

1. Crystal structure
2. Crystal diffraction
3. Crystal binding
4. Thermal vibration (phonon)
5. Specific heat

Thermal properties of solids

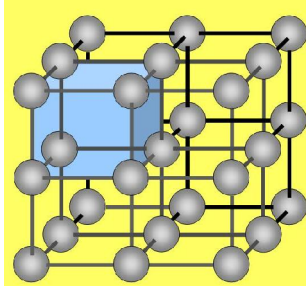
فيزياء الحالة الصلبة تختص بشكل كبير لدراسة البلورات والالكترونات في هذه البلورات, وتعتبر هذه الدراسة امتداد للفيزياء الذرية.

تتكون البلورات المثالية بواسطة التكرار الامتناهي من وحدات تركيبية متماثلة وغالبا ما تكون الوحدة التركيبية (unit cell)

من عدد من الذرات او الجزيئات وصولاً الى 10000 ذرة او جزيئة

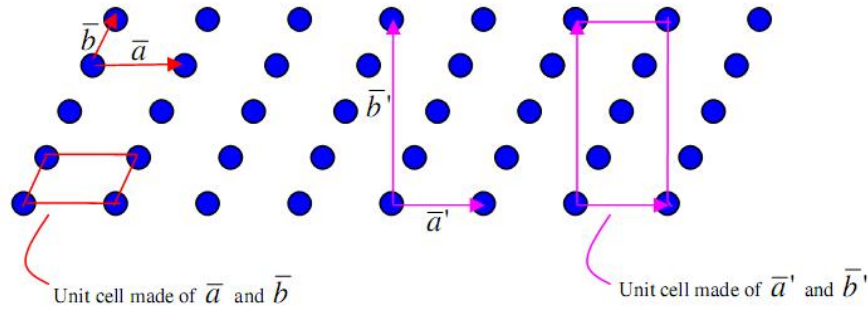
The Unit Cell Concept

The simplest repeating unit in a crystal is called a **unit cell**. Opposite faces of a unit cell are parallel. Not unique. There can be several unit cells of a crystal. The smallest possible unit cell is called **primitive unit cell** of a particular crystal structure.



Unit cell

ان الشبكة ومتجهات الانتقال , يقال لهل اولية (, اذا كانت أي نقطتين , يبدوون خلالها التركيب الذري نفسه ويحقق العلاقة:-



primitive translational vector

non-primitive translational vector

حيث ان هي نقطة في وحدة اولية من نقطة الاصل
 اعداد لوحدة الاراحة الازمة في اتجاهات , , ,
 هي وحدة مسافات في كل اتجاه , , ,
 ان متجهات الانتقال الاولى لها نقطة شبكية واحدة لكل وحدة خلية
 اما متجهات الانتقال غير الاولى فلها اكثر من نقطة انتقال شبكية لكل وحدة خلية كما في الشكل اعلاه
 ان تركيب كل البلورات يوصف بوحدات الشبكية () مع مجموعة من ذرات ملتحقة بكل نقطة
 شبكية وهذه المجموعة من الذرات تدعى بالقاعدة () وتكرر في الفراغ مكونة التركيب البلوري .

STRUCTURE OF SOLIDS

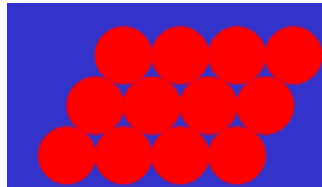
Can be classified under several criteria based on atomic arrangements, electrical properties, thermal properties, chemical bonds etc. Using electrical criterion: Conductors, Insulators, Semiconductors. Using atomic arrangements: Crystalline, Amorphous, Polycrystalline.

Crystalline Solids

Atoms arranged in a 3-D long range order. "Single crystals" emphasizes one type of crystal order that exists as opposed to polycrystals.

١) مواد صلبة بلورية (Crystalline Solids) (مواد يكون لها درجة تجمد محددة وثابتة):

وهي مواد توجد على هيئة بلورات ذات أشكال هندسية محددة (تمتاز بنوع من الانتظام والترتيب) مثل ملح الطعام (NaCl) (الملح الصخري rock salt) والكبريت (S) والفلزات مثل النحاس (Cu) وغيرها. وتمتاز المواد الصلبة البلورية بأن درجة تجمدها ثابتة لأنها تمتاز بالانتظام والترتيب في شكلها البلوري.

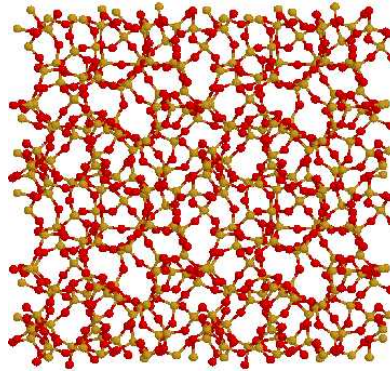


Amorphous Solids

No regular long range order of arrangement in the atoms. Eg. Polymers, common window glass, ceramic. Can be prepared by rapidly cooling molten material. Rapid—minimizes time for atoms to pack into a more thermodynamically favorable crystalline state as Fig below.

٢) مواد صلبة غير بلورية (أمورفية Amorphous Solids) (مواد لا يكون لها درجة تجمد محددة وثابتة)

لا تمتاز هذه المواد بالانتظام (لا تتواجد في صورة هندسية محددة) كما للمواد الصلبة البلورية، لذلك فإنها لا تتجمد عند درجة حرارة ثابتة. ومن أمثلة هذا النوع الزجاج والمطاط، والبلاستيك.

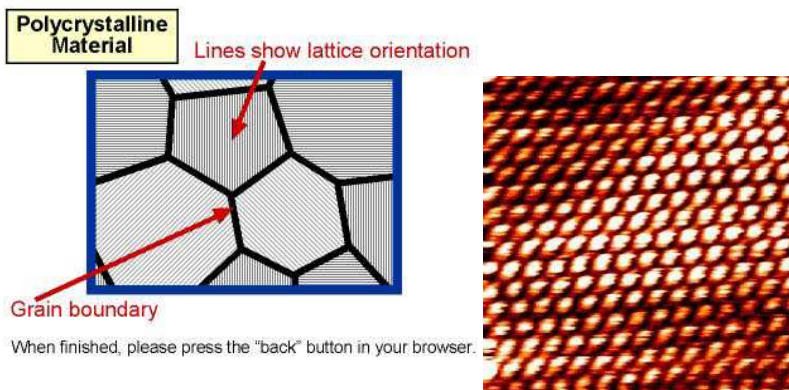


تركيب غير منتظم (عشوائي)

Continuous random network structure of atoms in an amorphous solid

Polycrystalline Solids

Atomic order present in sections (grains) of the solid. Different order of arrangement from grain to grain. Grain sizes = hundreds of μ m. An aggregate of a large number of small crystals or grains in which the structure is regular, but the crystals or grains are arranged in a random fashion.



Polycrystalline Solids

Examples:

Amorphous silicon (a-Si) used to make thin film transistors (TFTs) used as switching elements in LCDs. Polycrystalline Si – Gate materials in MOSFETS. Active regions of most solid state devices are made of crystalline semiconductors.

اذا امتدت التكرارية خلال المادة فسوف نحصل على بلورة منفردة () اما اذا اضطربت التكرارية عند الحدود الجيبية () فسوف نحصل على تركيب متعدد البلورات. وعندما لا تعطى الذرات الفرصة الكافية لتنظيم نفسها بشكل ملائم أي بواسطة التعرض لحركتها () فسوف تكون المادة الغير متبلورة () . اما ما يتعلق بالبلاستيك والبوليمرات فتتكون من جزيئات كبيرة ذات تركيب غير منتظم ويصعب الحصول على تعبئة بلورية منها ()

Lattice symmetry operation

There are mainly six symmetry operation :-

- | | |
|-----------------------------------|----------------------------|
| 1. Translation symmetry operation | تناظر انتقالي |
| 2. Rotation symmetry operation | تناظر دوراني |
| 3. Reflection symmetry operation | تناظر انعكاسي |
| 4. Inversion symmetry operation | تناظر انقلابي |
| 5. Glide symmetry operation | تناظر ترحلي |
| 6. Screw symmetry operation | تناظر البرم (تدوير البرغي) |

1. Translation symmetry operation تناظر انتقالي

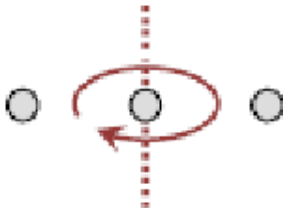
$$\mathbf{T} = n_1 \bar{\mathbf{a}} + n_2 \bar{\mathbf{b}} + n_3 \bar{\mathbf{c}}$$

$$\bar{\mathbf{r}} = \mathbf{r} + \mathbf{T}$$



ان مؤثر التناظر الانتقالي يتم بواسطة ازاحة التركيب البلوري او الشبكة بموازة نفسه ويربط بين أي نقطتين في الشبكة.

2. Rotation symmetry operation تناظر دوراني



عدد الدورات التي تعود بها النقطة واحد مثلا الى موقعها ويرمز لها بلرمز

Rotations by an angle $2\pi/n$ about a specific axis.



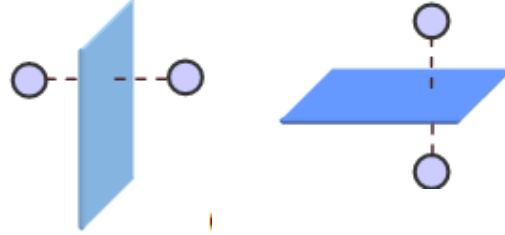
عدد الدورات التي تعود بها النقطة واحد مثلا الى موقعها 3-
اذا بقي محيط البلورة بدون تغيير بعد الدوران بزواوية
تسمى (بموثر التناظر الدوراني)
حيث ان فان هذه العملية

عدد الطيات او الدورات بحيث ان الذرة تبقى بدون أي تغيير وترجع الى موقعها الاصلي

3. Reflection symmetry operation (mirror plane)

تناظر انعكاسي

if we have point $r_I = a_x i + a_y j$
after applying a mirror (reflection)
we get $\bar{r}_I = a_x i - a_y j$



4. Inversion symmetry operation

تناظر انقلابي

if r represent any point or atom in space

$$r_I = a_x i + a_y j$$

$$-\bar{r}_I = -a_x i - a_y j$$

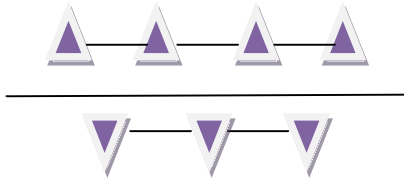


دوران ب 180 وانعكاس على شكل مرآة يمكن اعتبار الانقلاب التناظري عملية مركبة حيث يكافئ
دوران 180 مصحوبا بانعكاس على مستوي مرآة عمودي على مستوي الدوران

5. Glide symmetry operation

تناظر ترحلتي

اذا كان لدينا شبيكة كاملة ببعدين يمكن ان نحصل على موثر ترحلتي والذي يكافئ انعكاس مصحوبا
باننتقال 1/2 ثابت الشبيكة



6. Screw symmetry operation (تناظر البرم (تدوير البرغي)

يتكون مؤثر التناظر المحوري (تدوير البرغي) من محور دوران (1,2,3,4) مصحوباً بتناظر انتقالي وبذلك نحصل على العلاقة التالية

$$nT=Pa$$

حيث ان عدد صحيح

وتتذكر ان

$\alpha = 2\pi/n$ حيث ان هو عدد الطيات

$$T = \left(\frac{p}{n}\right)a$$

Ex. 1:- Draw the following screw operation 21

np في البداية نقارن 21 مع

$$n=2, p=1$$

نطبق المعادلة

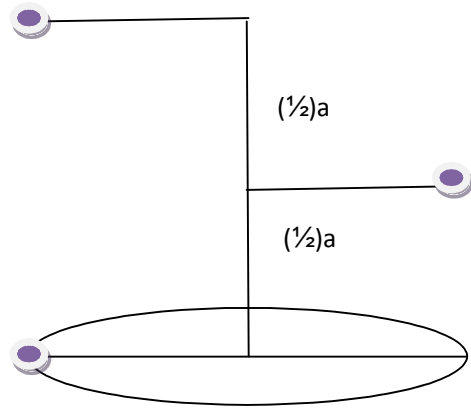
$$T = \left(\frac{p}{n}\right)a \gg T = 1/2 a \quad \text{مقدار الارتفاع}$$

$$\alpha = 2\pi/n \gg 2\pi/2 = \pi \quad \text{زاوية الدوران}$$

لكي نرسم هذا المؤثر نقوم برسم دائرة وهمية تساعدنا على تقدير الزاوية ونبدأ بتدويرها زاوي باي وبنفس الوقت نحرك الشكل مسافة

$$1/2 a$$

ولو دورنا الشكل مرة اخرى بنفس الزاوية ونفس مقدار الحركة فسوف نرجع الى الموضع الاصلي ولكن مصحوب بتناظر انتقالي



Ex. 2:- Draw the following screw operation 31

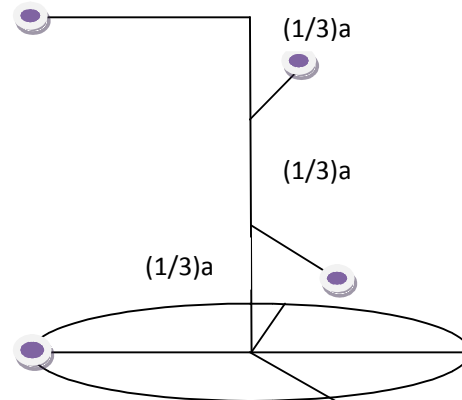
np في البداية نقارن 31 مع

$$n=3, p=1$$

نطبق المعادلة

$$T = \left(\frac{p}{n}\right)a \gg T = 1/3 a \quad \text{مقدار الارتفاع}$$

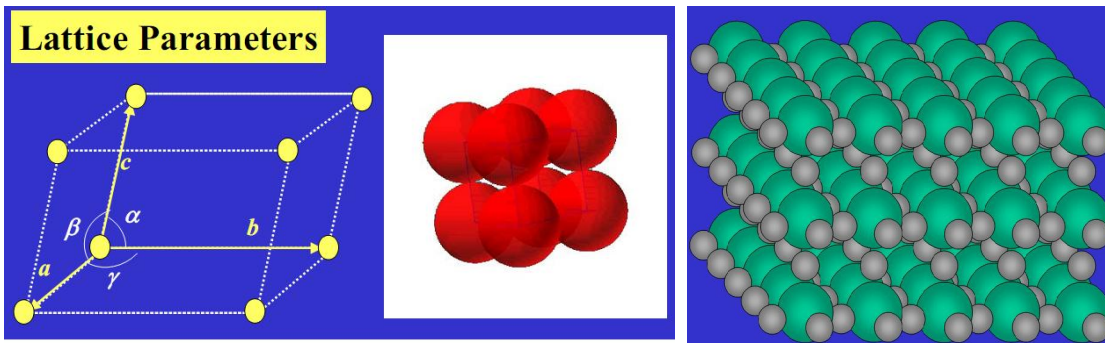
$$\alpha = 2\pi/3 \gg 2\pi/3 = 120^\circ \quad \text{زاوية الدوران}$$



Ex. 3:- H.W:- Draw the following screw operation 43?

