه  $e^{ik.R}$  برای همه  $R$  یک بردار شبکه باشد (مطابق 2) معادله  $k.R$  باید برای هرگز برای اعداد صحیح  $n_i$   $2\pi$  برابر یک عدد صحیح باشد.

لذا لازم است که ضرایب  $k_i$  عدد صحیح باشند. بنابراین شرط (2) برای اینکه  $k$  یک بردار شبکه وارون باشد، این است که ضرایب آن در رابطه 8 از  $2\pi$  یک عدد صحیح باشند. بنابراین شبکه وارون یک شبکه برده است و  $2\pi$  را می‌توان به عنوان برداری بسط در نظر گرفت.

وارون شبکه وارون: از آنجایی که شبکه وارون خود یک شبکه برده است، می‌توان در آن را هم صاف کرد. این وارون چیزی نیست مگر همان

شبکه مسطح اولیه  $\leftarrow$  اثبات کنید.

اثبات  $\leftarrow$  همان رابطه (1) وارون شبکه همچنان از برداری  $G$  است که برای تمام  $K$ های شبکه وارون (در شرط زیر صحت می‌کند).

$$e^{iG.K} = 1 \quad (9)$$

از آنجا که هر بردار شبکه مسطح  $R$  این ویژگی را از (2) دارد، همه بردارهای شبکه مسطح در شبکه وارون

شبکه وارون قرار دارند. علاوه بر این برداری می‌تواند این چنین باشد.

برای اینکه هر برداری که در شبکه می‌توانیم بنویسیم به شکل  $r = x_1 a_1 + x_2 a_2 + x_3 a_3$  بوده و در این صورت

یک پایه غیر مرتب است. برای بیان تعدادی از آن،  $e^{2\pi i x_i} = e^{b_i \cdot r}$  و شرط ⑨ برای

دارد  $K = b_i$  نقص می‌شود.



بردارهای  $\mathbf{G}$  در رشته فوریه (۱۱) بردارهای شبکه واروند، زیرا در این صورت رشته فوریه برای چگالی الکترونها تحت اثر انتقال بلور  $\mathbf{T} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}$  دارای ناوردایی مطلوب خواهد بود

$$n(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = \sum_{\mathbf{G}} n_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}} \quad (۱۴)$$

برای اثبات اینکه  $\exp[i\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}] = 1$ ، با به کار بردن رابطه (۲) به ترتیب زیر عمل می‌کنیم

$$\begin{aligned} \exp[i\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}] &= \exp[i(h\mathbf{A} + k\mathbf{B} + l\mathbf{C}) \cdot (u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c})] \\ &= \exp[2\pi i(hu + kv + lw)] \quad (۱۵) \end{aligned}$$

از آن جا که  $hu + kv + lw$  مجموع حاصل ضربهای اعداد درست است و بنابراین خود یک عدد درست می‌باشد، شناسه تابع نمایی فوق به صورت حاصلضرب  $2\pi i$  در یک عدد درست است. بنابراین  $\exp[i\mathbf{G} \cdot \mathbf{T}] = 1$ ، و با استفاده از رابطه (۱۵) نتیجه می‌شود درست است.  $n(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = \sum_{\mathbf{G}} n_{\mathbf{G}} \exp[i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}] = n(\mathbf{r})$ . این رابطه اثبات اینکه تحلیل فوریه یک تابع دوره‌ای در شبکه بلور می‌تواند فقط شامل مؤلفه‌های  $n_{\mathbf{G}} \exp[i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}]$  باشد را کامل می‌کند، بردارهای  $\mathbf{G}$  شبکه وارون با رابطه  $\mathbf{G} = h\mathbf{A} + k\mathbf{B} + l\mathbf{C}$  تعریف می‌شوند.

### شرایط پراش

قضیه: مجموعه بردارهای شبکه وارون  $\mathbf{G}$ ، بازتابهای ممکن پرتو  $\mathbf{x}$  را تعیین می‌کند. در شکل زیر مشاهده می‌کنیم که اختلاف در ضربهای فازین دو باریکه پراکنده شده از دو عنصر حجم که به فاصله  $\mathbf{r}$  از یکدیگرند برابر با  $\exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}]$  است.  $\mathbf{k}$  و  $\mathbf{k}'$  بردارهای موج باریکه‌های ورودی و خروجی اند. دامنه موج پراکنده شده از هر عنصر حجم با تراکم موضعی الکترونها متناسب است. دامنه کل موج پراکنده شده در جهت  $\mathbf{k}'$  با انتگرال حاصلضرب  $n(\mathbf{r}) dV$  در ضرب فاز  $\exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}]$  روی تمام بلور متناسب است. دامنه پراکندگی با انتگرال زیر تعیین می‌شود

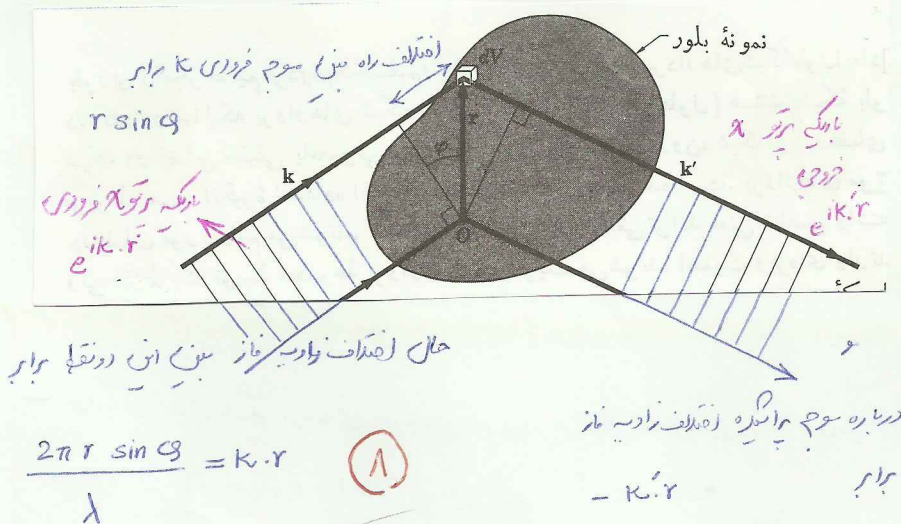
$$\mathbf{a} = \int dV n(\mathbf{r}) \exp(-i\Delta\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (۲)$$

که در آن

$$\mathbf{k} + \Delta\mathbf{k} = \mathbf{k}' \Rightarrow \Delta\mathbf{k} = \mathbf{k} - \mathbf{k}' \quad (۷)$$



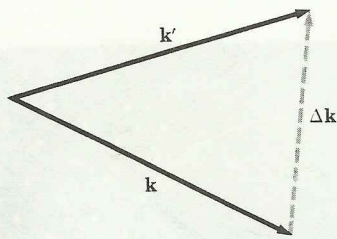
بردار پراکندگی



اختلاف کل در زاویه فاز برابر  $(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}$  است و موج پراکنده شده از  $dV$  در  $\mathbf{r}$  دلائل ضرب فاز  $e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}}$  است. نسبت به موج پراکنده شده از عنصر حجم واقع در مرکز  $O$  است.

در اینجا  $\Delta\mathbf{k}$  تغییر بردار موج را در پراکندگی است در بردار پراکندگی  $\Delta\mathbf{k}$  نام دارد حاصل ضرب موج





شکل ۱۴. تعریف بردار پراکندگی  $\Delta k$  به گونه‌ای که  $k + \Delta k = k'$  در پراکندگی کسان بزرگی بردارهای موج در رابطه  $k' = k$  صدق می‌کند. علاوه بر این، در پراکندگی برآگ از یک شبکه دوره‌ای هر  $\Delta k$  مجاز باید بایک بردار شبکه وارون  $G$  برابر باشد.

اگر  $G$  یک بردار شبکه وارون باشد،  $-G$  نیز برداری از شبکه وارون خواهد بود؛ بنابراین رابطه (۱۳) را می‌توان به صورت  $G = G^2 \cdot k$  نیز نوشت. معادله (۱۳) گزاره دیگری از قانون برآگ است: از مسئله صفحه قبل فاصله  $d(hkl)$  بین صفحات موازی که بر جهت  $G = hA + kB + lC$  عمودند، به صورت  $d(hkl) = 2\pi/|G|$  است. بدین ترتیب، نتیجه  $G = G^2 \cdot k$  را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$2 \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right) \sin \theta = \frac{2\pi}{d(hkl)} \Rightarrow 2 d(hkl) \sin \theta = \lambda \quad (21)$$

و یا  $2 d(hkl) \sin \theta = \lambda$ . در اینجا  $\theta$  زاویه بین باریکه فرودی و صفحه است. اعداد درست  $hkl$  که  $G$  را تعریف می‌کنند، الزاماً با شاخصهای یک صفحه واقعی بلور یکسان نیستند. اعداد درستی که  $G$  را تعریف می‌کنند، ممکن است شامل مقسوم علیه مشترک  $n$  باشند، در حالی که در شاخصهای صفحات، مقسوم علیه مشترک  $n$  حذف شده است. بنابراین، نتیجه برآگ را به دست می‌آوریم

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (22)$$

که در آن  $d$  فاصله بین صفحاتی است که شاخصهایشان  $h/n$ ،  $k/n$  و  $l/n$  است. نتیجه قبلی  $\Delta k = G$  را می‌توان به روش دیگری بیان کرد تا معادلات لاوه به دست آید. دو طرف این رابطه را در  $a$  و  $b$  و  $c$  شبکه بلور ضرب داخلی می‌کنیم و سه شرط لاوه در مورد بردار پراکندگی را به دست می‌آوریم  $\leftarrow$  لازم صفحه بعد.

$$2k \cdot G = G^2$$

$$\Rightarrow 2kG \cos \theta = G^2 \Rightarrow 2k \cos \theta = G$$

$$G = \frac{2\pi}{d(hkl)} \quad (14)$$

$$\Rightarrow 2k \cos \theta = \frac{2\pi}{d(hkl)} \Rightarrow 2 \frac{2\pi}{\lambda} \cos \theta = \frac{2\pi}{d(hkl)}$$

$$2 d(hkl) \cos \theta = \lambda \quad (15) \quad d_{hkl} = \frac{d}{n}$$

$$\Rightarrow 2d \sin \theta = n\lambda \quad (17)$$

برای بردار وارون بردار موج برآگ

شبه  $k$ ،  $\Delta k$  را  $k + \Delta k = k'$  می‌نویسند

مؤلفه‌های فوری  $n(x)$  را در رابطه

6 صفحه قبل قرار می‌دهیم و عبارت

$$a = \int_{(G-\Delta k)} e^{i \cdot r} n_G e^{i \cdot r} \quad (9)$$

برست می‌آوریم.

حتمی که یک بردار پراکندگی  $\Delta k$  یک

بردار شبکه وارون  $G$  برابر باشد، تمام

تابع‌های برابر صفر می‌شود و

$$a = \int n_G \quad (10)$$

برآگ کسان  $hkl$  از  $hkl$

$$w' = ck' \quad \text{برآگ}$$

$$w = ck \quad \text{برآگ}$$

فردی برابر است. بنابراین برآگ  $k$  و  $k'$

$$k^2 = k'^2 \quad \text{با استفاده از صفحه}$$

$$\Delta k = G \quad \underline{1} \quad k + G = k' \quad (11)$$

$$(k+G)^2 = k^2 \quad (12) \quad \text{شرط برآگ صفر}$$

$$2k \cdot G + G^2 = 0 \quad (13)$$

این رابطه نتیجه اصلی در نظر برآگ

کسان در یک شبکه (دوره‌ای است) همین

نتیجه در نظر می‌ماند (اصطلاحاً از روی آنگر)

در بلور پراکندگی می‌آید.

فاصله بین صفحه‌ها - صفحه hkl را در یک شبکه بلوری در نظر بگیرید .

(الف) ثابت کنید که بردار شبکه وارون  $G = hA + kB + IC$  بر این صفحه عمود است .

(ب) ثابت کنید که فاصله بین دو صفحه موازی و متوالی شبکه (صفحه‌هایی که از نقطه‌های شبکه می‌گذرند) برابر است با  $d(hkl) = \frac{2\pi}{|G|}$  ، که در آن  $G = hA + kB + IC$  .

