انفراج الأشعة السينية

- نستنتل من وصف كيف ذلك.

من مثال أن Cu هو Fcc و Fe هو bcc.

الذي يجيب على هذا هو انفراج الأشعة السينية.

ما هي الأشعة السينية (Rx)

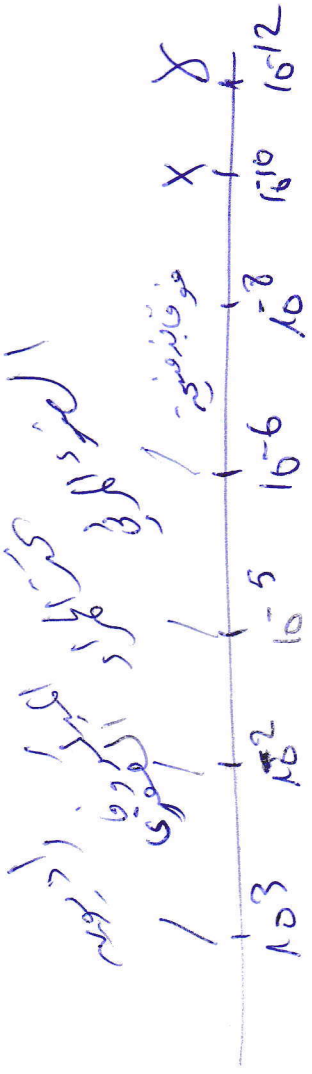
هي أشعة كهرومغناطيسية مع (λ) صغيرة جداً.

الحد λ (0,01 – 100Å) هو المتوسط 1Å.

Rx إذن هي شكل من أشكال الإشعاع الكهرومغناطيسي

طاقتها تعطى بالعلاقة

$$E = h\nu = h\omega = \frac{hc}{\lambda} = hc\bar{\nu}$$



λ في حدود أبعاد الذرة وأننا نكشف عن

الذي λ صغيرة جداً E كبيرة

لنحسب $E(\lambda = 1Å)$

$$E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6{,}62.10^{-34} \cdot 3.10^{8}}{10^{-10}}$$ joule

$$E = 12.400\ eV \quad (\lambda = 1Å)$$

ماذا يعني هذا العدد ؟

الأمواج الكهرومغناطيسية (R.X)

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \hbar\omega$$

$$\Rightarrow \lambda = \frac{hc}{E} \Rightarrow \boxed{\lambda(A^\circ) = \frac{12,4}{E(keV)}}$$

الإلكترونات

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

$$\Rightarrow E = \frac{p^2}{2m_e} \Rightarrow \boxed{\lambda_e(A^\circ) = \frac{h}{\sqrt{2m_e E}} = \frac{12,26}{\sqrt{E(eV)}}}$$

النترونات

$$\boxed{\lambda_n(A^\circ) = \frac{0,28}{\sqrt{E(eV)}}}$$

ما هي الطاقة اللازمة للحصول على

$$\begin{cases} \lambda_{pt} \simeq 1A^\circ \Rightarrow V = 12,4\,keV \\ \lambda_e \simeq 1A^\circ \Rightarrow V = 150\,eV \\ \lambda_n = 1A^\circ \Rightarrow E \simeq 0,028\,eV. \end{cases}$$

لاحظ λ_n ، λ_e

ملاحظة: λ_e تستعمل في دراسة الأشعة السينية

λ_n : تستعمل في دراسة الخواص المغناطيسية للمواد

طاقة التأين بـ eV

H	14						
He	25	55					
Li	5	76	123				
Be	9	18	154	218			
B	8	25	38	260	341		
C	11	24	48	64	393	491	
N	14	30	48	78	98	524	668
?							
O							

* لكل العناصر طاقة التأين في حدود 10eV

$12.400\ eV \longrightarrow 10\ eV$

لنرمز طاقة تأين الإلكترون الأول

H	He	Li	Be	B	C	N
14	55	123	218	341	491	668
1	2	3	4	5	6	7
1	4	9	16	25	36	49

$\times 13,6$

$$E = -KZ^2 = -13,6 \cdot Z^2$$

لنرمز طاقة تأين أخر الكترون في (N) 668eV

$12.400\ eV \longrightarrow 668eV$

إذن $\lambda = 1A^\circ$ هي القدرة على تأيين أي ذرة أي نزع أي الكترون

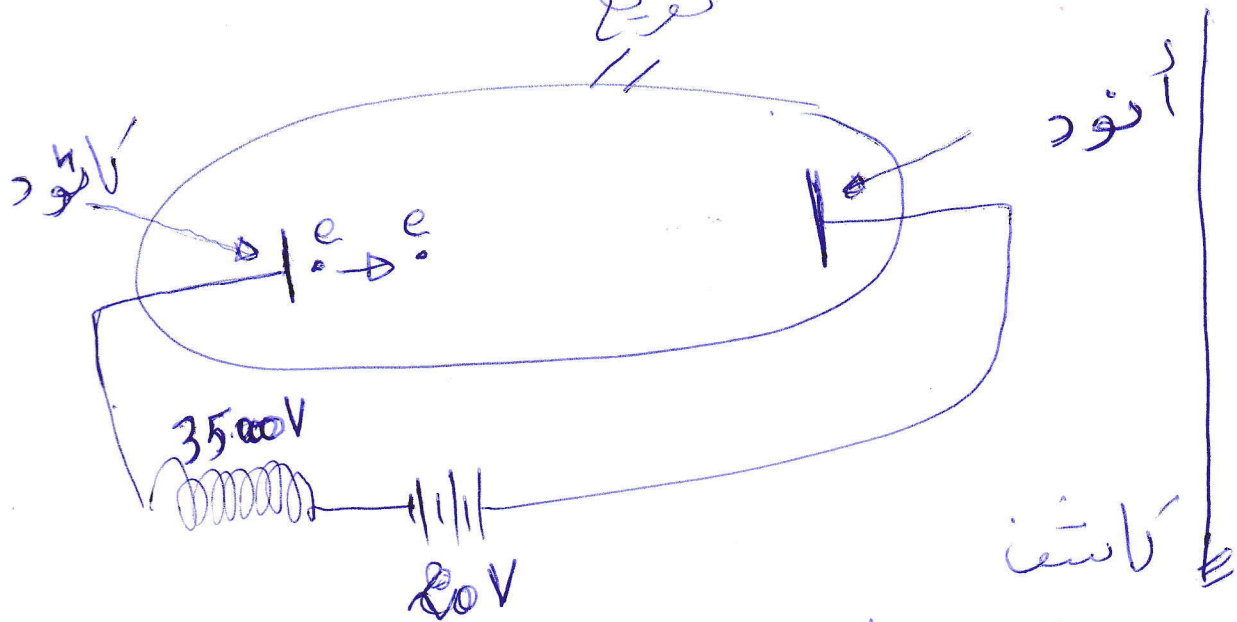
أي $\lambda = 1A^\circ$ هي القدرة على طرد أو نزع أي الكترون من أي ذرة مهما كانت

إذن $\lambda = 1A^\circ$ هي القدرة على تدمير البناء الإلكتروني

منشأ الأشعة السينية

كيف اكتشفت الأشعة السينية؟

- سنة 1895 شهر نوفمبر وليلاً بمنزل الأستاذ العالم رونتجن (بفاريا بألمانيا)، هو أستاذ بجامعة فورتسبورغ
- كان يبحث حول أنابيب تفريغ الغاز وتأثير V العالي والضغط المنخفض.



- تردد الأشعة $\frac{1}{8}$ وبالتالي ينعدم تفريغ الوسيلة فتنطفئ في كل 8 ثانية
- الشاشة (الكاشف) من مادة BaP+Ch بحيث تتوهج عند اصطدام جسم أو فوتون ذي طاقة معينة
- تشع 3 عند الاصطدام (الكترون أو فوتون) (تدعى بالشاشة المتألقة)

بدأ رونتجن التجربة. كان الجو غير مناسب لمطر-رعد-برق فلم يتبين له شيء واستمر في العمل عليها الأمور

* قام بتغليف لأنبوب الزجاجي بصندوق خشبي ملمع
و جعل أي مادة للشاشة ... و اهل التجربة
و لكن التوهج استمر ... بسبب التوهج ليس مادة
بل أشعة أخرى مضاعفة ... قام بتأثير على بمضاعفين
فلم يحدث أي تأثير. و اهل
و منع كتاب من الشاشة و الأنبوب ... ظهر الكتاب
و ظهرت يده ؟؟
و قطع (V) فتوقف كل شيء. أدرك السبب V
35.000V