Hard Sphere Model of Crystals

Assumes atoms are hard spheres with well defined diameters that touch. Atoms are arranged on periodic array – or lattice. Repetitive pattern – unit cell defined by lattice parameters comprising lengths of the 3 sides (a , b , c) and angles between the sides (α , β , γ).



Atoms in a Crystal

Crystal structure

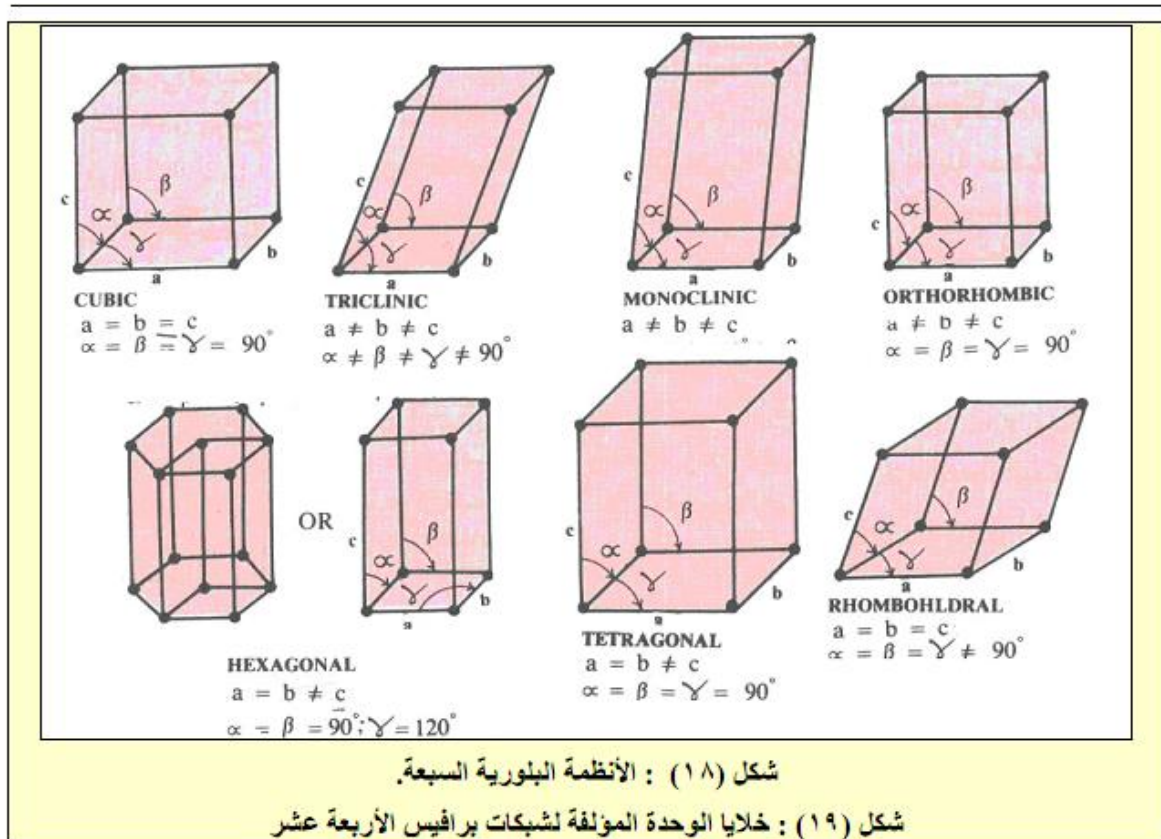
In a crystal, the atoms are arranged in a regular pattern that repeats throughout the material. The periodic arrangement of atoms in a crystal is called a lattice. All the lattice points are geometrically equivalent. A lattice therefore exhibits perfect translational symmetry and, relative to an arbitrarily chosen origin, at a lattice point, any other lattice point has the position vector.

$$r_{123} = n_1\mathbf{a} + n_2\mathbf{b} + n_3\mathbf{c}$$

where n is necessarily an integer and the vectors \mathbf{a} , \mathbf{b} and \mathbf{c} are fundamental units of the translational symmetry. There are fourteen different lattice structures which are called the *Bravais* lattices. By repeated duplication, a unit cell should reproduce the whole crystal. A Bravais lattice (unit cells) - a set of points constructed by translating a single point in discrete steps by a set of *basis vectors*. In 3-D, there are 14 unique Bravais lattices. All crystalline materials fit in one of these arrangements.

Crystal system

The **crystal system**: Set of rotation and reflection symmetries which leave a lattice point fixed. There are seven unique crystal systems: the cubic (isometric), hexagonal, tetragonal, rhombohedral (trigonal), orthorhombic, monoclinic and triclinic.



عدد الأشكال البلورية :

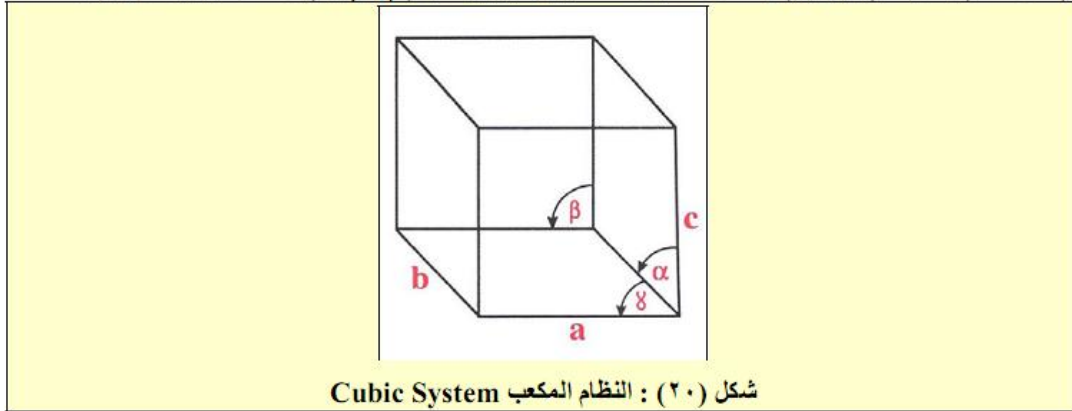
عدد الأشكال البلورية يربو (يزيد) على مائتي شكل، وكل مجموعة من هذه الأشكال تتشابه في تماثلها بحيث أرجعت الى (٣٢ قسماً)، وكل مجموعة من هذه الأقسام تتشابه في العلاقة بين أطوال محاورها (a, b, c) وفي الزوايا الموجودة بين هذه المحاور (α, β, γ) ، بحيث أرجعت الى الأنظمة البلورية السبع المعروفة (شكل ١٨ والشكل ١٩) وقد صنفتها العالم برافيس عام ١٨٤٨ م.

جدول (٢) : الأنظمة البلورية السبعة

أمثلة	الزوايا	طول الوحدة	النظام
الماس، ملح الطعام CaF ₂ , ZnS, (rock salt) NaCl	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	a = b = c	المكعب cubic
الزركون Zr، ثنائي أكسيد التيتانيوم TiO ₂ ، KH ₂ PO ₄ , SnO ₂	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	a = b ≠ c	رباعي الأوجه Tetragonal
الزنكايست، المغنيسيوم Mg، HgS، SiO ₂ (silica)	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	a = b ≠ c	سداسي الأوجه Hexagonal
الكالسيت (Calcite) CaCO ₃ ، البزموت Bi، NaNO ₃	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	a = b = c	ثلاثي الأوجه Rhombohedral
البارايست، البروم Br ₂ ، BaSO ₄ ، MgSO ₄ .7H ₂ O (epsomite)	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	a ≠ b ≠ c	المعيني Orthorhombic
كبريتات الصوديوم المانية CaSO ₄ .2H ₂ O، Na ₂ SO ₄ .10H ₂ O	$\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$	a ≠ b ≠ c	أحادي الميل Monoclinic
كبريتات النحاس المانية CuSO ₄ .5H ₂ O، K ₂ Cr ₂ O ₇ (Potassium Dichromate)	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	a ≠ b ≠ c	ثلاثي الميل Triclinic

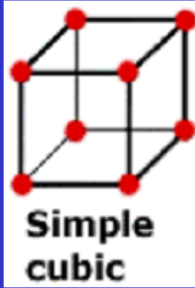
أولاً : النظام المكعب (Cubic System)

ويمتاز هذا النظام أن كل زوايا المكعب قائمة ($\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$) وأحرفه متساوية ($a = b = c$) (شكل ٢٠). حيث (a, b, c): تمثل أطوال المحاور البلورية و (α, β, γ): تمثل زوايا البلورة.



مثاله : (١) كلوريد الصوديوم (NaCl) (٢) كلوريد السيزيوم (CsCl) (٣) ألماس (C)

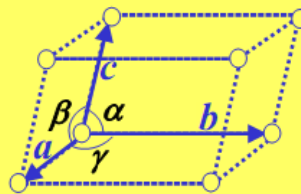
3 Bravais lattices



Symmetry elements: Four 3-fold rotation axes along cube diagonals

$$a = b = c$$

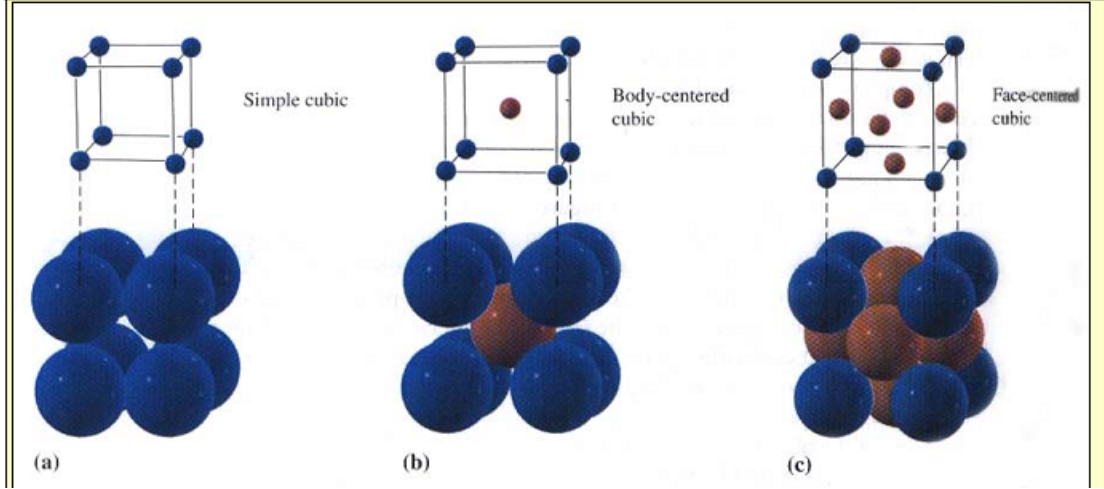
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



أنواع الخلايا المكعبة : Cubic Unit Cells

توجد ثلاثة أنواع مختلفة من الخلايا المكعبة.

- (١) مكعب بسيط Simple cubic أنظر الشكل (Fig. 27 a).
- (٢) مكعب جسمي المركز Body-centered cubic أنظر الشكل (Fig. 27 b).
- (٣) مكعب وجهي المركز Face-centered cubic أنظر الشكل (Fig. 27 c).



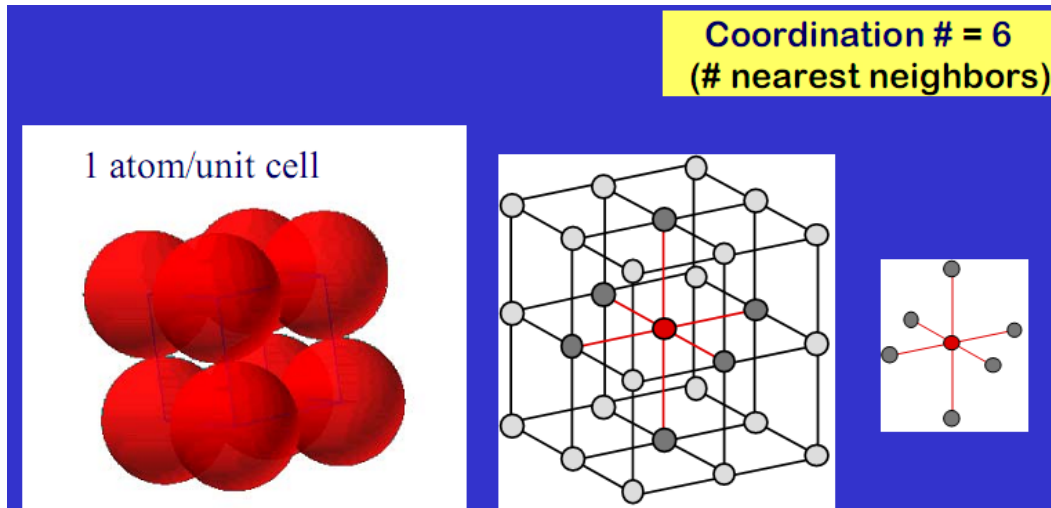
(1-a): Simple Cubic Structure (SC)

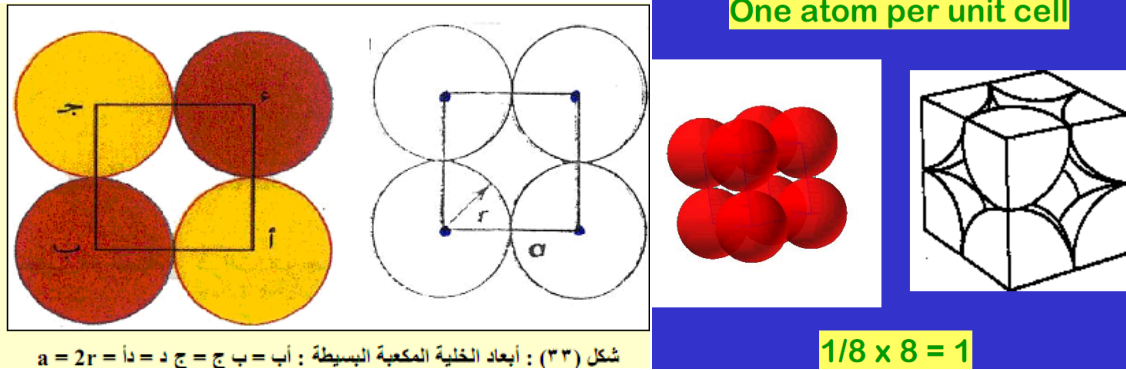
أ) المكعب البسيط Simple Cubic

الخلية الوحدة المكعبة البسيطة (Simple Cubic Unit Cell)

الخلية المكعبة البدائية Primitive Cubic Unit Cell

وهو عبارة عن مكعب به ثماني ذرات موجودة في أركان المكعب (نقاط شبكية عند الزوايا فقط) وهو فارغ من الداخل من أي جسيم. وهو يمتاز بأن نقاط الشبكة موجودة في الأركان فقط (شكل ٣١ و شكل ٣٢)، وعندئذ فكل نقطة (جزيء، ذرة، أيون) تتشارك بها ثمانية خلايا الأمر الذي يعني أن الخلية الواحدة تمثل نقطة واحدة فقط أي تمثل (1/8) نقطة من كل زاوية من الزوايا الثمانية.



