الفصل الثاني

أنعراج الأشعة السينية في البلورات

تذكير: تنتج الأشعة السينية نتيجة لقصف مصعد معدني بحزمة سريعة من الالكترونات. فينتج نوعان من الأشعة : الاول يسمى أشعة الاستيقاف كنتيجة لتباطؤ حزمة الالكترونات في مادة المصعد، والثاني يسمّى بالأشعة المميزة تبعثها ذرات المصعد المثارة.

يوصف أمتصاص المواد للاشعة بمعامل الامتصاص μ المعتمد على نوع المادة الممتصة وطول الموجة λ . ويستفاد من ظاهرة الامتصاص في صناعة مرشحات الأشعة حيث تختار مادة المرشحة حسب أطوال حافات امتصاصها للاشعة.

يُدرس انعراج الأشعة السينية في البلورات عن طريق قانون براغ: شرط انعكاس الأشعة السينية أو شرط حدوث نهاية عظمى لشدة الأشعة المنعرجة هو:

$$2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda \qquad n=1,2,\ldots \tag{1-2}$$

حيث d_{hkl} - الفاصلة بين المستويات البلورية العاكسة، 2θ: الزاوية بين الشعاع الساقط والمنعرج، n - مرتبة الانعكاس.

درس لاوي الانعراج معتمدا على تشتت الأشعة الساقطة من قبل كل ذرات أو أيونات المادة المشتتة، فاستنتج قانونه - المكافيء لشرط براغ - : اللوحة الانعراج تمثل صورة الشبكة المعكوسة للمادة المشتتة فاستنتج شرط التداخل البناء طبقا للعلاقات التالية:

$$\vec{a}_1\cdot\vec{\Delta k}=2\pi h,\ \vec{a}_2\cdot\vec{\Delta k}=2\pi k,\ \vec{a}_3\cdot\vec{\Delta k}=2\pi l \ ;\ \vec{\Delta k}=\vec{G}(hkl) \tag{2-2}$$

حيث $\vec{\Delta k}$ - التغير بشعاع موجة الاشعة السينية نتيجة الانعراج عن مجموعة المستويات المتوازية (hkl).

ولقد استخدم شرط لاوي $\vec{\Delta k}=\vec{G}$ في تصميم هندسي يفسر النتائج التجريبية لتوزيع القيم العظمى في مخطط الأشعة السينية المنعرجة - يدعى بناء أيوالد.

تتناسب شدة الأشعة المنعرجة على مجموعة من العوامل أهمها عامل البنية F_{hkl} (الذي يعتمد على قرائن المستوي العاكس hkl)

الذي يمثل دور ذرات أو جزيئات قاعدة التركيب البلوري في تكوين شدة الأشعة المنعرجة. أنعدام F_{hkl} يعني أنعدام الانعكاس عن المستويات (hkl):

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^{s} f_j \, e^{2\pi i (x_j h + y_j k + z_j l)} \qquad (3\_2)$$

حيث ($x_j \, y_j \, z_j$) أحداثيات الذرة المشتتة j الموجودة في القاعدة، S - عدد ذرات القاعدة، f_j - عامل التشتت الذري المعتمد على التركيب الالكتروني للذرة المشتتة. (hkl) - معاملات ملر بالنسبة للمحاور $\vec{a}_1 \vec{a}_2 \vec{a}_3$ المنطبقة على وحدة التركيب البلوري - الخلية الأساسية.

- عنصر ذو التركيب Sc (P): لا توجد انعكاسات تحقق العلاقة $N = h^2 + k^2 + l^2 = 4^p (8n + 7)$ حيث n ، p - أعداد صحيحة (بضمها الصفر).

- عنصر ذو التركيب Bcc (I): تختفي الانعكاسات عن المستويات البلورية عند ما يكون مجموع دلائلها فرديا.

- عنصر ذو التركيب Fcc (F): تختفي الانعكاسات عن المستويات التي قرائنها مختلطة.

- عنصر ذو التركيب الماسي: شروط الانعكاسات المفقودة هي: عندما (hkl) مختلطة وعند ما $h + k + l = 4n + 2$ حيث n - عدد صحيح وصفر.

والآن نذكر قيم N المسموحة:

P:	1	2	3	4	5	6	×	8	9	10	11	12	13	14	×	16
I:	–	2	–	4	–	6	×	8	–	10	–	12	–	14	×	16
F:	–	–	3	4	–	–	×	8	..	–	11	12	–	–	×	16

P:	17	18	19	20	21	22	×	24	25	26	27	×	29	30	31	32
I:	–	18	–	20	–	22	×	24	–	26	–	×	–	30	–	32
F:	–	–	19	20	–	–	×	24	–	–	27	×	–	–	–	32

زيادة درجة حرارة العينة المشتتّة تُضعف شدة الأشعة السينية المنعرجة (المنعكسة) ولكنها لا تؤثر على التباين وذلك طبقا لقانون ديباي - والر.

توجد ثلاثة طرق تجريبية لدراسة الانعراج:

أ ـ طريقة لاوي: تدرس بهذه الطريقة البلورة الاحادية باستخدام أشعة سينية بيضاء فتظهر لوحة الانعراج بهيئة بقع (لطخات) على الفيلم الحساس المستوي العمودي على الأشعة الساقطة. وتستخدم هذه الطريقة في تعيين تناظر وتوجهات البلورات المعروفة التركيب وكذلك في تحديد التشوهات والعيوب البلورية.

ب ـ طريقة البلورة الدوارة: تدرس البلورة الاحادية بعد جعلها تدور حول نفسها داخل فيلم أسطواني. أما الأشعة الساقطة فأحادية اللون ولوحة الانعراج تكون بهيئة لحظات على الفيلم. وتسعمل في تحديد ثوابت الشبكة بعد معرفة التوجه البلوري لمحور دوران البلورة بطريقة لاوي مثلا.

جـ ـ طريقة المسحوق أو طريقة يباي ـ شرر: هنا تحضر العينة بهيئة مسحوق ناعم جدا داخل أنبوبة شعرية بلاستيكية موجودة داخل حجرة الانعراج الاسطوانية. والأشعة المستخدمة بيضاء. ولوحة الانعراج تكون بهيئة دوائر متمركزة. وتستعمل في تحديد التركيب البلوري وتعيين ثوابت الشبكة البلورية.

تمرينات الفصل الثاني

1 - شدة اشعاع التباطؤ (أو الاشعاع الخلفي (Back - ground) الناتج عن أنبوبة الاشعة السينية (I_{ph}) هي:

$$I_{ph} \propto i \, Z \, V^2$$

حيث i - تيار شعيرة الأنبوبة، Z - العدد الذري للمصعد (الهدف)، V - فرق جهد الأنبوبة. وشدة الاشعة السينية المميزة تتناسب مع:

$$I_K \propto i \, (V - V_K)^{3/2}$$

حيث V_K - فرق جهد عتبة الخط السيني K (وهو أقل فرق جهد لازم لاشعاع الخط السيني K).

أ - أحسب V_K لانبوبة الهدف فيها Cu، وتنكستن W .

ب - لغرض الحصول على نسبة معينة $\frac{I_K}{I_{ph}}$ (نسبة القمة / الخلفية) يجب اختيار فرق جهد V معين. ما هو فرق الجهد اللازم للحصول على أعلى قيمة لنسبة (القمة / الخلفية).

الحل:

أ - $$eV_K = h\nu_K = \frac{hc}{\lambda_K} \; , \quad V_K = \frac{hc}{e\lambda_K}$$

$$V_K = \frac{1{,}2407 \times 10^{-6}}{\lambda_K} V.m; \quad Cu \quad V_K = \frac{1{,}2407 \; 10^{-6}}{1{,}54 \; 10^{-10}} = 8{,}056 \; kV.$$

$$W \quad V_K = \frac{1{,}2407 \; 10^{-6}}{0{,}21 \times 10^{-10}} = 59{,}081 \; kV$$

ب - $$\frac{I_K}{I_{ph}} \propto \frac{V^2}{(V - V_K)^{3/2}} \quad \text{و} \quad \frac{d(I_K / I_{ph})}{dV} = 0$$

$$V = 4 \, V_K$$

2 - في تجربة ديباي-شررمان طول الموجة المستخدم $\lambda = 1,54 \ \mathring{A}$ والمسحوق البلوري المستخدم من النوع bcc ثابت الشبكة $a = 3,5 \ \mathring{A}$.

ما هي قرائن الانعكاس (hkl) الملائمة الى أعظم زاوية براغية θ_{max}.

الحل:

نستخدم معادلة براغ:

$$\frac{4a^2 \sin^2\theta}{\lambda^2} = h^2 + k^2 + \ell^2 = N \quad ,$$

$$20,6611 \quad \sin^2\theta = N$$

حيث N - عدد صحيح و $\sin^2\theta < 1$ اذن $20 \geqslant N$ وأعلى قيمة لـ N هي 20 تلائم القرائن (420)، وأعلى زاوية براغية $\theta_{max} = \theta_{420}$ هي :

$$\sin^2 \theta_{420} = 0968 \ , \qquad \sin \theta_{420} = 0,9838,$$

$$\theta_{420} \simeq 80^\circ$$

3 ـ أستخدمنا حزمة أشعة سينية من مصعد حديدي Fe له ،

$(\lambda_{K\alpha} = 1,939\,\mathring{A}$ ، $\lambda_{K\beta} = 1,757\,\mathring{A})$. مررنا هذه الحزمة خلال مرشحة من المنغنيز لها حافة الامتصاص K تساوي $\lambda_K = 1,896\,\mathring{A}$ ، والحزمة النافذة أستعملت في دراسة بلورة مكعبة غير الماسية ثابت شبكتها $a = 5,42\,\mathring{A}$.

(أ) ما هو طول موجة الشعاع النافذ من المرشحة .

(ب) ما هي زاوية براغ θ_1 الموافقة للانعكاس 300.

(ج) في الحقيقة لا يظهر هذا الانعكاس، ماذا تستنتج.

(د) واذا استعملنا حزمة الاشعة السابقة من دون امرارها بالمرشحة فيظهر انعكاس عند الزاوية θ_1 تقريبا فما هي قرائن المستويات المحدثة له .

(هـ) ما هو التركيب البلوري للبلورة المستعملة .

أ ـ تمتص المرشحة أساسا الخط K_β وتترك K_α يمر من خلالها بدون امتصاص كبير. أي أن طول موجة الاشعة النافذة هي $1,939\,\mathring{A}$.

ب ـ $2\dfrac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}\sin\theta_1 = \lambda_{K\alpha}$ و $2d\sin\theta = \lambda$

$\sin\theta_1 = 0,5366 \qquad \theta_1 = 32^\circ$

ج ـ عدم ظهور الانعكاس (300) يعني أن البلورة ليست Sc .