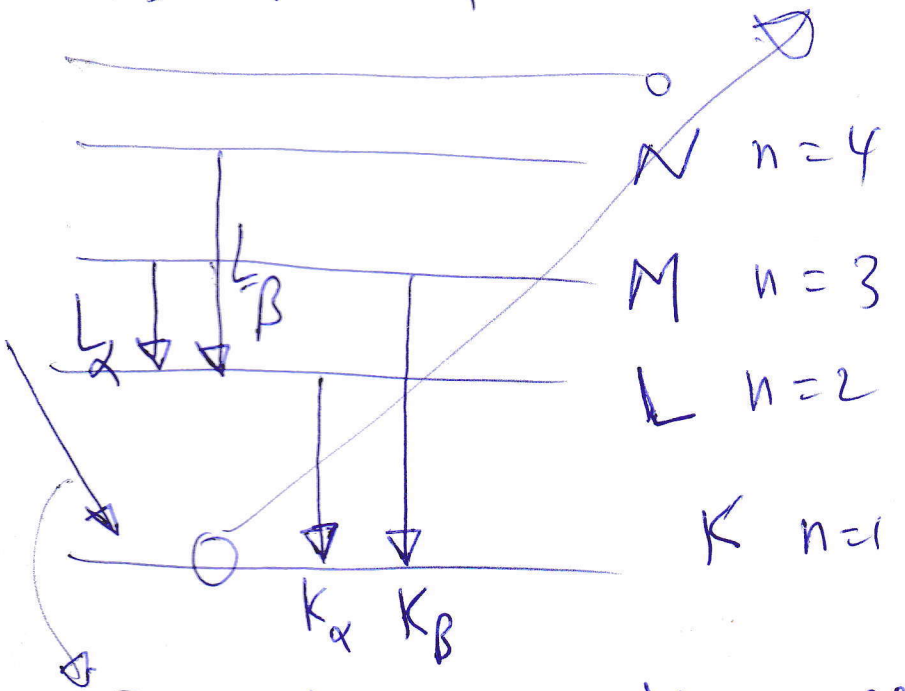
إذن السبب هي الموجات و غير معروفة ماهيتها (X)
أي الأشعة المجهولة سميت (X) أي الأشعة السينية (RX)
و سميت بها.

و لم يعلن عن النتائج في حينها بل واصل التجارب طيلة
شهر نوفمبر و ديسمبر من سنة 1895
و عندما تأكد أعلن عن ذلك في جانفي من سنة 1896
و كان التأثير ذلك على العالم كبير.

- انجلترا - مجتمع محافظ - اعلنت أنه عن صناعة البندقية
- فرنسا - مجتمع متفتح - قال كاتب ربما أمكننا رؤية الروح
- امريكا - مجتمع غريب - أو فكرة في جريدة ربما أمكننا نقل المعلومات من الكتب الأدمغة.

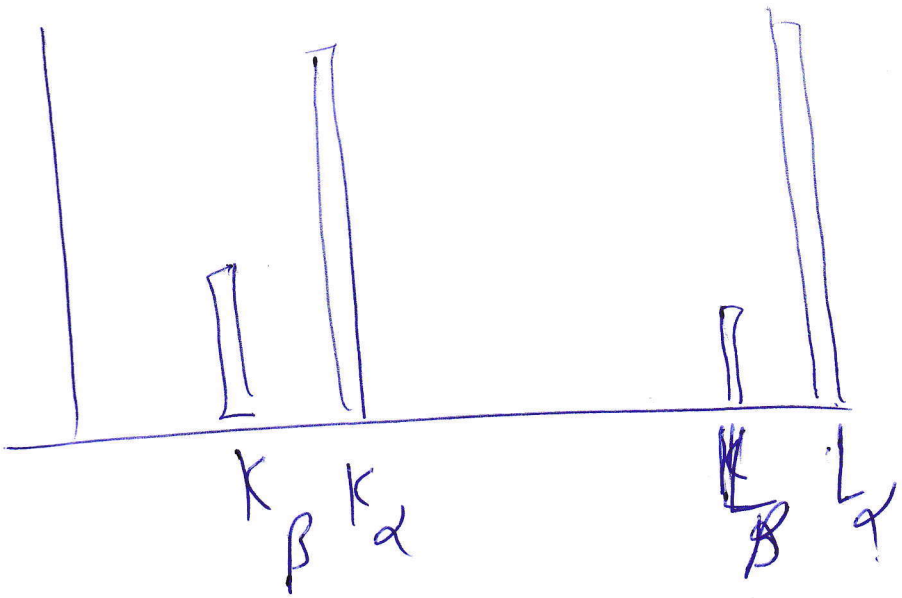
البشرية التأثير عن بعد
سنة 1899 - عالجة السرطان ص 4

أين الغرابة: إذا صادمت لسان من الكترونات الغاز بل من صادمت عند اصطدام (e) بالانود