(ج) نشان دهید که در یک شبکه مکعبی ساده  $d^2 = \frac{a^2}{(h^2 + k^2 + l^2)}$  .

حل - یک صفحه بلوری با شاخص‌های Miller ، hkl صفحه‌ای است که با نقطه‌های  $\frac{a}{h}$  ،  $\frac{b}{k}$  و  $\frac{c}{l}$  تعریف می‌شود .

(الف) دو بردار را که در یک صفحه قرار می‌گیرند ممکن است به صورت‌های  $\frac{a}{h} - \frac{b}{k}$  و  $\frac{a}{h} - \frac{c}{l}$  انتخاب کنیم . اما حاصل ضرب نرده‌ای هر کدام از این بردارها با  $G = ha + kb + lc$  صفر است ، در نتیجه G باید بر صفحه hkl عمود باشد .

(ب) اگر  $\hat{n}$  برداریکه عمود بر صفحه باشد ، فاصله بین صفحه‌ها برابر است با  $\hat{n} \cdot \frac{a}{h}$  .

اما می‌دانیم  $\hat{n} = \frac{G}{|G|}$  ، و از آنجا  $d(hkl) = G \cdot \frac{a}{h |G|} = \frac{2\pi}{|G|}$

(ج) برای یک شبکه مکعبی ساده  $G = (\frac{2\pi}{a})(h\hat{x} + k\hat{y} + l\hat{z})$

و از آنجا نتیجه می‌شود :  $\frac{1}{d^2} = \frac{G^2}{4\pi^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$

زمان برخوردی آینه که  $\Delta K = G$  در طرف آن را  $\rightarrow$  شبکه abc بیرون می‌آید (معمولاً کشیم)

$a \cdot \Delta K = 2\pi h$      $b \cdot \Delta K = 2\pi k$      $c \cdot \Delta K = 2\pi l$     (۱۷)    اندازه متوسط - شرط آینه

این معادلات یک تفسیر هندسی واضح دارند . سمت اول یعنی  $a \cdot \Delta K = 2\pi h$  می‌گوید  $\Delta K$  بیرون مخروط معنی حول جهت a

قرار دارد . علاوه بر این  $\Delta K$  باید بیرون مخروطی حول b و ... در فضای 3 بعدی ، برای آنکه بازتابی صورت گیرد ،  $\Delta K$  باید در

3 معادله فوق را ارضا کند . وقتی 3 مخروط فوق هم‌خط - طور تصادفی می‌تواند برخورد واقعی کند و در این برخورد هم باید برای

این 3 معادله باید طول موج و زاویه بلور را به طور مناسب تغییر داد . (در شکل صفحه بعد زودت کنید)

$$2k \sin \theta = n\lambda$$

منعطف

فاز

هضایات فون کاره بران برایش تریو  $n\lambda$  توسط یک بلور

هضایات فون کاره بران این تفاوت را دارد که در آن جمع روشی دومی برای شکست یک بلور - هضایات فون کاره بران برایش تریو  $n\lambda$  توسط یک بلور

سین سین در مورد بازتاب آینه ای منظور نمی شود. در عین حال بلور مسطح از هضایات فون کاره بران برایش تریو  $n\lambda$  توسط یک بلور

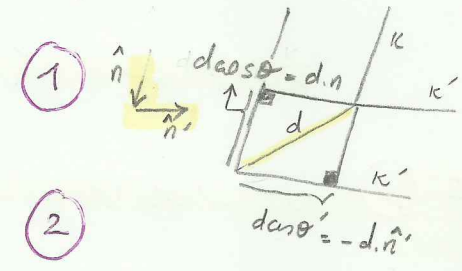
$R$  شبکه براده قرار دارند و هر کدام آن فون کاره بران برایش تریو  $n\lambda$  توسط یک بلور

همه نقاط شبکه با هم تداخل سازنده ایجاد می کنند. برای پیدا کردن شرط برای تداخل سازنده باید در نظر بگیریم که با  $d$  از هم جدا می شوند. فرض

کنیم تریو  $\lambda$  از فون کاره بران برایش تریو  $n\lambda$  توسط یک بلور  $k = \frac{2\pi n}{\lambda}$  و فون کاره بران برایش تریو  $n\lambda$  توسط یک بلور  $k' = \frac{2\pi n'}{\lambda}$  این شرط سازنده

شود که اختلاف راه بین پرتوهای برانسته شده در نتیجه هر کدام از در بین صفر یا مضرب صحیحی از طول موج باشد یعنی شرط تداخل سازنده با

$$d(n - n') = m\lambda$$



$$d \cos \theta + d \cos \theta' = d(n - n')$$

میزان  $1$  در  $\frac{2\pi}{\lambda}$  شرط زیر برای برهم کنش سازنده - صفت می آید  $d \cdot (k - k') = 2\pi m$  (3) ← شرط ساده

در هر یک از این شرایط  $\lambda$  برانسته شده طبق آرایه این از برانسته شده ها دارد جابجایی یک شبکه بر در نظر می گیریم. از آنجایی که جابجایی شبکه با  $R$  از هم جدا می شوند

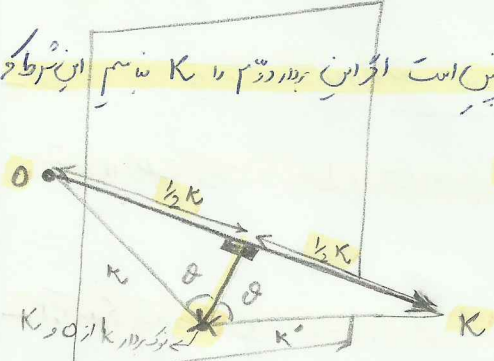
مسئله شرط آن که هر پرتوهای برانسته شده تداخل سازنده ایجاد دهند باید رابطه  $3$  همزمان با هم معادله  $d$  که بر روی شبکه براده انزوا قرار دارند

شرط را در  $e^{i(G \cdot R)} = 1$  شرط ساده  $\Rightarrow e^{i(k - k') \cdot R} = 1$  (4)  $\Rightarrow R \cdot (k - k') = 2\pi m$  (5)

برای هم برداری شبکه براده  $R$  هم برداری شبکه براده  $R$  شرط ساده: اگر مجموع بردار  $k$  و  $k'$  یک بردار  $k$  باشد و  $k$  هم برداری باشد آن گاه  $k$  و  $k'$  هم برداری است.

نتیجه اینکه این شرط (5) تعریف شبکه وارون - شرط ساده می رسم که می نویسیم:  $k - k' = G$  (6)  $k = k' + G$  بردار شبکه وارون باشد  $k - k'$  نیز چنین است اگر این بردار  $G$  با  $k$  هم برداری باشد این شرط  $k$  و  $k'$  نیز یکی یکی داشته اند چنین است:

شرط ساده → تداخل سازنده زمانی رخ می دهد که منصف بردار سوم  $k = k' + G$  (6)  $k = k' + G$  برابر با بردار شبکه وارون باشد. بردار  $G$  هم برداری است.



$$k = |k - k'|$$
 (7)

$$k \cdot k' = \frac{1}{2} k^2$$

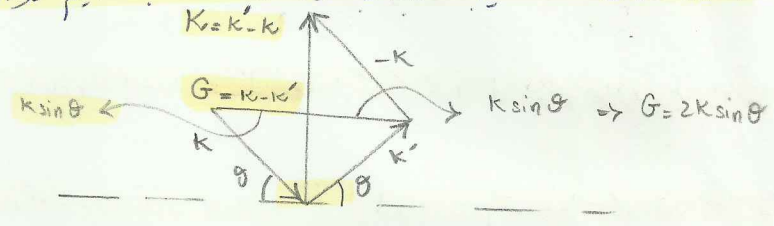
شرط ساده → ما چیزی در کون در طر  $7$  داریم

منصف بردار سوم فون کاره برایش تریو  $n\lambda$  توسط یک بلور  $k$  در آنجا هم برداری شبکه وارون  $k$  باید نصف طول  $k$  باشد.

✓ تمام از برای فرمول میزگی برآگ علاوه بر این پرتو X از رابطه سن برابری شبکه دارند و می توان از آن برای شبکه مستقیم ناشی می شود.

فرمول گشت برادر موجهای فرودی شرط لازم برابر  $K = k - k'$  را بر آورده می شود و از آنجا که طول موجهای فرودی در پراکنده کننده یکسان است پس  $k = k'$  هم اندازه اند. این یعنی می شود که  $k$  و  $k'$  یکدیگر را با هم مخالف و در هر  $k$  معیارند. زیرا پراکنش را می توان به عنوان یک بازتاب برآگ در نظر گرفت.

طوری کردن  $\theta$  زاویه برآگ نسبت به خانواده سی صفحات شبکه مستقیم معمود بر شبکه دارند  $k$  است پس  $\theta$  شرط لازم را داریم. بنابراین شکل:



الف  $G = 2k \sin \theta$   
 ب  $k - k' = G$   
 ج  $k = k'$

برای اینکه فاصله سازنده باشد در برآگ در صفحات این سوال را رسم  $2d \sin \theta = n \lambda$  (2)

و برای اینکه غایت رسم کوان بازتاب شرط برآگ را بر آورده می شود مورد داشته باشیم که برادر

معرفی مسی از کوتاهترین بردار شبکه دارند  $G$  است که  $G = \frac{2\pi}{d}$  (3)  $d$  فاصله بین صفحات است

در خانواده این است که بر  $G$  و  $G$  عمود است. پس اگر مورد در سری باید شرط فاصله سازنده را برای آن داریم  $G = \frac{2n\pi}{d}$  (4)

برای سری  $\left\{ \begin{array}{l} a. G = 2n_1 \pi \\ b. G = 2n_2 \pi \end{array} \right.$  (5) در این سری  $\left\{ \begin{array}{l} a. G = 2n_1 \pi \\ b. G = 2n_2 \pi \\ c. G = 2n_3 \pi \end{array} \right.$  (6)

بهر برآگ  $\frac{2\pi}{\lambda d}$  ضرب می کنیم تا رابطه این (1) را بدست آوریم

$2d \sin \theta \times \frac{2\pi}{\lambda d} = \frac{2n\pi}{\lambda d} \Rightarrow 2 \sin \theta = \frac{2n\pi}{dk} \Rightarrow 2k \sin \theta = \frac{2n\pi}{d} = G$  (6)

که شرط لازم برای داشتن بودن است که  $G = \frac{2n\pi}{d}$  و  $2k \sin \theta$  رابطه است و شرط لازم برای داشتن بودن است رابطه (4)

و رابطه  $k \sin \theta = \frac{n\pi}{d}$  (7)  $\lambda$  این را می نویسد که طول موج از شرط برآگ مستقیم می گذرد  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

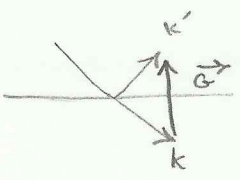
توجه: برای آنکه برآگ امکان پذیر باشد مستقیم بردار سوم به اندازه بردار شبکه دارند. متناظر است با بازتاب برآگ از خانواده صفحات شبکه مستقیم  $G$

توجه:  $n$  در جهت برابر طول  $G$  مستقیم بر طول کوتاهترین بردار شبکه دارند موازی با  $G$   
 $n = \frac{G}{G_0}$   $\rightarrow \frac{2\pi}{d}$

از آنجا که شبکه دارند رابطه به یک شبکه برآه می معلوم را می توان به آسانتر از مجموعه می نامد صفحاتی که می توان یک شبکه برآه را به آن تبدیل نمود

توجه: مستقیم کردن فاصله کار کردن با شرط لازم برای رفتار شبکه های برآه مستقیم آسانتر از شرط برآگ است.