د ـ الانعكاس يحدث بسبب $\lambda_{K\beta}$.

$$N = \frac{4a^2\sin^2\theta_1}{\lambda_{K\beta}^2} \simeq 11 \longrightarrow (hkl) = (311) \longrightarrow \underline{Fcc}$$

4 - أحسب عامل التشتت الذري f لتجمع الكترونات (عددها Z) منتظم داخل كرة نصف قطرها R .

الجواب : كثافة الشحنة ثابتة أي أن :

$\rho(r) = \rho = cst$. ومن تعريف f نجد :

$$f_{hkl} = 4\pi \int_0^R \rho(r)\, r^2 \frac{\sin Gr}{Gr} dr$$

أجعل $Gr = x$ نجد :

$$f_{hkl} = \frac{2\pi\rho}{G^3} \int_0^{GR} x \sin x \, dx$$

وبطريقة التجزأة نجد التكامل :

$$f_{hkl} = \frac{4\pi\rho}{G^3} \left(- GR \cos GR + \sin GR \right)$$

وعندما تكون $GR >> 1$ نهمل الحد الثاني بالنسبة للأول لنجد :

$$f_{hkl} = \frac{2\pi}{G^3} \frac{Ze}{\frac{4}{3}\pi R^3} GR \cos GR \sim G^{-2} \cos GR$$

Ze - الشحنة الكلية .

5 ـ ما هي طبيعة المصعد في أنبوبة الأشعة السينية اللازم لاعطاء خط طيفي K_α يستطيع أن ينعكس براغياً عن المستويات (110) لبلورة مكعبة ثابتها $A = 3,6$ أنكستروم استخدم نموذج بور.

الحل: لكي ينعكس خط سيني طول موجته λ عن المستويات البلورية (110) يجب أن يتحقق شرط براغ $\lambda = 2d_{hkl}\sin\theta$ ، أي يجب أن يكون $\lambda < 2d_{hkl}$ أو أن $\lambda_{max} = 2d_{hkl}$.

$d_{110} = \frac{a}{\sqrt{2}} = 2,54\,\mathring{A}$ أذن $\lambda_{max} = 5,08\,\mathring{A}$ ، وطاقة فوتون الاشعة السينية يساوي :

$$E_{min} = \frac{hc}{\lambda_{max}} \simeq \frac{12400}{\lambda_{max}(\mathring{A})} \simeq 2.440,94\ eV.$$

ومن نظرية بور للاشعاع :

$$E = RZ^2\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2}\right)$$

حيث $R = 13,6\ eV$ وللخط K_α ($n = 1$ ، $n' = 2$) نجد أن $Z \simeq 15,4$.

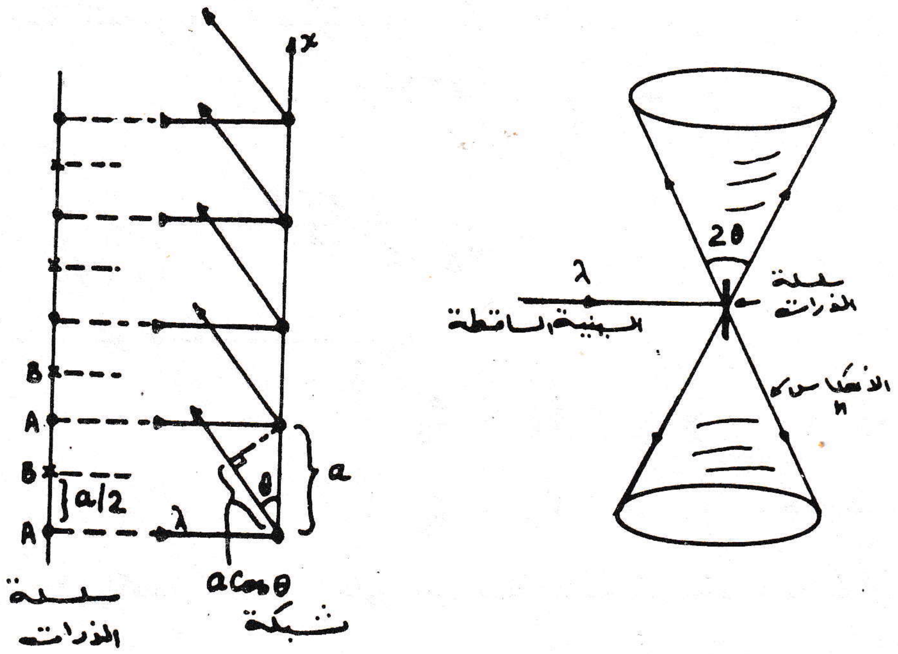
فلكي تتحقق شروط السؤال يجب أن تكون $Z > 15$ ، فالمصعد يمكن أن يكون $_{26}Fe$ مثلاً.

6 ـ ندرس سلسلة من الذرات ----$ABAB$ بحيث أن المسافة $A-B$ تساوي $\frac{a}{2}$. عامل التشتت الذري للذرات A و B هو على التوالي f_A و f_B . حزمة أشعة سينية تسقط بصورة عمودية على خط الذرات .

أ ـ ما هي شروط التداخل البنّاء.

ب ـ ما هي علاقة شدة الحزمة المنعرجة مع f_A و f_B .

الحل : نستبدل كل ذرتين A و B بعقدة كما في الشكل المجاور. واحداثيات الذرات (القاعدة) بالنسبة لاية نقطة عقدة هي $A(0,0,0)$ و $B(\frac{1}{2},0,0)$.



شكل تمرين 6

هذه العقد هي مراكز التشتت. فرق المسار بين كل شعاعين متجاورين مُشتّتين

بزاوية θ عن مركزين متجاورين يساوي $\Delta = a \cos\theta$. ولكي يكون التداخل بناء فان :

$$\Delta = n\lambda \quad \longrightarrow \quad a\cos\theta = n\lambda$$

حيث λ ـ طول موجة الاشعة الساقطة، n ـ عدد صحيح.

وهذا هو المطلوب ـ أ ـ

ب ـ نحسب عامل بنية القاعدة حسب تعريفه :

$$F_{hkl} = \sum_j f_j \, e^{i2\pi(hx_j + ky_j + lz_j)}$$

لدينا أحداثي واحد هو ـ x . وأصغر شعاع "للشبكة" المعكوسة هو $\vec{G}_0 = \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\vec{i}$ ، وشعاع الشبكة المعكوسة $\vec{G}(n) = \frac{2\pi}{a} n \vec{i}$ اذن:

$$F(h) = \sum_j f_j \, e^{i2\pi n x_j}$$

$$= f_A + f_B \, e^{i\frac{2\pi n}{2}} = f_A + f_B \, e^{i\pi n}$$

وشدة الاشعة المنعكسة تتناسب مع :

$$I \sim |f_A + f_B|^2 \qquad n \text{ ـ زوجي}$$

$$I \sim |f_A - f_B|^2 \qquad n \text{ ـ فردي}$$

في الحقيقة، أن الأشعة المنعكسة تكون على هيئة مخروط زاوية رأسه 2θ.

٧ - سلسلة من ذرات الكاربون متقاربة مع بعضها أزواجاً أزواجاً كما في الشكل بحيث أن $a = 4b = 5\mathring{A}$. عموديا على خط السلسلة سقطت أشعة سينية أحادية اللون $\lambda = 0,5\ \mathring{A}$ فانعرجت:

أ - ما هو شرط التداخل البناء .

ب - عين عامل بنية القاعدة، ثم أحسب نسبة شدة الاشعة المنعرجة من قبل كل ذرات السلسلة (I_T) الى شدة الأشعة المنعرجة عن ذرات قاعدة واحدة (I_r).

ج - رتب النتائج كتطبيق عددي.

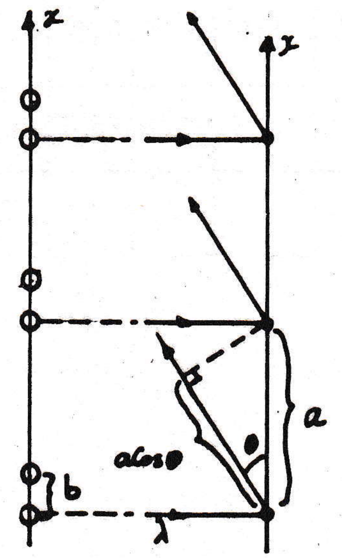
الجواب :

أ - الشكل المجاور يبين عقد الشبكة وهي واقعة على خط مستقيم بحيث تكون المسافة بين كل عقدتين a . أما قاعدة الشبكة فمتكونة من ذرتين أحداثياتهما بالنسبة لاية عقدة $(0,0,0)$ و $(\frac{1}{4},0,0)$.

فرق المسار بين كل شعاعين منعرجين عن عقدتين متجاورتين يساوي $\Delta = a\cos\theta$. ويحدث التداخل البناء عند ما:

$a\cos\theta = n\lambda$ ، حيث n - عدد صحيح.

وهذا شرط التداخل البناء.



شكل تمرين ٧

ب - نطبق تعريف عامل البنية لاحداثي واحد:

$$F_n = \sum_{j=1}^{s} f_j \, e^{i 2\pi n x_j} = f\left(1 + e^{i n \frac{\pi}{2}}\right)$$

حيث $f_{1/4} = f_0 = f$ لأن الذرات متماثلة. ونميز ثلاثة حالات:

$n = 4k$ - زوجي	$F_n = 2$	$I_T = 4 I_r$
$n = 2(2k+1)$ - زوجي	$F_n = 0$	$I_T = 0$
n - فردي	$F_n = f\,(1 \pm i)$	$I_T = 2 I_r$

حيث k - عدد صحيح.

ج - تطبيق عددي:

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$\cos\theta = \frac{n\lambda}{a}$	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0
θ°	84,26	78,47	72,55	64,50	60	53,14	45,58	36,87	25,84	0
I_T / I_r	2	0	2	4	2	0	2	4	2	0

8 ـ أ ـ أحسب شدة الاشعة السينية المنعرجة كدالة للتغير $\vec{\Delta K}$.

ب ـ ثم استنتج شروط لاوي للانعراج.

جـ ـ قدّر عرض قمة أنعكاس لاوي .