SC

1. No. of atom/unit cell $1/8 \times 8 = 1$ atom
2. No. of nearest neighbor are 6
3. the distance of the nearest neighbor $d = a$
4. the relation between r and a is $a = 2r$, $r = a/2$
5. the primitive vector are $\bar{a} = ia$, $\bar{b} = jb$, $\bar{c} = kc$

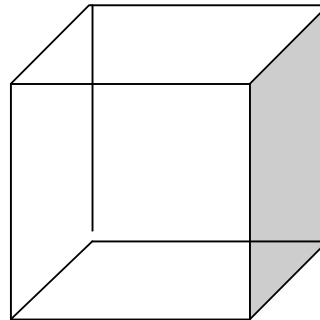
$$\text{Volume} = |\bar{a} \cdot \bar{b} \times \bar{c}|$$

$$\text{Volume} = ia \cdot (jb \times kc)$$

$a = b = c$ in the cubic system

$$\text{Volume} = ia \cdot (ja \times ka) \gg ia \cdot (ia^2)$$

$$\text{Volume} = a^3$$



(1-b): Body Centered Cubic Structure (BCC)

(ب) مكعب جسمي المركز (Body-Centred Cubic)

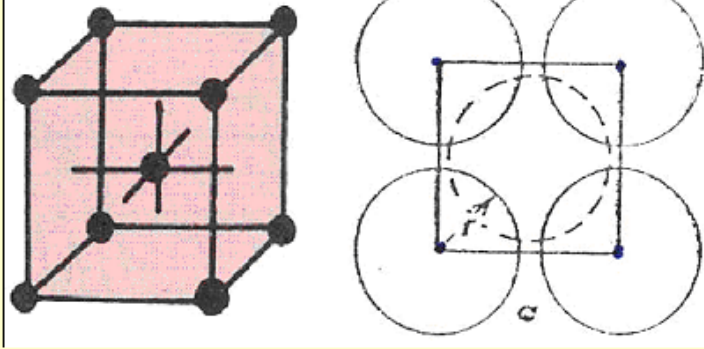
خلية مكعبة مجسمة (Body-Centred)

خلية مكعبة مركزية الجسم Body-Centered Cubic Unit Cell

وهي عبارة عن خلية مكعبة لها ثماني ذرات في أركان المكعبات (نقاط شبكية عند الأركان) وذرة في وسط المكعب (نقطة شبكية في مركز الخلية). ويمتاز إضافة الى ما يمتاز به المكعب البسيط بوجود نقطة في مركز الخلية الوحدة (شكل ٣٤) وهذا يعني أن الخلية الوحدة تمثل نقطتين. والذرة الوسطية تلامس الذرات في الأركان المقابلة ولذلك فإن أبعاد هذا النوع عبارة عن:

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

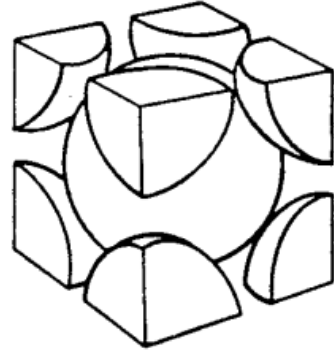
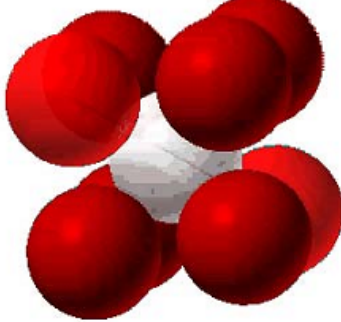
$$r = \left(\frac{a}{4}\right)\sqrt{3}$$



شكل (٣٤): الخلية المكعبة جسمية المركز (مركزة الجسم)

- Exhibited by Cr, Fe, Mo, Ta, W
- Close packed directions are cube diagonals.
- Coordination number = 8

All atoms are identical



2 atoms/unit cell

BCC

$$D = \sqrt{a^2 + (\sqrt{2}a)^2}$$

$$D = \sqrt{3}a$$

$$d = 1/2(\sqrt{3}a)$$

1. No. of atom/unit cell $(1/8 \cdot 8) + 1 = 2$ atom

2. No. of nearest neighbor are 8

3. the distance of the nearest neighbor $d = 1/2(\sqrt{3}a)$

4. the relation between r and a is $\sqrt{3}a = r + r + 2r$, $\sqrt{3}a = 4r \Rightarrow r = 1/4(\sqrt{3}a)$

$$r = d/2$$

5. the primitive vector are

$$\bar{a} = a/2(i + j - k)$$

$$\bar{b} = a/2(-i + j + k)$$

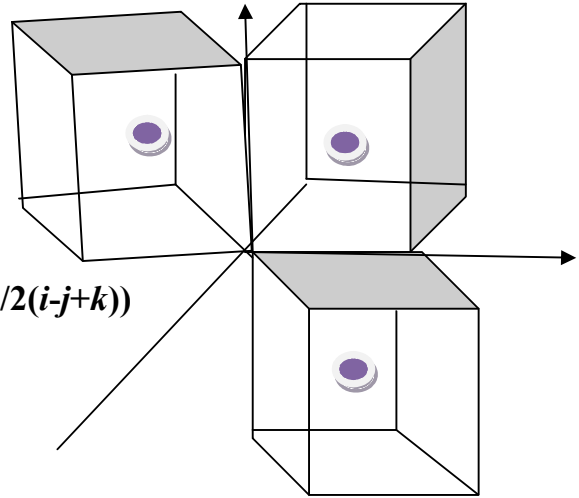
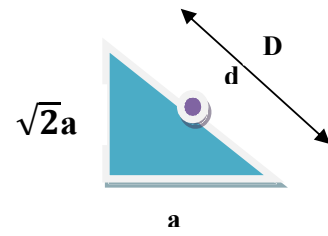
$$\bar{c} = a/2(i - j + k)$$

$$\text{Volume} = |\bar{a} \cdot \bar{b} \times \bar{c}|$$

$$\text{Volume} = a/2(i + j - k) \cdot (a/2(-i + j + k) \times a/2(i - j + k))$$

$$a = b = c \text{ in the cubic system}$$

$$\text{Volume} = (1/2)a^3$$



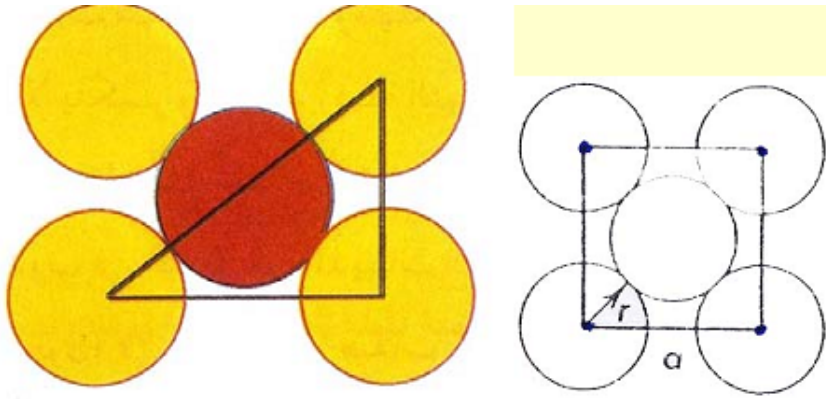
(1-c): Face Centered Cubic Structure (FCC)

ج) مكعب وجهي المركز Face-Centred Cubic (الخلية المكعبة ذات الواجهة)

الخلية الوحدة المكعبة المركزية الوجه Face – Centered Cubic Unit Cell

وهو عبارة عن مكعب له ثماني ذرات موجودة في الأركان الثمانية للمكعب وأيضاً ست ذرات موجودة في وسط كل واجهة من الواجهات الست للمكعب (نقاط شبكية عند الأركان الثمانية ونقطة في مركز كل من وجوه الستة).

وهذا ما يمتاز به عن المكعب البسيط (شكل ٣٥)، وبما أن كل وجه يكون مشترك بين خليتين فإن هذا يعني أن نصيب الخلية من هذه النقاط الست هو ثلاث نقاط ليكون مجمل ما تمثله الخلية هو أربع نقاط.



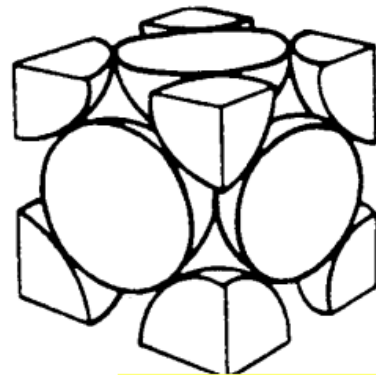
شكل (٣٦) : أبعاد الخلية المكعبة ذات الواجهة (مركزة الوجه).

وعليه تكون أبعاده كما يلي :

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

- Coordination number = 12
- 4 atoms/unit cell

All atoms are identical

Adapted from Fig. 3.1(a),
Callister 6e.

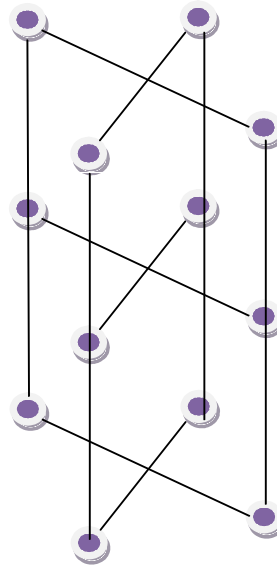
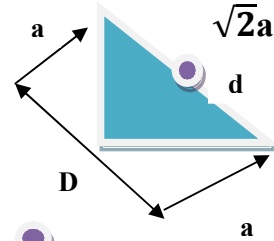
$$6 \times (1/2 \text{ face}) + 8 \times 1/8 (\text{corner}) = 4 \text{ atoms/unit cell}$$

FCC

$D = \sqrt{2}a$

$d = 1/2(\sqrt{2}a)$

1. No. of atom/unit cell $(1/8*8)+6*1/2=4$ atom
2. No. of nearest neighbor are 12
3 planes * 4 points=12



3. the distance of the nearest neighbor $d = 1/2 \sqrt{2}a$
4. the relation between r and a is $\sqrt{2}a = r+r+2r, \sqrt{2}a = 4r \Rightarrow r = 1/4(\sqrt{2}a)$
 $r = d/2$

5. the primitive vector of FCC are

$\bar{a} = a/2(i+j)$

$\bar{b} = a/2(j+k)$

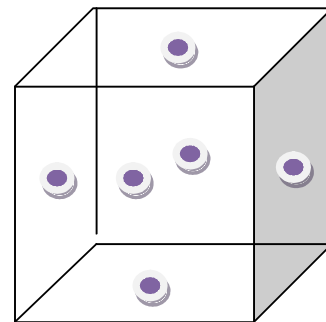
$\bar{c} = a/2(i+k)$

Volume = $|\bar{a} \cdot \bar{b} \times \bar{c}|$

Volume = $a/2(i+j) \cdot (a/2(j+k) \times a/2(i+k))$

$a=b=c$ in the cubic system

Volume = $(1/4)a^3$



The filling factor F.F or packing factor

وهو النسبة المئوية للحجم المشغول بواسطة الذرات على الحجم الكلي للمكعب او النظام

$$F.F = \frac{\text{v o l u m e c u p b e y d t o m s}}{\text{t o t a l v o l u m e}}$$

$$F.F = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3 * N_{\text{atoms}}}{a^3}$$

Applications1.SC

No. of atoms /unit cell=1

$$r = a/2$$

$$F.F = \frac{\frac{4}{3}\pi \left(\frac{a}{2}\right)^3 * 1}{a^3} = \frac{\pi}{6} = 3.14/6 = 52\%$$

2.BCC

No. of atoms /unit cell=2

$$r = 1/4(\sqrt{3}a)$$

$$F.F = \frac{\frac{4}{3}\pi \left(\frac{\sqrt{3}a}{4}\right)^3 * 2}{a^3} = 68\%$$

3.FCC

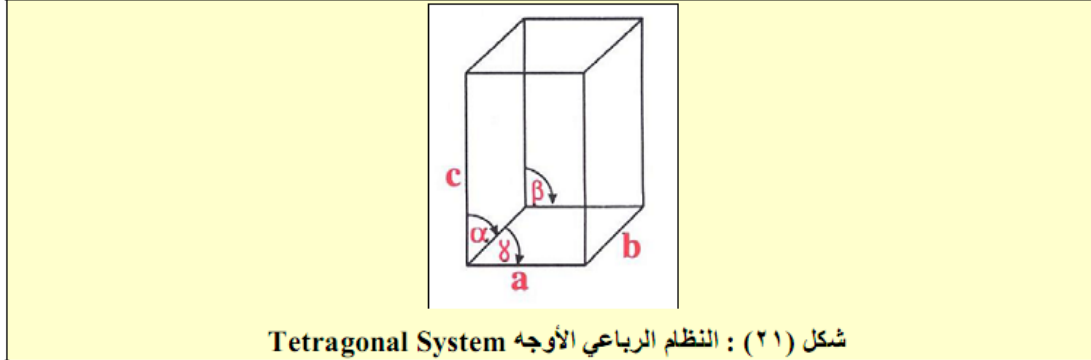
No. of atoms /unit cell=4

$$r = 1/4(\sqrt{2}a)$$

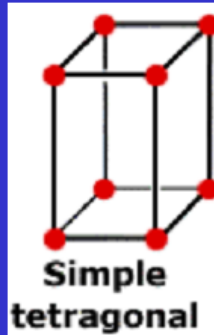
$$F.F = \frac{\frac{4}{3}\pi \left(\frac{\sqrt{2}a}{4}\right)^3 * 4}{a^3} = 74\%$$

ثانياً : النظام الرباعي الأوجه (Tetragonal System)

وهو منشور رباعي قائمة قاعدته شكلها مربع ($a = b$)، ويمتاز هذا النظام بأن كل زواياه قائمة ($\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$) وبالنسبة لأحرفه فإن ($a = b \neq c$).
ووجوهه الجانبية مستطيلة متساوية، وارتفاعه يختلف عن طول أحد أضلاع القاعدتين (شكل ٢١).