هم انرژی نورانی بزرگ را در یک زمان برای پرتو  $\lambda$   $\rightarrow$   $k = k'$   $\rightarrow$  درجه الاستیسیته  $\rightarrow$  پرتوهای پراکنده



ماتریس شکل  $\vec{k}$  برابر سوم فردی است

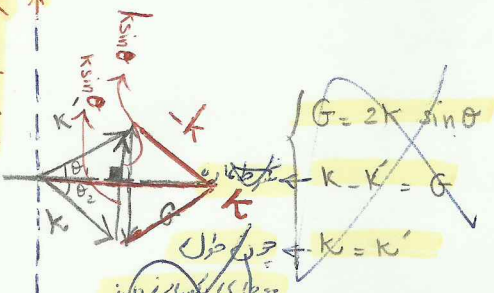
این هم انرژی از رساننده من بردارهای شبکه دارند و خانواده های صفحه ای شبکه مستقیم ناشی می شود

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

ماتریس شکل  $\vec{k}$  برابر سوم فردی است

برای اینکه تراز من بازنده لاستیسیته من صفات این برای  $2d \sin \theta = n\lambda$  طول شکل صفحه  $2d$  جل بر این است این که شرط بزرگ را بر آورده می شود می شود در صفحه  $G = \frac{2\pi}{d}$   $G = \frac{2\pi}{d}$   $G = \frac{2\pi}{d}$  اگر بلور در بعدی باشد و شرط تراز من بازنده فاصله صفات  $G$  و  $G'$  یکدیگر است  $G = \frac{2n\pi}{d}$   $G = \frac{2n\pi}{d}$   $G = \frac{2n\pi}{d}$

در یک بلور 3 بعدی است و  $a \cdot G = n_1 \lambda = 2n_1 \pi$   $b \cdot G = n_2 \lambda = 2n_2 \pi$   $c \cdot G = n_3 \lambda = 2n_3 \pi$  شرط تراز من بازنده



در این 3 فرقی داریم:  $G = 2k \sin \theta$   $k - k' = G$   $k = k'$

منابع پراکنده می باشد در این حالت: عنوان یک بزرگ است در نظر گرفتن  $\theta$  زاویه بزرگ نسبت به خانواده صفات شبکه مستقیم مورد بررسی در شبکه دارند  $k$  است

در شرط تراز من بازنده حال طریقی را بطوری در دراز  $2d \sin \theta = n\lambda$   $\rightarrow$  در شرط تراز من بازنده

$$2d \sin \theta \times \frac{2\pi}{d\lambda} = n \lambda \frac{2\pi}{d\lambda}$$

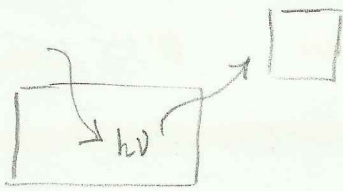
$$2k \sin \theta = \frac{2n\pi}{d} = G$$

$k \sin \theta = \frac{n\pi}{d}$   $2k \sin \theta$  در شرط کاوازا برای دراز بودن است  $\frac{2n\pi}{d}$  هم داشته است علاوه بر این دایره تریک حول موج از شرط بزرگ تبدیل می شود

تکونی: خانواده های مستطی در یک بلور همواره است

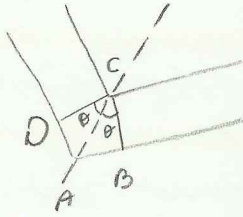
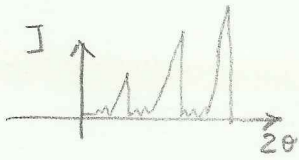
تکونی: توضع دهد چرا پرتو  $\lambda$  در یک بلور را هم در الاستیسیته در نظر می گیریم

منه دانستیم در جهت الاستیسیته انرژی تقییری که در تولا وجودی که فقط جهت حرکت تقییری است. در تولا هم جهت کاوازا وجودی که اگر تراز من بازنده باشد آنرا من شدن داریم. ممکن است در جای آستیکا ساز صحنه ایلا استواره کند چون در یک آستیکا درونی تلف می شود. عبارت دیگر بر آستیکا گشتان است. پس پرتوهای فردی و تکونی تا اول روشن داریم. بازتاب می تواند از طریق من داشته باشد



آبجکت، سازه

هر چه مقدار طول موج کمتر باشد، شدت پرتو بیشتر است



ب

تغییر لایه:  $\Delta = AB - CD \Rightarrow \Delta = L(1 - \cos 2\theta)$

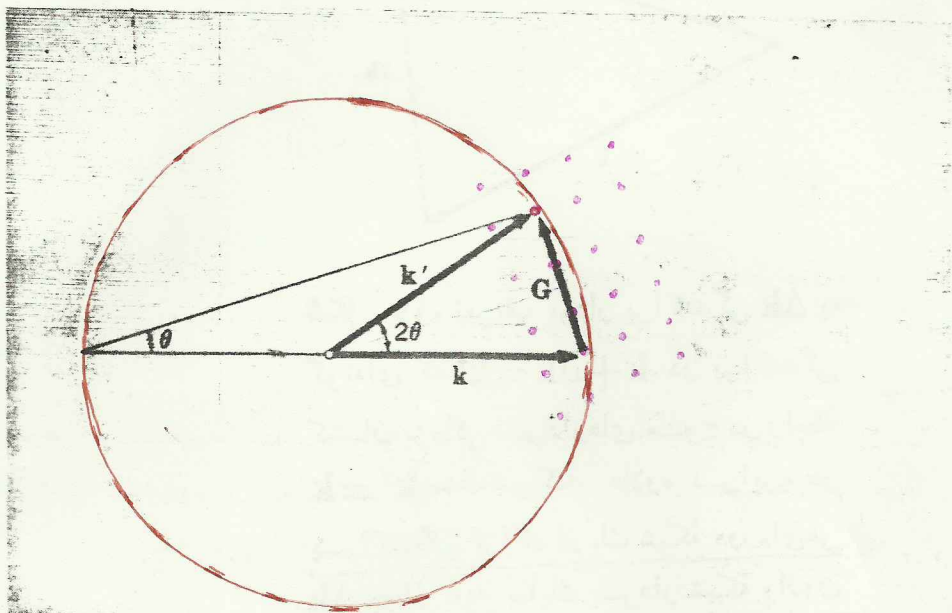
$$\frac{a \cdot k'}{k'} - \frac{a \cdot k}{k} = \frac{a(k' - k)}{k} = \frac{a \cdot G}{k}$$

$$2L \sin^2 \theta = n\lambda \quad \left\{ \begin{array}{l} 2d \sin \theta = n\lambda \\ k - k' = G \\ k = k' \end{array} \right. \quad \text{شرط تراکم سازش}$$

$\Rightarrow \Delta = AB - CD$  الف

میزان جابجایی بزرگتر از 120 نانومتر است و در اثرش نور پراکنده

تقریباً این معادله را می توانیم با  $G$  و  $k$  و  $k'$  بنویسیم



شکل ۱۵. نقاط سمت راست، نقاط شبکه وارون بسوزند. بردار  $k$  در جهت باریکه  $x$  فرودی رسم شده است و به یک نقطه شبکه وارون منتهی می شود. کره ای به شعاع  $k = 2\pi/\lambda$  حول مبدأ  $k$  رسم می کنیم. اگر این کره از هر نقطه دیگری از شبکه وارون بگذرد، باریکه پراشیده تشکیل خواهد شد. کره ای که در شکل رسم شده است، از نقطه دیگری می گذرد که توسط بردار شبکه وارون  $G$  به انتهای  $k$  وصل می شود. باریکه  $x$  پراشیده در جهت  $k' = k + G$  خواهد بود. این ترسیم را اوالد ابداع کرده است.

دسته های تکراری شرط گانه  $\theta$  یک بردار موج فرودی  $k$  زمان منحرف - قله پراش یا بازتاب پراش می شود اگر فقط اگر نزدیک بردار موج فرودی یک

صاف پراش در فضای  $k$  قرار گیرد از آنجایی که هم صفحات پراش خانواده های متوازی از صفحات هستند این مجموعه می تواند تمام فضای  $k$  را

پُر کند و در حالت عام نزدیک بردار  $k$  روی یک صفحه پراش قرار می گیرد. بنابراین برای یک بردار موج فرودی ثابت - برعکس پراش، برای هر  $x$  با طول

موج ثابت در فضای فرودی ثابت نسبت به طول موج پراش - به طور عام هیچ مدلی پراش نمی دهد. پس برای جهت جوی تکرار ثابت پراش  $k$  را برداریم یا  $k$  را تغییر

دهیم  $\downarrow$  را تغییر دهیم بطور آنکه آن را در محور ثابت - در فضای فرودی تغییر دهیم. بردار موج پراش  $k'$  که شرط گانه را برآورده کند فقط زمانی در بردار

که صفحه های شبکه دارای محور عمود بر فضای پراش باشد که از صفحات شبکه مستقیم عمود بر هر یک از بردار وارون یک بازتاب پراش وجود خواهد داشت

- اگر پراش فضای  $k$  روی سطح یک کره در آن فضای قرار داشته باشد، کره نیز در هر نقطه شبکه وارون روی سطح خود قرار داشته باشد

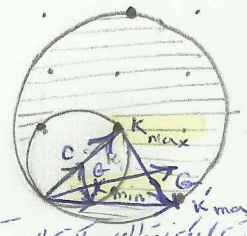
سازگی ابروالو معادله شبی بر محور قرار دارد پراش به ازای یک بردار موج فرودی عام را می توانی کشی - در صفحه چین رسن ان توان از تصویر

کره های پراش ابروالو بردار کرد. صفحه پراش این دایره فرودی

۱- روشن گاهوں: عمل پر مشتمل نازکی را توسط یک کت بلور با بسنگری ثابت نسبت - بر اساس فرود ثابت  $\hat{n}$  انبساط در نیم آینه یا برنگی ای از

پروکندگی  $\lambda$  با طول موجهای از  $\lambda_0$  تا  $\lambda$  باشد در این صورت کمره ایرال در ناحیه  $\theta$  در کروی  $k_0 = \frac{2\hat{n}\pi}{\lambda}$  و  $k_1 = \frac{2\hat{n}\pi}{\lambda_1}$  (تقریباً)

مما بر تلمه های براگ متناظر با حرکتی از بردارهای شبکه در این واقع در این ناحیه  $\theta$  گستره  $\lambda$  از فزین شبکه درون می توان مشاهده حاصل کرد در حالی که با جلوگیری از بزرگ شدن زیاد آن می توان از رطوبت زیاد جلوگیری کرد و تصویر مازاد کم کرد.



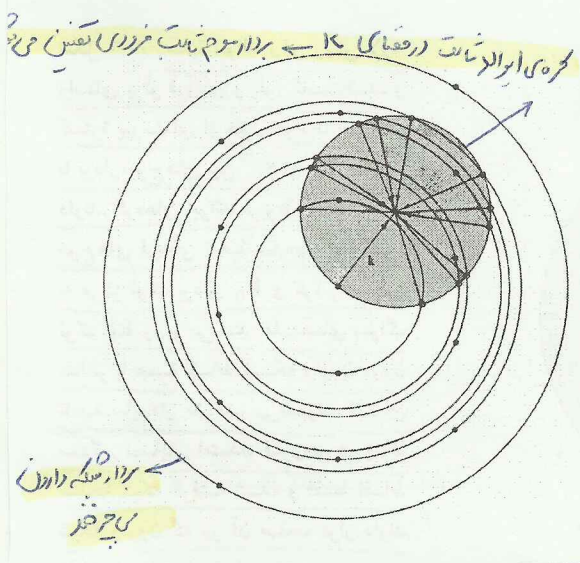
روشن گاهوں کے لیے روشن گاہوں کے لیے متناظر شدہ است - مثال اگر جهت نزدیک در امتداد یک محور قرار گیرد، حرکت لگدی می تواند بر تو هاس بازتابیده و در این همان نتایج خواهد بود.

$k_{max}$  یک بردار بزرگتر می کشیم می درین این دایره کائوری یک نقطه ای ممکن است وجود داشته باشد بالذات نقطه ای می باشد در این دایره که زاویه  $\theta$  در این دایره باشد تا در این دایره باشد.