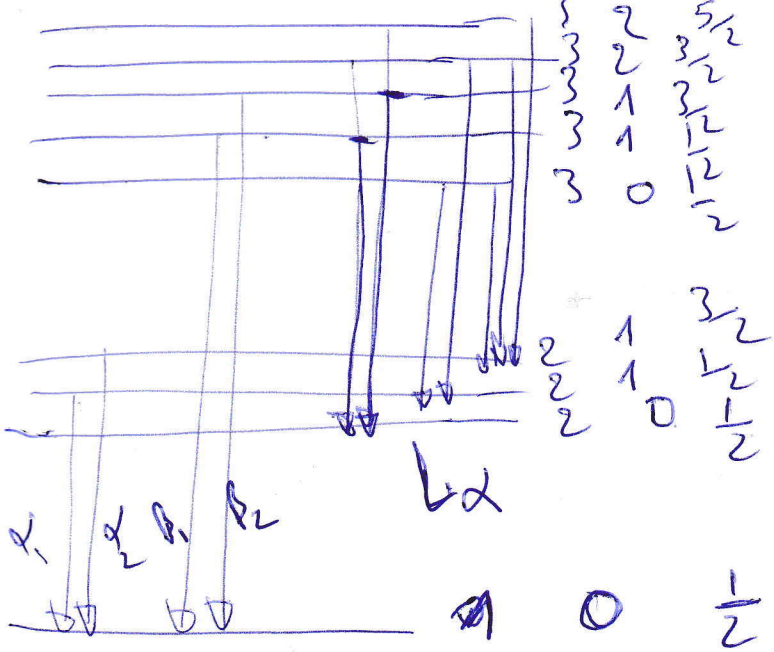


$E = qV = 35.000 eV = \frac{1}{2} m v^2$

طاقة الارتداد للذرة K بحدود $K Z^2 \simeq 10.000 eV$



$\Delta n \neq 0$, $\Delta \ell = \pm 1$, $\Delta j = 0, \pm 1$



$\ell = 0, \ldots (n-1)$

$j = \ell \pm \frac{1}{2}$

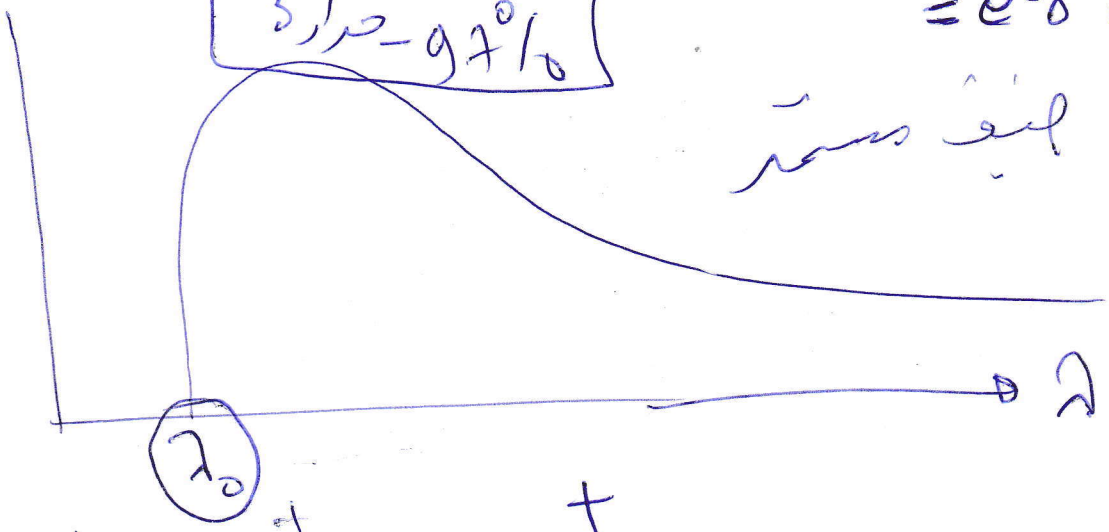
1 0 1/2

n ℓ j

3 حزم - 97% ح

بالنسبة لـ

$E = P\tau = e^2\gamma^2\tau = \frac{e^2 v^2}{\tau}$



طيف مستمر

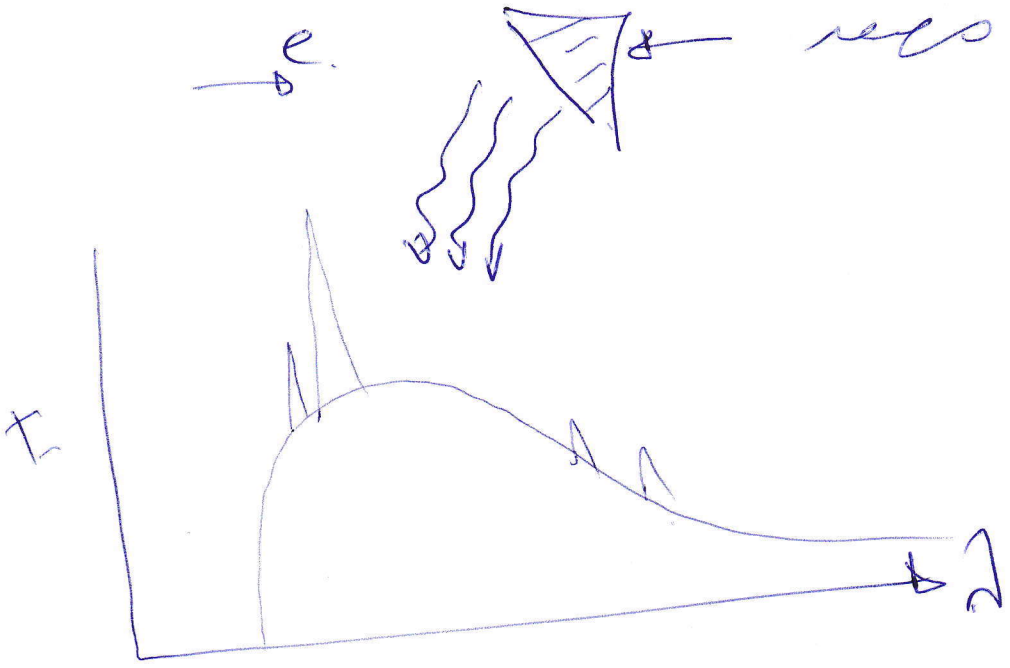
طيف خطي

$E = \frac{e^2 v^2}{\tau_0}$ ⟵ $\lambda = 0 - \infty$

$\lambda_0 = \lambda_{min} = \left(\frac{eV}{hc}\right)^{-1}$ ⟵ $E_{max} = \frac{hc}{\lambda_{min}} = eV$ كما في

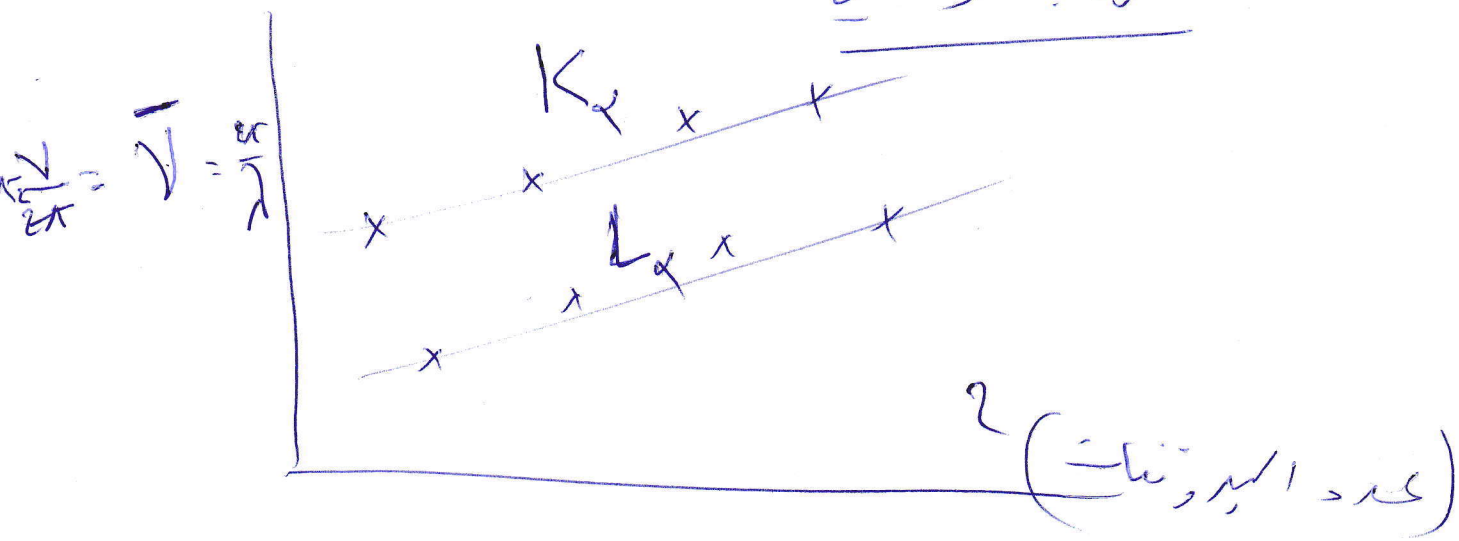
$\lambda_0(\text{A}^\circ) = \frac{12400}{V(V)}$

أذن



ما الحل للحصول على حزمة وحيدة اللون !!

قانون موسلي



18	19	58,933 27	28
39,948 Ar	39,09 K	Co	58,69 Ni
52	53	92	93
127,6 Te	126,90 I	238,1 U	237,0— Np

?

أعداد ثابتة.

$$\bar{\nu} = R\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)(Z-\sigma)^2$$

n_f n_i

قانون موسلي

σ	1	1,4
	K_α	L_α

$$\Rightarrow \begin{cases} \nu'_{K_\alpha} = R_\infty \frac{3}{4}(Z-1)^2 & L \to K \\ \nu'_{L_\alpha} = \frac{5}{36}R(Z-1,4)^2 & m \to L \end{cases}$$

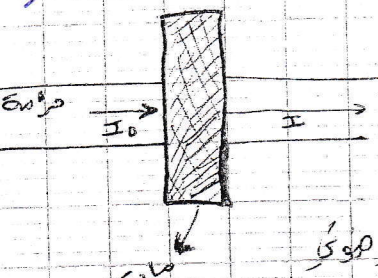
٤٠٤

إمتصاص الأشعة السينية : (نقصان الشدة I)

1- تخترق (تزوج) بعض الإشعاعات المادة
ولكنها عملية امتصاص حقيقية

2- الظاهرة الكهروضوئية (انطلاق الكترونات)

3- ظاهرة أوجر : وهي عند نزع الإلكترون الأول الكهروضوئي تهبط الإلكترونات الأكثر طاقة الأخرى لتعبئة الفرق في الطاقة فتشع بورها أشعة X التي تنزع بدورها الكترونا أخر (e) يسمى الكترون أوجر.



$dI \sim I\,dt \Rightarrow dI = -\mu I\,dt$ (سالبة)

μ : معامل الإمتصاص الخطي

t : سمك المادة

$$\Rightarrow \boxed{I = I_0 e^{-\mu t}}$$

$$\ln \frac{I}{I_0} = -\mu t$$

$$\mu t = \ln \frac{I_0}{I}$$

$$\Rightarrow \boxed{\mu = \frac{\ln \frac{I_0}{I}}{t}} \quad cm^{-1}$$

$\mu = \mu_m \rho = \mu_a \rho_0 \frac{N_{av}}{M} = \mu_{mol} \frac{\rho}{M}$

$\mu_{mol} = \frac{\mu}{\rho} M_{mol}$ $\frac{cm^2}{mol}$ * 4

* 2 يوجد معامل آخر يسمى : المعامل الكتلي للإمتصاص μ_m

معدل الامتصاص لوحدة المساحة لوحدة كتلة المادة

ρ : الكثافة

$$\boxed{\mu_m = \frac{\mu}{\rho}} \quad \frac{cm^2}{g} \Rightarrow \boxed{I = I_0 e^{-\mu_m \rho t}}$$

$\mu_a = \frac{\mu}{\rho} \frac{M_{mol}}{N_{av}}$ $\frac{cm^2}{atom}$ * 3 العامل الذري للإمتصاص (معدل الامتصاص لوحدة المساحة لذرة واحدة)

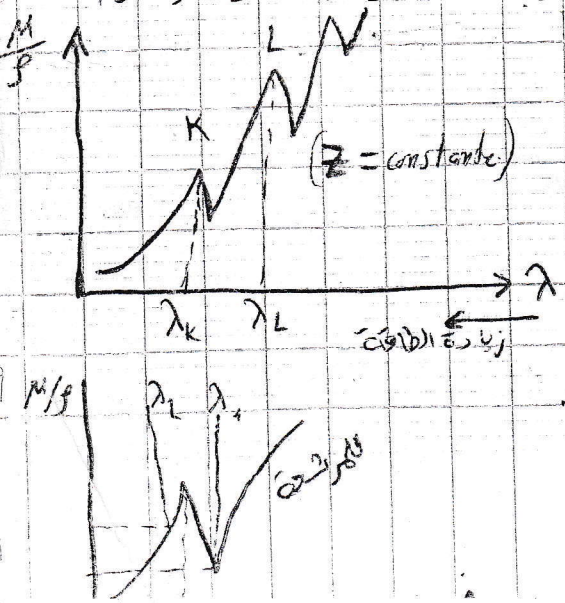
μ_m : لا يعتمد مطلقا على طور المادة (غازية، سائلة أو صلبة)

$$(\mu_m)_{ABC\ldots} = \sum_K W_K (\mu_m)_K = W_A \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_A + W_B \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_B + \ldots$$

لعنصر أو مركب $= \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{calcul}$

W_K : النسبة المئوية للعنصر K في المول الغرامي للعنصر أو المركب

المرشحة :



$\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{\lambda,Z}$: تغير λ لأشعة X و Z للمادة

تحدث حافات الإمتصاص (K، L ...) عندما تحدث رسن (قفزات) في اهتزازات المادة أي عندما تصبح طاقة الإشعاع كافية لنزع الكترون من مدار (K أو L ...).

وهنا تعتمد فكرة المرشحات.