مثاله : (١) ثاني أكسيد التيتانيوم TiO_2 (٢) ثاني أكسيد القصدير SnO_2 (٣) الزركونيوم Zr

Two Bravais lattices

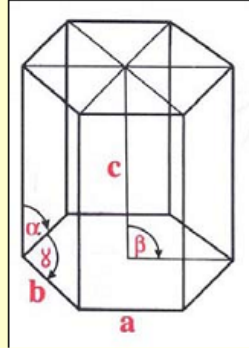
Symmetry element: One 4-fold rotation axis

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

ثالثاً : النظام السداسي الأوجه (Hexagonal System)

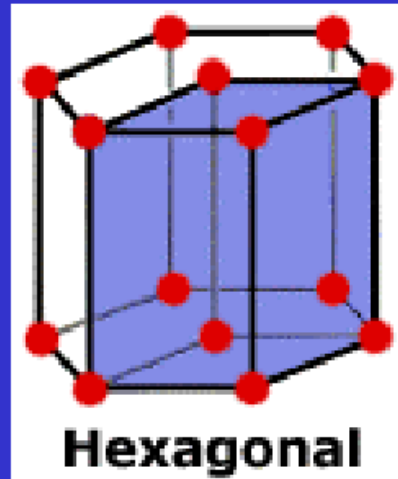
وهو منشور قائمة قاعدته شكلها مسدس، متساوي الأضلاع. ويمتاز هذا النظام بأن زواياه $(\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ)$ وأحرفه $(a = b \neq c)$ (شكل ٢٢).



شكل (٢٢) : النظام السداسي الأوجه Hexagonal System

مثاله (١) الزنكايت (٢) الكوارتز (SiO_2) (٣) المغنسيوم Mg (٤) الجرافيت (C)

Only one Bravais lattice



Symmetry element: One 6-fold rotation axis

$$a = b \neq c$$

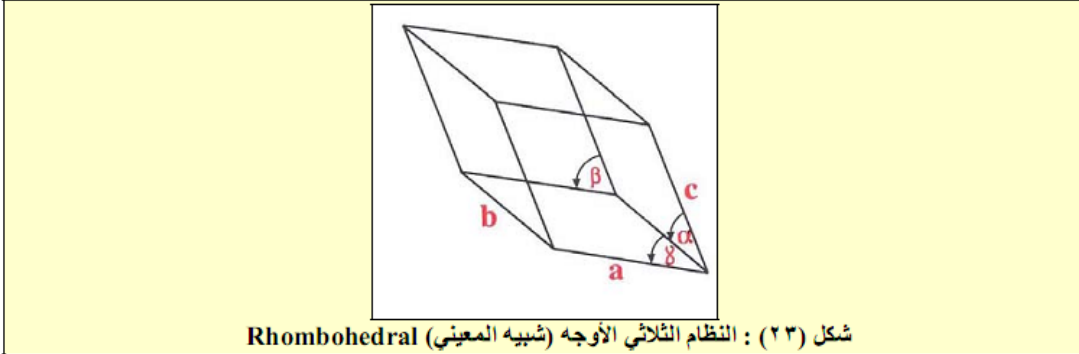
$$\alpha = 120^\circ$$

$$\beta = \gamma = 90^\circ$$

رابعاً : النظام الثلاثي الأوجه (Trigonal System)

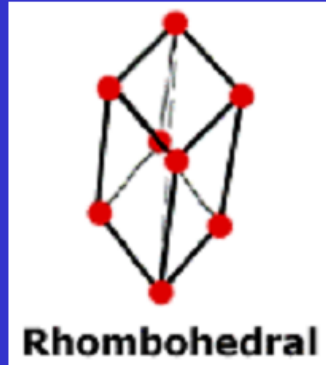
أو (النظام شبيه المعيني (Rhombohedral)

النظام الثلاثي الأوجه (ويسمى أيضاً النظام شبيه المعيني) يشبه هذا النظام شكل مكعب وجوهه مائلة على بعضها، وأحرفه متساوية الطول ($a = b = c$) وزواياه متساوية لكنها ليست قائمة ($\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$) (شكل ٢٣).



مثاله : (١) الكالسيت CaCO_3 (٢) أكسيد الألومنيوم (Al_2O_3) (٣) البزموت Bi

One Bravais lattice



Symmetry element: One 3-fold rotation axis

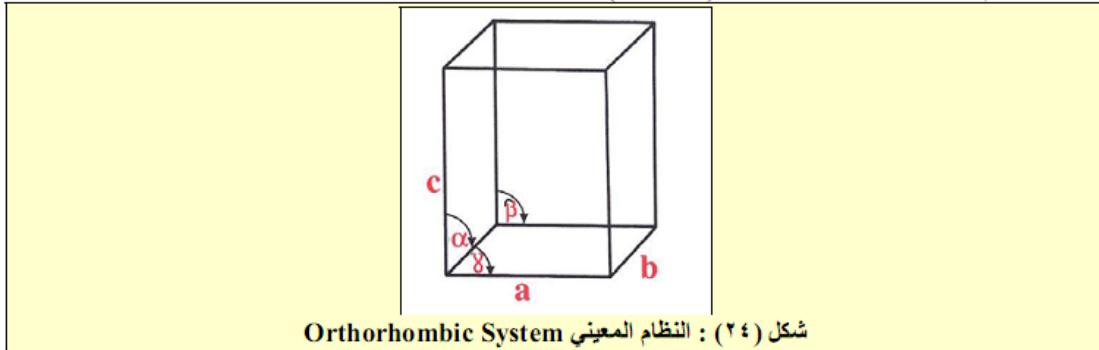
$$a = b \neq c$$

$$\alpha = 120^\circ$$

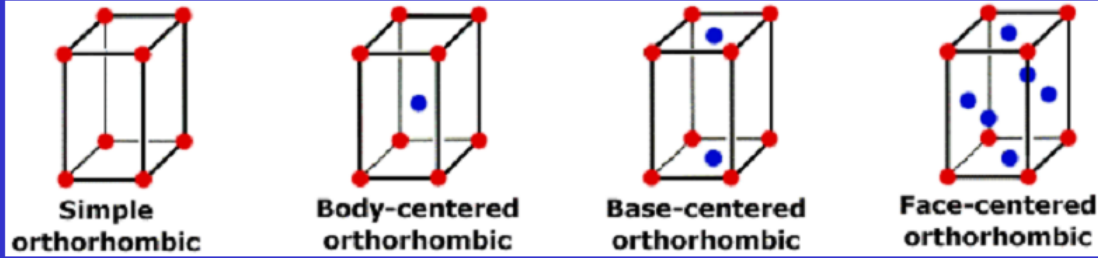
$$\beta = \gamma = 90^\circ$$

خامساً : النظام المعيني (Orthorhombic System)

هذا النظام كل زواياه قائمة ($\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$) وبالنسبة لأحرف وجوهه فتختلف أطوالها ($a \neq b \neq c$)، وهذا النظام يشبه شكل علبة الكبريت (شكل ٢٤).



مثاله : (١) الباريت (٢) كبريتات الباريوم $BaSO_4$ (٣) كبريتات البوتاسيوم K_2SO_4 (٤) الكبريت S (٥) البروم (Br_2)

Four Bravais lattices

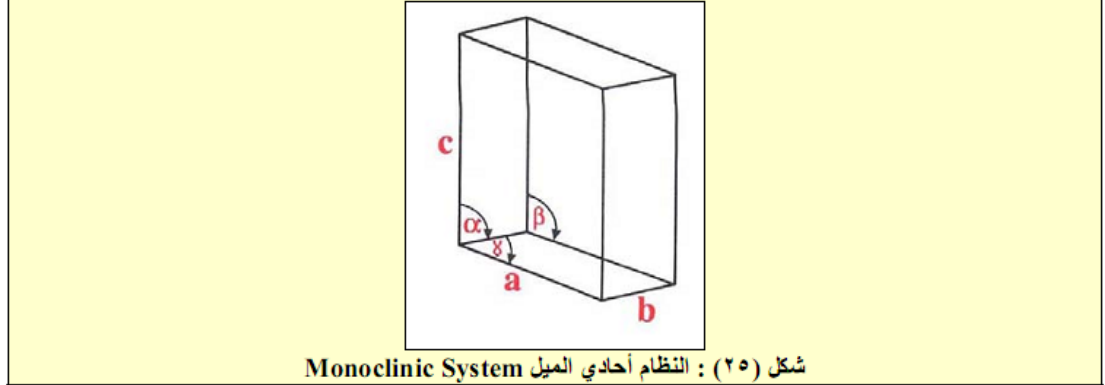
Symmetry element: Three mutually perpendicular 2-fold rotation axes

$$a \neq b \neq c$$

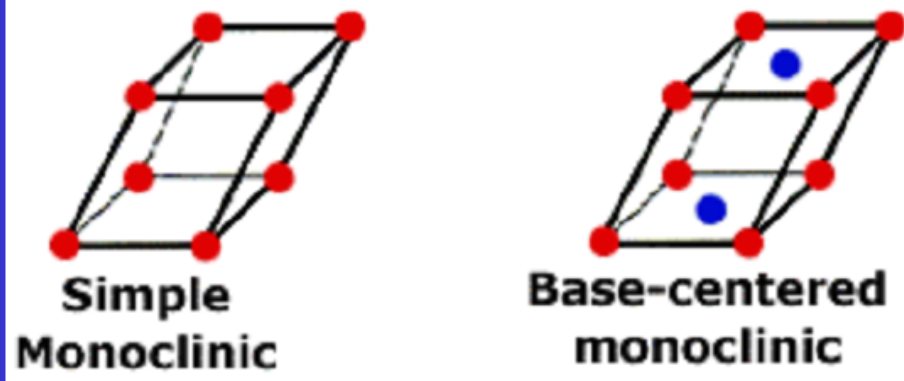
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

سادساً : نظام أحادي الميل (Monoclinic System) :

هذا النظام له أربعة وجوه مستطيلة ووجهان متوازيان أضلاع، وله زاويتان قائمتان والثالثة غير قائمة ($\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$). وأحرف هذا النظام غير متساوية ($a \neq b \neq c$) (شكل ٢٥).



مثاله : (١) كبريتات الصوديوم المائية ($\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$) (٢) كلورات البوتاسيوم (KClO_3)
(٣) كرومات الرصاص (PbCrO_4)

Two Bravais lattices

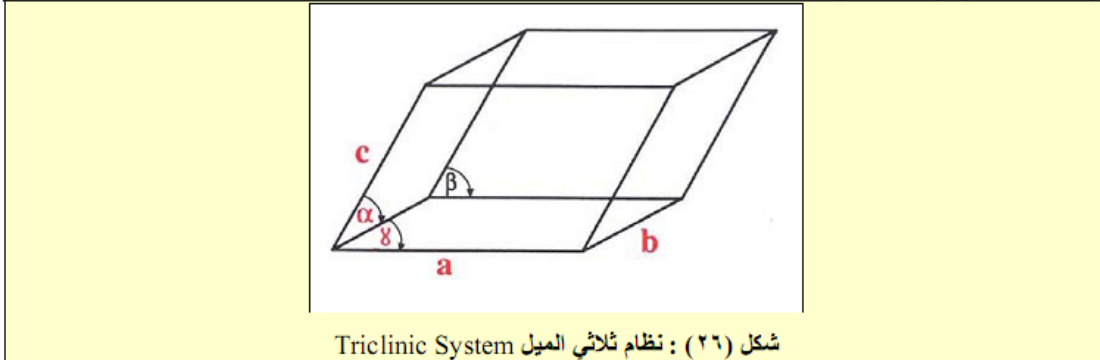
Symmetry element: One 2-fold rotation axis

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$$

سابعاً : نظام ثلاثي الميل (Triclinic System)

كل زوايا هذا النظام غير متساوية وغير قائمة ($\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$) وأحرفه غير متساوية ($a \neq b \neq c$). (شكل ٢٦).