۲- روشن بلور چرخان: در این روش از تزی هاس  $\lambda$  تک آ استفاده می شود اما زاویه فرود تقریباً کفر. در عمل جهت باید که متوجه  $\lambda$  ثابت

تنگ داشته می شود در عین سستیگیری بلور تصدیراده می شود در روش بلور چرخان بلور همول محور ثابتی در خانه می شود و تمام آن هاس بر آنی که در این چرخش رخ می دهند، برای یک نیم سبب می شوند. وسیع بلور می چرخد شبکه درون آن هم همان شعاع در حال همان محور می چرخد. بنابراین کمره ایرال (که با بردار موج ثابت فرود می شود) در فضای  $k$  ثابت است، در حالی که محل شبکه درون حول محور چرخش بلور می چرخد در این چرخش حرکت از نقاط شبکه درون دایره ای حول محور چرخش را می بینیم و حرکت این دایره کمره ایرال را قطع کند یک بازتاب برگ بر می دهد.

$\theta$  چرخان  
 $k$  مشخص

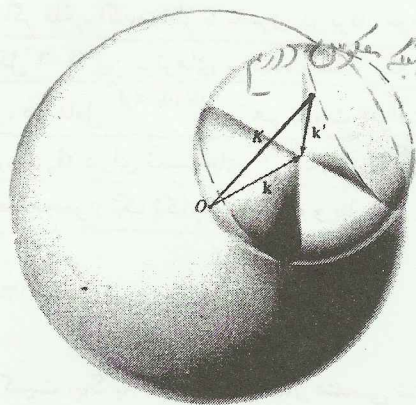


شکل ۶-۹ سازه ایوالد برای روش بلور - چرخان. برای سادگی موردی نشان داده شده که در آن بردار موج فرودی در یک صفحه شبکه قرار دارد، و محور چرخش عمود بر آن صفحه است. دایره های هم مرکز مدارهایی هستند که تحت چرخش توسط بردارهای شبکه وارون واقع در صفحه عمود بر محوری که بردار  $k$  در آن است جاروب می شوند. نقطه برخورد هر یک از چنین دایره هایی با کره ایوالد، بردار موج یک پرتو بازتابیده براگ را می دهند. (بردار موج های بازتابیده براگ متناظر با بردارهای شبکه وارون واقع در صفحات دیگر نشان داده نشده اند).

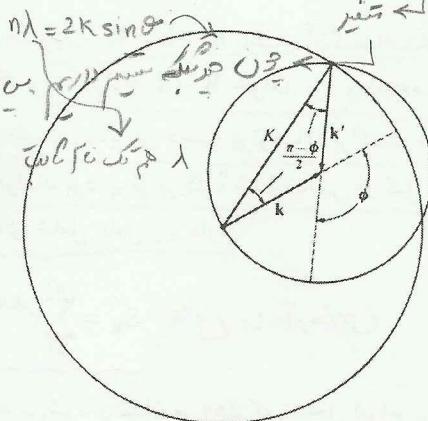


۳- روش پودری یا روش دیبی - شمر: این روش معادل روش بلور چرخان است، به اضافه این که در آن محور چرخش نیز در تمام جهتهای ممکن تغییر می کند. در عمل این میانگین گیری همسانگرد بر روی جهت فرود با استفاده از یک نمونه بسبلور یا پودری به دست می آید که دانه هایش هنوز در مقیاس اتمی آنقدر بزرگ اند که قابلیت پراشیدن پرتوهای X را داشته باشند. به دلیل آن که محورهای بلوری دانه های مجزا سمتگیری کاتوره های دارند، گرتة پراش تولید شده توسط چنین پودری همانی است که از ترکیب گرتة های پراش یک تک بلور با تمام سمتگیری ممکن به دست می آید. اینک بازتاب های براگ با ثابت نگه داشتن بردار  $k$  فرودی و همراه با آنها کره ایوالد به دست می آید، با چرخیدن شبکه وارون تحت همه زوایا حول مبدأ، هر بردار شبکه وارون  $K$  کره ای به شعاع  $K$  حول مبدأ به وجود می آورد. هر یک از این کره ها به شرط آن که  $K$  کوچکتر از  $2k$  باشد، کره ایوالد را در یک دایره قطع می کند (شکل ۶-۱۰-الف). برداری که هر نقطه روی چنین دایره هایی را به نوک بردار  $k$  فرودی وصل می کند، یک بردار موج  $k'$  است که برای آن تابش پراکنده شده مشاهده خواهد شد. بنابراین هر بردار شبکه وارون با طول کمتر از  $2k$ ، مخروطی از تابش پراکنده شده با زاویه  $\phi$  تولید می کند که در آن (شکل ۶-۱۰-ب)

$$K = 2k \sin \frac{1}{2} \phi$$



(الف)



(ب)

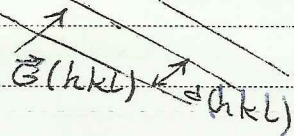
شکل ۶-۱۰ سازه ایوالد برای روش پودری. (الف) کره ایوالد کره کوچکتر است. این کره به مرکز نوک بردار موج فرودی  $k$  به شعاع  $k$  است، طوری که مبدأ  $O$  روی سطح آن قرار دارد. کره بزرگتر به مرکز مبدأ و دارای شعاع  $K$  است. دو کره همدیگر را در یک دایره قطع می کنند (که در شکل به صورت یک بیضی درآمده است). بازتاب های براگ برای هر بردار موج  $k'$  که هر نقطه روی دایره فصل مشترک را به نوک بردار  $k$  وصل می کند روی می دهد. بنابراین پرتوهای پراکنده شده روی مخروطی قرار دارند که در راستای مخالف  $k$  باز می شود. (ب) یک سطح مقطع از (الف) که حاوی بردار موج فرودی است. مثلث متساوی الساقین است و بنابراین  $K = 2k \sin \frac{1}{2} \phi$

لذا با اندازه گیری زوایای  $\phi$  که تحت آنها بازتاب براگ مشاهده شده است، می توان طول همه بردارهای شبکه وارون کوچکتر از  $2k$  را پیدا کرد. به کمک این اطلاعات و واقعیت هایی از تقارن ماکروسکوپی بلور و این واقعیت که شبکه وارون یک شبکه براوه است، معمولاً می توان خود شبکه وارون را ساخت (برای مثال مسئله ۱ را ببینید).

$$\vec{G} = h\vec{a}_1^* + k\vec{a}_2^* + l\vec{a}_3^* \quad (21)$$

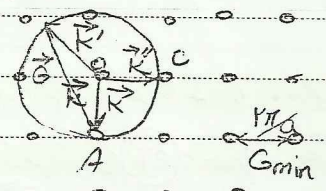
حاصل‌جمع بردارها (نشاندهنده شماره 5) (اطلا)

$$\vec{G}' = 2h\vec{a}_1^* + 2k\vec{a}_2^* + 2l\vec{a}_3^* \quad (22)$$



$$\begin{cases} \vec{k}' - \vec{k} = \vec{G} \\ \vec{k}' = \vec{k} \end{cases}$$

دایره نقطه A نقطه مرکزی از شبکه و مرکز دایره دایره باشد



تقاطع دایره دایره (در صورت)

هاله‌ها نقطه مرکزی دایره تقاطع دایره دایره (در صورت)

اگر بردار k از نصف بردار  $G_{min}$  کوچکتر باشد اتفاق افتاده

در این صورت تقاطع روی خط ردیف چون هیچ نقطه‌ای مثل A روی دایره نمی‌افتد (23)

$$k < \frac{G_{min}}{2}$$

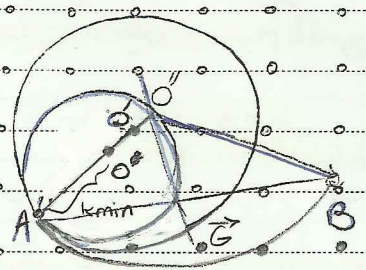
$$k > \frac{G_{min}}{2} \Rightarrow \frac{k\pi}{\lambda} \geq \frac{\pi}{a} \Rightarrow \lambda \leq 2a \quad (24)$$

$$2d \sin \theta = n\lambda \Rightarrow \sin \theta = \frac{n\lambda}{2d} \Rightarrow \lambda \leq 2a \quad (25)$$

شکل صفحه  $111$  [  $\lambda_{min} - \lambda_{max}$  ]

چرخش بلور  $\rightarrow$  در طول تک‌بلور  $\rightarrow$  در طول تک‌بلور چرخان  $\sin \theta = \frac{n\lambda}{2d}$

روی بلور  $\rightarrow$



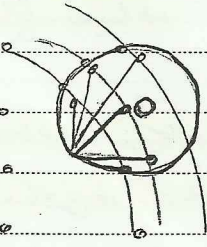
روی بلور  $\rightarrow$  محور مختصات بین A و B در نقطه ای مثل O پیدا می‌شود

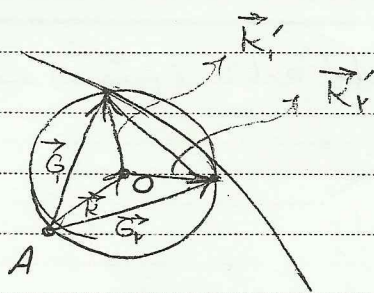
در روی بلور ثابت است

در روی بلور  $\rightarrow$  اگر جای نپراشیم بدست می‌آید که آرایش آن‌ها مثل شبکه‌های دایره‌ای باشد

روی بلور چرخان  $\rightarrow$

اگر بردار  $\rightarrow$  غیر حول محور قائم چرخش کرده





$$\vec{G} \cdot \vec{a} = 2\pi h \quad (25)$$

روشن پودری :

در روشن پودری  $d$  ثابت است چون پودرها مشخص است.  
 حجم ثابت است پس زاویه  $\theta$  را تغییر می دهیم.

عامل ساختار هندسی :

برای پرتوهای برای پایه ای اجزای حجم : (اتم های همسان) مثل لایه های یکدیگر با  $n=2$  ، در این مورد معنای هر یک از سطوح را هم می توان از زاویه های  $d_1$  و  $d_2$  درین رابطه بررسی می کنیم. جهت ناس در یک جهت دیگر یعنی در همان

این پرتوهای را برآورده شده از این طایفه های با یکدیگر می توان در برآورد کامل در این سترین معیار در این رابطه در نظر بگیریم که علاوه بر این

$$e^{i\vec{G} \cdot (\vec{d}_1 - \vec{d}_2)} \Rightarrow e^{i\vec{G} \cdot (\vec{d}_1 - \vec{d}_2)} \Rightarrow e^{i\vec{G} \cdot \vec{d}_1} e^{-i\vec{G} \cdot \vec{d}_2}$$

این پرتوهای را برآورده شده از این طایفه های با یکدیگر می توان در برآورد کامل در این سترین معیار در این رابطه در نظر بگیریم که علاوه بر این

$$S = \sum_{j=1}^n e^{i\vec{G} \cdot \vec{d}_j} \quad (30) \quad \sum_{j=1}^n e^{i\vec{G} \cdot \vec{d}_j} = 1 \quad (29)$$

عامل ساختار هندسی

در این حالت ساختار هندسی  $S_G$  صفر شود یعنی سیستمها متنگ رخ می دهد.

① مکعب هرگز جسم = مکعب شماره با پایه ای در واقع به یک مکعب برآورده است

$$d_1 = 0$$

$$d_2 = \frac{a}{\sqrt{3}} (\hat{i} + \hat{j} + \hat{k})$$

↑  $bcc$  (بازو)

شماره دارون نیز می گوی شماره با پایه متکی به سیستم دارون

$$\vec{R} = a(n_1 \hat{i} + n_2 \hat{j} + n_3 \hat{k}) \Rightarrow G = \frac{2\pi}{a}$$

$$S_G = 1 + e^{i\vec{G} \cdot \frac{a}{2}(i+j+k)}$$

سیستمی چون برای  $G$  داریم

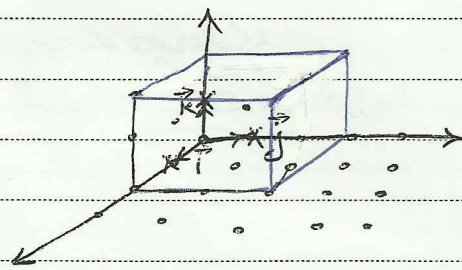
دنبال شرایط هستیم که  $S_G$  صفر شود

$$d \rightarrow S_G = 1$$

$$d_2 \rightarrow S_G = 1 + \exp[i\pi(n_1 + n_2 + n_3)] = 1 + (-1)^{n_1 + n_2 + n_3}$$

چون  $e^{i\pi n} = (-1)^n$

②  $(n_1 + n_2 + n_3) \rightarrow S_G = 0$  فرد باشد  $\rightarrow$  فرد باشد  
 $S_G = 2$  زوج باشد  $\rightarrow$  زوج باشد



در مکعب شماره دارون آن مکعب شماره است و این به دلیل غیرتاری سیستماتیک مکعب مرکز سطحی می شود.