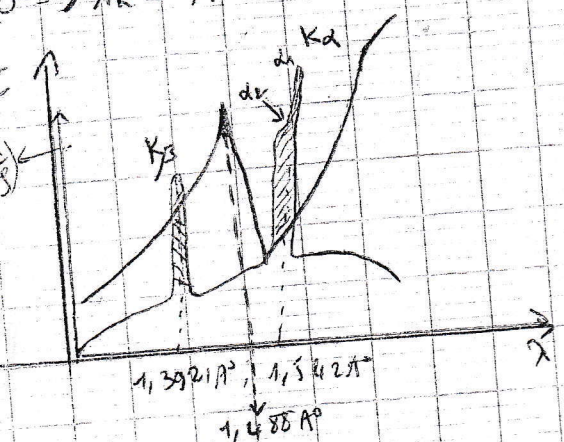
* نختار المرشحة بحيث : $\lambda_L < \lambda_K < \lambda_1$

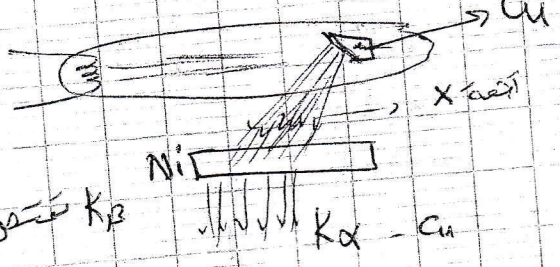
25

مثال :

$\lambda_{K\beta} = 1,39217\ A^\circ$ } ← Cu
$\lambda_{K\alpha} = 1,542\ A^\circ$ }

لفصل $\lambda_{K\alpha}$, $\lambda_{K\beta}$ نستعمل الشكل Ni لأن $\lambda_K = 1,488\ A^\circ$ (الشكل)





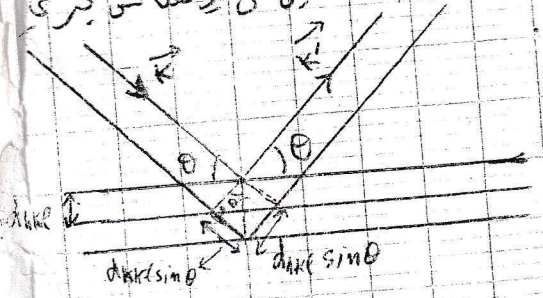
إنعراج (حيود) أشعة X

في حالة الإنعراج عندما تحيد الأشعة عن طريقها الأصلي عندئذ تراكب
لذا كان التراكب بناء على تواجد في الطور سمي بالتراكب البناء (شدة مضيئة
- الهدام (- مظلمة
- تعاكسي -

تفسير براغ :

1- البلورة تتكون من مستويات عاكسة للأشعة السينية
2- لا تنعكس كل الأشعة عن أول مستوى تواجهه بل أن الإنعكاس جزئي
3- تخضع الإنعكاسي لقوانين الإنعكاس

- فرق المسار بين الشعاعين المنعكسين على مستويين متوازيين



Δ : مسار ربي

$\Delta = 2\, d_{hkl} \sin\theta$

إذا كان $\Delta = n\lambda$ (n عدد صحيح) ⇐ تداخل تقويي (بناء).

* شرط التداخل البناء (تداخل التقويي)

$$\boxed{2\, d_{hkl} \sin\theta = n\lambda}$$ ← شرط براغ.

n : عدد صحيح يسمى رتبة الإنعكاس.

- عموما عند سقوط أشعة X ما على بلورة ما لا يحدث الإنعكاس إلا إذا تحققت شرط براغ.

ملاحظات :

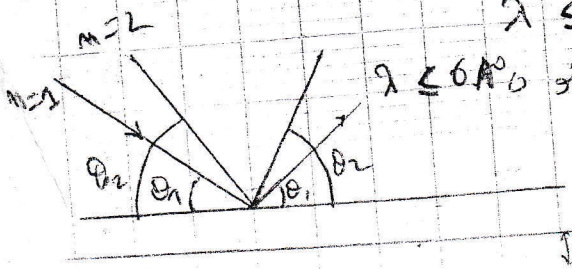
① ما هو طول الأشعة السينية المستخدمة للإنعراج في البلورة ؟

$n = 1$ و $\sin\theta \leq 1$ ⇐ $\lambda \leq 2d$

مثال $d = 3\ A^\circ$ فما هي أكبر قيمة لطول موجة الإنعراج يجب أن تكون $\lambda \leq 6\ A^\circ$

② n : رتبة الإنعكاس تقدد قيمة θ (زاوية براغ)

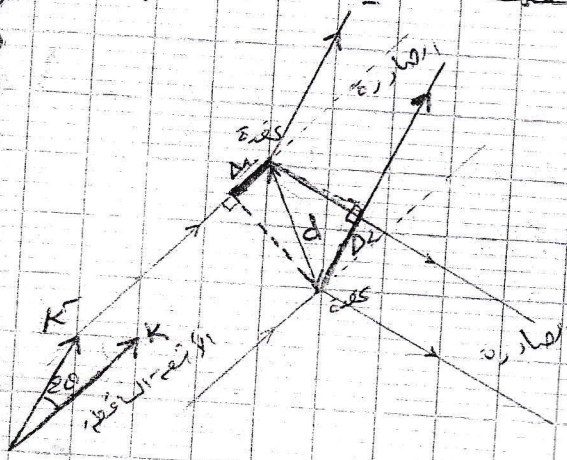
$\sin\theta_1 = \frac{\lambda}{2d_0}$, $\sin\theta_2 = \frac{2}{d_0}$



③ عند سقوط أشعة X بيضاء على البلورة تقوم المستويات البلورية بانتقاء الأطوال الأمواج التي تحقق شرط براغ، وبالتالي تحصل على حزم كثيرة من الانعكاسات.

تفسير لاوي :- Laue

عند سقوط الأشعة السينية على عقد الشبكة البلورية التي تسمى منابع الأشعة فإنها تنتشر وتبعث إشعاعها في جميع الاتجاهات فتتداخل هذه الإشعاعات مع بعضها فإذا كان التداخل بناءً عندئذ يكون الإشعاع الصادر عن كل عقدة البلورة كذا ظلاً بناءً وعندئذ يظهر هذا على لوحة الإفراج كقمة شبيهة انعكاس براغي



الحسابات الرياضية :-

$$\begin{cases} \vec{K} = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{u_K} \\ \vec{K'} = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{u_{K'}} \end{cases}$$ الحل الوجهي لا يتغير

$$\varphi = \vec{d}\cdot\Delta\vec{K} = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)$$

$$\Delta_2 = \vec{d}\cdot\vec{u_K}$$

$$\Delta = \Delta_1 - \Delta_2 = \vec{d}\cdot(\vec{u_{K'}} - \vec{u_K})$$

$$\varphi = \frac{2\pi}{\lambda}\Delta = \vec{d}\cdot\Delta\vec{K}$$

شرط التداخل البناء:

$$\vec{d}\cdot\Delta\vec{K} = 2\pi n$$

n عدد صحيح

$\vec{d} = \vec{R} \Rightarrow$ $\boxed{\vec{R}\cdot\Delta\vec{K} = 2\pi n}$

يجب أن تتحقق هذه العلاقة لكل قيم $\vec{R}$ أي لكل قيم n_3, n_2, n_1

وتكتب بالعلاقة $\boxed{e^{i\vec{R}\cdot\Delta\vec{K}} = 1}$

$$e^{i\vec{R}\cdot\Delta\vec{K}} = e^{i2\pi n} = 1 \Rightarrow \boxed{e^{i\vec{R}\cdot\Delta\vec{K}} = 1}$$

$$e^{i\vec{R}\vec{G}} = 1$$

وعرفنا سابقاً (في الشبكة المعكوسة) أن

$$\boxed{\vec{G} = \Delta\vec{K}}$$

$\Rightarrow$

* لوحة الإفراج تمثل جزءاً من طارف الشبكة المعكوسة

$\vec{R_{hkl}} = \vec{G}$

$\Delta\vec{K} = 2\pi n \Rightarrow$ $\begin{cases} \vec{a_1}\cdot\Delta\vec{K} = 2\pi h \\ \vec{a_2}\cdot\Delta\vec{K} = 2\pi k \\ \vec{a_3}\cdot\Delta\vec{K} = 2\pi l \end{cases}$ معادلات لاوي