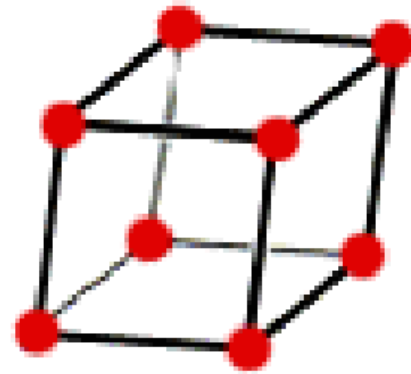
مثاله (١) كبريتات النحاس المائية ($\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$) (٢) ثنائي كرومات البوتاسيوم $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$

One Bravais lattice

Symmetry element: None

$a \neq b \neq c$

$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$



Triclinic

Miller Index

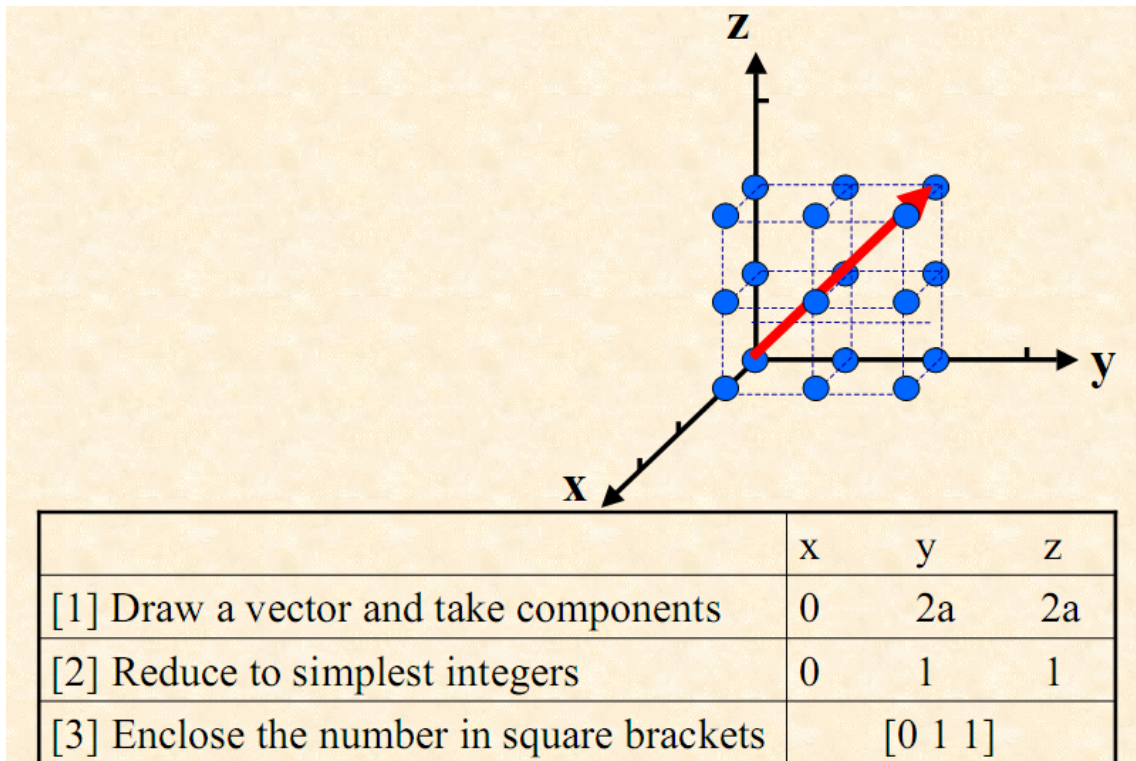
- Miller index is used to describe directions and planes in a crystal.
- Directions written as $[u \ v \ w]$ where u, v, w integers u, v, w represent coordinates of the vector in real space. A family of directions which are equivalent due to symmetry operations is written as $\langle u \ v \ w \rangle$
- Planes: Written as $(h \ k \ l)$, Integers $h, k,$ and l represent the intercept of the plane with $x, y,$ and z axes, respectively. Equivalent planes represented by $[h \ k \ l]$.

Q: - The intercepts of a crystal plane with the axis defined by a set of unit vectors are at $2a, -3b$ and $4c$. Find the corresponding Miller indices of this and all other crystal planes parallel to this plane.

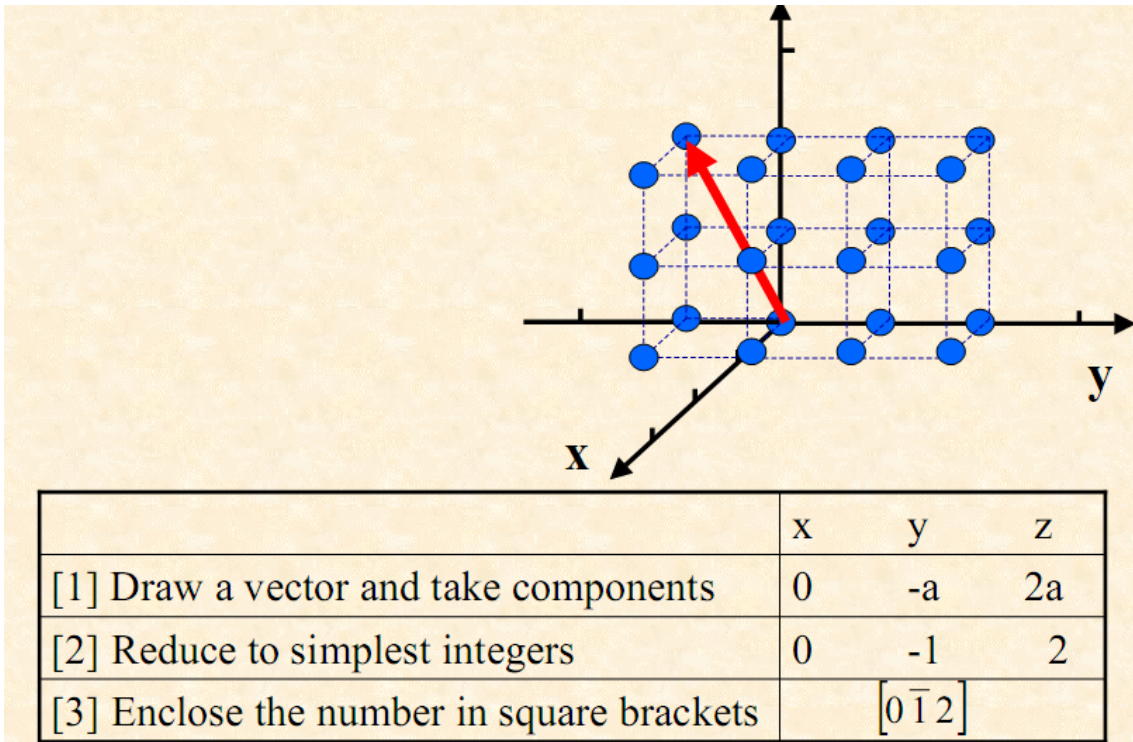
The Miller indices are obtained in the following three steps:

1. Identify the intersections with the axis, namely $2, -3$ and 4 .
2. Calculate the inverse of each of those intercepts, resulting in $1/2, -1/3$ and $1/4$.
3. Find the smallest integers proportional to the inverse of the intercepts. Multiplying each fraction with the product of each of the intercepts ($24 = 2 \times 3 \times 4$) does result in integers, but not always the smallest integers.
4. These are obtained in this case by multiplying each fraction by 12 .
5. Resulting Miller indices is $(6 \ \bar{4} \ 3)$
6. Negative index indicated by a bar on top.

Miller Indices: Directions

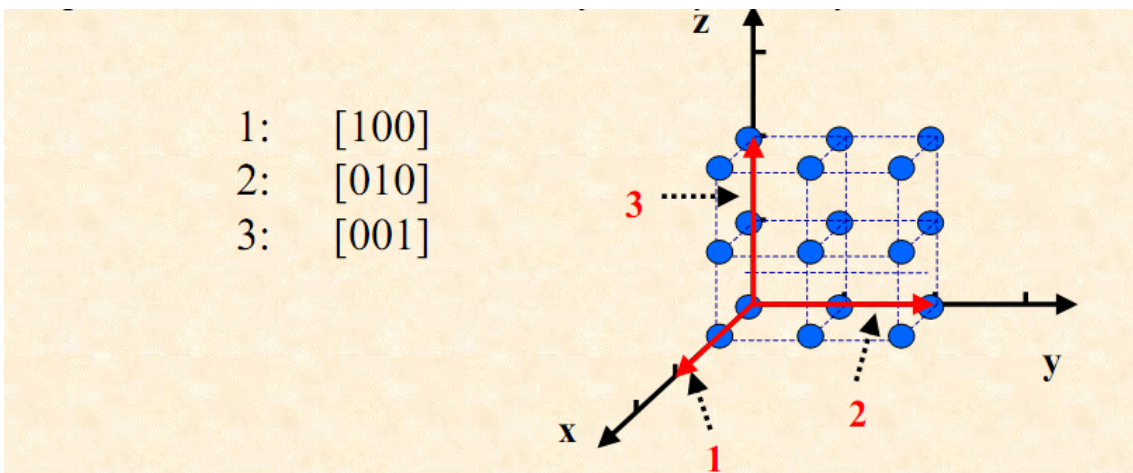


Negative Directions

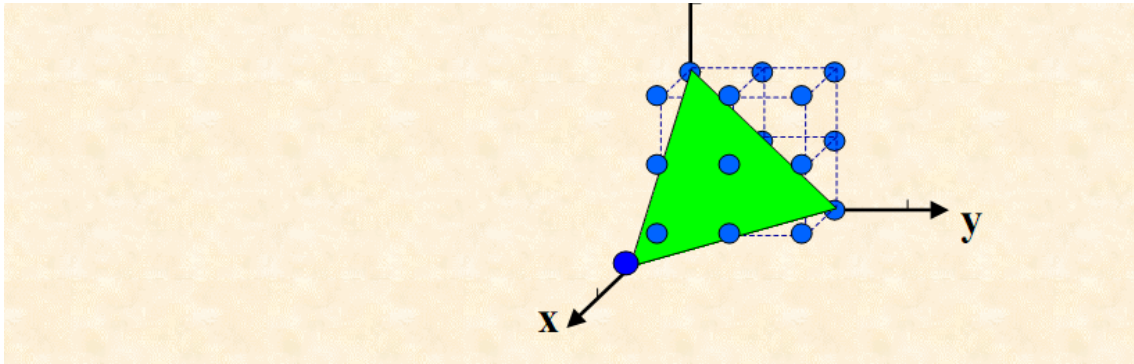


Miller Indices: Equivalent Directions

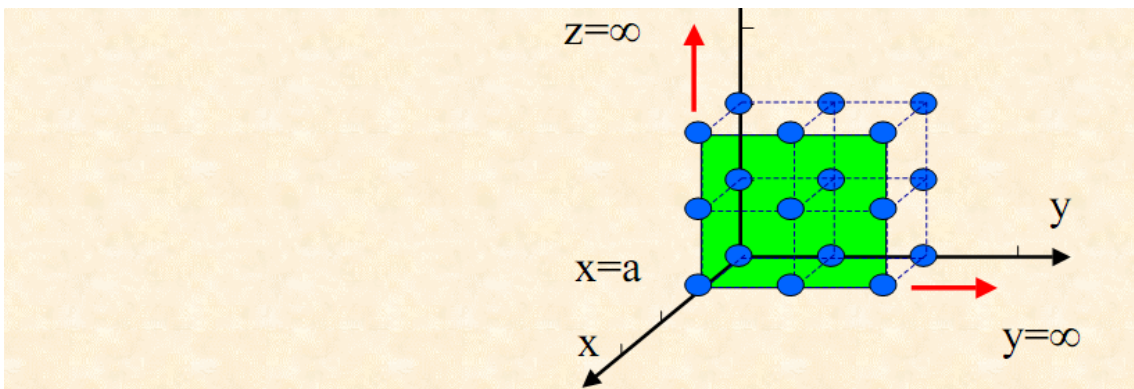
Equivalent directions due to crystal symmetry:



Miller Indices of Planes

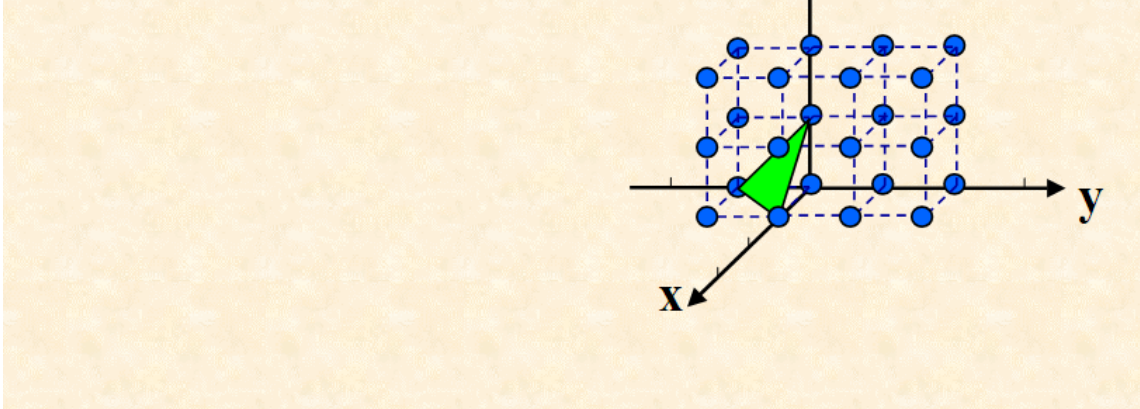


	x	y	z
[1] Determine intercept of plane with each axis	2a	2a	2a
[2] Invert the intercept values	1/2a	1/2a	1/2a
[3] Convert to the smallest integers	1	1	1
[4] Enclose the number in round brackets	(1 1 1)		



	x	y	z
[1] Determine intercept of plane with each axis	a	∞	∞
[2] Invert the intercept values	1/a	1/ ∞	1/ ∞
[3] Convert to the smallest integers	1	0	0
[4] Enclose the number in round brackets	(1 0 0)		

Planes with Negative Indices



	x	y	z
[1] Determine intercept of plane with each axis	a	-a	a
[2] Invert the intercept values	1/a	-1/a	1/a
[3] Convert to the smallest integers	1	-1	-1
[4] Enclose the number in round brackets	$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$		

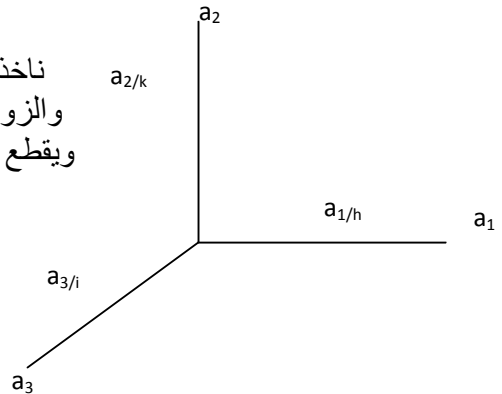
Miller Index for Hexagonal Crystal System

- Four principal axes used, leading to four Miller Indices:
- Directions $[h\ k\ i\ l]$; Planes $(h\ k\ i\ l)$, e.g. (0001) surface.
- First three axes/indices are related: $h + k + i = 0$ or $i = -h - k$.
- Indices h , k and l are identical to the Miller index.
- Rhombohedral crystal system can also be identified with four indices.