۲- شبکه الماسی تک اتمی: شبکه الماسی تک اتمی (کربن، سیلیسیم، ژرمانیم یا قلع خاکستری) یک شبکه براوه نیست و باید به عنوان یک شبکه با یک پایه توصیف شود. شبکه براوه زیربنایی مکعبی مرکز سطحی است و پایه را می توان به صورت  $\mathbf{d} = 0$  و  $\mathbf{d}_2 = (a/4)(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$  گرفت که در آن  $\hat{x}$ ،  $\hat{y}$  و  $\hat{z}$  در راستای محورهای مکعب قرار دارند و  $a$  ضلع یاخته مکعبی قراردادی است. شبکه وارون مکعبی مرکز حجمی با یاخته مکعبی قراردادی به ضلع  $4\pi/a$  می باشد. اگر بردارهای بسط را به گونه زیر در نظر بگیریم:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\hat{y} + \hat{z} - \hat{x}), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\hat{z} + \hat{x} - \hat{y}), \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}) \quad (17-6)$$

آن گاه عامل ساختار (۱۳-۶) برای  $\mathbf{K} = \sum n_i \mathbf{b}_i$  عبارت است از:

$$S_{\mathbf{K}} = 1 + \exp\left[\frac{1}{2}i\pi(n_1 + n_2 + n_3)\right]$$

$$S_{\mathbf{K}} = \begin{cases} 2, & \text{دو برابر یک عدد زوج } n_1 + n_2 + n_3 \\ 1 \pm i, & \text{فرد } n_1 + n_2 + n_3 \\ 0, & \text{دو برابر یک عدد فرد } n_1 + n_2 + n_3 \end{cases} \quad (18-6)$$

برای تفسیر هندسی این شرایط روی  $\sum n_i$ ، توجه کنید که اگر (۱۷-۶) را در  $\mathbf{K} = n_i \mathbf{b}_i$  درج کنیم، می توانیم بردار شبکه وارون عام را به شکل زیر بنویسیم:

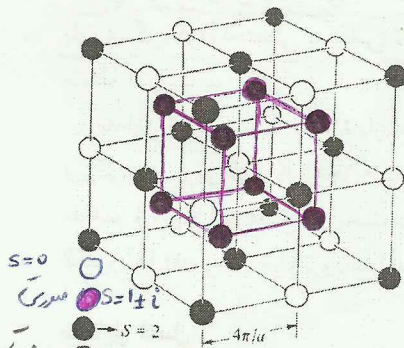
$$\mathbf{K} = \frac{4\pi}{a}(v_1 \hat{x} + v_2 \hat{y} + v_3 \hat{z}) \quad (19-6)$$

که در آن

$$v_j = \frac{1}{2}(n_1 + n_2 + n_3) - n_j, \quad \sum_{j=1}^3 v_j = \frac{1}{2}(n_1 + n_2 + n_3) \quad (20-6)$$

می دانیم (فصل ۵ را ببینید) که وارون شبکه fcc، با یاخته مکعبی به ضلع  $a$ ، یک شبکه bcc با یاخته مکعبی به ضلع  $4\pi/a$  است. این شبکه را ترکیبی از دو شبکه مکعبی ساده به ضلع  $4\pi/a$  در نظر می گیریم. اولی که شامل مبدأ ( $\mathbf{K} = 0$ ) است باید (بنابر (۱۹-۶)) همه عدد صحیح های  $v_i$  را داشته باشد و بنابراین باید (بنابر (۲۰-۶)) توسط  $\mathbf{K}$  با  $n_1 + n_2 + n_3$  زوج داده شود. دومی که شامل «نقطه مرکز حجمی»  $(\frac{1}{2})(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$  است باید (بنابر (۱۹-۶)) همه عدد صحیح های به اضافه  $\frac{1}{2}$  را برای  $v_i$  داشته باشد و بنابراین (بنابر (۲۰-۶)) باید توسط  $\mathbf{K}$  با  $n_1 + n_2 + n_3$  فرد داده شود.

پس از مقایسه با (۱۸-۶) درمی یابیم که نقاط با عامل ساختار  $1 \pm i$  متعلق به زیرشبکه مکعبی ساده ساخته شده از نقاط «مرکز حجمی» می باشند. نقاطی نیز که عامل ساختارشان،  $S$ ، برابر ۲ یا ۰ است، در زیر شبکه مکعبی ساده شامل مبدأ هستند به گونه ای که  $\sum v_i$  برای  $S=2$ ، زوج و برای  $S=0$ ، فرد است. بنابراین یک بار دیگر با به کار بردن سازه نشان داده شده در شکل ۱۱-۶ نقاط با عامل ساختار صفر از زیرشبکه مکعبی ساده ای که شامل مبدأ است حذف می شود، و آن زیرشبکه به یک ساختار مکعبی مرکز سطحی تبدیل می شود (شکل ۱۲-۶).



شکل ۱۲-۶ شبکه مکعبی مرکز حجمی با یاخته مکعبی به ضلع  $4\pi/a$  که وارون شبکه مکعبی مرکز سطحی با یاخته مکعبی به ضلع  $a$  است. وقتی این شبکه fcc شبکه زیربنایی ساختار الماسی باشد، آن گاه دایره های سفید جایگاه هایی را نشان می دهند که عامل ساختار صفر دارند. (دایره های سیاه جایگاه هایی با عامل ساختار ۲ اند، و خاکستری ها جایگاه هایی با عامل ساختار  $1 \pm i$ )

- آزمون های پایه ، همواره با هم عامل ساختار شکل فرار با جزیی تیرد

- آزمون های همواره عامل شکل یکسانی دارند .

$$S_k = \sum f_j(k) e^{ikd_j}$$

↓

عامل شکل امی و به ساختار داخلی

بر می که جابجا  $d_j$  با در شبکه

انتقال مجدد سنگی دارند

۱. گزاره های گوناگون شرط براگی

$$2d \sin \theta = n\lambda; \quad \Delta \mathbf{k} = \mathbf{G}; \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{G} = G^2$$

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{G}$$

۲. شرایط لاوّه

$$\mathbf{a} \cdot \Delta \mathbf{k} = 2\pi h; \quad \mathbf{b} \cdot \Delta \mathbf{k} = 2\pi k; \quad \mathbf{c} \cdot \Delta \mathbf{k} = 2\pi l$$

$$\mathbf{a} \cdot \frac{2\pi}{\lambda} = 2\pi h$$

$$\Rightarrow a = \lambda h$$

۳. بردارهای انتقال بسیط شبکه و ارون عبارتند از

$$\mathbf{A} = 2\pi \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}}; \quad \mathbf{B} = 2\pi \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}}; \quad \mathbf{C} = 2\pi \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}}$$

در اینجا  $\mathbf{a}$ ،  $\mathbf{b}$  و  $\mathbf{c}$  بردارهای انتقال بسیط شبکه بلورند.

۴. يك بردار شبکه و ارون به صورت زیر است

$$\mathbf{G} = h\mathbf{A} + k\mathbf{B} + l\mathbf{C}$$

که در آن  $h$ ،  $k$  و  $l$  اعداد درست یا صفر هستند.

۵. دامنه پراکنده شده در جهت  $\Delta \mathbf{k} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{G}$  با عامل ساختار هندسی زیر

متناسب است

$$S_{\mathbf{G}} \equiv \sum f_j \exp(-i\mathbf{r}_j \cdot \mathbf{G}) = \sum f_j \exp[-i2\pi(x_j h + y_j k + z_j l)]$$

که در آن  $z$  تمام  $z$  اتم پایه را اختیار می کند، و  $f_j$  عامل شکل اتمی ( $S_0$ ) مربوط به اتم

$z$ ام پایه است. عبارت سمت راست برای بازتاب ( $hkl$ ) نوشته شده است که برای آن

$$\mathbf{G} = h\mathbf{A} + k\mathbf{B} + l\mathbf{C}$$

۱- نمونه‌های پودری سه بلور مکعبی تک‌اتمی متفاوت با یک دوربین دبای شرر بررسی شده‌اند. می‌دانیم که یک نمونه مکعبی مرکز سطحی است، یکی مکعبی مرکز حجمی و دیگری ساختار الماسی دارد. محل تقریبی چهار حلقه پراش اول در هر مورد عبارتند از (شکل ۶-۱۳) را ببینید.

مقادیر  $\phi$  برای نمونه‌ها

| A     | B     | C     |
|-------|-------|-------|
| 42.2° | 28.8° | 42.8° |
| 49.2  | 41.0  | 73.2  |
| 72.0  | 50.8  | 89.0  |
| 87.3  | 59.6  | 115.0 |

(الف) ساختار بلوری A ، B و C را تعیین کنید.

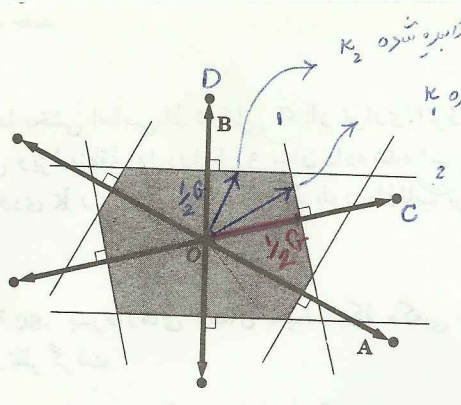
(ب) اگر طول موج باریکه پرتو X فرودی  $1.5 \text{ \AA}$  باشد، طول ضلع یاخته مکعبی قراردادی در هر مورد چقدر است؟

(پ) اگر به جای ساختار الماسی یک ساختار بلند روی با یاخته یک مکعبی با همان ضلع داشته باشیم، زاویه چهار حلقه اول چقدر است؟

۱- در نتیجه قادر نبوده‌ایم اظهار نظر دقیقی درباره شدت مطلق قله‌های براگ یا درباره زمینه پخشی تابش در راستاهایی که شرط براگ مجاز نمی‌شمارد انجام دهیم.

۲- از نظر مکانیک کوانتومی ذره‌ای با تکانه p را می‌توان موجی با طول موج  $\lambda = h/p$  دانست.

منطقه بریلوئن



این برورها شرط پراش را ارضایی کند  
این برورها بردار موجی هستند که از مبدأ آمده  
و به عمود منصفها ختم شده اند.

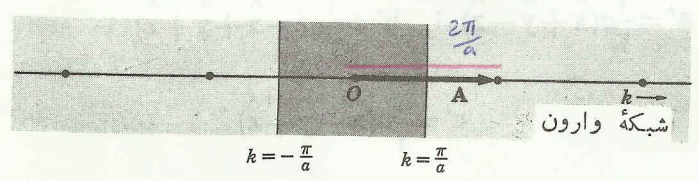
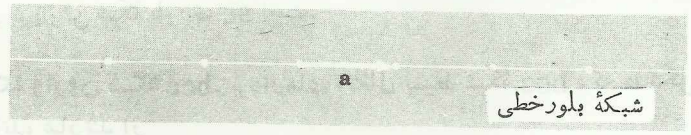
$$OC = \frac{1}{2} G_x$$

$$OB = \frac{1}{2} G_y$$

۱۹

این صفحات همگی فضای خردی بلور را  
فصلحات گوناگون تقسیم می کنند. هر چه بزرگی  
یک منطقه بریلوئن می تواند باشد و در اصل شکل  
بر روی یک صاف شبکه میل دورتری باشد.

شکل ۱۸. رسم منطقه اول بریلوئن یک  
شبکه مایل دوبعدی. ابتدا در شبکه وارون  
بردارهایی را از نقطه O به نقاط مجاور رسم  
می کنیم. سپس عمود منصف این بردارها را  
رسم می کنیم. کوچکترین سطح محصور، منطقه  
اول بریلوئن است.



$$A \rightarrow \left[ \frac{2\pi}{a} \right]$$

a: محور بسط شبکه بلور است.