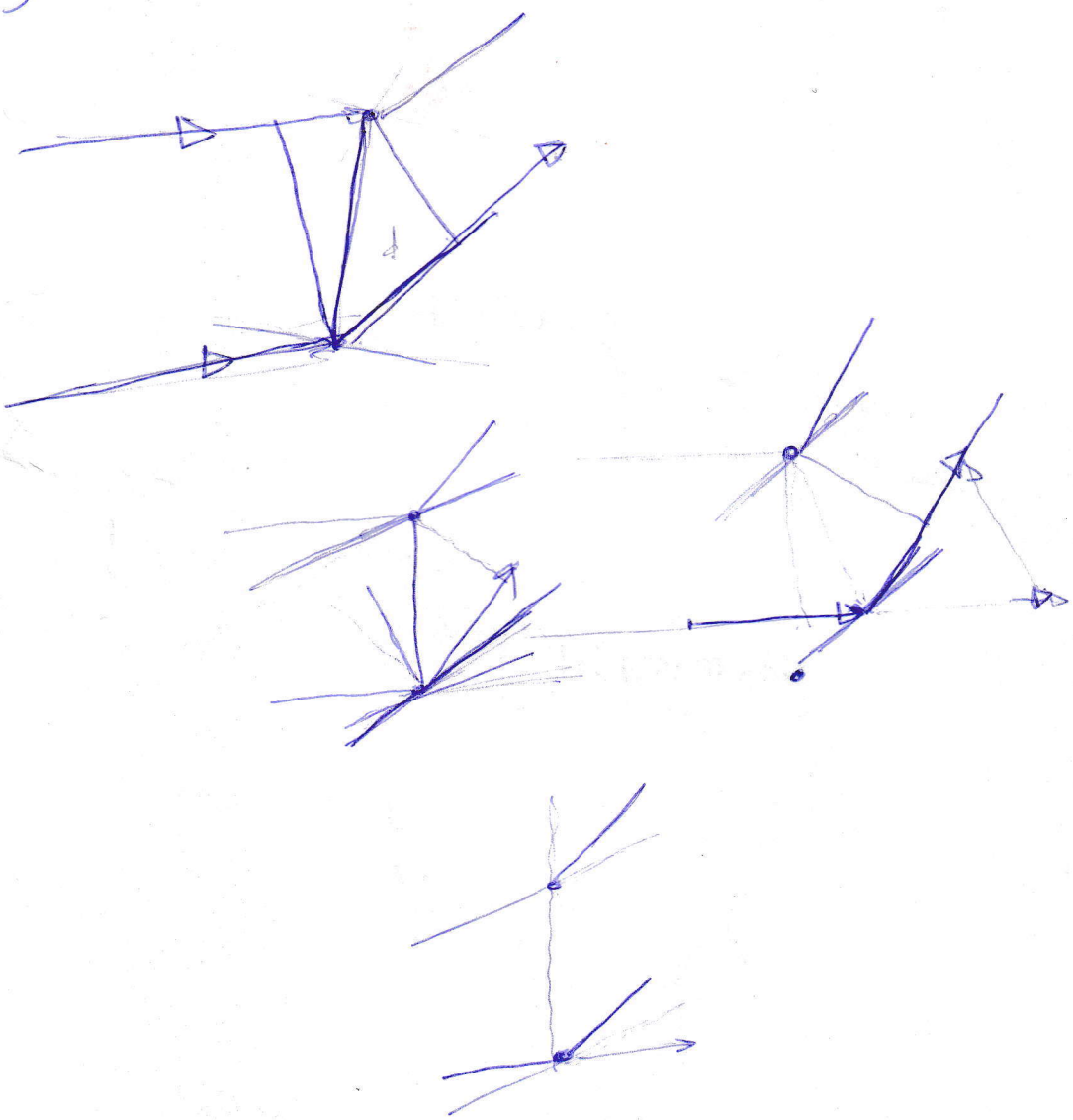
$$\Delta = \Delta_2 - \Delta_1 = \vec{d}\vec{u}_{k'} - \vec{d}\vec{u}_{k}$$

$$\varphi = \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \Delta = K \cdot \left(\vec{d}\vec{u}_{k'} - \vec{d}\vec{u}_{k}\right)$$

$$= \vec{d}.\vec{k'} - \vec{d}\vec{k} = \vec{d} . \Delta\vec{k} .$$

$\varphi = 2\pi m \Rightarrow$ الشرط الذي ينتج لنا:

$$\varphi - 2\pi m = \vec{d} . \Delta\vec{K} .$$



27

$\Phi = \vec{R} \cdot \Delta\vec{K}$

شدة الموجة المنعكسة :-

ب- $\mathcal{E}_{sc} = \mathcal{E}_0 e^{i\omega t}$

ج- $\mathcal{E}_{sc} = \mathcal{E}_0 e^{i\omega t + i\Phi}$

د- $\mathcal{E}_{sc} = \mathcal{E}_0 e^{i(\omega t + \vec{R}\cdot\Delta\vec{K})}$ ، $A_{\Delta K} = \sum_{n_1,n_2,n_3} e^{i\vec{R}\cdot\Delta\vec{K}}$ ← سعة طبيعة الكاشف

$(A_{\Delta K})_{max} = A_G$ ، $A_G = \sum_{n_1,n_2,n_3} e^{i\vec{R}\cdot\vec{G}}$ A_G : السعة العظمى للموجة المنعكسة

$A_G = \sum_{n_1=0}^{N-1} \sum_{n_2=0}^{N-1} \sum_{n_3=0}^{N-1} e^{i\vec{R}\cdot\vec{G}} = N^3$

لأنه لدينا N^3 من العقد

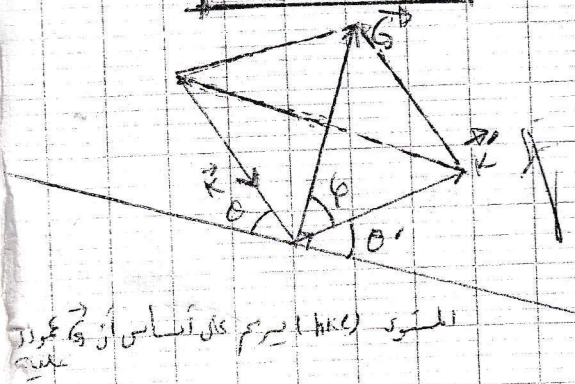
أو نقول لدينا N^3 خلية أساسية

$I = |A_G|^2 = N^6$ ← الشدة

تكافؤ أسلوبي براغ والوي :-

$\Delta\vec{K} = \vec{G} \Rightarrow \vec{K'} - \vec{K} = \vec{G}$

$\boxed{\vec{K} = \vec{K'} + \vec{G}}$ أو $\boxed{\vec{K'} = \vec{K} + \vec{G}}$



$\vec{G} \perp (hkl)$

$G = nG_{hkl} = n\frac{2\pi}{d_{hkl}}$

$2K\cos\varphi = G$

$G = 2K\sin\theta = \frac{4\pi}{\lambda}\sin\theta$

$\frac{2\pi n}{d} = \frac{4\pi}{\lambda}\sin\theta$

$\Rightarrow \boxed{2d\sin\theta = n\lambda}$ → علاقة براغ

المستوى (hkl) يرسم على أساس أن $\vec{G}$ عمودي عليه

(hkl)

بناء إيوالد :- هو أسلوب لتحليل النتائج العملية

* فرضيات براغ ومعادلته موجودة ضمنيا، في شرط الوي للإنراج.

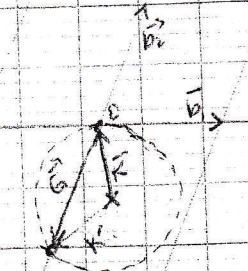
1- نرسم الشبكة المعكوسة

2- نأخذ أية نقطة "O"

3- نجعل "O" رأس الشعاع $\vec{K}$ الممثل للحزمة الكاشفة والإنحراف

4- نعتبر ذنب الشعاع $\vec{K}$ مركزا لكرة إيوالد

نصف قطرها $= K = \frac{2\pi}{\lambda}$

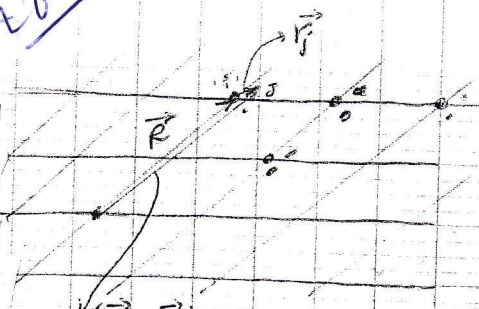


حتى يحدث الإنراج يجب أن تمر كرة إيوالد بالأقل بنقطة واحدة من عقد الشبكة المعكوسة (عدا "O") تعليم هذه العقدة هو نفس تعليم بقعة الإنراج على الوجه الإنراجي

وهي تمثل معادلة مماثلة للمستويات العاكسة

عامل البنية :-

(1) تمثل موقع عقدة شبكة عاكسها متكونة من مجموعة ذرات عددها S



- الانزياح عن عقد الشبكة $A_G = \sum_{n_1,n_2,n_3} e^{i\vec{R}\cdot\vec{G}}$

- تتعامل مع ذرات الشبكة الليورية بالتالي:

$$A_G = \sum_{n_1 n_2 n_3 j} f_j e^{i(\vec{R}+\vec{r_j})\cdot\vec{G}}$$

f_j : عامل يختص بنوع الذرات (حديد، نحاس ...).

$$A_G = \underbrace{\left(\sum_{n_1,n_2,n_3} e^{i\vec{R}\cdot\vec{G}}\right)}_{M^3} \cdot \underbrace{\left(\sum_j f_j e^{i\vec{r_j}\cdot\vec{G}}\right)}_{F(hkl)}$$

شدة الأشعة السينية المحيدة $I = M^6 |F|^2$

حيث :

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^{S} f_j e^{i\vec{r_j}\cdot\vec{G}}$$

F : عامل البنية ، f_j : عامل التشتت الذري.

x_j, y_j, z_j احداثيات الذرة بالنسبة للعقدة المنتمية لها.