الحل:

أ ـ نبدأ من معادلة حساب سعة الموجة المنعرجة :

$$A_{\Delta k} = \sum e^{i\vec{R}\cdot\vec{\Delta k}} \qquad , \vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$$

نفرض أن n^3 هو عدد الخلايا الاساسية (أو عدد العقد) للشبكة المدروسة، اذن :

$$(1)\quad A_{\Delta k} = \sum_{n_1=0}^{n-1} e^{i n_1 \vec{a}_1\cdot\vec{\Delta k}} \sum_{n_2=0}^{n-1} e^{i n_2 \vec{a}_2\cdot\vec{\Delta k}} \sum_{n_3=0}^{n-1} e^{i n_3 \vec{a}_3\cdot\vec{\Delta k}}$$

وباستعمال العلاقة :

$$(2)\quad \sum_{m=0}^{n-1} x^m = \frac{1-x^n}{1-x}$$

اذاً :

$$(3)\quad A_{\Delta k} = \left(\frac{1-e^{in(\vec{a}_1\cdot\vec{\Delta k})}}{1-e^{i(\vec{a}_1\cdot\vec{\Delta k})}}\right)\left(\frac{1-e^{in(\vec{a}_2\cdot\vec{\Delta k})}}{1-e^{i(\vec{a}_2\cdot\vec{\Delta k})}}\right)\left(\frac{1-e^{in(\vec{a}_3\cdot\vec{\Delta k})}}{1-e^{i(\vec{a}_3\cdot\vec{\Delta k})}}\right)$$

وشدة الحزمة $I = A_{\Delta k} A^*_{\Delta k}$. نحسب حداً حداً :

$$I^{(1)} = \frac{1-e^{in(\vec{a}_1\cdot\vec{\Delta k})}}{1-e^{i(\vec{a}_1\cdot\vec{\Delta k})}} \times \frac{1-e^{-in(\vec{a}_1\cdot\vec{\Delta k})}}{1-e^{-i(\vec{a}_1\cdot\vec{\Delta k})}}$$

$$(4)\quad I^{(1)} = \frac{1-\cos n(\vec{a}_1\cdot\vec{\Delta k})}{1-\cos(\vec{a}_1\cdot\vec{\Delta k})} = \frac{\sin^2\frac{n}{2}(\vec{a}_1\cdot\vec{\Delta k})}{\sin^2\frac{1}{2}(\vec{a}_1\cdot\vec{\Delta k})}$$

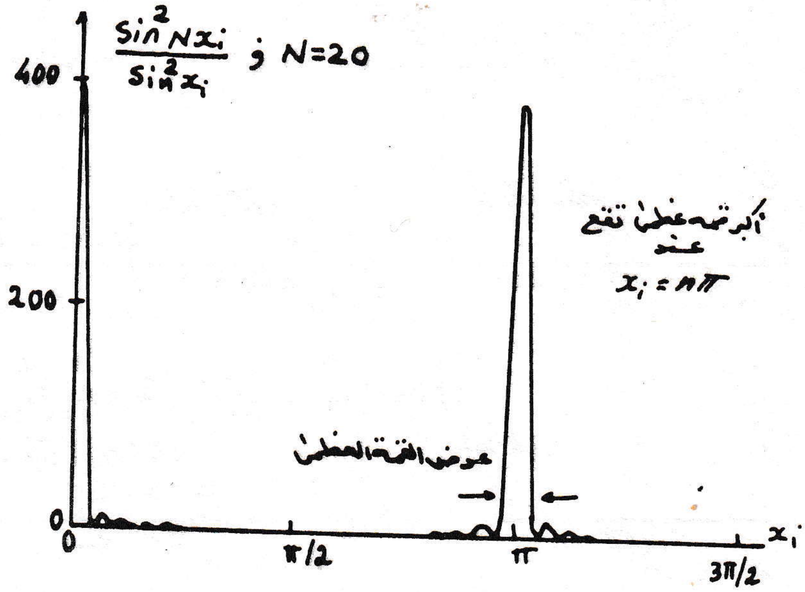
حيث استعملنا تعريف الجيب تمام بدلالة الاس العقدي وعلاقة جيب تمام زاوية

بجيب نصفها . وبنفس الأسلوب نحسب الشدة الناتجة عن بقية الحدود لنجد في نهاية المطاف :

$$I = A_{\Delta K} A^{*}_{\Delta K} = \frac{\sin^2 \frac{N}{2}(\vec{a}_1 \cdot \vec{\Delta k})}{\sin^2 \frac{1}{2}(\vec{a}_1 \cdot \vec{\Delta k})} \quad \frac{\sin^2 \frac{N}{2}(\vec{a}_2 \cdot \vec{\Delta k})}{\sin^2 \frac{1}{2}(\vec{a}_2 \cdot \vec{\Delta k})} \quad \frac{\sin^2 \frac{N}{2}(\vec{a}_3 \cdot \vec{\Delta k})}{\sin^2 \frac{1}{2}(\vec{a}_3 \cdot \vec{\Delta k})}$$

فالشدة المنعرجة تعتمد على النسب الثلاثة أعلاه ، كل من هذه النسب في الصورة :

$$y = \frac{\sin^2 N x_i}{\sin^2 x_i} \quad , \quad x_i = \frac{\vec{a}_i \cdot \vec{\Delta k}}{2} \quad , (i = 1, 2, 3)$$



شكل تمرين 8

والشكل المجاور يبين تصوير هذه الدالة للقيمة $N = 20$ ، حيث تبلغ أعلى قمة القيمة N^2 ، وكلما ازدادت N كلما ارتفعت القمة ونحفت. وللبلورات الحقيقية N أكبر بكثير من 20 لذلك نستطيع القول أن الدالة $\sin^2 N x_i / \sin^2 x_i$ تنعدم في كل مكان عدى منطقة ضيقة جدا حول القيم العظمى $x_i = n\pi$. وشدة الأشعة المنعرجة تساوي صفراً عدى في المناطق التي تقترب فيها النسب الثلاثة من قيمهم العظمى. لذلك تتحقق ثلاثة شروط للانعراج في نفس الوقت :

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{\Delta k} = 2\pi h \,,\ \vec{a}_2 \cdot \vec{\Delta k} = 2\pi k \,,\ \vec{a}_3 \cdot \vec{\Delta k} = 2\pi \ell \qquad (5)$$

حيث h ، k ، ℓ - أرقام صحيحة . وهذه هي معادلات أو شروط لاوي للحيود. ويمكن وضعها بشرط واحد، فبضرب المعادلات على التوالي بالأرقام n_1، n_2، n_3 ثم جمعها ينتج :

$$\vec{R} \cdot \Delta \vec{k} = 2\pi m \qquad (6)$$

حيث $m = n_1 h + n_2 k + n_3 \ell$ - عدد صحيح. ومن تعريف الشبكة المعكوسة ينتج أن الكمية $\Delta \vec{k}$ تساوي $\vec{G}$ أي أن شرط الانعكاس هو : مساواة $\Delta \vec{k} = \vec{G}$ التغير بشعاع الموجة لأحد أشعة الشبكة المعكوسة . وشدة الموجة المنعكسة تساوي $I = A^2 = (n^3)^2$.

جـ - وعرض القمة الأعظم - انعكاس براغ - يحدث عندما يتحقق الشرط $\vec{a}_i \cdot \Delta \vec{k} = 2\pi h_i + \epsilon$ ، أي تتغير $\Delta \vec{k}$ بمقدار قليل جدا حيث $\vec{a}_i$ تقابل $\vec{a}_1$ ، $\vec{a}_2$ ، $\vec{a}_3$ و h_i تقابل h و k و ℓ على التوالي. والكمية ϵ الصغيرة جدا تقابل عرض انعكاس براغ عندما تؤول الكمية $\sin \frac{n}{2}(\vec{a}_i \cdot \Delta \vec{k})$ الى الصفر - تنعدم شدة الانعكاس:

$$\sin \frac{n}{2}(\vec{a}_i \cdot \Delta \vec{k}) = \sin \frac{n}{2}(2\pi h_i + \epsilon) = 0$$

ومن قانون جيب جمع زاويتين نستنتج أن $\epsilon = \frac{2\pi}{n}$ و $\sin \frac{n\epsilon}{2} = 0$ وهي أصغر قيمة للكمية ϵ . أي أن عرض القيمة العظمى للانعراج يتناسب عكسيا مع n الكبيرة جدا ؛ وهو صغير للغاية بحيث يجعلنا نظريا اعتبار الشدة الكلية $I = n^6$ في مواقعها المحددة بالشروط (5) وتساوي صفرا في بقية المناطق.

9 - بيّن بأن الأشعة النافذة المنعكسة عن مجموعة مستويات المنطقة في بلورة أحادية (مخطط لاوي) تشكل مخروطاً محوره هو محور المنطقة .

الحل: محور المنطقة هو :

$$\vec{A}(u, v, w) = u\vec{a}_1 + v\vec{a}_2 + w\vec{a}_3$$

وكل مستوي (hkl) ينتمي الى المنطقة (u, v, w) قرائنه تحقق المعادلة :

$$hu + kv + lw = 0$$

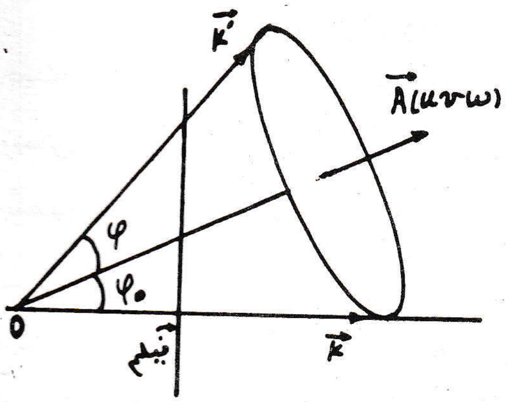
شرط انعكاس لاوي هو:

$$\vec{K}' = \vec{K} + \vec{G}(hkl)$$

اذن:

$$\vec{K}' \cdot \vec{A} = \vec{K} \cdot \vec{A} + \vec{G} \cdot \vec{A}$$

والمقدار الاخير معدوم لان $\vec{G}$ عمودي على المستويات (hkl) وبالتالي يكون عموديا على المحور $\vec{A}$.