شکل ۱۹. شبکه های بلور و وارون در حالت یک بعدی. بردار A به طول  $2\pi/a$   
بردار پایه در شبکه وارون است. کوتاهترین بردارهای شبکه وارون که از مبدأ  
رسم شده اند عبارتند از A و -A. عمود منصف این بردارها مرزهای منطقه  
اول بریلوئن را تشکیل می دهند. مرزها در  $k = \pm\pi/a$  واقعند.

در مرتبه حالت خاص بهترین گزاره شرط پراش توسط بریلوئن ارائه شد. این گزاره تنها زمانی است که در تقارن

خواهی انرژی اکثر در مسطح کردن برانگیزنده گویای نیازی بلور مورد استفاده قرار می گیرد. تابع معرف منطقه بریلوئن یک تابع

طرح را به دست می دهد

۲۰

و دیگر - ساینس در شبکه وارون است.

$$2k \cdot G = G^2 \quad \text{یا} \quad k \cdot \left(\frac{1}{2}G\right) = \left(\frac{1}{2}G\right)^2 \quad (۱)$$

ارائه می دهد. صفر عمود منصف بردار G را رسم می کنیم. شکل بالا. هر بردار k که از مبدأ شروع می شود و در این صفحه ختم شود

مشروط بر این که در فضای کد بر تقاطع خود متوقف شود، فضای از مرز بریلوئن را تشکیل می دهد. یک بار دیگر بر تو لا که بلور دارد

می آید به شرطی پراشیده می شود که نهی و تحت بردار موج آن را بطوری (۱) را ارضایی کند. بار دیگر پراشیده شده در جهت بردار G - k خواهد بود

۵۹



— در حالت اول، یافته مرکزی شبکه وارون دارای اهمیت است و آن را منطقه اول بریلوتن گویند. منطقه اول بریلوتن کوچکترین

حجمی است که توسط صفحات عمود متعمق بر دارای شبکه وارون که از مبدأ رسم شده کاملاً محصور شده باشد. در صفحه مثل  $ABC$  مرکز شبکه

خطی در شکل ۲ رسم شده است.

— در حالت دوم، از زمان تشکیل ساختار بلوری توسط پراش بر تو  $h$  است، شبکه این منطقه را به همین اساسی از تکلیف ساختار بلوری

انتزاعی انتزاعی بلور را تشکیل می دهد.

— در رسم بریلوتن تا آن برداری موج وارون که را که  $h$  باشد توسط بلور بازتاب برگرداند. این برداری می دهد.

—  $h$  یافته صیقل و شیار مناسب در شبکه وارون است. هر موج که در بردار موج  $h$  از مبدأ شروع شود در سطح منطقه  $h$  ختم شود

توسط بلور را  $h$  می شود.

| منطقه اول بریلوتن         | شبه بلور    |
|---------------------------|-------------|
| شکل                       | شکل ساده    |
| دوران در فضای گزینش       | " مرکز سطحی |
| هفت رکن ناقص در $h$ گزینش | " " گزینش   |

۱۰. خط دو اتمی. خطی از اتمها به صورت  $ABAB \dots$  را در نظر بگیرید. طول پیوند  $A-B$  برابر  $a/2$  است. عامل شکل اتمهای  $A$  و  $B$  به ترتیب عبارتند از  $f_A$  و  $f_B$ . باریکه پرتو  $x$  فرودی بر خط اتمها عمود است. (الف) نشان دهید که شرط تداخل به صورت  $n\lambda = a \cos \theta$  است که در آن  $\theta$  زاویه بین باریکه پراشیده و خط اتمهاست. (ب) نشان دهید که شدت باریکه پراشیده برای  $n$ های فرد با  $|f_A - f_B|^2$  و برای  $n$ های زوج با  $|f_A + f_B|^2$  متناسب است. (ج) توضیح دهید که اگر  $f_A = f_B$  باشد چه اتفاقی روی می دهد.

الف) پایه یک اتم  $A$  در برابر پایه اتم  $B$  در  $a/2$  دارد. معادله لانه (مرد درست)  $a \cdot \Delta k = 2\pi$

مگر در هر از صفحه های موازی را در فضای فضا می کشد محل برخورد آنها یک محور گردان از مرکز است.

بر بلور که باریکه های پراشیده در هر از مخروطها قرار می گیرند

$$S(n) = f_A + f_B e^{-in\pi}$$

$$S = f_A - f_B$$

$$S = f_A + f_B$$

برای  $n$  فرد

برای  $n$  زوج

ب)  $f_A = f_B$

چ) اگر  $f_A = f_B$  باشد اتمها به صورت یک خط می کشند محل

این است که بردار انتقالی صیقل  $a/2$  در مرکز پراش

$$(a \cdot \Delta k) = 2\pi \times \text{عدد}$$

شکل دادن شبکه ی SC : برداری انتقال  $\vec{P}$  شبکه مکعبی ساده بصورت مجموع برداری است

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

برای انتقال وسط شبکه دادن  $\Rightarrow A = \frac{2\pi}{a}\hat{x}$

(۲۲)

$$B = \frac{2\pi}{a}\hat{y}$$

بردار دادن  $\leftarrow C = \frac{2\pi}{a}\hat{z}$

— سه شبکه دادن خود یک شبکه مکعبی ساده ثابت شبکه  $\frac{2\pi}{a}$  است

میزبانی نقطه ای اول برپوشش عبارتند از جهات محور مثبت مشخص بردار شبکه دادن  $\pm A$  ،  $\pm B$  ،  $\pm C$

لحین رابطه ۲۲ را به ۲ قسمی کنیم  $\leftarrow \pm \frac{1}{2}A = \pm \frac{\pi}{a}\hat{x}$

(۲۳)

$$\pm \frac{1}{2}B = \pm \frac{\pi}{a}\hat{y}$$

$$\pm \frac{1}{2}C = \pm \frac{\pi}{a}\hat{z}$$

این مشخص صفت مکعبی به جهت  $\frac{2\pi}{a}$  و  $\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$  آسانگی می دهند این شبکه نقطه اول برپوشش شبکه بزرگ SC است

شبهه دارون شبهه bcc ← يك شبهه شعاعی مخروطی

$$a_1^0 = \frac{1}{2} a (-x + y + z)$$

$$b_1^0 = \frac{1}{2} a (+x + y + z)$$

$$c_1^0 = \frac{1}{2} a (x + y + z)$$

یا ضمیمه شعاعی قرارداری - ضلع  $\frac{4\pi}{a}$  است. بکار

برون دستورالعلاج (۲۳) در مورد بردار  $\vec{a}_2 \times \vec{a}_3$  کمی بسط

fcc ریاست.

$$\vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix} = 2\hat{j} + 2\hat{k}$$

مجموعه  $V = \frac{1}{2} a^3$

$$a_1^0 = \frac{2\pi (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}{|\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|} = \frac{2\pi (2\hat{j} + 2\hat{k})}{2a} = \frac{2\pi}{a} (\hat{j} + \hat{k})$$

$$\vec{a}_1^* = \alpha \hat{i} + \beta \hat{j} + \gamma \hat{k} \rightarrow \begin{cases} \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_1^* = a^2 \\ \vec{a}_2 \cdot \vec{a}_1^* = 0 \\ \vec{a}_3 \cdot \vec{a}_1^* = 0 \end{cases}$$

برای ابررستیت یعنی با استفاده از روابط ① در رابطه با  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  با دارم یا ضمیمه شعاعی و درون موازی السطوح

است که در ۳ بردار A و B و C که با روابط برقرار می شود، نمای شود. حجم یا ضمیمه شعاعی

شبهه دارون برابر  $2 \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$  است. این موازی السطوح شامل یک نقطه از شبهه دارون

است و از هر یک از حقیقت رأس این موازی السطوح متشکل است: همسوازی -

السطوح شامل  $\frac{1}{8}$  هر یک از رأس است.

$$A = \frac{2\pi}{a} (x + y)$$

$$B = \frac{2\pi}{a} (y + z)$$

$$C = \frac{2\pi}{a} (x + z)$$

(۲۵)

این بردار بردارهای بسط شبهه fcc هستند بنابراین شبهه دارون شبهه bcc شبهه fcc است.

اگر  $h, k, l$  اعداد درست باشند و بردار  $\vec{hkl}$  از شبهه دارون چنین است.

$$G = hA + kB + lC = \frac{2\pi}{a} [(h+l)\hat{x} + (h+k)\hat{y} + (k+l)\hat{z}]$$

(۲۶)

کوچکترین G عبارتند از ۱۲ بردار زیرا که  $\vec{hkl}$  مستقل علامتها بر روی می آیند.

$$\frac{2\pi}{a} (\pm x \pm y)$$

$$\frac{2\pi}{a} (\pm y \pm z)$$

$$\frac{2\pi}{a} (\pm x \pm z)$$

(۲۷)

منطقه اول بردارهای  $\vec{hkl}$  به عنوان یا ضمیمه شعاعی شبهه دارون در نظر گرفته می شود. در مرکز چنین یا ضمیمه شعاعی یک نقطه شبهه واقع است.

این منطقه با صفحات عمود منصف ۲۷ برابر رابطه ۲۷ مشخص می شود و همان گونه که در شکل صفتی عدد در هر یک از این دو دوازده

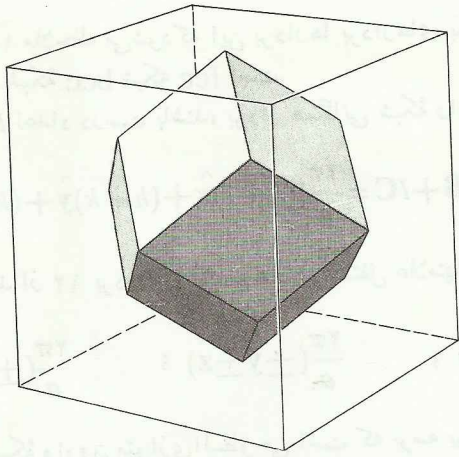
وجهی لوزی رخ است. بردارهای  $\vec{hkl}$  که در این رابطه مرکز هر یک از این وجه در اصل می شود عبارتند

$$\frac{\pi}{a} (\pm x \pm y)$$

$$\frac{\pi}{a} (\pm y \pm z)$$

$$\frac{\pi}{a} (\pm x \pm z)$$

(۲۸)



شکل ۲۱. منطقه اول بریلوئن شبکه مکعبی مرکز حجمی. این شکل، یک دوازده وجهی لوزی رخ منظم است.

$$\begin{cases} (2) & \alpha - \beta + \gamma = 0 \\ (3) & \alpha + \beta - \gamma = 0 \\ (1) & -\alpha + \beta + \gamma = \frac{2\pi}{a} \end{cases} \rightarrow \alpha = \beta = \gamma = \frac{2\pi}{a}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} a_1^* = \frac{2\pi}{a} (k + j) \\ a_2^* = \frac{2\pi}{a} (k + i) \\ a_3^* = \frac{2\pi}{a} (i + j) \end{cases}$$

این شبکه بردهای یک شبکه fcc را دارد و در صورتی که طول دارند

$$G_{hkl} = h a_1^* + k a_2^* + l a_3^* \Rightarrow \text{نتیجه} \Rightarrow \text{ضرایب صحیح همان hkl اند}$$

$$G \cdot a_1 = 2\pi$$

$$G \cdot a_2 = 2\pi$$

$$G \cdot a_3 = 2\pi$$

دارون شبکه fcc

بردارهای انتقال شبکه fcc که در شکل زیر نشان داده شده اند عبارتند از:

$$\begin{cases} a' = \frac{1}{2} a (\hat{x} + \hat{y}) \\ b' = \frac{1}{2} a (\hat{y} + \hat{z}) \\ c' = \frac{1}{2} a (\hat{z} + \hat{x}) \end{cases}$$

(۷۹)

$$V = \frac{1}{4} a^3$$

$$A = \frac{2\pi}{a} (x + y - z)$$

$$B = \frac{2\pi}{a} (-x + y + z)$$

$$C = \frac{2\pi}{a} (x - y + z)$$

بردارهای انتقال شبکه A, B, C  
 شبکه دارون شبکه fcc عبارتند از:

بردارهای انتقال شبکه bcc از (۸۰) ⇒

— بردارهای شبکه دارون شبکه fcc شبکه bcc است

— حجم یافته دارون  $4 \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$

— بردارهای شبکه دارون عبارتند از:

hkl

$$G = \frac{2\pi}{a} [h - k + l] \hat{x} + (h + k - l) \hat{y} + (-h + k + l) \hat{z} \quad (۸۱)$$

اعداد صحیح ژنرال h, k, l

کوتاهترین بردارهای G

$$\frac{2\pi}{a} (\pm x \pm y \pm z)$$

(۸۲)

۸ بردار در مجموع

— بخش اعظمی از فضای یافته شبکه دارون fcc را ۸ صفحه عمودسخت این بردارها تشکیل می دهند، زنی گوشه های هشت وجهی

حاصل توسط صفحات عمودسخت متسلسل بر روی شبکه دارون یعنی ←

مقطع می شود. توجه داریم که  $\left(\frac{2\pi}{a}\right)(2x)$  یک بردار شبکه دارون است زیرا

با A+C برابر است. منطقه ۱ بریلوئن، کوچکترین حجم محدود حول مبدأ

است و همان گوشه که در شکل بعد نشان داده شده است. شکل یک ۸ وجهی

است که سطح گوشه آن قطع شده است. سطح هفتی فوق، سطحی

$$\frac{2\pi}{a} (\pm 2x)$$

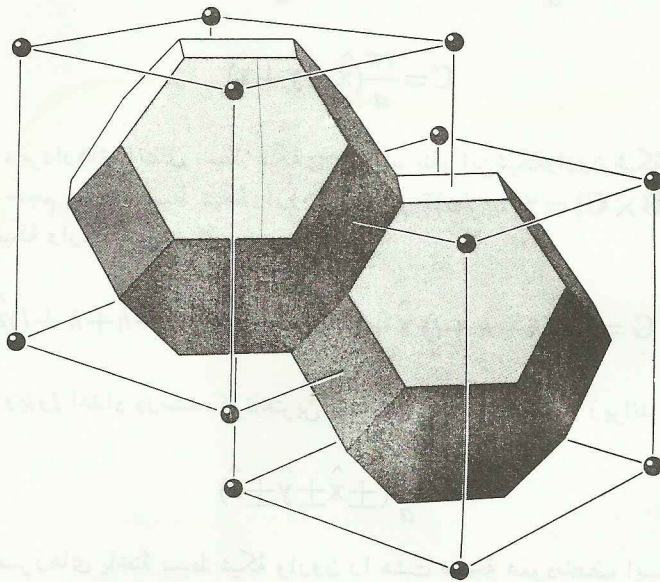
$$\frac{2\pi}{a} (\pm 2y)$$

$$\frac{2\pi}{a} (\pm 2z)$$

(۸۳)

— حجم  $\frac{2\pi}{a}$  و  $\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$  را تشکیل می دهند.

۱۵

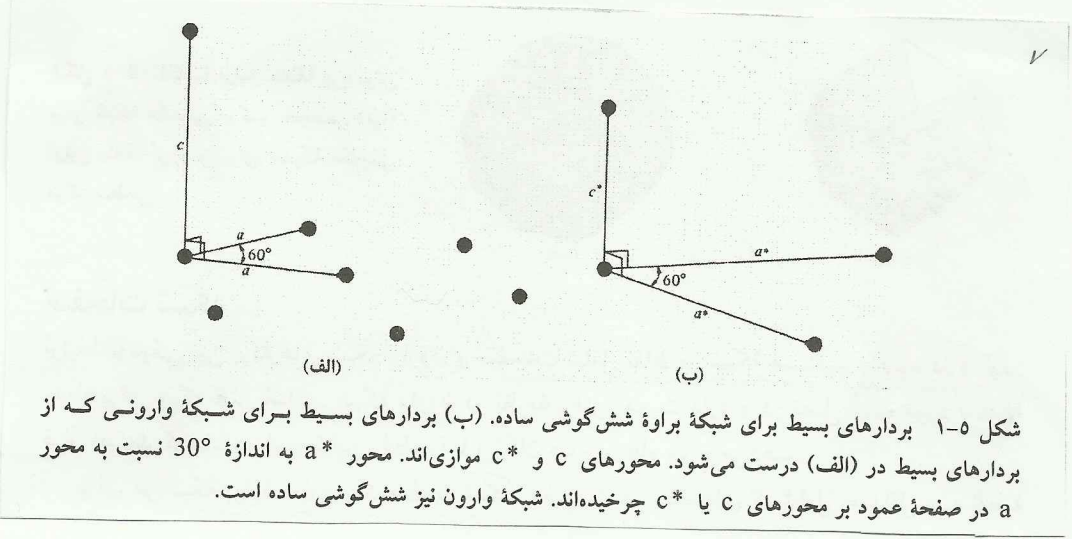


شکل ۲۳. منطقه‌های بریلوئن شبکه مکعبی مرکز سطحی. یاخته‌ها در فضای واروند و شبکه وارون مرکز حجمی است.

نکته: ساختار فلک یکبره‌ای شش‌گوشی، یک شبکه برده‌نیست، بنابراین شبکه وارونی که در تحلیل طایرتهای hep - کار می‌آورد ارتباط به شبکه شش‌گوشی ساده است.

\* بهترین نشان دهنده کوآرون یک شبکه‌ی برده‌نیست شش‌گوشی ساده یا شبکه‌ی شبکه a و c شکل زیر است و یک

شبکه‌ی شش‌گوشی ساده‌ی دیگر با شبکه‌های شبکه‌ی  $\frac{2\pi}{c}$  و  $\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}$  است. شکل با کوسین شبکه مستقیم است. حول محور c، 30 درجه چرخیده است.



صفحات شبکه: ارتباط نزدیکی بین برداشتی شبکه دادن و صفحات شامل نقاط شبکه سیستم وجود دارند. این رابطه برای درک نفس

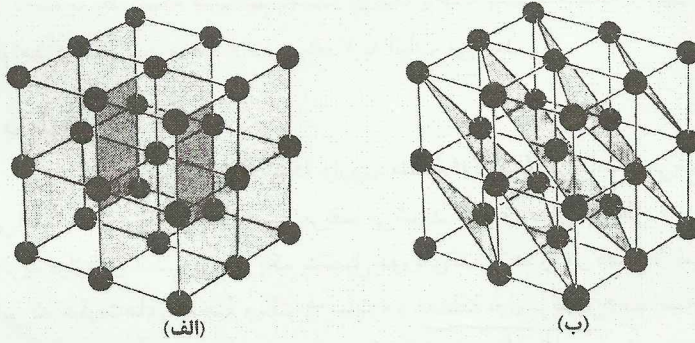
اساسی شبکه دادن در سطح برایش اهمیت دارد. ← فصل آینده

برای هر شبکه بردهای معلوم یک صفحه‌ای شبکه که به صورت صفحاتی که شامل صفحاتی شبکه بر او با بر طرف می‌شود.

به علت تقارن انتقالی شبکه بر او یک چنین صفحه‌ای در عمل شامل

تعداد نامتناهی نقطه شبکه خواهد بود که یک شبکه بر او دویعدی درون آن صفحه به وجود می‌آورند.

برخی صفحه‌های شبکه مربوط به شبکه بر او مکعبی ساده، در شکل (۳-۵) نشان داده شده‌اند.



شکل ۳-۵ برخی صفحه‌های شبکه (سایه‌زده) در یک شبکه بر او مکعبی ساده؛ (الف) و (ب) دو روش متفاوت نمایش شبکه به صورت خانواده‌ای از صفحات شبکه می‌باشد.



منظور از خانواده‌ای از صفحات شبکه مجموعه‌ای از صفحات شبکه است که موازی هم و به فاصله مساوی از یکدیگر قرار دارند، به طوری که با هم، همه نقاط شبکه برآوه سه‌بعدی را شامل می‌شوند. هر صفحه شبکه عضوی از یک چنین خانواده‌ای است. بدیهی است که تفکیک یک شبکه برآوه به صورت صفحات شبکه، یکتا نیست (شکل ۵-۳). شبکه وارون روش بسیار ساده‌ای برای دسته‌بندی تمام خانواده‌های ممکن صفحات فراهم می‌کند که در قضیه زیر بیان می‌شود:

برای هر خانواده از صفحات شبکه که به فاصله  $d$  از هم واقع‌اند، بردارهای شبکه وارونی وجود دارند که بر این صفحات عمودند و کوتاه‌ترین آن‌ها به طول  $2\pi/d$

می‌کنند. (از آن‌جا که می‌دانیم بردارهای شبکه وارونی عمود بر هر خانواده از صفحات شبکه وجود دارند، طبیعی است که یک بردار شبکه وارون را برای نمایش بردار عمود برگزینیم. برای این که این گزینش منحصر به فرد باشد، کوتاه‌ترین بردار شبکه وارون را مورد استفاده قرار می‌دهیم. در این صورت به شاخص‌های میلر صفحه می‌رسیم.)

شاخص‌های میلر یک صفحه شبکه مختصات کوتاه‌ترین بردار شبکه وارون عمود بر آن صفحه نسبت به مجموعه معینی از بردارهای بسط شبکه وارون‌اند. بنابراین صفحه‌ای با شاخص‌های میلر  $h, k$  و  $l$  عمود بر بردار شبکه وارون  $hb_1 + kb_2 + lb_3$  است.

(طبق این تعریف به دلیل این که هر بردار شبکه وارون ترکیبی خطی از سه بردار بسط با ضرایب عدد صحیح است، شاخص‌های میلر نیز اعداد صحیح‌اند. از آن‌جا که بردار عمود بر یک صفحه به وسیله کوتاه‌ترین بردار شبکه وارون عمود بر آن مشخص می‌شود، اعداد صحیح  $h, k$  و  $l$  نمی‌توانند هیچ مضرب مشترکی داشته باشند. در ضمن توجه داشته باشید که شاخص‌های میلر به انتخاب ویژه بردارهای بسط بستگی دارند.)

(در شبکه‌های برآوه مکعبی ساده، شبکه وارون نیز مکعبی ساده است و شاخص‌های میلر مختصات بردار عمود بر یک صفحه در دستگاه مختصات مکعبی‌اند.) (به‌عنوان یک قاعده کلی، شبکه‌های برآوه مکعبی مرکز سطحی و مکعبی مرکز حجمی در قالب یک یاخته مکعبی قراردادی یا به عبارت دیگر به صورت شبکه‌های دارای پایه مکعبی ساده توصیف می‌شوند.) از آن‌جا که هر صفحه شبکه در یک شبکه  $bcc$  یا  $fcc$ ، متعلق به شبکه مکعبی ساده زیربنایی آن‌ها نیز هست، می‌توان از همان شاخص‌گذاری مکعبی ابتدایی برای مشخص کردن صفحات شبکه استفاده کرد. (در عمل فقط در توصیف بلورهای غیر مکعبی است که باید به یاد داشته باشیم شاخص‌های میلر مختصات بردار عمود در دستگاهی است که نه با شبکه مستقیم، بلکه با شبکه وارون داده می‌شود.)