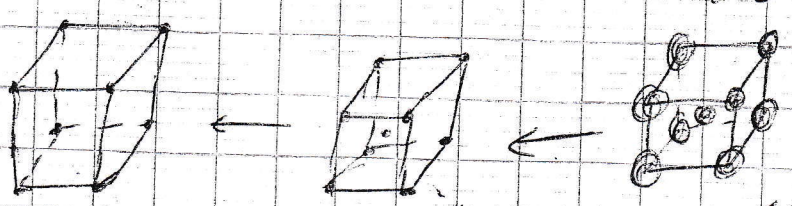
$$\vec{r_j} = x_j\vec{a_1} + y_j\vec{a_2} + z_j\vec{a_3} \quad , \quad \vec{G} = h\vec{b_1} + k\vec{b_2} + l\vec{b_3}$$

$$\boxed{F_{hkl} = \sum_{j=1}^{S} f_j e^{i2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)}}$$

- وهذه العلاقة تتكامل الحاور الأساسية للشبكة وفي حالة الشبكات bcc ... فيمكن أن نعتبر الحاور الأساسية منطبقة على الحاور الكارتيزية (أي الشبكة) حتى نعتبر الشبكة العقدة كتلة بسيطة + قواعد عقدية

مثال: احسب عامل البنية لمعدن (N_a) الصوديوم.

- تركيب الصوديوم هو bcc :



(خلية متكونة من عقدتين (0,0,0), $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$)

$(x_j, y_j, z_j) = \begin{cases} 0,0,0 & j=1 \\ \frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2} & j=2 \end{cases}$

$$F_{hkl} = f_{Na} + f_{Na}\, e^{i\pi(h+k+l)} = f_{Na}\left(1 + e^{i\pi(\overbrace{h+k+l}^{n})}\right)$$

نعوض في القانون

$$n = h+k+l \Rightarrow \boxed{F_{hkl} = f_{Na}\left(1 + (-1)^n\right)}$$

1- عندما $n = h+k+l$ = عدد فردي $\Leftarrow F = 0$ لا يوجد انعكاس على السطح (100)

2- عندما $n = h+k+l$ = عدد زوجي $\Leftarrow F = 2 f_{Na}$

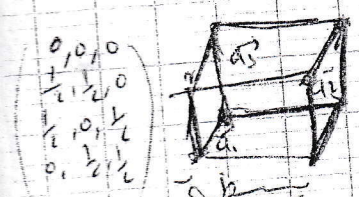
التفسير الفيزيائي:

مثال ②: بالنسبة لـ كلوريد السيزيوم (Cs Cl) $\Leftarrow$

$$F_{hkl} = f_{Cs} + f_{Cl}\, e^{i\pi(h+k+l)}$$

$$F_{hkl} = \begin{cases} f_{Cs} - f_{Cl} & \rightarrow h+k+l = \text{عدد فردي} \\ f_{Cs} + f_{Cl} & \rightarrow h+k+l = \text{عدد زوجي} \end{cases}$$

مثال ③: معامل البنية لكل (f_{cc} . $\frac{N_i}{n}$)



بسيط $\Leftarrow$

$$F_{hkl} = f_{Ni} + f_{Ni}\, e^{i\pi(h+k)} + f_{Ni}\, e^{i\pi(h+l)} + f_{Ni}\, e^{i\pi(k+l)}$$

غير مالئين: $h<k<l$. مختلط (زوجي و فردي)، أو غير مختلط (عدد أو زوجي)

1- h,k,l مختلطة $\Leftarrow F = 0 \leftarrow I = 0$ (لا يوجد انعكاس).

2- h,k,l غير مختلطة $\Leftarrow F = 4 f_{Ni}$

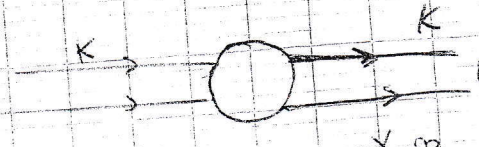
عامل التشتت الذري:

$$F_{hkl} = \sum_{j}^{s} f_j\, e^{i \frac{\vec{r}_j \cdot \vec{G}}{}}$$

f_j: يعتمد على نوع الذرة المشتتة ولذلك زاوية التشتت، طول الموجة المشتتة وعددها موجودة في جداول خاصة.

ويمكن أن نفصل ونقول هناك حالات:

الحالة الأولى: $\theta = 0$



التشتت الكائن في ذرة هو $(Z \cdot X)$: التشتت الكائن على الإلكترون واحد $\times$ Z: العدد الذري

$f_i = \frac{\text{تشتت ذرة}}{\text{تشتت ذرة}}$

30/

$f_j < Z$ ~~$f_j > Z$~~ اما اذا كان $\theta \neq 0$ فان

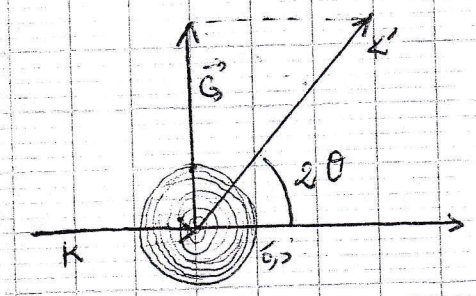
تعريف f_j - بالنظرية الكلاسيكية.

$$f_j(\vec{G}) = \int_{(\vartheta)} \rho(\vec{r})\, e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}\, d\vartheta$$

ناخذ حالة ذرات بسيطة

معناه نفرض أن التوزيع متناظر

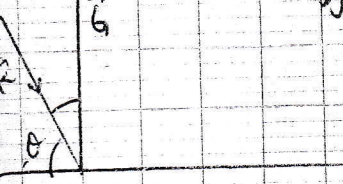
$$\rho(\vec{r}) = \rho(r)$$



$$f_j(G) = \int_{\varphi=0}^{\pi}\int_{G=0}^{2\pi}\int_{r=0}^{\infty} \rho(r)\, r^2 \sin\alpha\, d\alpha\, d\varphi\, dr\, e^{iGr\cos\alpha}$$

$$= 2\pi \int_{r=0}^{\infty} \rho(r)\, r^2\, dr \frac{2}{2i}\frac{e^{iGr} - e^{-iGr}}{Gr} \longrightarrow \sin(G\cdot r)$$

$$f_j = 4\pi \int_0^{\infty} r^2 \rho(r)\, dr \frac{\sin(\vec{G}\vec{r})}{G\cdot r}$$



$$\vec{K'} = \vec{K} + \vec{G}, \quad K'^2 = K^2 + G^2 + 2\vec{K}\cdot\vec{G}$$

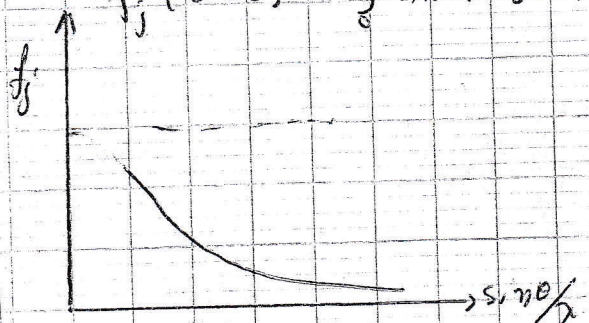
$$G^2 + 2KG\sin\theta = 0$$

$$|\vec{G}| = 2K\sin\theta = \frac{4\pi}{\lambda}\sin\theta$$

$$f_j\left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right) = \int_0^{\infty} 4\pi r^2 \rho(r)\, dr \frac{\sin\left(4\pi r \frac{\sin\theta}{\lambda}\right)}{4\pi r \sin\theta/\lambda}$$

$\theta \to 0,\ G \to 0 \Rightarrow \lim_{G\to 0} \frac{\sin Gr}{Gr} = 1$

$$f_j(\theta = 0) = \int_0^{\infty} 4\pi r^2 \rho(r)\, dr = Z$$



احتمال وجود الكترون في المدى r و $r+dr$.