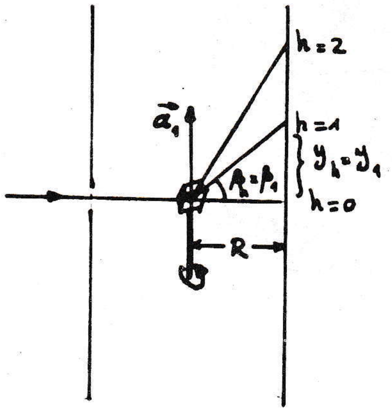


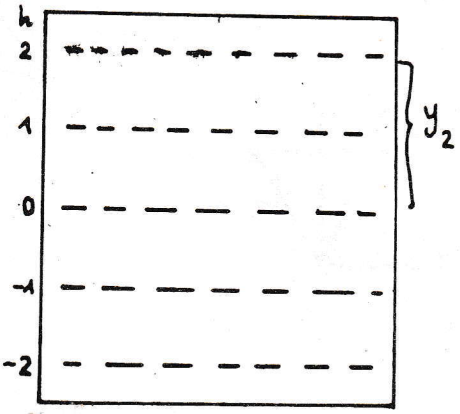
شكل تمرين 9

اذن: $\varphi = \varphi_0$ حيث φ_0 - زاوية بين الاشعة الساقطة $\vec{K}$ والمحور $\vec{A}$ ، φ - زاوية بين الاشعة المنعرجة $\vec{K}'$ والمحور $\vec{A}$. فكما هو واضح في الشكل فان الاشعة المنعرجة عن كل مستويات المنطقة $(u\ v\ w)$ تكوّن عناصر مخروط يحوي على الشعاع الساقط $\vec{K}$. ومقطع هذا المخروط مع الفيلم العمودي على $\vec{K}$ يشكل قطعا ناقصا ، لذلك تلاحظ بقع لاوي النافذة على الفيلم مشكلة قطوعا ناقصة مارة بالبقعة المركزية (بقعة الاشعة الساقطة $\vec{K}$).

10 ـ في تجربة البلورة الدوارة . كانت البلورة مكعبة بسيطة تدور حول الاتجاه [100] . وكان طول موجة الاشعة السينية الساقطة $\lambda = 1,539\ \mathring{A}$ ونصف قطر حجر الانعراج 46,2ملم . ما هي قيمة ثابت شبكة البلورة (a_1) اذا كانت المسافة بين الانعكاس الاستوائي والمستوى الثاني للانعكاس 24,1 ملم .

الحل: السؤال موضح في الشكل.





شكل تمرين 10

$$\vec{a}_1 \cdot (\vec{K}' - \vec{K}) = 2\pi h \quad و \quad \vec{a}_1 \cdot \Delta\vec{K} = 2\pi h$$

اذن:

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{K}' = 2\pi h \quad , (\vec{a}_1 \perp \vec{K})$$

$$\therefore \quad \sin\beta_n = \frac{h\lambda}{a_1} \quad و \quad tg\,\beta_h = \frac{y_h}{R}$$

حالة السؤال:

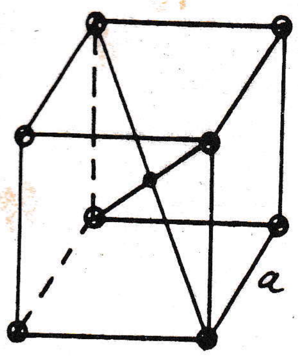
$$tg\,\beta_2 = \frac{y_2}{R} = \frac{24,1}{46,2} = 0,5216$$

$$\sin\beta_2 = 0,4624$$

$$a_1 = \frac{h\lambda}{\sin\beta_2} = \frac{2 \times 1,539}{0,4624} = 6,65\ \mathring{A}$$

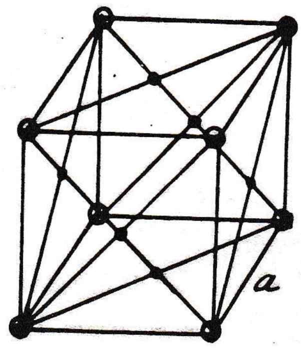
11 ـ وحدة التركيب البلوري المكعبة للمركبين $CuZn$ و Cu_3Au في الحالة الطبيعية موضحة في الشكل. والمطلوب حساب نوع الشبكة وعامل البنية لكلا المركبين.

الحل:



●: Zn
O: Cu

$CuZn$



●: Cu
O: Au

Cu_3Au

شكل تمرين 11

$CuZn$: الشبكة مكعبة بسيطة بقاعدة متكونة من ذرتين:

$Cu\,(0,0,0)$ ، $Zn\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$ بالنسبة للمحاور الاساسية المنطبقة على أحرف المكعب:

$\vec{a}_1 = a\vec{i},\ \vec{a}_2 = a\vec{j},\ \vec{a}_3 = a\vec{k}$. عامل البنية يساوي:

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^{2} f_j\, e^{i2\pi(hu_j + kv_j + lw_j)} = f_{Cu} + f_{Zn}\, e^{i\pi(h+k+l)}$$

ونميز حالتين:

$h+k+l$ = عدد فردي و $F_{hkl} = f_{Cu} - f_{Zn}$

$h+K+l$ = عدد زوجي و، $F_{hkl} = f_{Cu} + f_{Zn}$

Cu_3Au : الشبكة مكعبة بسيطة بقاعدة متكونة من أربعة ذرات:

$Au(0,0,0)$ و $Cu(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})$, $Cu(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})$, $Cu(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$

محسوبةً بالنسبة للمحاور الأساسية المنطبقة على أحرف المكعب. عامل البنية يساوي:

$$F_{hkl} = f_{Au} + f_{Cu}\left(e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)}\right)$$

ونميز حالتين :

h, k, l - مختلطة $\quad F_{hkl} = f_{Au} - 3 f_{Cu}$

h, k, l - غير مختلطة $\quad F_{hkl} = f_{Au} + 3 f_{Cu}$

12 ـ شبكة معينية مستقيمة ممركزة الجسم (I) أبعاد خليتها الاولية (غير الاساسية) هي $a = \frac{b}{2} = \frac{c}{4} = 3{,}14\ \mathring{A}$ وزواياها $(\alpha = \beta = \gamma = \frac{\pi}{2})$. سقط عليها شعاع أحادي اللون $(K = \frac{2\pi}{\lambda} = 2{,}5\ \mathring{A}^{-1})$ عمودياً على المستويات البلورية $(23\bar{0})$، التصوير التوضيحي في الشكل (أ).

(أ) ـ صمم شبكتها المعكوسة مؤشرا على عقدها في المستوي $(\vec{b}_1 - \vec{b}_2)$

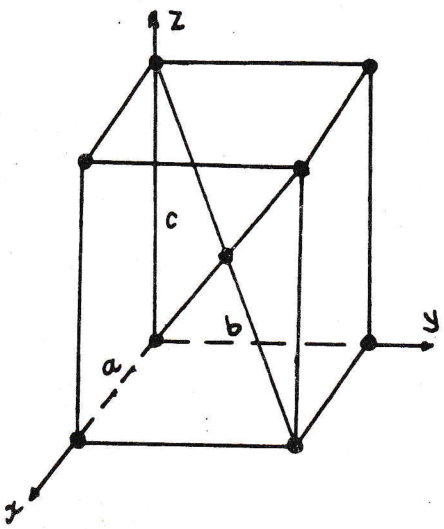
(ب) ـ أرسم الدائرة الناتجة عن قطع المستوي أعلاه مع كرة أيوالد المناظرة للشعاع السينى الساقط، وعين قرائن المستوي أو المستويات التي تحقق شرط براغ، أحسب زاوية براغ.

(ج) ـ صمم منطقة بريليون الاولى في المستوي أعلاه.

الحل:

(أ) ـ نعين أولا الشبكة المعكوسة للشبكة المعينية المستقيمة الاساسية (P)، ثم نلغي منها العقد التي لها عامل البنية معدوماً، فنحصل على الشبكة المعكوسة للشبكة المعينية المستقيمة الغير أساسية (وهي هنا من النوع I).

أشعة الانسحاب الاساسية للشبكة (P) تكون منطبقة على أحرف الخلية الاولية (التي تكون أساسية في حالة الشبكة P) المعينية المستقيمة: $\vec{a}_1 = a\vec{i}\ ,\ \vec{a}_2 = b\vec{j}\ ,\ \vec{a}_3 = c\vec{k}$



شكل تمرين 12 ـ أ ـ

وحجم الخلية الاولية ((الأساسية)) يســاوي : $v = a\,b\,c$.

أشعــة الانسحــاب للشبكــة المعكوسـة هــي:

$$\vec{b}_1 = 2\pi\,\frac{\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3}{v} = \frac{2\pi}{a}\,\vec{i} = 2\,\vec{i}\ \mathring{A}^{-1}$$

$$\vec{b}_2 = 2\pi\,.\frac{\vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1}{v} = \frac{2\pi}{b}\,\vec{j} = 1\,\vec{j}\ \mathring{A}^{-1} \qquad (1)$$

$$\vec{b}_3 = 2\pi\,\frac{\vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2}{v} = \frac{2\pi}{c}\,\vec{k} = 0{,}5\,\vec{k}\ \mathring{A}^{-1}$$

وعقد الشبكة المعكوسة تعيّن بالشعــاع :

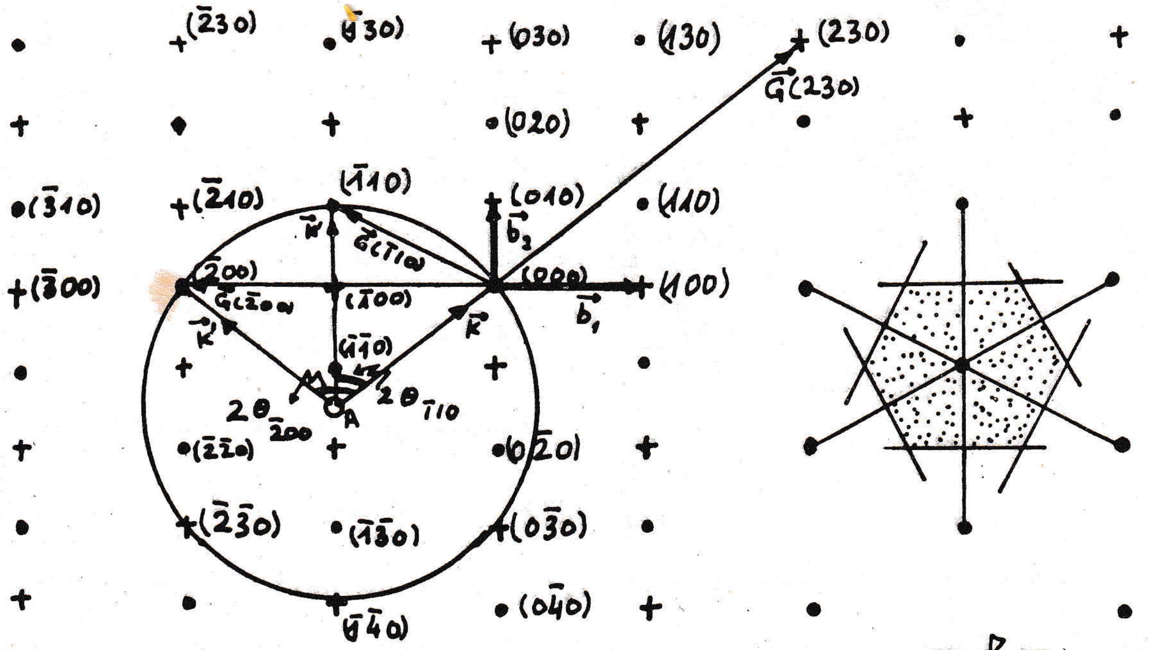
$$\vec{G}_{hk\ell} = 2h\,\vec{i} + k\,\vec{j} + 0{,}5\,\ell\,\vec{k} \qquad (2)$$

عامل البنية للخلية (I) : نعتبر الشبكة (I) كشبكة بسيطة (P) مع قاعدة عقديــة متكونة من عقدتــين في الموقع (0,0,0)و ($\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$) بالنسبة للاحداثيات المنطبقة على أحرف الخلية الاولية المعينية-المستقيمة . وعامل البنية يســاوي :

$$F_{hk\ell} = f\left(1 + e^{i\pi(h+k+\ell)}\right) \qquad (3)$$

وهذا العامل ينعدم $F_{hk\ell} = 0$ عندما يكــون المجموع $h + k + \ell$ = عدد فــردي.