ان العلامة بين المتجهات المتعامدة (a_1, a_2, a_3) تعطي علامة بين معاملات ملر الثلاثة الاولى وهي وجوب ان يكون مجموعها يساوي صفرًا.

Q:- show that the first three miller indices in the hexagonal system have a sum of zero.

ناخذ قاعدة النظام السداسي والتي فيها المحاور المتساوية (a_1, a_2, a_3) والزوايا بين كل محورين 120، نختار مستوي يقطع أي من المحورين ويقطع الامتداد السالب للمحور الثالث



$$\Delta ABE = \frac{1}{2} \frac{a^3}{i} * \frac{a^1}{h} \sin 60$$

$$\Delta ABD = \frac{1}{2} \frac{a^3}{i} * \frac{-a^2}{k} \sin 60$$

$$\Delta BED = \frac{1}{2} \frac{a^1}{h} * \frac{-a^2}{k} \sin 60$$

$$\Delta ABE = \Delta ABD + \Delta BED$$

$$\frac{1}{2} \frac{a^3}{i} * \frac{a^1}{h} \sin 60 = - \frac{1}{2} \frac{a^3}{i} * \frac{a^2}{k} \sin 60 - \frac{1}{2} \frac{a^1}{h} * \frac{a^2}{k} \sin 60$$

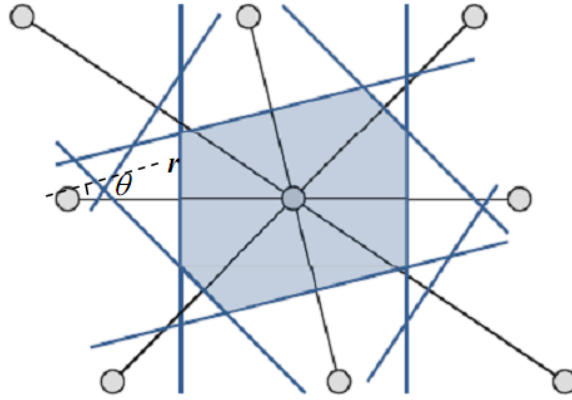
$$a_1 = a_2 = a_3 = a$$

$$\frac{a^2}{i h} = - \frac{a^2}{i k} - \frac{a^2}{h k} \gg \frac{1}{i h} = - \frac{1}{i k} - \frac{1}{h k}$$

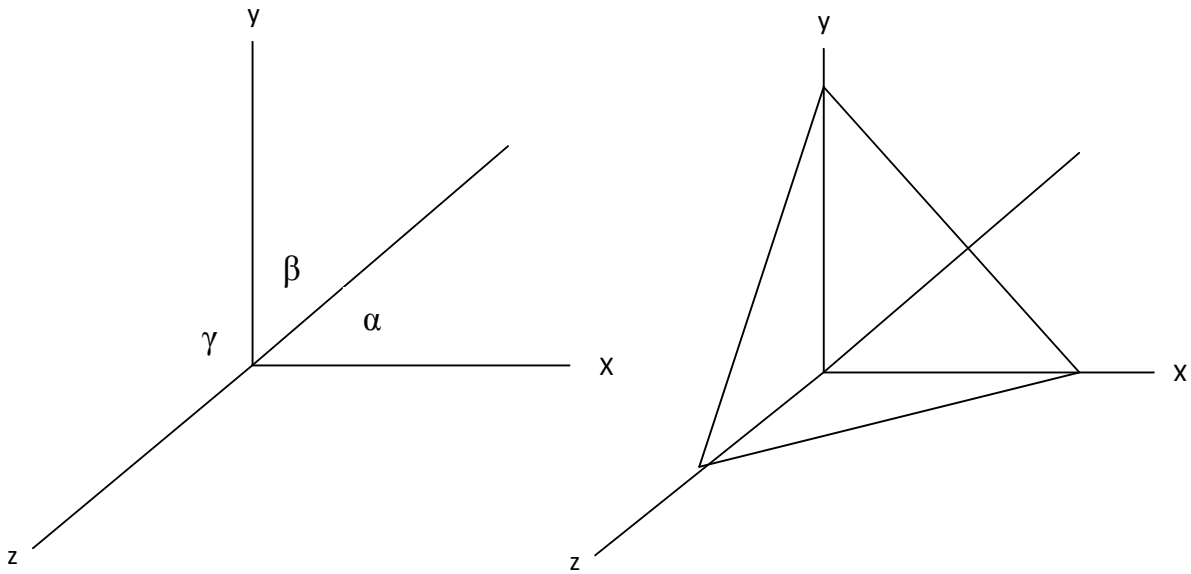
$$\frac{h + k + i}{i h k} = 0 \gg h + k + i = 0$$

Wigner-Seitz cell

In order to incorporate the information about the point group symmetry in the primitive cell, the **Wigner-Seitz cell** is usually employed. This particular primitive unit cell is constructed by first drawing lines to connect a given lattice point to all nearby lattice points, and then drawing new lines (or planes, in three-dimensional lattices) at the mid point and normal to the first lines. The Wigner-Seitz cell is the smallest area (volume) enclosed by the latter lines (planes). An example of the construction of a Wigner-Seitz cell for a two-dimensional oblique lattice is illustrated in the figure below. For a two-dimensional square lattice the Wigner-Seitz cell is also a square. The Wigner-Seitz cell is always centered on a lattice point and incorporates the volume of space which is closest to that lattice point rather than to any other point.



حساب المسافة الفاصلة بين مستويات () المتجاورة



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

$$d = a/h \cos \alpha$$

$$d = b/k \cos \beta$$

$$d = c/l \cos \gamma$$

من العلاقات اعلاه سوف نجد قيمة كل من جيب تمام الزوايا ونعوضها في معادلة رقم 1

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

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

for cubic system $a=b=c$

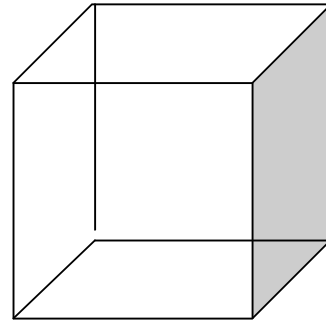
$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{(h^2 + k^2 + l^2)}}$$

d =inter planer distance

a =inter atomic separation

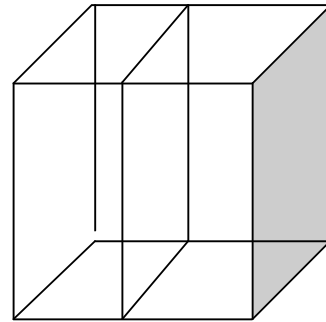
Ex.1:- find the inter planer distance of the following plane (100).

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{(h^2 + k^2 + l^2)}} = \frac{a}{\sqrt{(1^2 + 0^2 + 0^2)}} = a$$



Ex.2:- find the inter planer distance of the following plane (200).

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{(h^2 + k^2 + l^2)}} = \frac{a}{\sqrt{(4^2 + 0^2 + 0^2)}} = a/2$$



Q:-show that in the cubic system the directional cosines are:-

1-proportional to the Miller indices

$$\cos \alpha / \cos \beta / \cos \gamma = h/k/l$$

$$2\text{-prove that } \cos \alpha = \frac{h}{\sqrt{(h^2 + k^2 + l^2)}}, \cos \beta = \frac{k}{\sqrt{(h^2 + k^2 + l^2)}}$$

$$\cos \gamma = \frac{l}{\sqrt{(h^2 + k^2 + l^2)}}$$

$$\cos \alpha = d(h/a)$$

$$\cos \beta = d(k/b)$$

$$\cos \gamma = d(l/c)$$

in the cubic system

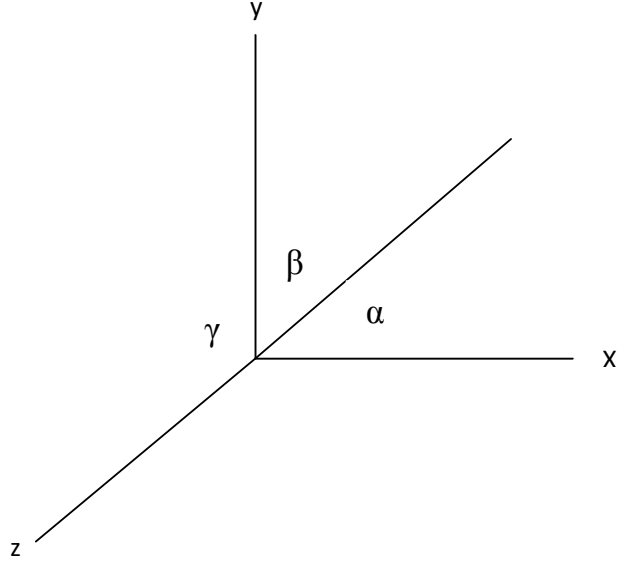
$$a=b=c$$

$$\cos \alpha / \cos \beta = d(h/a) / d(k/b) = (h/k)$$

$$\cos \beta / \cos \gamma = d(k/b) / d(l/c) = (k/l)$$

$$\cos \gamma / \cos \alpha = d(l/c) / d(h/a) = (l/h)$$

$$\cos \alpha / \cos \beta / \cos \gamma = h/k/l$$



we remember

$$d = \frac{a}{\sqrt{(h^2/a^2) + (k^2/b^2) + (l^2/c^2)}} \quad \text{بضرب طرفي المعادلة ب } (h/a)$$

$$(h/a) * d = \frac{h}{\sqrt{(h^2/a^2) + (k^2/b^2) + (l^2/c^2)}} \quad *(h/a)$$

$$\cos \alpha = \frac{h}{\sqrt{(h^2/a^2) + (k^2/b^2) + (l^2/c^2)}}$$

وبنفس الطريقة يمكن ايجاد

$$d = \frac{a}{\sqrt{(h^2/a^2) + (k^2/b^2) + (l^2/c^2)}} \quad \text{بضرب طرفي المعادلة ب } (k/b)$$

$$a=b=c$$

$$(k/b) * d = \frac{k}{\sqrt{(h^2/a^2) + (k^2/b^2) + (l^2/c^2)}} \quad *(k/b)$$

$$\cos \beta = \frac{k}{\sqrt{(h^2/a^2) + (k^2/b^2) + (l^2/c^2)}}$$

وبنفس الطريقة بالنسبة الى

$$\cos \gamma = \frac{l}{\sqrt{(h^2/a^2) + (k^2/b^2) + (l^2/c^2)}}$$

Crystal diffraction

لغرض دراسة التركيب البلوري لا يمكن ان نحصل على معلومات كافية من خلال الملاحظات المجهرية او بالعين المجردة ليس لان للمجهر حدود معينة للتكبير بل الموضوع يتعلق بطبيعة الشعاع المستخدم وفي المجاهر عادة يكون ضوءا مرئيا اطواله الموجية محصورة بين 4000-7000 انكستروم فما نريده هو شعاع طوله الموجي يساوي او اقل من المسافات المطلوب تحليلها وبما ان الفسح بين ذرات البلورة لا تزيد عن بضعة انكسترومات اذا فالشعاع المطلوب يجب ان يكون طوله الموجي يساوي او اقل من بضعة انكسترومات ومن خلال هذا سوف نحصل على تفاصيل وافية عن التركيب البلوري مثل حجم اصغر خلية في البلورة ومواقع نوى الذرات والتوزيع الالكتروني في داخل الخلية وكذلك انماط اهتزاز ذرات البلورة ان هذا وغيره يتم من خلال الانعطاف او الحيود وتدعى هذه العملية احيانا بالتشتت (الاستطارة).

س/ متى تحصل الاستطارة والتشتت

ج/ عندما يتفاعل الاشعاع الكهرومغناطيسي مع المادة فاذا فقد الجسيم او الفوتون المنحرف عن مساره قسما من طاقته فهذه العملية تدعى الاستطارة غير المرنة وذا لم يحدث تغير في الطاقة لا يحدث تغير في الطول الموجي فان العملية تدعى (الاستطارة المرنة).

توجد ثلاث انواع اساسية من الجسيمات الموجية المختلفة بالطاقة والتي يمكن استخدامها في تجارب الحيود وهذه الانواع الثلاثة هي :-

- 1-X-ray photons.
- 2- Electrons.
- 3-Neutrons.