لو كانت الذرة نقطية مادية: $f_j = Z$

تأثير درجة الحرارة على شدة الأشعة السينية المنعرجة:

$$A_G = \sum_{n_1 n_2 n_3} f_j\, e^{i(\vec{R}+\vec{r}_j)\cdot\vec{G}}$$

تأثير التذبذب الحراري

$$\vec{r}_j \longrightarrow \vec{r}_j' = \vec{r}_j + \vec{U}_j(t)$$

$$A_G = \sum_{n_1 n_2 n_3} f_j\, e^{i\vec{R}\vec{G}} \cdot e^{i\vec{r}_j\vec{G}} \cdot e^{i\vec{U}_j\vec{G}} = \Gamma^3 \sum_{j=1}^{s} f_j\, e^{i\vec{r}_j\vec{G}} \cdot e^{i\vec{U}_j\vec{G}}$$

$$\langle e^{i\vec{U}\cdot\vec{G}} \rangle$$

بالشروط التالية نأخذ مثل

$$e^X = 1 + X + \frac{X^2}{2!} + \cdots \qquad (X << 1)$$

37

$e^{i\vec{u}\cdot\vec{G}} = 1 + i\vec{u}\cdot\vec{G} - \frac{1}{2}(\vec{u}\cdot\vec{G})^2$, $\langle e^{i\vec{u}\cdot\vec{G}} \rangle = 1 + \langle i\vec{u}\cdot\vec{G} \rangle - \langle \frac{1}{2}(\vec{u}\cdot\vec{G})^2 \rangle$

بما أن الحركة الذرية عشوائية فستتوقع أن يكون متوسط المسافة $\vec{u_j}$ على $\vec{G}$ معدوماً وبالتالي

$$\langle \vec{u_j}\cdot\vec{G} \rangle = 0$$

$$\langle (\vec{u_j}\cdot\vec{G})^2 \rangle = \frac{1}{3}\langle u_j^2 \rangle G^2$$

$\frac{1}{3}$ نتيجة لدرجة حرية مثل $T = \frac{3}{2}kT$ في الحركة الكاربية

$-\frac{1}{6}\langle u_j^2 \rangle G^2$

$$\langle e^{i\vec{u}\cdot\vec{G}} \rangle = 1 - \frac{1}{6}\langle u_j^2 \rangle \vec{G} \simeq e^{-\frac{1}{6}\langle u^2 \rangle G^2}$$

$$A_G = M^3 \sum_{j=1}^{S} f_j e^{i\vec{r}_j\cdot\vec{G}} e^{-\frac{1}{6}\langle u^2 \rangle G^2}$$

← عدد ذرات الخلية الواحدة (غالباً يستبعد عليها)

$\vec{u_j}$ يعتمد على نوع الذرة وموقع الذرة ونوعها وعلى وضع ذرات الخلية الواحدة خارج الإشارة أكبر عندما

① كل الذرات في البلورة من نفس النوع

② التذبذب الذري لا يعتمد على موقع الذرة في البلورة، (غير مؤكد).

$$I = |A_G|^2 = M^6 |F|^2 e^{-\frac{1}{3}\langle u^2 \rangle G^2}$$

$$\boxed{I = I_0 e^{-2M}}$$

$\langle u_j^2 \rangle = \langle u^2 \rangle$

I_0: تدهور الشدة في الصفر العطلة (حيث الحركة الذرية معطلة).

$$\langle u \rangle = \frac{3}{2}K_B T = \frac{1}{2}m\omega^2\langle u^2 \rangle$$

متذبذب ترمودينامكي

$$\langle u^2 \rangle = 3K_B T / m\omega^2$$

K_B: ثابت بولتزمان.

$$\boxed{M = \frac{1}{6}\frac{3K_B T}{m\omega^2}\left(\frac{4\pi \sin\theta}{\lambda}\right)^2}$$

القيمة العظمى لشدة الأشعة السينية على لوحة الإفراج تنعكس الإنعكاس البراغي.

من معادلة M:

① زيادة درجة الحرارة تنقص من شدة الإنعكاس البراغي

② زيادة درجة الحرارة تنقص من شدة إنعكاس براغ بزوايا θ قليلة أقل مما هو عليه بزوايا θ كبيرة

③ تبيان (تركيز) إنعكاس براغ لا يتغير بتغير درجة الحرارة ولكنها تتغير

الإضافة

زيادة درجة الحرارة تؤدي إلى زيادة نسبة شدت الأشعة السينية الغير المرنة والتي عليها ($\lambda \neq \lambda'$ ، $K \neq K'$). وهذا يؤدي إلى تفاعل بين الفوتونات التي تسبب خطأ طفيف معين أما الفوتونات المصدمة فكما ذكرنا تعتبر من زيادة الخلفية (Back ground) (Bgl)

32

الطرق التجريبية لإنفراج الأشعة السينية

1 ـ طريقة لاوي:

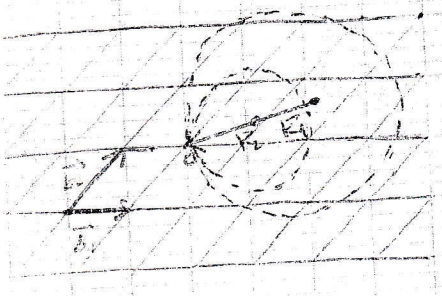
المستويات المستقيمة
الطول الموجي الذي تعكسه
قانون لاوي $2d \sin\theta = n\lambda$
ـ خلف الإنفراج يتمثل بقع أو فيلم
ملتقطة على الفيلم

تفسير مخطط لاوي بطريقة بناء إيوالد.

طريقة لاوي تكفل الإمكانيات البلورية فقط أو معرفة الجيب الموجود في البلورات. بعض ذلك أننا نعرف التركيب البلوري للعينة عند ما نرسم المخلوب.

$\vec{K_1} \longrightarrow \vec{k_1}$
$\lambda_1 \longrightarrow \lambda_2$

$\vec{K_1} = \frac{2\pi}{\lambda_1}\vec{u}$, $\vec{K_2} = \frac{2\pi}{\lambda_2}\vec{u}$

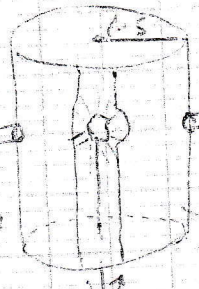


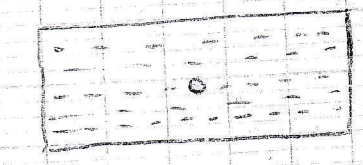
أن نقطة من عقد الشبكة العكسية الواقعة بين كرتين سطحها يمثل طرفيها يكفي أن نتصورها سطح كرة هي كرة ايوالد. أي يظهر تأثيرها على شعاع لاوي.

① ترتيب البقع (بقع لوحة الإنفراج) على شبكة وضع تناظري بالنسبة للأشعة الناتجة كل مخطط تناظر يمثل إحداثيات منطقة واحدة. أيها الأشعة الرابعة تشكل وجهيا زائدة.

② إذا التقت الأشعة الساقطة على البلورة بالتجاه محور بلوري ذي تناظر $n=4$ فإن تناظر هذا التناظر درجته تتطابق لوحة الإنفراج.

2. طريقة البلورة الدوارة.
(بلور، 2 أحادية)





نستخدم في حسابنا ثوابت الشبكة a, b, c
حيث c هو محور البلورة المراد حسابه الموازي لمحور الدوران
نحسب a أو b بالتجاه محور الدوران
بالتدوير نغير زاوية السقوط

$a_3 \cdot \Delta K = 2\pi k$. $a_3 \cdot \Delta K = 2\pi k$. $a_3 \cdot \Delta K = 2\pi k$

$\vec{a_3}(\vec{k_2} - \vec{k_1}) = 2\pi k$

$a_3 \frac{2\pi}{\lambda} \sin\alpha = 2\pi k$

$a_3 = \frac{\lambda k}{\sin\alpha}$

$\tan\alpha = \frac{r}{R}$

33

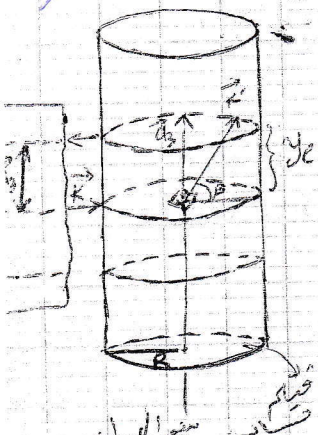
$\vec{a_3} \cdot \vec{AK} = 2\pi\ell = a_3 (\vec{K} - \vec{r}) = \vec{a_3} \vec{K}$

$\vec{a_3} \perp \vec{K}$

$\vec{a_3} \cdot \vec{K} = 2\pi\ell$ ، $tg\beta = \frac{y_\ell}{K}$

$a_3 \frac{2\pi}{\lambda} \sin\beta = 2\pi\ell$

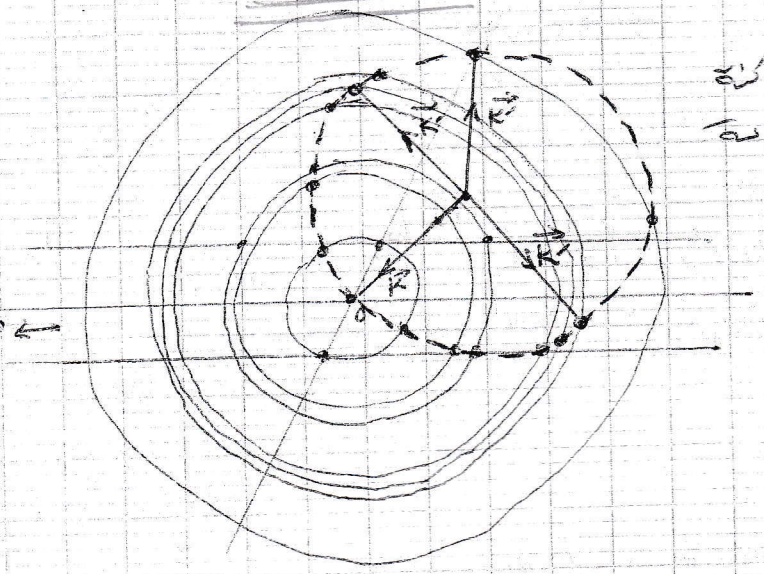
$$a_3 = \frac{\lambda\ell}{\sin\beta}$$



وذلك للعموم :

$$tg\beta_n = \frac{y_n}{K}$$
$$a_n = \frac{\lambda n}{\sin\beta_n} \qquad n = 1, 2, 3$$

هذه العلاقة تسمح لنا بحساب a_3 ، a_2 ، a_1 .