الشبكة المعكوسة للشبكــة (I): نصمم الشبكــة المعكوسة للشبكة (P) على أساس المعادلات (2،1) حيث (h , k , ℓ) هي أحداثيات العقدة في الفضاء المعكــوس . ثم نزيل من هذه الشبكة المعكوسة كل العقد التي لها $F_{hk\ell} = 0$ أي التي لهــــا $h + k + \ell$ = عدد فردي، فنحصل على الشبكة المعكوســة للشبكة (I). نــرسم ونؤشر على العقد التي في المستوي ($\vec{b}_1$ - $\vec{b}_2$) - أحداثياتها ($h\ k\ 0$) ونؤشـر علــى العقد الملغية بالاشــارة +، هذا موضح في الشكل - ب . تأشير العقد يتم بالنسبــة للعقدة (0,0,0) المختــارة .



- ب -   - D -

شكل تمرين 12 .

(ب) شعاع الحزمة الساقطة $\vec{K}$ طوله $\frac{2\pi}{\lambda} = 2,5\ \text{Å}^{-1}$ رأسه عند النقطة (0,0,0) التي اعتبرت مركزا للشبكة المعكوسة. الشعاع الساقط عمودي على المستويات المتوازية (230). وحيث أن الشعاع $\vec{G}(230)$ - المعيّن في الشبكة المعكوسة - يكون عموديا على المستوي (230) - وهذه قاعدة عامة - لذلك فالشعاع الساقط $\vec{K}$ يوازي $\vec{G}(230)$ أوينطبق عليه. بداية الشعاع $\vec{K}$ (النقطة A) تبعد بالبعد $2\pi/\lambda$ عن النقطة (0,0,0). والنقطة A تعتبر مركزا "الدائرة" أوالد

كما في الشكل (ب). عندئذ نلاحظ وقوع العقد ($\bar{2}00$) و ($\bar{1}10$) على محيط دائـرة أيوالـد، أي يحدث الانعكاس عن مجموعة المستويات المتوازية ($\bar{2}00$) ومجموعـة المستـويات المتوازيـة ($\bar{1}10$) ولكن بزاويتـين براغيتـين مختلفتـين:

$$\vec{G} = \vec{k}' - \vec{k} \quad \text{و} \quad \sin\theta_{hkl} = \frac{G_{hkl}}{2k}$$

- الانعكـاس ($\bar{2}00$):

$$\vec{G}_{\bar{2}00} = -2\vec{b}_1 = -4\vec{i}, \quad G_{\bar{2}00} = 4$$

$$\sin\theta_{\bar{2}00} = \frac{4}{2\times 2{,}5} = \frac{4}{5}, \quad \theta_{\bar{2}00} = 53{,}2^\circ$$

- الانعكـاس ($\bar{1}10$)

$$\vec{G}_{\bar{1}10} = -\vec{b}_1 + \vec{b}_2 = -2\vec{i} + \vec{j}, \quad G_{\bar{1}10} = \sqrt{5}$$

$$\sin\theta_{\bar{1}10} = \frac{\sqrt{5}}{2\times 2{,}5} = 0{,}448 \quad \text{و} \quad \theta_{\bar{1}10} = 26{,}5^\circ$$

وحيث أن الانعكاس مرآتي لذلك فان زاوية سقوط الاشعة على المستـويـات ($\bar{2}00$) والمستويات ($\bar{1}10$) هما على التوالي $53{,}3^\circ$ و $26{,}5^\circ$. والشكـل (د) يوضح هذه العمليـة.

العمود على المستويـات البلـوريـة :

$$(hkl) \perp \vec{G}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 = 2\pi\left(\frac{h}{a^2}\vec{a}_1 + \frac{k}{b^2}\vec{a}_2 + \frac{l}{c^2}\vec{a}_3\right)$$

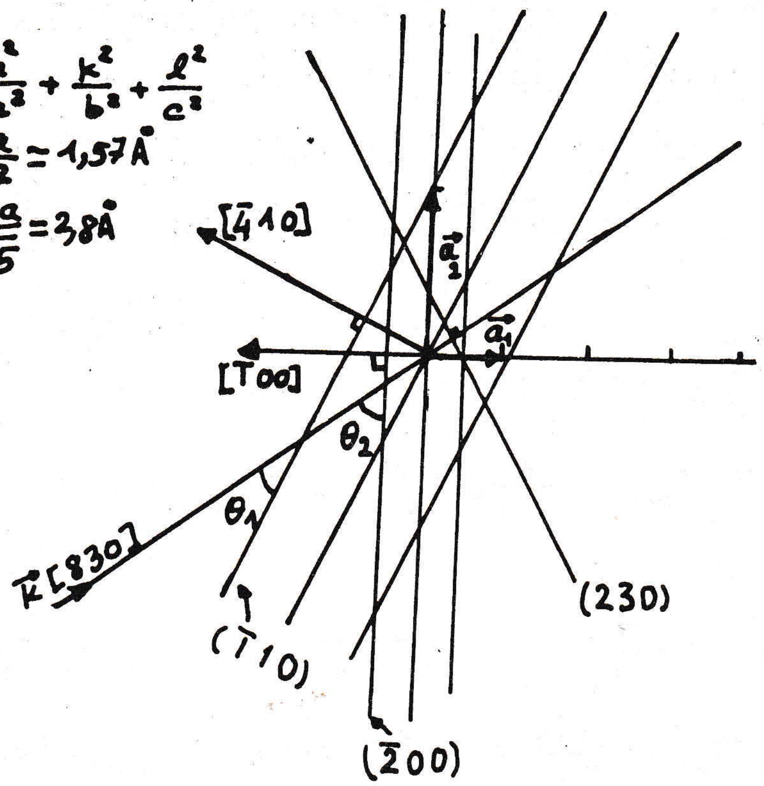
∴ الشعاع العمود على المستـوي (hkl) هو $\vec{n}(hkl)$ ويسـاوي:

$$\vec{n}_{(hkl)} = \left(\frac{h}{a^2}, \frac{k}{b^2}, \frac{l}{c^2}\right)$$

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

$$d_{\bar{2}00} = \frac{a}{2} = 1{,}57\,\mathring{A}$$

$$d_{\bar{1}10} = \frac{2a}{\sqrt{5}} = 3{,}8\,\mathring{A}$$



شكل تمرين(12 د)

وهذا يصح للمجموعة المعينية المستقيمة (في حالة الشبكة المكعبة حيث $a = b = c$

فان الشعاع العمود على المستويات (hkl) هو $(h,k,l) = \vec{n}_{hkl}$)

أذن ($b = 2a$ ، $C = 4a$):

$$\vec{n}_{(\bar{2}00)} = [\bar{1}00] \quad \text{و} \quad \vec{n}_{(\bar{1}10)} = [\bar{4}10] \,, \quad \vec{n}_{(230)} = [830]$$

الزاوية α بين الشعاعين $u_1\vec{a}_1 + v_1\vec{a}_2 + w_1\vec{a}_3$ و $u_2\vec{a}_1 + v_2\vec{a}_2 + w_2\vec{a}_3$ هي:

$$\cos\alpha = \frac{u_1 u_2 a^2 + v_1 v_2 b^2 + w_1 w_2 c^2}{\sqrt{(u_1^2 a^2 + v_1^2 b^2 + w_1^2 c^2)(u_2^2 a^2 + v_2^2 b^2 + w_2^2 c^2)}}$$

حيث $\vec{a}_1 = a\vec{i}$ ، $\vec{a}_2 = b\vec{j}$ ، $\vec{a}_3 = c\vec{k}$. والمعادلة أعلاه تصح للمجموعة المعينية المستقيمة (وللمكعبة حيث تتبسط العلاقة أعلاه لان $a = b = c$).

الزاوية α_1 بين الشعاعين [$\bar{4}10$] و [830] هي:

$$\cos\alpha_1 = -\frac{2}{\sqrt{20}} = \cos\left(\frac{\pi}{2} + \theta_1\right) = -\sin\theta_1 \quad ; \quad \theta_1 = 26{,}5^\circ = \theta_{\bar{1}10}$$

α_2 - زاوية بين الشعاعين [$\bar{1}00$] و [830] :

$$\cos\alpha_2 = -0{,}8 = \cos\left(\frac{\pi}{2} + \theta_2\right) = -\sin\theta_2 \quad ; \quad \theta_2 = 53{,}2^\circ = \theta_{\bar{2}00}$$

وهي نفس زوايا براغ الانعكاسية .

(ج) - بالاسلوب الطبيعي نصمم منطقة بريليون الاولى كما في الشكل - ج - في السمتوي ($\vec{b}_1 - \vec{b}_2$).

حجم كل منطقة بريليون يساوي :

$$v_R = |\vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \wedge \vec{b}_3)| = \frac{(2\pi)^3}{v} = \frac{(2\pi)^3}{abc} = 1 \quad \text{Å}^{-3}$$

13 ـ اعتبر الماس (الكربون) وأحسب :

أ ـ عامل البنية، ب ـ شروط انعدام عامل البنية، جـ ـ طبق ما جاء أعلاه على بلورة ZnS .