شاخص‌های میلر یک صفحه در شبکه مستقیم یک تفسیر هندسی دارند که گاهی به‌عنوان راه دیگری برای معرفی آن‌ها پیشنهاد می‌شود. با توجه به آن که یک صفحه شبکه با شاخص‌های میلر  $h, k$  و  $l$  بر بردار شبکه وارون  $K = hb_1 + kb_2 + lb_3$  عمود است، این صفحه با انتخاب ثابت مناسب  $A$ ، در صفحه پیوسته  $K \cdot r = A$  واقع خواهد بود. این صفحه محورهای تعیین شده به وسیله بردارهای بسط شبکه مستقیم یعنی  $a_1, a_2$  و  $a_3$  را در نقاط  $x_1 a_1, x_2 a_2$  و  $x_3 a_3$  قطع می‌کند (شکل ۵-۴) که در آن‌ها  $x_1$  ها به وسیله این شرط تعیین می‌شوند که  $x_1 a_1$  ها باید در معادله صفحه  $K \cdot (x_1 a_1) = A$  صدق کنند. از آن‌جا که  $K \cdot a_1 = 2\pi h$ ،  $K \cdot a_2 = 2\pi k$  و  $K \cdot a_3 = 2\pi l$  است نتیجه می‌شود که

حاصل بردار  $\vec{G}$  از  $\vec{R}$   $\vec{G} \cdot \vec{R} = 2\pi m$

تداخل سازنده  $2d \sin \theta = n\lambda \rightarrow G = 2k \sin \theta$

تداخل سازنده  $\vec{G} \cdot \vec{a}_1 = 2\pi n_1 \quad x n_1$   
 $\vec{G} \cdot \vec{a}_2 = 2\pi n_2 \quad x n_2$   
 $\vec{G} \cdot \vec{a}_3 = 2\pi n_3 \quad x n_3$   
 $\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$  ①  
 $\vec{G} \cdot \vec{R} = 2\pi m \rightarrow \vec{G} \cdot \vec{R} = 2\pi m \rightarrow e^{i\vec{G} \cdot \vec{R}} = 1$  ③  
 تداخل سازنده

تسهلی وارون: شبکه وارون همان شبکه ای است که بردارهایش در  $e^{i\vec{G} \cdot \vec{R}} = 1$  صدق کند  
 این رابطه از روش لاوره بدست آمد که حاصل فاز است که در دایره موج پراکنده شده و هموار شود

$\vec{G} = n_1^* \vec{a}_1^* + n_2^* \vec{a}_2^* + n_3^* \vec{a}_3^*$  ② G وارون بردار R است

$\vec{a}_i \cdot \vec{a}_j^* = 2\pi \delta_{ij}$  ④

$n_1 n_1^* \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_1^* + n_2 n_2^* \vec{a}_2 \cdot \vec{a}_2^* + n_3 n_3^* \vec{a}_3 \cdot \vec{a}_3^* + \dots = 2\pi m$

$\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_1^* = 2\pi$   
 $\vec{a}_2 \cdot \vec{a}_1^* = 0$   
 $\vec{a}_3 \cdot \vec{a}_1^* = 0$

نتیجه بگیریم  $a_1^*$  بر  $a_2$  و  $a_3$  عمود است و  $a_1^*$  و  $a_2$  در یک راستا هستند  
 اگر فرض بر این است

تقریب: تسهلی وارون به طول  $a$  در نظر بگیرد بردارهای بنیادی بردارهای وارون آن را بنویسید

$\vec{a}_1^* = \frac{2\pi}{V} \vec{a}_2 \times \vec{a}_3$        $a_1^* = \frac{2\pi}{a}$  ⑤

$V = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|$   
 V جایی که در معادله می رود و جاگذاری می کنیم

$\vec{a}_2^* = \frac{2\pi}{V} \vec{a}_3 \times \vec{a}_1$        $V^* = \frac{2\pi^3}{a^3} = \frac{2\pi^3}{V}$  ⑥

$\vec{a}_3^* = \frac{2\pi}{V} \vec{a}_1 \times \vec{a}_2$        $V^* = |\vec{a}_1^* \cdot (\vec{a}_2^* \times \vec{a}_3^*)|$  ⑦

تسهلی وارون  $V^*$  شبکه مستقیم  $V$  با رابطه بر بردار است ⑧  
 $V^* = \frac{2\pi^3}{V}$

وارون سه ضلعی مرکز جرم است. وارون سه ضلعی مرکز سطح مرکز جرم است.   
 وارون سه ضلعی مستقیم سه ضلعی است. وارون سه ضلعی مرکز جرم است.   
 مختصات بردارهای بنیادی در سه ضلعی مرکز جرم

$$\begin{cases} a_1 = \frac{a}{2}(-i+j+k) \\ a_2 = \frac{a}{2}(i-j+k) \\ a_3 = \frac{a}{2}(i+j-k) \end{cases}$$

$$a_2 \times a_3 = \begin{vmatrix} i & j & k \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{vmatrix} = 2j + 2k$$

$$a_1^* = \frac{2\pi}{|a_1 \cdot (a_2 \times a_3)|} (a_2 \times a_3)$$

$$a_1^* = \frac{a^3/4 \times 2\pi (j+k)}{a^3/8 \times 4} = \frac{2\pi}{a} (j+k)$$

$$a_1^* = \alpha i + \beta j + \gamma k$$

$$a_1 \cdot a_1^* = 2\pi \quad a_1 \cdot a_2^* = 0 \quad a_1 \cdot a_3^* = 0$$

$$\begin{cases} \alpha - \beta + \gamma = 0 \\ \alpha + \beta - \gamma = 0 \\ -\alpha + \beta + \gamma = \frac{2\pi}{a} \end{cases} \quad \beta = \gamma = \frac{2\pi}{a}$$

این سه بردار یک سه ضلعی PCC می سازند. یعنی سه ضلعی

$$a_1^* = \frac{2\pi}{a} (k+j)$$

$$a_2^* = \frac{2\pi}{a} (i+k)$$

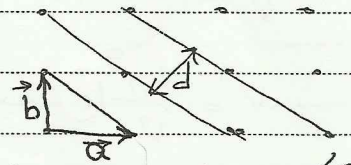
$$a_3^* = \frac{2\pi}{a} (i+j)$$

$$G(hkl) = h\vec{a}_1^* + k\vec{a}_2^* + l\vec{a}_3^*$$

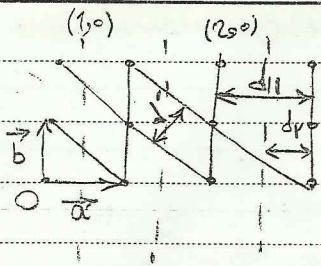
سه ضلعی داریم ضرایب صحیح همان h, k, l هستند

$$G \cdot a_1 = 2\pi \quad G \cdot a_2 = 2\pi \quad G \cdot a_3 = 2\pi$$

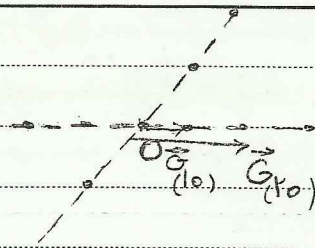
$$G_{hkl} = 2k \sin \theta = \frac{2\pi}{d_{hkl}} n$$



سه ضلعی مستقیم داریم و خواهیم سه ضلعی وارون آن را بدست آوردیم



$$d_2 = \frac{1}{2} d_1$$



$$G_{(1,0)} = \frac{2\pi}{d_1} n$$

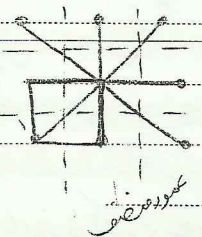
$$G_{(2,0)} = \frac{2\pi}{d_2} n$$

$$G_{(2,0)} = 2 G_{(1,0)}$$

$$m G_{hkl} = G(mh, mk, ml)$$

دسته صنفه (۱، ۲، ۳، ۴) با دسته صنفه (۱، ۲، ۳، ۴) چه تفاوتی دارند؟ آیا برابر و موازی است؟

کدام اهمیت فیزیکی دارند و کاربرد آنها چیست؟ آیا جهت و دامنه دیتا در شبکه وارون را با جهت و دامنه دیتا در شبکه معکوس می توانیم مقایسه کنیم؟



مربع نقطه چین وارون مربع خفا شده است. اگر مستطیل برداشته باشد آنجا که

کوچکترین فضای که بین خطوط عمود نصف محور عمود شود در هم O در مرکز آن است و یا جهت عمود در O بدست می آید

مثال:

شرط براگن ماژنده را بگیریم معادله  $k - k' = G$  از این مراحل ماژنده روی می آید.

(15)  $k = k'$   
 $\vec{G} = k' - k \rightarrow k' = k + \vec{G}$   
 $k = k' + \vec{G} + 2k \cdot \vec{G}$

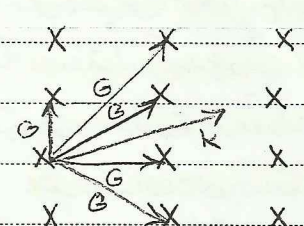
(16)  $\vec{G} + k \cdot \vec{G} = 0$

بردارهای  $G$  بردارهای مشرفی هستند بردارهای  $k$  چه بردارهایی هستند؟  $k$  ها باید در این رابطه صدق کنند

گفته جهت بردار  $k$  هم جهت با نیرو تابش فروری است و اندازه آن  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  پس  $k$  می تواند در اندازه ای

داشته باشد چون  $\lambda$  می تواند باشد.

بردارهای  $G$  محدودند به این که حاصل بین دو نقطه شبکه وارون باشند و این محدودیت را ندارد پس بردارهای  $G$  محدودترند و تعداد کمتری دارند.



(17)

در شبکه مربعی شرط  $G^2 + 2K \cdot G = 0$  قرار می دهیم

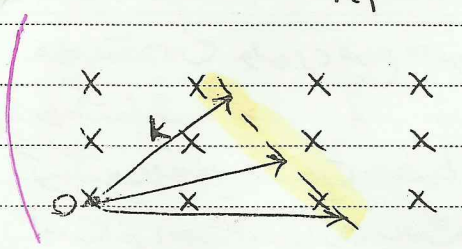
$\vec{a}_1 = a_1 \hat{i}$        $\vec{a}_1^* = \frac{2\pi}{a} \hat{i}$        $\vec{a}_2^* = \frac{2\pi}{a} \hat{j}$   
 (برای  $a_1$ )      (برای  $a_2$ )

$\vec{G} = \frac{2\pi}{a} (n_1 \hat{i} + n_2 \hat{j})$        $k = k_x \hat{i} + k_y \hat{j} \Rightarrow K \cdot G = \frac{4\pi^2}{a^2}$

$\frac{4\pi^2}{a^2} (n_1^2 + n_2^2) + (\frac{2\pi}{a}) [n_1 k_x + n_2 k_y] = 0$

$\rightarrow n_1 k_x + n_2 k_y = -\frac{\pi}{a} (n_1^2 + n_2^2)$

$k_y = -\frac{\pi}{a} \frac{(n_1^2 + n_2^2)}{n_2} - \frac{n_1}{n_2} k_x$  (18)

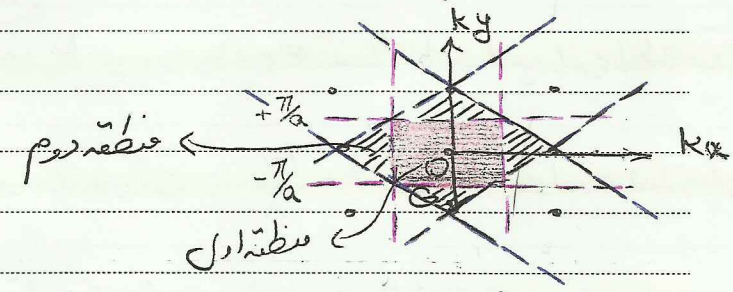


معادله خط: این خطوط برای بریلوئن می دهند. این مناطق که به ازای آن در داخل سازنده روی می دهند. همه ی بردارهای موج که استوای آنرا به خط چین برسد در شرط داخل سازنده صدق می کنند و بازتاب بر آن دارند و لگه های پراش را به هم می دهند.

برای شبکه مربعی خطوط بریلوئن را به دست آورید. (در معادله جای  $n_1$  و  $n_2$  عددی نگذاریم)

$n_1 k_x + n_2 k_y = -\frac{\pi}{a} (n_1^2 + n_2^2)$

$k_y = \pm \frac{\pi}{a} \rightarrow n_1 = 0, n_2 = 1$  (19)



(20)  $k_x + k_y = -\frac{2\pi}{a}$        $n_1 = 1, n_2 = 1$   
 این رابطه کرده و با طوری کرده، تمام لگه های بریلوئن به موازات صفحات بلوری هستند. کوچکترین مقدار این خط قطع می شود همان منطقه اول بریلوئن. منطقه اول بریلوئن تنها منطقه ی یک پاره است. برای رفتن از مقدار صفحات به منطقه  $n$  بریلوئن باید از  $n-1$  منطقه عبور کنیم. باید توجه داشت که حین در استای خود تقارن نباشد.

همه ی مناطق دارای مساحت یکسان هستند اما در شبکه مستطیل شکل خودی ندارند. تمام خصوصیات یک بلور در منطقه اول بریلوئن منبسط و یا منقبض و یا همبنداری است.