1. فوتونات الاشعة السينية X-ray photons

ان الاشعة السينية هي موجات كهرومغناطيسية ذات اطوال موجية محددة تقع بين الاشعة فوق البنفسجية واشعاعات كاما حيث لا تزيد اطوالها الموجية عن بضعة انكسترومات (0.1-10Å) ان طاقة الفوتون للاشعة السينية

$$E = hv = \frac{hc}{\lambda} \gg h = 6.63 \times 10^{-34}$$

$$c = 3 \times 10^8 \text{ m/s}$$

$$\lambda(\text{Å}) = \frac{12.4}{E(\text{keV})}$$

$$\text{if } \lambda = 1 \text{ Å} \gg E = 12400 \text{ eV}$$

$$E = 12.4 \text{ KeV}$$

ان دراسة التركيب البلوري تحتاج الى طاقات بحدود (10-50 KeV)

2. الالكترونات Electrons

ان ظاهرة الحيود الالكتروني هي في الاساس اثبات لوجود موجات ترافق الالكترونات بموجب نظرية ديبرولي المعروفة ولكن مايميز الالكترون عن الفوتون والنيوترون امتلاكه للشحنة ويتفاعل بقوة مع المواد ويخترقها الى مسافات صغيرة نسبيا قد تصل الى بضعة مئات من الانكسترومات قبل ان يعاني من تشتت مرن او غير مرن, ان طاقة الالكترون تعطى بواسطة علاقة ديبرولي

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

p=momentum

m_e =mass of electron

v=velocity of electron

h=planks constant

$$E = \hbar^2 / 2m_e \lambda^2$$

$$\lambda = \hbar / \sqrt{2m_e E} \text{ (e V)}$$

$$\lambda \text{ (Å)} = 12 \sqrt{E \text{ (e V)}}$$

$$\text{if } \lambda = 1 \text{ Å} \gg E = 150 \text{ eV}$$

3. النيوترونات Neutrons

في عام 1945 تم بناء اول جهاز لتسجيل الحيود النيوتروني وكما نعلم فان للنيوترون شحنة متعادلة ولكنه يمتلك عزم مغناطيسي بسبب عدم تطابق مركزي الشحنة السالبة والموجبة لذلك يمكن الاستفادة منه في دراسة التراكيب البلورية للبلورات المغناطيسية حيث يتفاعل النيوترون بسبب عزمه المغناطيسي مع الكترونيات هذه البلورات وكذلك تفاعله مع نوى الذرات اما في حالة البلورات الغير مغناطيسية فالنيوترون يتفاعل مع نوى الذرات, تعطى معادلة طاقة النيوترون بواسطة معادلة ديبرولي

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

p=momentum

m_n =mass of neutrons

v=velocity of neutrons

h=planks constant

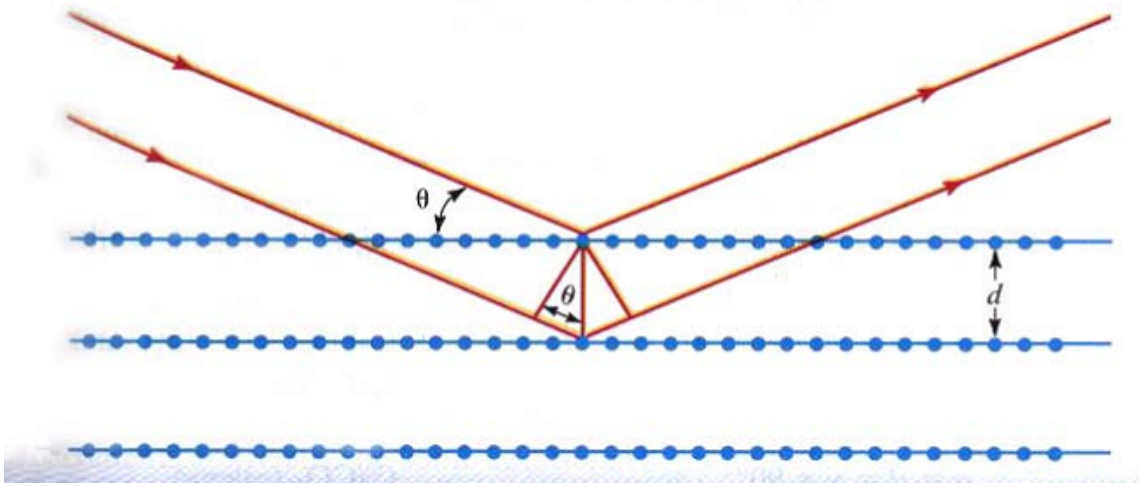
$$E = \hbar^2 / 2m_n \lambda^2$$

$$\lambda = \hbar / \sqrt{2m_n E} \text{ (e V)}$$

$$\lambda \text{ (Å)} = 0.28 \sqrt{E \text{ (e V)}}$$

$$\text{if } \lambda = 1 \text{ Å} \gg E = 0.08 \text{ eV}$$

Bragg diffraction law



يتضح من الشكل (٥١، ٥٢) وجود شعاعين من حزمة أشعة إكس أحادية الطول الموجي (طول موجي مفرد) مميزة بـ a و b . تعكس الموجة a بأحد مستويات الذرات أو الأيونات في البلورة، بينما تعكس الموجة b مستوى ذرات البلورة الآخر (السفلي)، فنلاحظ أن الموجة b تسير منعكسة مسافة أكبر من تلك التي تقطعها الموجة a والمسافات الإضافية التي تسيرها (أو تقطعها) الموجة b تساوي $2 d \sin\theta$ (سيتم إثبات ذلك لاحقاً).

تزيد شدة أو قوة الإشعاعات المنتشرة عندما تعزز الموجتين (a , b) بعضهما البعض، أي عندما تنطبق ذروتيهما وحوضهما معاً، ولتحقيق ذلك يجب أن تكون المسافة الإضافية التي تقطعها الموجة b مساوية لمضاعفات الطول الموجي لأشعة إكس أي n :

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

ومن قيم θ المقاسة عندما تكون شدة أشعة إكس المشتتة قصوى وقيم λ (الطول الموجي) يمكن حساب المسافة d بين الطبقات الذرية. وباستعمال اتجاهات مختلفة للبلورة يمكن تحديد الأبعاد الذرية والكثافة الإلكترونية للاتجاهات المختلفة خلال البلورة أو بمعنى آخر تحديد شكل البلورة.

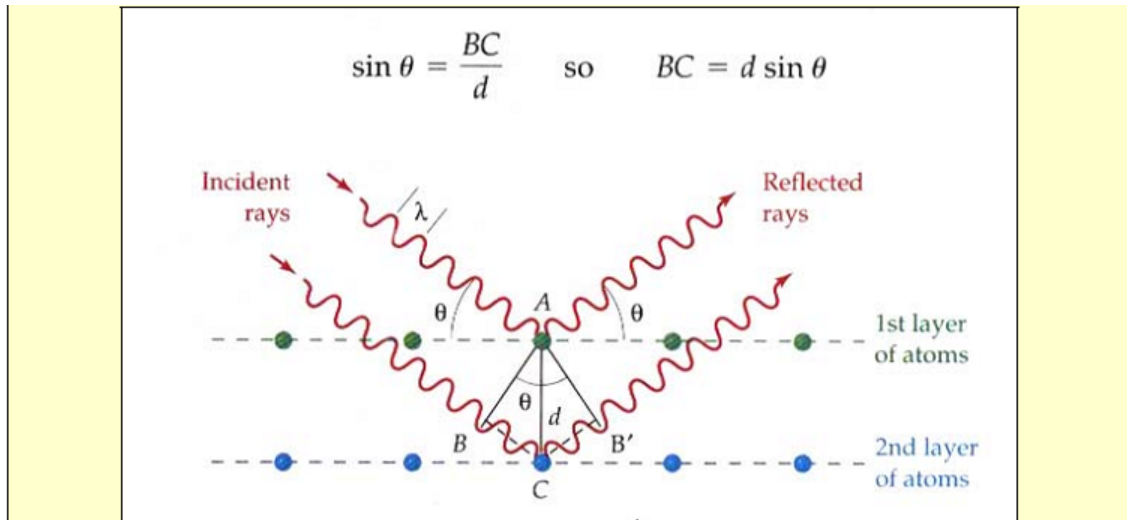


Fig. 52 : Diffraction of X rays of wavelength λ from atoms in the top two layers of a crystal. Rays striking atoms in the second layer travel a distance equal to $BC + CB'$ farther than rays striking atoms in the first layer. If this distance is a whole number of wavelengths, the reflected rays are in-phase and interfere constructively . Knowing the angle θ then makes it possible to calculate the distance d between layers.

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

$$n=1, 2 \theta=1$$

$$\lambda_{\max} = 2d$$

الشعاع المطلوب استخدامه لدراسة الحيود يجب ان يكون طوله الموجي يساوي او اقل من المسافة
البيئية بين مستويات hkl

$$\text{i.e } \lambda \leq 2d$$

$$\text{if } d = 5 \text{ \AA} \gg \lambda_{\max} \leq 10 \text{ \AA}$$

هذا هو السبب في عدم الاستفادة من الضوء المرئي في دراسة التركيب البلوري لان الاطوال الموجية
محصورة بين (4000 - 7000) \AA.

في المختبر نقيس عادة الزاوية ϕ وهي تساوي 2θ لذلك يكون من المفيد ايجاد علاقة تدخل فيها
الزاوية ϕ وكذلك المسافة البيئية بين الذرات a .

$$d = \frac{a}{\sqrt{(h^2 + k^2 + l^2)}}$$

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

$$n\lambda = 2 \frac{a}{\sqrt{(h^2 + k^2 + l^2)}} \sin \theta$$

$$((h)^2 + (k)^2 + (l)^2) n^2 \lambda^2 = 4a^2 \sin^2 \theta$$

$$\sin^2 \theta = 1/2(1 - \cos 2\theta)$$

$$\sin^2 \theta = 1/2(1 - \cos \phi)$$

$$((h)^2 + (k)^2 + (l)^2) n^2 \lambda^2 = 2a^2(1 - \cos \phi)$$

وهذا الشكل العملي لقانون براك

Experimental diffraction methods

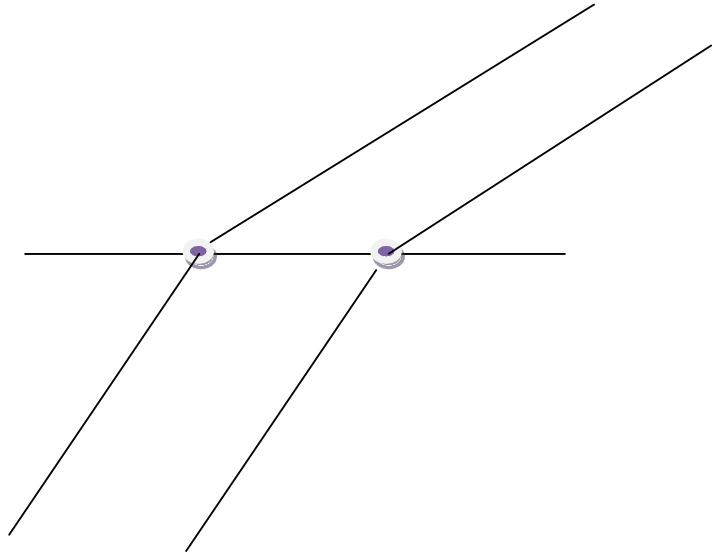
- 1-Laue method
- 2-Rotating crystal method
- 3-Powder method

طريقة لاوي
طريقة البلورة الدوارة
طريقة المسحوق

Laue diffraction equation

in one dimension

let α and α_0 are the angles between a and the incident and diffracted radiation respectively ,
where a is inter atomic distance



from the Fig.

$$\Delta 1 = a \cos \alpha_0 = \vec{a} \cdot \vec{S}_0$$

$$\Delta 2 = a \cos \alpha = \vec{a} \cdot \vec{S}$$

The path-difference

$$\Delta 2 - \Delta 1 = a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) = \vec{a} \cdot (\vec{S} - \vec{S}_0) = \vec{a} \cdot \vec{S}$$

where $S = (\vec{S} - \vec{S}_0)$ is the normal scattering factor عامل الاستطارة العمودية

لكي نحصل على تداخل بناء فان فرق المسار هذا يجب ان يساوي مضاعفات عددية صحيحة الى الطول الموجي

$$a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) = \vec{a} \cdot \vec{S} = e\lambda$$

for three dimension

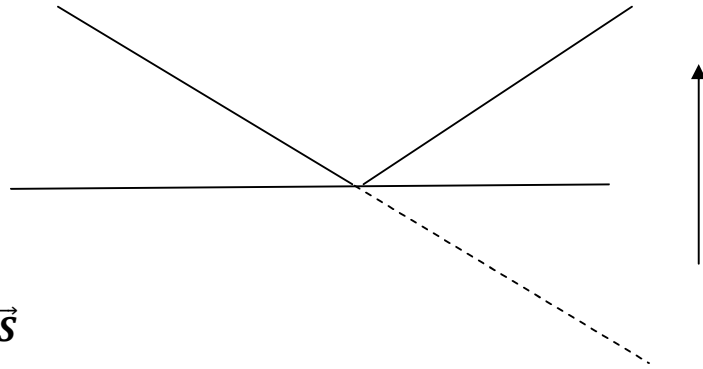
باستخدام نفس الاسلوب اعلاه سوف نحصل على

$$a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) = \vec{a} \cdot (\vec{S} - \vec{S}_0) = \vec{a} \cdot \vec{S} = e\lambda$$

$$b(\cos \beta - \cos \beta_0) = \vec{b} \cdot (\vec{S} - \vec{S}_0) = \vec{b} \cdot \vec{S} = f\lambda$$

$$c\gamma(\cos \gamma - \cos \gamma_0) = \vec{c} \cdot (\vec{S} - \vec{S}_0) = \vec{c} \cdot \vec{S} = g\lambda$$

where $e=nh$, $f=nk$, $g=nl$ (hkl) Miller indices



from the Fig. we find that

$$|S| = 2 \sin \theta$$

$$\vec{S} = 2 \sin \theta \cdot \vec{n}$$

where \vec{n} is unit vector along \vec{S}

Q-Prove that Laue equation are equivalent to Bragg's law.