الحل: وحدة التركيب البلوري للماس مكعبة طول ضلعها a تحتوي على 8 ذرات. نعتبر كل ذرتين في الموقعين $(0,0,0)$ و$(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4})$ ـ بالنسبة للاحداثيات المنطبقة على أحرف المكعب ـ عقدتاً. فنحصل على شبكة الماس بهيئة مكعبة fcc فيه طول ضلع المكعب الاصطلاحي a . وعند اعتبار كل عقدتين كقاعدة عقدية لحصلنا على شبكة مكعبة بشيطة كل عقدة فيها تقابل 8 ذرات. اذاً نستطيع اعتبار المحاور المنطبقة على أحرف المكعب (حرفه a) وهي $a\vec{i}$ ، $a\vec{j}$ ، $a\vec{k}$ كمحاور أساسية ، على أساسها نعيّن أحداثيات الذرات الثمانية في كل وحدة تركيب بلوري وهي:

$$(x_1,y_1,z_1)=(0,0,0)\;;\;(x_2,y_2,z_2)=(0,\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2})\;;\;(x_3,y_3,z_3)=(\tfrac{1}{2},0,\tfrac{1}{2})\;;$$
$$(x_4,y_4,z_4)=(\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},0)\;;$$
$$(x_5,y_5,z_5)=(\tfrac{1}{4},\tfrac{1}{4},\tfrac{1}{4})\;;\;(x_6,y_6,z_6)=(\tfrac{1}{4},\tfrac{3}{4},\tfrac{3}{4})\;;$$
$$(x_7,y_7,z_7)=(\tfrac{3}{4},\tfrac{1}{4},\tfrac{3}{4})\;;\;(x_8,y_8,z_8)=(\tfrac{3}{4},\tfrac{3}{4},\tfrac{1}{4})\,.$$

وباستخدام تعريف عامل البنية واعتبار كل الذرات متماثلة (لها نفس عامل التشتت الذري f) نجد:

$$(1)\quad F_{hkl}=f\left(1+e^{i\pi(k+l)}+e^{i\pi(h+l)}+e^{i\pi(h+k)}\right)+$$
$$+f\,e^{i\frac{\pi}{2}(h+k+l)}\left(1+e^{i\pi(k+l)}+e^{i\pi(h+l)}+e^{i\pi(h+k)}\right)$$

حيث استخرجنا العامل المشترك ($\exp(i\frac{\pi}{2}(h+k+l))$. أذن :

$$(2) \quad F_{hkl} = f(1+e^{i\pi(k+l)}+e^{i\pi(h+l)}+e^{i\pi(h+k)})(1+e^{i\frac{\pi}{2}(h+k+l)})$$

وهو المطلوب (أ)

ب ـ نميز بصيغة F_{hkl} حالتين:

$F_{hkl} = 0$ ـ (h,k,l) أعداد مختلطة

$F_{hkl} = 4f(1+e^{i\frac{\pi}{2}(h+k+l)})$ ـ (h,k,l) أعداد غير مختلطة

لهذا لا توجد انعكاسات مثل 110 و 120 ـ ـ ـ الخ.

في حالة القرائن الغير مختلطة، تتناسب شدة الاشعة المنعرجة مع $|F_{hkl}|^2$:

$$(3) \quad |F_{hkl}|^2 = F_{hkl}F^*_{hkl} = 16f^2(2+e^{-i\frac{\pi}{2}(h+k+l)}+e^{i\frac{\pi}{2}(h+k+l)})$$

اذن :

$$|F_{hkl}|^2 = 32f^2(1+\cos\frac{\pi}{2}(h+k+l))$$

والآن نميز الحالات التالية (تبقى h ، k ، l غير مختلطة):

أ ـ كل القرائن زوجية، وهنا نميز حالتين:

1 ـ عندما : $h+k+l = 4n$ حيث n ـ عدد صحيح

$$|F|^2 = 32f^2(1+\cos 2\pi n) = 64f^2$$

2 ـ عندما : $h+k+l = 2(2n+1)$ ، عندئذ:

$$|F|^2 = 0$$

وحسبما جاء لا يوجد أنعكاس 222*

---

* ولكن هذا الانعكاس موجود عملياً، لزيادة تركيز الالكترونات بين ذرات الكربون المتجاورة .

ب - كل القرائن فردية :

$$|F_{hkl}|^2 = 32 f^2$$

جـ - في حالة ZnS حيث تشغل الذرات المواقع التالية :

$$Zn : (0,0,0), (\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},0), (\tfrac{1}{2},0,\tfrac{1}{2}), (0,\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2})$$

$$S : (\tfrac{1}{4},\tfrac{1}{4},\tfrac{1}{4}), (\tfrac{3}{4},\tfrac{3}{4},\tfrac{1}{4}), (\tfrac{3}{4},\tfrac{1}{4},\tfrac{3}{4}), (\tfrac{1}{4},\tfrac{3}{4},\tfrac{3}{4})$$

فتتحول المعادلة (2) الى الصورة التالية :

$$F_{hkl} = \left(1 + e^{i\pi(k+l)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(h+k)}\right)\left(f_{Zn} + f_S\, e^{i\frac{\pi}{2}(h+k+l)}\right)$$

ومنه :

$$|F|^2 = 16\left(f_{Zn}^2 + f_S^2 + 2 f_{Zn} f_S \cos\frac{\pi}{2}(h+k+l)\right)$$

حيث اعتبرنا القرائن غير مختلطة ، ونميز 4 حالات :

أ - القرائن مختلطة $F^2 = 0$

ب - القرائن غير مختلطة

(1) كل القرائن فردية :

$$|F|^2 = 16\left(f_{Zn}^2 + f_S^2\right)$$

(2) كل القرائن زوجية ، نميز حالتين:

الاولى - عندما $h+k+l = 4n$

$$|F|^2 = 16\left(f_{Zn} + f_S\right)^2$$

الثانية - عندما $h+k+l = 2(2n+1)$

$$|F|^2 = 16\left(f_{Zn} - f_S\right)^2$$

14 ـ أحسب عامل بنية معدن الزنك

الحل: التركيب البلوري للزنك Zn هو سداسي متراص (hcp) وشبكته سداسية بسيطة قاعدتها متكونة من ذرتين في المواقع $(0,0,0)$ و$(\frac{1}{3},\frac{2}{3},\frac{1}{2})$ وذلك بالنسبة للمحاور الاساسية للتركيب السداسي. ومن تعريف عامل البنية نجد:

$$F_{hkl} = f\left(1 + e^{i2\pi\left(\frac{h+2k}{3}+\frac{l}{2}\right)}\right)$$

وشدة الانعكاس السيني يتناسب مع $|F_{hkl}|^2$.

$$|F_{hkl}|^2 = F_{hkl}F^*_{hkl} = 4f^2\cos^2\pi\left(\frac{h+2k}{3}+\frac{l}{2}\right)$$

حيث نميز أربعة حالات (n ـ عدد صحيح):

$h+2k=3n$ ، l ـ زوجي $\qquad F^2_{hkl}=4$ f^2

$h+2k=3n$ ، l ـ فردي $\qquad F^2_{hkl}=0$

$h+2k=3n\pm1$ ، l ـ زوجي $\qquad F^2_{hkl}=f^2$

$h+2k=3n\pm1$ ، l ـ فردي $\qquad F^2_{hkl}=3f^2$

حيث استخدمنا قوانين المثلثات في حساب جيب تمام جمع الزوايا.

لذلك فالتركيب السداسي المتراص يتميز باختفاء الانعكاسات التي لها l ـ عدد فردي وأما $h+2k=3n$ أو $2h+k=6n-3k=3n'$

حيث n' ـ عدد صحيح أيضا.

15 ـ أحسب عامل بنية ملح الطعام :

الحـل: وحدة التركيب البلوري لملح الطعام مكعبة طول ضلعها a تحتوي على 8 ذرات: أربعة ذرات Cl^- تشغل المواقع: $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0),(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}),(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})$ ، $(0,0,0)$ وأربعة ذرات Na^+ تشغل المواقع : $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}),(0,0,\frac{1}{2}),(0,\frac{1}{2},0),(\frac{1}{2},0,0)$. وذلك محسوبة بالنسبة لأحرف وحدة التركيب ـ المكعب. نعتبر كل ذرتين في الموقعين $(0,0,0)$ و $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$ بالنسبة لاحداثيات أحرف المكعب ـ عقداً. فنحصل على شبكة ملح الطعام بهيئة مكعب fcc فيه طول ضلع المكعب الاصطلاحي (الخلية الاولية غير الأساسية) a . وعند اعتبار كل عقدتين كقاعدة عقدية لحصلنا على شبكة مكعب بسيطة كل عقدة فيها تقابل 8 ذرات : اذاً نستطيع اعتبار المحاور المنطبقة على أحرف المكعب (الذي هو في الاساس وحدة التركيب البلوري) وهي $a\vec{i}$ ، $a\vec{j}$ ، $a\vec{k}$ كمحاور أساسية ،على أساسها نعين (وقد عيّنا أعلاه) أحداثيات الذرات الثمانية.

وبتطبيق التعريف الأساسي حيث $S = 8$ نجد :

$$F_{hkl} = f_{Cl}\left(1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)}\right) + f_{Na}\left(e^{i\pi(h+k+l)} + e^{i\pi h} + e^{i\pi k} + e^{i\pi l}\right). \quad (1)$$

ونميز هنا ثلاثة حالات :

كلها زوجية ـ h, k, l ; $F_{hkl} = 4\,(f_{Cl} + f_{Na})$

كلها فردية ـ h, k, l ; $F_{hkl} = 4\,(f_{Cl} - f_{Na})$

مختلطة ـ h, k, l ; $F_{hkl} = 0$

16 ـ مخطط انعراج مسحوق ملح الطعام : أستعملت أشعة سينية أحادية اللـون $Cu\,K_\alpha$ ($\lambda = 1,542\ \mathring{A}$) للحصول على مخطط الانعراج. والنتائج العملية مدرجة في العمودين 1، 2، 14 للجدول الرئيسي: القيم 2θ تقاس عملياً مباشرة، والقيم $\frac{1}{d^2} = \frac{4\sin^2\theta}{\lambda^2}$ تحسب بمعرفة θ و λ . والشدة المكاملة تحسب من المساحة تحت قمم مخطط الانعراج المأخوذ بطريقة العداد ـ الراسم . ولقد أدرجت النتائج العملية للشدة النسبية للخطوط السينية ، أي نسبة الشدة المكاملة لخط سيني معين الى الشدة المكاملة لأعظم قمة في المخطط، وتحسب كنسبة مئوية (نرمز لها بالرمز I_{rel} % ـ عملي). والمطلوب معرفة ثابت الشبكة ومقارنة الشدة النسبية عمليا ونظريا .

الحـل: نقوم أولا باملاء العمود الثالث للجدول ـ فطالما أن العينة ـ المسحوق مكعبة التركيب البلوري لذلك نفكر بالقاسم المشترك يساوي :

$$0,094 \text{ أو } \frac{0,094}{2} = 0,047 \text{ أو } \frac{0,094}{3} = 0,0313 .$$

وبعد "التجريب" نختار القاسم المشترك 0,0313، وعلى أساسه نكتب أقرب أعداد صحيحة N ونجدولها في العمود الثالث .