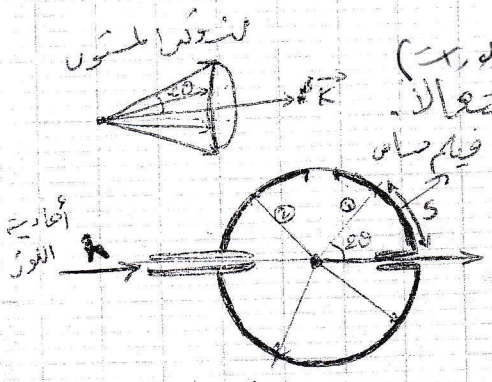


- كرة ايوالد سائرة
- الشبكة المعكوسة
- تدور .

← مسارات عقد الشبكة المعكوسة

3 - طريقة المسحوق (دباي - شرر) (سفد، البلورة)

- محدد التركيب البلوري وهي الطريقة الأكثر استعمالا.
- تسمح التوزيع الفضائي في الفضاء للعينات ذات الأشعة المقرية في مستوى معين hkl تكون بمثابة مقرية حيث محوره هو اتجاه الأشعة الساقطة K ، وموادته هي الأشعة K المنعرجة في المستويات hkl في العينات المختلفة.



$$2\theta = \frac{S}{D/2} \cdot \frac{180}{\pi}$$

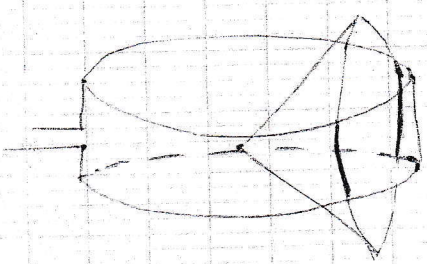
حيث : S : طول القوس ،

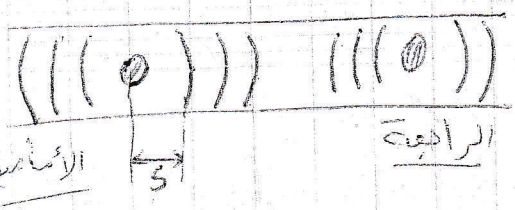
D : قطر الدائرة

$$\theta = \frac{S}{D} \cdot \frac{180}{\pi}$$

وتقسم الدائرات بحيث أن :

$$D = \frac{180}{\pi} mm = 57,7 \ mm .$$



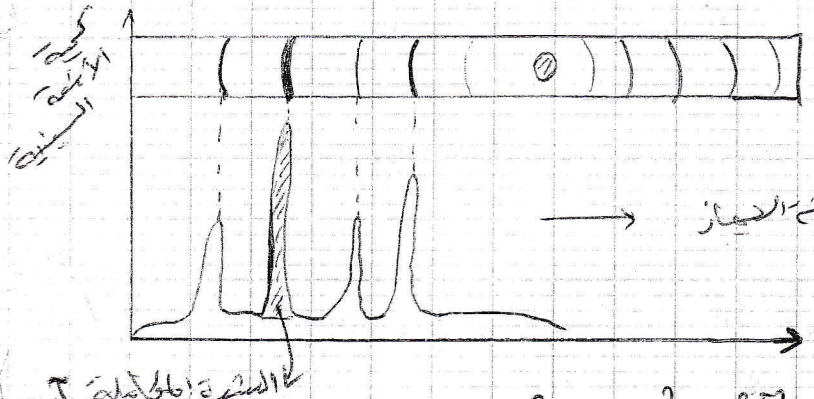


$$\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+\ell^2}} \sin\theta = \lambda \Rightarrow \frac{1}{1/a^2}\cdot\frac{4\sin^2\theta}{\lambda^2} = h^2+k^2+\ell^2 = N$$

(d_hkl) — عامل مشترك.

- كلما كانت θ كبيرة يكون قياس a دقيقا. ولكن ازدياد θ يساهم في تأثير درجة الحرارة مما يسبب بعثرة نقطاني الذرة.

- هناك جهاز يسمى يعطي شدة أشعة X



شدة الحزمة المكتملة J

$$J \propto |A_{SK}|^2 |F_G|^2 e^{-2M} \left(\frac{1+\cos^2 2\theta}{\sin\theta \sin 2\theta}\right) \times M_{hkl}$$

العوامل الرئيسية المؤثرة على الشدة المكتملة (J):

1- عامل التكرارية: M_{hkl} :

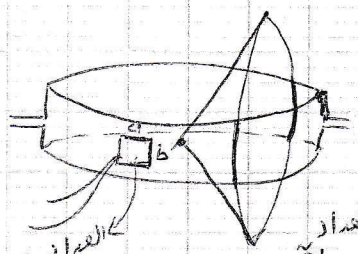
يتمتع مركب الأشعة المنعكسة في مستويات بلورية مختلفة الفرائي ولكن لها نفس العامل مثلا: $100 \Rightarrow M_{100} = 6$

$M_{100} = 6$ أي أن المستويات التي تكافئ العامل (100) عددها 6.

$$= \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+\ell^2}} \rightarrow (100), (010), (001), (\bar{1}00), (0\bar{1}0), (00\bar{1})$$

$$d_{100} = d_{010} = d_{001} = \cdots$$

2- عامل طول القوس:

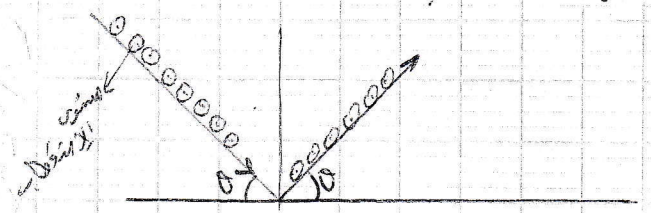


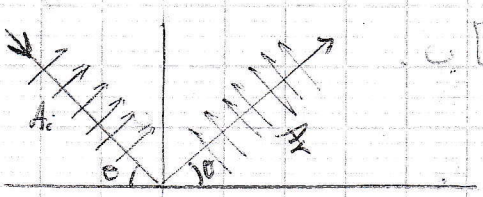
محيط دائرة الحزمة $S = 2\pi r_0 \sin 2\theta$

الطاقة الداخلة للعداد أو الشدة المسجلة.

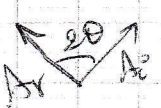
$$I \propto \frac{1}{2\pi r_0 \sin 2\theta}$$

3- عامل الاستقطاب.





استقطاب الورود = استقطاب الانعكاس.
$A_i = A_r$



في الحالة العامة $A_r < A_i$

1- يتغير مستوى الاستقطاب
2- تنقص شدة الأشعة المنعكسة.

وجد بالحساب أن عامل الاستقطاب هو $P = \frac{1+\cos^2 2\theta}{2}$ عندما تكون الأشعة الساقطة غير مستقطبة.

- عند سقوط أشعة X غير مستقطبة تتفرق مستقطبة جزئياً. وتقل شدتها
- عامل لورانس - بولاريزيشن: يفتح هذا العامل شبيكة كبرج هذه الشبكة ومعناه
الانعكاس يحدث عند زوايا قريبة من أو = θ

$$\theta = \theta_{B} \pm \varepsilon$$

$$= \frac{1}{2\sin\theta}$$

عامل لورنتز - الاستقطاب $(Lp) = \frac{1+\cos^2 2\theta}{\sin\theta \cdot \sin 2\theta}$

هناك معلومات (معلومات) تفسر دوريا تغيير طيوفها بداخل تحتوي على الشبكة المكعبة البسيطة (ASTM)

الأواصر البلورية

- يتم التصنيف الجديد على أساس الأواصر (الروابط) بين الذرات هذه الأواصر تتأثر بشدة على توزيع الكترونات التكافؤ الذرية. وبالتالي فإن التصنيف يميز المواد عن بعضها بخواصها الفيزيائية.

الكترونات الذرة: 1- القلبية، 2- التكافؤية

1- الإلكترونات القلبية لا تتأثر بالتفاعل

2- - التكافؤية تتأثر بالتفاعل.

القوة التي تكون الجسم الصلب كان أساسي كهربائي ولكنها متنوعة وقد تكون جاذبية، وتكون نافرة. والجسم الصلب يكون دائماً حالة توازن.

$F = U - TS$ ← طاقة حرة

الطاقة الداخلية (حركية + كامنة)

عند التوازن تكون (F) الطاقة الحرة أقل ما يمكن. (F_{min})

عند درجة الصفر المطلق $(T=0K)$ ⇐ $F = U$

حركية + كامنة

تمثل الطاقة الحركية ⇐ $F = V$ ← الطاقة الكامنة

وتسمى (F) في هذه الحالة طاقة التكوين (الربط).

- وطاقة الجسم الصلب أقل من طاقة عناصره قبل تكوينه. وفرق الطاقة هذا يسمى طاقة الربط.

طاقة الربط - هي الطاقة اللازم إعطاؤها للجسم الصلب لكي يتجزأ إلى عناصره المستقلة المتباعدة. وهي (بإهمال الطاقة الحركية) تساوي مجموع الطاقات الكامنة لعناصر الجسم الصلب.