Answer:-

$$a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) = e\lambda = nh\lambda$$

$$b(\cos \beta - \cos \beta_0) = f\lambda = nk\lambda$$

$$c(\cos \gamma - \cos \gamma_0) = g\lambda = nl\lambda$$

* consider a cubic system $a=b=c$

* Take the square of both sides of Laue equation above and add them together we get

$$a^2 [(\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma) + (\cos^2 \alpha_0 + \cos^2 \beta_0 + \cos^2 \gamma_0) - 2(\cos \alpha \cos \alpha_0 + \cos \beta \cos \beta_0 + \cos \gamma \cos \gamma_0)] = (e^2 + f^2 + g^2) \lambda^2$$

$$e = nh, f = nk, g = nl$$

$$a^2 [2 - 2(\cos \alpha \cos \alpha_0 + \cos \beta \cos \beta_0 + \cos \gamma \cos \gamma_0)] = n^2 (h^2 + k^2 + l^2) \lambda^2$$

$$\text{because } (\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma) = (\cos^2 \alpha_0 + \cos^2 \beta_0 + \cos^2 \gamma_0) = 1$$

but

$$(\cos \alpha \cos \alpha_0 + \cos \beta \cos \beta_0 + \cos \gamma \cos \gamma_0) = \cos \phi \text{ (to be prove later) where}$$

$$\phi = 2\theta$$

$$2 a^2 [1 - \cos \phi] = n^2 \lambda^2 (h^2 + k^2 + l^2)$$

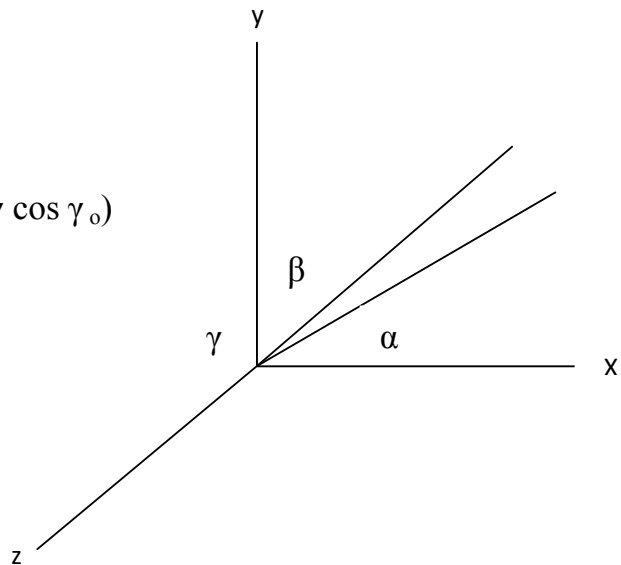
$$\cos \phi = (\cos \alpha \cos \alpha_0 + \cos \beta \cos \beta_0 + \cos \gamma \cos \gamma_0)$$

$$\vec{s} = i \cos \alpha + j \cos \beta + k \cos \gamma$$

$$\vec{s}_0 = i \cos \alpha_0 + j \cos \beta_0 + k \cos \gamma_0$$

$$\vec{s} \cdot \vec{s}_0 = |\vec{s}| \cdot |\vec{s}_0| \cos \phi$$

$$= \cos \phi$$



$$\vec{s} \cdot \vec{s}_0 = \cos \alpha \cos \alpha_0 + \cos \beta \cos \beta_0 + \cos \gamma \cos \gamma_0 = \cos \phi$$

Other forms of Laue equation**1-in terms of phase difference H****Definition :-**

$$H = \text{path diff.} \cdot 2\pi/\lambda$$

$$\text{but path diff.} = \vec{a} \cdot \vec{S}$$

$$= \vec{b} \cdot \vec{S}$$

$$= \vec{c} \cdot \vec{S}$$

$$H = (2\pi/\lambda) \cdot (\vec{a} \cdot \vec{S}) = 2\pi/\lambda \cdot e \cdot \lambda = 2\pi e = 2\pi n h$$

$$H = (2\pi/\lambda) \cdot (\vec{b} \cdot \vec{S}) = 2\pi/\lambda \cdot f \cdot \lambda = 2\pi f = 2\pi n k$$

$$H = (2\pi/\lambda) \cdot (\vec{c} \cdot \vec{S}) = 2\pi/\lambda \cdot g \cdot \lambda = 2\pi g = 2\pi n l$$

Reciprocal lattice**الشبكة المقلوبة**

The concept of reciprocal lattice is directly connected with the periodicity of crystalline materials and of their physical properties (such as charge density, electric field distribution, etc.).

هي مفهوم اساسي في علم البلورات يستخدم للتعبير عن كل الظواهر التي تنتج من تفاعل الموجات في المواد الصلبة مثل الحيود وكما نعلم فان حيود الاشعة السينية تنتج من استطارتها من الذرات ولجل معرفة مصدر كل استطارة نستخدم مفهوم الشبكة المقلوبة .

ان مقلوب المسافة البينية بين مستويات hkl هو الذي يعين موقع نقطة في الشبكة المقلوبة.

$$|G_{hkl}| = \frac{A}{d}$$

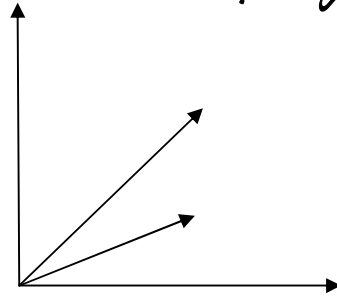
where G_{hkl} is reciprocal lattice vector

A عامل قياس الرسم وقيمه اما 2π او 1 وسوف نستخدم 2π في موضوع الحالة الصلبة

$$|G_{hkl}| = 2\pi / d_{hkl}$$

ان الشبكة المقلوبة هي عدد غير محدد من النقاط المرتبة بانتظام وبشكل دوري في فضاء ثلاثي الابعاد وان طول المتجه بين نقطة الاصل وأي نقطة في الشبكة المقلوبة تتناسب عكسيا مع المسافة البينية d لمجموع من المستويات المتوازية في شبكة حقيقية ولجل اشتقاق العلاقة بين المتجهات الاساسية للشبكة الحقيقية والمتجهات الاساسية للشبكة المقلوبة نفرض ان لدينا وحدة خلية لشبكة مائلة محاورها الاساسية

$$\vec{a} \cdot \vec{b} \cdot \vec{c} .$$



حجم هذا المكعب v مساحة القاعدة * الارتفاع

$$v = \text{مساحة القاعدة} * h$$

$$v = \text{مساحة القاعدة} * d_{001}$$

$$\frac{\vec{a} * \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} * \vec{c}} = 1/d_{001}$$

$$|G_{hkl}| = 2\pi / d_{hkl}$$

$$G_{001} = 2\pi / d_{001} = 2\pi \frac{\vec{a} * \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} * \vec{c}}$$

وبنفس الطريقة نجد :-

$$G_{010} = 2\pi / d_{010} = 2\pi \frac{\vec{a} * \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} * \vec{c}}$$

$$G_{100} = 2\pi / d_{100} = 2\pi \frac{\vec{b} * \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} * \vec{c}}$$

ويمكن استبدال G_{001} , G_{100} , G_{010} بالرموز التالية a^* , b^* , c^* , لتمثيل اتجاهات الشبكة المقلوبة الاساسية

$$a^* = 2\pi \frac{\vec{b} * \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} * \vec{c}}$$

$$b^* = 2\pi \frac{\vec{a} * \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} * \vec{c}}$$

$$c^* = 2\pi \frac{\vec{a} * \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} * \vec{c}}$$

من هذه العلاقات نفهم على انه a^* يكون عمودي على $\vec{b} \vec{c}$.

$$a^* \perp \vec{b} \vec{c}.$$

$$b^* \perp \vec{a} \vec{c}.$$

$$c^* \perp \vec{a} \vec{b}.$$

$$a^* \cdot \vec{a} = b^* \cdot \vec{b} = c^* \cdot \vec{c} = 2\pi$$

$$a^* \cdot \vec{b} = a^* \cdot \vec{c} = b^* \cdot \vec{a} = b^* \cdot \vec{c} = c^* \cdot \vec{a} = c^* \cdot \vec{b} = 0$$

لقد حددنا مواقع الشبكة الحقيقية بواسطة المتجهات الاساسية $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$.

$$\mathbf{R}_{hkl} = h\vec{a} + k\vec{b} + l\vec{c}$$

اما في الشبكة المقلوبة فيتم تعريف أي نقطة في هذه الشبكة بدلاله معاملات ملر لمحاور الشبكة المقلوبة $a^* b^* c^*$

$$\mathbf{G}_{hkl} = ha^* + kb^* + lc^*$$

تطبيقات الشبكة المقلوبة

1-SC

The primitive vector

$$\vec{a} = ai$$

$$\vec{b} = bj$$

$$\vec{c} = ck$$

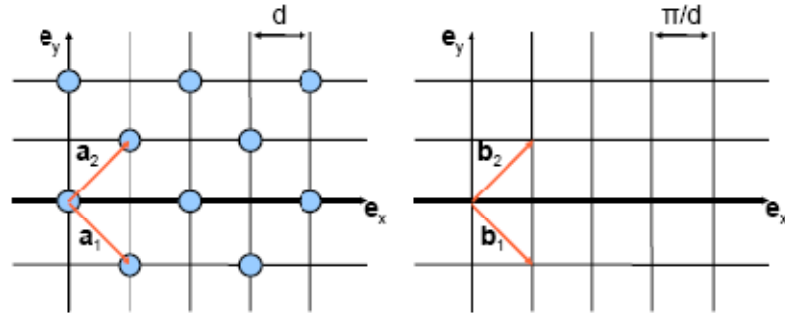
$$a^* = 2\pi \frac{\vec{b} \cdot \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \cdot \vec{c}} = 2\pi \frac{a^2 i}{a^3} = \left(\frac{2\pi}{a}\right) i$$

$$b^* = 2\pi \frac{\vec{a} \cdot \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \cdot \vec{c}} = \left(\frac{2\pi}{a}\right) j$$

$$c^* = 2\pi \frac{\vec{a} \cdot \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \cdot \vec{c}} = \left(\frac{2\pi}{a}\right) k$$

حيث ان طول a^*, b^*, c^* يساوي $\left(\frac{2\pi}{a}\right)$ والزوايا متساوية 90 لذلك فان مقلوب المكعب البسيط هو

كذلك مكعب بسيط ولكن ثابت الشبكة هو $\left(\frac{2\pi}{a}\right)$



2-BCC

The primitive vector

$$\bar{a} = a/2(i+j-k)$$

$$\bar{b} = a/2(-i+j+k)$$

$$\bar{c} = a/2(i-j+k)$$

$$a^* = 2\pi \frac{\bar{b} \cdot \bar{c}}{\bar{a} \cdot \bar{b} \cdot \bar{c}} = 2\pi \frac{\bar{b} \cdot \bar{c}}{\frac{a^3}{2}} = \frac{2\pi}{a}(i+j)$$

$$b^* = 2\pi \frac{\bar{a} \cdot \bar{c}}{\bar{a} \cdot \bar{b} \cdot \bar{c}} = \frac{2\pi}{a}(j+k)$$

$$c^* = 2\pi \frac{\bar{a} \cdot \bar{b}}{\bar{a} \cdot \bar{b} \cdot \bar{c}} = \frac{2\pi}{a}(i+k)$$

$$\mathbf{G}_{hkl} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^* = h\left[\frac{2\pi}{a}(i+j)\right] + k\left[\frac{2\pi}{a}(j+k)\right] + l\left[\frac{2\pi}{a}(i+k)\right]$$

$$= \frac{2\pi}{a} \left[(h+l)i \right] + (h+k)j \left] + (k+l)k \right]$$

The reciprocal lattice of (BCC) is (FCC)

3-FCC

The primitive vector

$$\bar{a} = a/2(i+j)$$

$$\bar{b} = a/2(j+k)$$

$$\bar{c} = a/2(i+k)$$

$$a^* = 2\pi \frac{\bar{b} \cdot \bar{c}}{\bar{a} \cdot \bar{b} \cdot \bar{c}} = 2\pi \frac{\bar{b} \cdot \bar{c}}{\frac{a^3}{4}} = \frac{2\pi}{a}(i+j-k)$$

$$b^* = 2\pi \frac{\bar{a} \cdot \bar{c}}{\bar{a} \cdot \bar{b} \cdot \bar{c}} = \frac{2\pi}{a}(-i+j+k)$$

$$c^* = 2\pi \frac{\bar{a} \cdot \bar{b}}{\bar{a} \cdot \bar{b} \cdot \bar{c}} = \frac{2\pi}{a}(i-j+k)$$

$$\mathbf{G}_{hkl} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^* = h\left[\frac{2\pi}{a}(i+j-k)\right] + k\left[\frac{2\pi}{a}(-i+j+k)\right] + l\left[\frac{2\pi}{a}(i-j+k)\right]$$

$$= \frac{2\pi}{a} \left[(h-k+l)i + (h+k-l)j + (-h+k+l)k \right]$$

The reciprocal lattice of (FCC) is (BCC)

Q-show that $d = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}|}$ is equivalent to $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{(h^2 + k^2 + l^2)}}$

in SC.

Answer:-

$$\mathbf{G}_{hkl} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^* = \frac{2\pi}{a}(hi+kj+lk)$$

$$\mathbf{G}_{hkl} \cdot \mathbf{G}_{hkl} = |\mathbf{G}_{hkl}|^2 = \frac{4\pi^2}{a^2}((h)^2 + (k)^2 + (l)^2)$$

$$|\mathbf{G}_{hkl}| = \frac{2\pi}{a} \sqrt{(h)^2 + (k)^2 + (l)^2}$$

$$d = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}|} = \frac{2\pi}{\frac{2\pi}{a} \sqrt{(h^2 + k^2 + l^2)}} = \frac{a}{\sqrt{(h^2 + k^2 + l^2)}}$$

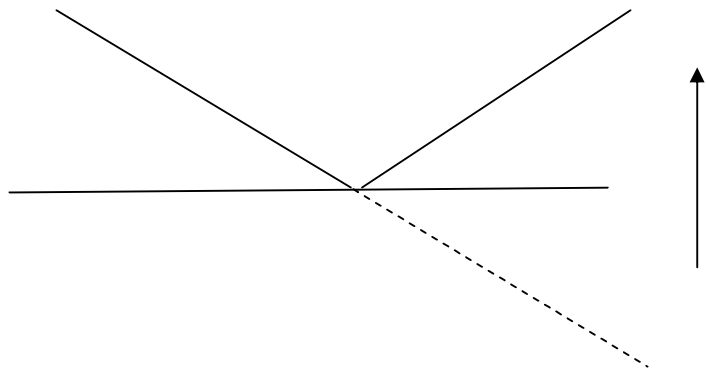
Q-show that $\Delta\mathbf{k} = \mathbf{G}$

The wave vector $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$

$\Delta\mathbf{k} = \vec{k} - \vec{k}_0 = \text{normal to the plane}$

=diff. in the wave vectors

from the Fig.



$$|\Delta\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda} \sin \theta + \frac{2\pi}{\lambda} \sin \theta$$

$$|\Delta\mathbf{k}| = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta \dots \dots \dots \text{scaler}$$

and $|\Delta\mathbf{k}| = \left(\frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta\right) \cdot \tilde{n} \dots \dots \dots \text{vector}$

\tilde{n} unit vector along the normal $\Delta\mathbf{k}$ or \mathbf{G}

$$\tilde{n} = \frac{\vec{G}}{|\vec{G}|} \Rightarrow |\Delta\mathbf{k}| = \left(\frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta\right) \cdot \tilde{n} \Rightarrow |\Delta\mathbf{k}| = \left(\frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta\right) \cdot \frac{\vec{G}}{|\vec{G}|}$$

$$d = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}|} \Rightarrow |\mathbf{G}| = \frac{2\pi}{d} \Rightarrow |\Delta\mathbf{k}| = \left(\frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta\right) \cdot \frac{\vec{G}}{\frac{2\pi}{d}}$$

$$\Delta k_{\parallel} = \left(\frac{2d}{\lambda} \sin \theta\right) \cdot \vec{G} \gg 2d \sin \theta = n \lambda \text{ for } n=1$$

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

$$\vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{G} \gg \vec{k} = \vec{k}_0 + \vec{G}$$