على أساس العمود الثالث نؤشر على قمم مخطط الانعراج ونجدولها في العمود4

نتائج مخطط انعراج مسحوق ملح الطعام ($\lambda = 1,542\ A^{\circ}$)

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
$2\theta^{\circ}$	$\frac{4\sin^2\theta}{\lambda^2}$	$N=h^2+k^2+l^2$	hkl	$a(\mathring{A})$	$\frac{\sin\theta}{\lambda}$	f_{Na}	f_{Cl}	F^2_{hkl}	M_{hkl}	$(LP)_{hkl}$	$\frac{F^2_{hkl} M_{hkl} (LP)_{hkl}}{1000}$	نظري $\%I_{rel}$	عملي $\%I_{rel}$
27,3	0,0940	3	111	5,65	0,154	8,90	13,50	338	8	33,5	91	8,6	9,2
31,7	0,1255	4	200	5,65	0,177	8,70	12,70	7330	6	24,0	1057 * (max.)	100	100
45,5	0,2516	8	220	5,64	0,251	7,65	10,50	5280	12	10,9	690	65,3	55,0
53,9	0,3455	11	311	5,64	0,294	7,00	9,60	107	24	7,4	19	1,8	1,8
56,5	0,3768	12	222	5,64	0,307	6,75	9,35	4150	8	6,6	219	20,7	15,8
66,3	0,5030	16	400	5,64	0,354	6,10	8,65	3490	6	4,7	98	9,2	7,3
73,2	0,5980	19	331	5,64	0,386	5,65	8,30	112	24	3,8	10	0,94	1,03
75,4	0,6290	20	420	5,64	0,396	5,50	8,20	3010	24	3,6	260	24,5	15,7
84,1	0,7550	24	422	5,64	0,434	5,05	7,85	2660	24	3,05	195	18.4	10.8
90,6	0.8490	27	{ 511 333	5,64	0,461	4,75	7,60	130	{ 24 8	2,8	12 (جمع الاحتماليين)	1.1	0.8
معلومات عملية		حسابات نظرية											معلومات عملية

بمساعدة العمود 2 و 3 واستخدام المعادلة :

$$\frac{4\sin^2\theta}{\lambda^2} = \frac{h^2+k^2+l^2}{a^2} = \frac{N}{a^2}$$

نحسب قيم "a" . ونلاحظ

(أ) اختفاء القرائن (h, k, l) المختلطة مما يبين أن ملح الطعام ذو بلورات مكعبة ممركزة السطوح .

(ب) أدق قيم للثابت a تحسب عندما تكون زاوية الانعراج كبيرة ، لذلك نختار القيمة $\mathring{A}$ $a = 5,64$.

(جـ) عدد ذرات Na و Cl في الخلية الاولية المكعبة يحسب من معرفة الكثافة (ρ) ، عدد أفوكادرو ($N_{av.}$)، الكتلة المولية لملح الطعام (M)، حسب العلاقة التالية :

$$\text{كتلة الخلية الاولية} = \rho\, a^3 = n\frac{M}{N_{av.}} \quad \text{و} \quad n = \frac{N_{av.}\rho\, a^3}{M}$$

$$n = \frac{0,602 \times 10^{24} \times 2,17 \times (5,64 \times 10^{-8})^3}{(23,0 + 35,5)} = 4,00$$

أي توجد أربعة "جزيئات" $NaCl$ ، توجد 4 ذرات Na و 4 ذرات Cl ، في الخلية الاولية . ومن معلوماتنا عن التركيب fcc ، يجب أن تشغل الذرات Cl (أو Na) زوايا المكعب بينما تشغل الذرات Na (أو Cl) منتصفات وجوه المكعب . وعلى هذا الأساس نحسب الكمية F^2_{hkl} (أنظر السؤال السابق) حيث يتبين أن : .

$$F^2_{hkl} = 4(f_{Cl} + f_{Na})^2 \quad , \quad \text{عندما } h, k, l \text{ - زوجية}$$

$$F^2_{hkl} = 4(f_{Cl} - f_{Na})^2 \quad ; \quad \text{عندما } h, k, l \text{ - فردية}$$

قيم $f_{cl}\left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right)$ ، $f_{Na}\left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right)$ ، كدوال للكمية $\frac{\sin\theta}{\lambda}$ تؤخذ من الجداول.

لذلك نجدول في العمود (6) قيم $\frac{\sin\theta}{\lambda}$ العملية ، وفي العمودين السابع والثامن نجدول قيم f_{Na} و f_{cl} كدالة للكمية $\frac{\sin\theta}{\lambda}$ من جداول الاشعة السينية. وعلى أساس هذه المعلومات نحسب عامل البنية F^2_{hkl} ونجدولها في العمود (9).

ندرج في العمود (10) قيم عامل التعددية المعروفة سلفا لكل hkl : عدد طرق تبديل مواقع الكميات $\pm l$ و $\pm k$ و $\pm h$ بالنسبة للبلورات المكعبة.

ندرج في العمود (11) قيم $(LP)_{hkl}$ لورنتز ـ الاستقطابي:

$$(LP)_{hkl} = \frac{1+\cos^2 2\theta}{\sin\theta \ \sin 2\theta}$$

وهذه القيم تحسب بمعرفة θ .

عند حساب الشدة المكاملة للخطوط السينية نترك عامل ديباي ـ والر الحراري المساوي الى $c\ e^{-2M_T} = c\ e^{-2B\sin^2\theta/\lambda^2}$ ، وذلك لجهلنا بالثوابت B ، C ضمن معطيات السؤال (هذه الثوابت تحسب عملياً عادة). ونقول أن الشدة المكاملة لأي خط تتناسب مع الكمية: $I_{hkl} \propto F^2_{hkl} m_{hkl} (LP)_{hkl}$

لذلك ندرج الكميات $F^2_{hkl} m_{hkl} (LP)_{hkl}$ في العمود الثاني عشر.

والآن نختار أعظم قيمة $[F^2_{hkl} m_{hkl} (LP)_{hkl}]_{max.}$ ـ حيث نجدها للخط 200، ونحسب الشدد النسبية بالنسبة لهذا الخط :

$$I_{rel} = I^{rel}_{hkl} = \frac{I_{hkl}}{I_{200}} = \frac{F^2_{hkl}\ m_{hkl} (LP)_{hkl}}{F^2_{200}\ m_{200}\ (LP)_{200}} \times 100\ \%$$

وعلى أساس هذه المعادلة ندرج القيم النظرية للشدد النسبية في العمود (13).

ومن مقارنة العمودين 13 و 14 يلاحظ الاختلاف بين الشدد النسبية المحسوبة نظريا والمقاسة عمليا. وهذا الاختلاف يعزى الى اهمالنا لعامل ديباي - والر المعتمد على hkl والذي يجب أن يتضمن اختلاف التذبذب الحراري للذرتين Na و Cl .

17 ـ نريد قياس ثابت الشبكة المكعبة (a) للفاناديوم (V). فاستخدمنا الاشعة السينية $\lambda = 1,54 \mathring{A}$ لاجراء أنعراج ديباي شرر وحصلنا على المعلومات التالية :

رقم الحلقة	1	2	3	4	5	6	7
زاوية براغ θ^{o}_{hkl}	22,1	30,5	38,5	46	53,5	61,7	72

الحل:

بما أن شبكة الفاناديوم مكعبة لذلك يكتب قانون براغ بالصورة التالية :

$$\frac{4 \sin^2 \theta_{hkl}}{\lambda^2} = \frac{h^2+k^2+l^2}{a^2} = \frac{N}{a^2} \qquad (1)$$

حيث a ـ ثابت الشبكة المطلوب حسابه . نـدون حساباتنا في الجدول أدنـاه . المعلومات العملية والمحسوبة منها مباشرة تكون في الاعمدة الاول الى الرابع.

نبحث عن قاسم مشترك (قيمته $\frac{1}{a^2}$) الذي عندما نقسم به كل عناصر العمود الثالث تظهر لدينا أرقام قريبة جدا من أرقام صحيحة قليلة.

والقاسم المشترك للمجموعة المكعبة يكون اما 0,2177 (الذي للحلقة الاولى) أو نصفه 0,1088 أو ثلثه 0,0725.

نجري عملية القسمة (لاختيار أحد القواسم) للحلقة الرابعة لنجد:

$$\frac{0,8685}{0,2177} = 3,98 \quad , \quad \frac{0,8685}{0,1088} = 7,97 \quad , \quad \frac{0,8685}{0,0725} = 11,96$$

ويتضح أن القاسم المشترك الملائم أما الاول أو الثاني،

$$4 / \lambda^2 = 1,68$$

رقم الحلقة	θ^{o}_{hkl}	$\sin\theta_{hkl}$	$\frac{4\sin^2\theta_{hkl}}{\lambda^2}$	N	(hkl)	$a(\overset{o}{A})$
1	22,1	0,360	0,2177	2	(110)	3,025
2	30,5	0,507	0,4318	4	(200)	3,034
3	38,5	0,622	0,6499	6	(211)	3,03
4	46	0,719	0,8685	8	(220)	3,028
5	53,5	0,804	1,0859	10	(310)	3,029
6	61,7	0,880	1,3009	12	(222)	3,029
7	72	0,951	1,5193	14	(321)	3,029

لنجرب الحلقة الخامسة :

$$\frac{1,0859}{0,2177} = 4,98 \quad , \quad \frac{1,0859}{0,1088} = 9,97$$

نستمر بالحسابات فنأخذ الحلقة السابعة لنجد:

$$\frac{1,5193}{0,2177} = 6,97 \quad , \quad \frac{1,5193}{0,1088} = 12,95$$

وهكذا يتضح ترك القاسم المشترك 0,2177 لأنه يؤدي الى ظهور $N=7$ الممنوعة للشبكات المكعبة. لذلك فالقاسم المشترك هو 0,1088 ، نجري عملية قسمة عناصر العمود الرابع على هذا القاسم المشترك ونكتب في العمود الخامس أقرب عدد صحيح لناتج القسمة. ومن الجداول الرابطة لعلاقة $N = (h^2 + k^2 + l^2)$ مع (hkl) نؤشر على الحلقات وندرجها في العمود السادس. عندئذ نحسب قيم a باستخدام المعادلة (1) وندرجها في العمود السابع. ومن الجدول يتبين:

(1) شبكة الفاناديوم هي مكعبة bcc - بسبب وجود الانعكاسات ذات القرائن $h + k + l$ = عدد زوجي.

(2) ثابت الشبكة هو 3,029 لأن الزوايا الكبيرة تعطي نتائج أدق.

18 ـ أجريت تجربة انعراج دیباي ـ شرر لمسحوق مكعب التركيب البلـــــوري. وكانت أقطار دوائر مخطط الانعـراج (R) تسـاوي بالملمـتر :

57,7 67,4 99 120 126,6 155,8 182 192,9

طول موجة الاشعة المستخدمة λ يساوي $1,54\mathring{A}$ ومحيط حجرة ديباي 240 ملم .

(أ) ما هو نوع الشبكة ، أحسب ثابتها .

(ب) برهن أن أفضل دوائر انعراج لقياس ثابت الشبكة a هي الدوائـر ذات زاوية الانعراج القريبة من 90°. عنئذٍ قـدر دقة حساب a بالنسبة للزاويـة θ .

الحـــل:

لدينا من هندسـة حجرة ديباي ـ شـرر :

$$\theta^\circ = \frac{r}{D}\,\frac{180}{\pi} = \frac{R}{D}\,\frac{90}{\pi} = \frac{3}{8}\,R(mm\ \ )$$

حيث ($\pi D = 240\ mm$)، D ـ قطر الحجرة، R ـ قطر دائرة الانعراج. وعلـى أساس المعادلة أعلاه نجدول الاعمدة 3،2،1 في الجدول التالي :

	$R(mm)$	θ°_{hkl}	$\sin\theta_{hkl}$	$\frac{4\sin^2\theta_{hkl}}{\lambda^2}$	N	(hkl)	$a(\mathring{A})$
1:	57,7	21,63	0,368	0,2283	3	(111)	3,61
2:	67,4	25,27	0,427	0,3074	4	(200)	3,61
3:	99,0	37,12	0,603	0, 613	8	(220)	3,61
4:	120,0	45,00	0,707	0,8427	11	(311)	3,61
5:	126,6	47,47	0,737	0,9165	12	(222)	3,62
6:	155,8	58,43	0,852	1,2238	16	(400)	3,62
7:	182,0	68,30	0,928	1,4544	19	(331)	3,62
8:	192,9	72,33	0,952	1, 528	20	(420)	3,62

القاسم المشترك لعناصر العمود 4 هو $\frac{0,2283}{3} = 0,076$ والذي على أساسه نملأ 5

العمود 5، 6 ثم نجدول قيم a . والتركيب FCC .

(ب) لدينا $\lambda = 2d\sin\theta$ ، $\Delta\lambda = 2\sin\theta\,\Delta d + 2d\,\Delta\sin\theta$ ،

وبالقسمة على λ نجد:

$$\frac{\Delta d}{d} = \frac{\Delta\lambda}{\lambda} - \cot\theta\ \Delta\theta(rad.)$$

ونهمل $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$ على أساس أن الأشعة المستخدمة أحادية اللون تماما ! .

وحيث أن $d = \frac{a}{(h^2+k^2+l^2)^{1/2}}$ اذن $\frac{\Delta d}{d} = \frac{\Delta a}{a}$ ، أذن :

$$\left|\frac{\Delta a}{a}\right| = |\cot\theta|\ \Delta\theta(rad)$$

وهكذا فدقة قياس a تزداد بزيادة θ (أي أن زيادة θ تقلل Δa). لذلك نختار قيمة a من الزوايا الكبيرة ($3,62\ \mathring{A}$).

والآن نقدر دقة قياس a (Δa): لدينا $\theta^\circ = \frac{3}{8} R$ اذن $\Delta\theta^\circ = \frac{3}{8}\Delta R$.

نقدر $\Delta R \simeq 0,5\ mm$ اذن $\Delta\theta \simeq 0,187^\circ$ وتساوي ($0,0033\ rad$). نضع $\cot\theta \rightarrow 1$ نستنتج أن :

$$\frac{\Delta a}{a} \simeq 0,0033 \quad \text{أو أن} \quad \Delta a \simeq 3,62 \times 0,0033 \simeq 0,01\mathring{A}$$

و"الخطأ" أو الدقة أعلاه ناتجة عن عدم دقة R أو عدم دقة القياس النهائي على الفيلم، هذا بفرضنا أن أسلوب اجراء التجربة مثالي. ولكن الواقع يبين أن هناك عدم دقة في وضع الفيلم تماما ملامسا للحجرة الاسطوانية :

فلدينا من تجربة ديباي: $4\theta = \frac{R}{D/2}$ (θ ـ راد) ومنه :

$$\frac{\Delta\theta}{\theta} = \frac{\Delta R}{R} - \frac{\Delta(D/2)}{D/2} \quad \text{أو} \quad \Delta\theta = \left(\frac{\Delta R}{R} - \frac{\Delta(D/2)}{D/2}\right)\frac{R}{4(D/2)}$$

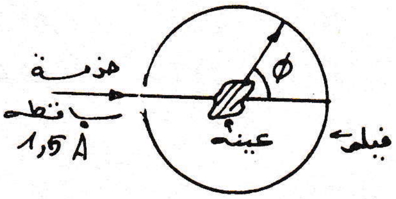
حيث $\frac{\Delta R}{R}$ ـ ناتج عن الخطأ في قياس R و $\frac{\Delta(D/2)}{D/2}$ ناتج عن عدم دقة وضع الفيلم في الاسطوانة

وعلى العموم نستنتج أن $\theta \rightarrow \pi/2$ $\Delta a \rightarrow 0$.

وهنا افترضنا أن العينة موضوعة في مركز الحجرة الاسطوانية تماما. وعموما وجدنا أن :

$$\frac{\Delta a}{a} = -\cot\theta \left(\frac{\Delta R}{R} - \frac{\Delta(D/2)}{D/2} \right) \frac{R}{4(D/2)}$$

19 - مسحوق مخلوط من ثلاثة عناصر، أحد هذه العناصر مكعب fcc والآخر مكعب bcc والآخر الماسي التركيب. وعند اجراء تجربة الانعراج بطريقة ديباي - شرر ميزت أولى حلقات الانعراج باسنادها الى العناصر التي عكستها بالصورة التالية :



شكل تمرين 19

	A	B	C
ϕ =	42,2°	28,8°	42,8°
	49,2°	41,0°	73,2°
	72,0°	50,8°	89,0°
	87,3°	59,6°	115,0°

(أ) ما هو التركيب البلوري للعناصر A ، B ، C .

(ب) ما هو طول حرف الخلية المكعبة الاصطلاحية (a).

(جـ) اذا استبدلنا العنصر الماسي بالمادة ZnS التي لها نفس ثابت الشبكة a للعنصر الماسي. فما هي زوايا الانعكاسات الاربعة الاولى.

أ - كل العناصر مكعبة التركيب، لذلك نستفيد من العلاقة التالية :

$$\frac{4 \sin^2 \theta}{\left(\frac{1}{a^2}\right) \lambda^2} = h^2 + k^2 + l^2 = N \qquad (1)$$

حيث الكمية $\left(\frac{1}{a^2}\right)$ - القاسم المشترك الذي نبحث عنه .

العنصر A : النتائج العملية مدرجة في الجدول التالي، في الاعمدة الاربعة الاولى:

A : $2\theta_{hkl}$	θ_{hkl}	$\sin\theta_{hkl}$	$\frac{4}{\lambda^2}\sin^2\theta_{hkl}$	N	hkl	$a(\mathring{A})$
42,2	21,1	0,360	0,22939	3	111	3,616
49,2	24,6	0,4162	0, 3066	4	200	3,612
72,0	36,0	0,5878	0, 6115	8	220	3,617
87,3	43,65	0,. 690	0, 8426	11	311	3,614

$4 / \lambda^2 = 1,77$

والآن نبحث عن القاسم المشترك. لا يوجد في المخلوط مادة مكعبة بسيطة لذلك فالعامل المشترك هو

أما $\frac{0,22939}{2} = 0,11469$ أو $\frac{0,22939}{3} = 0,07646$

اذاً:

$\frac{0,3066}{0,11469} = 2,67$ و $\frac{0,6115}{0,11469} = 5,33$ و $\frac{0,8426}{1,11469} = 7,34$

$\frac{0,3066}{0,07646} = 4,00$ و $\frac{0,6115}{0,07646} = 7,99$ و $\frac{0,8426}{0,07646} = 11,02$

حيث يلاحظ أن القاسم المشترك 0,07646 هو الذي يأتي بنتائج أقرب الى العدد الصحيح N . ندرج الاعداد الصحيحة في العمود(5). وحيث $N = h^2 + k^2 + l^2$ نستنتج تأشيرات الحلقات الاربعة الاولى للمسحوق A . ويبدو اختفاء الانعكاسات التي لها h و k و l مختلطة. معنى هذا أن العنصر A هو fcc . نعيد استخدام المعادلة (1) لاستخراج قيم a ، وندرجها في آخر عمود. والقيمة الحقيقية للثابت a تستنتج من الانعكاسات ذات الزوايا الكبيرة أو من المعدل $3,615\mathring{A}$.

العنصر B : النتائج العملية مدرجة في الاعمدة الاربعة الاولى للجدول التالي:

B :

$2\theta^{\circ}_{hkl}$	θ°_{hkl}	$\sin\theta_{hkl}$	$\frac{4}{\lambda^2}\sin^2\theta_{hkl}$	N	(hkl)	a
28,8	14,4	0,2486	0,1094	2	(110)	4,267
41,0	20,5	0 , 350	0,2168	4	(200)	4,283
50,8	25,4	0,4289	0,3256	6	(211)	4,283
59,6	29,8	0,4969	0,4370	8	(220)	4,268

والآن نبحث عن القاسم المشترك الذي هو:

أما $\frac{0,1094}{2} = 0,0547$ أو $\frac{0,1094}{3} = 0,0364$

اذاً :

$\frac{0,437}{0,0547} = 7,98$ و $\frac{0,3256}{0,0547} = 5,95$ و $\frac{0,2168}{0,0547} = 3,96$

$\frac{0,437}{0,0364} = 12,0$ و $\frac{0,3256}{0,0364} = \underline{8,94}$ و $\frac{0,2168}{0,0364} = 5,95$

لا نستعمل القاسم 0,0364 لأنه يؤدي الى ظهور عدد صحيح مقداره $N = 9$ وهو فقط يصح للمكعبة البسيطة . لذلك فالقاسم المشترك هو <u>0,0547</u> . ندرج الاعداد الصحيحة في العمود (5). وحيث أن $N = h^2 + k^2 + l^2$ لذلك نستنتج تأشيرات الحلقات الاربعة الاولى للمسحوق B . ويبدو اختفاء الانعكاسات التي لها $h+k+l=$ عدد فردي . معنى هذا أن تركيب هو <u>bcc</u> . ونستعمل المعادلة (1) للحصول على قيم a التي معدلها $4,28\,\mathring{A}$.

العنصـــر C : نجري نفس الأسلوب السابق فنجد أن القاسم المشترك هــو

$\frac{0,2355}{3} = 0,078$ وعليـه نكتـب الجـدول التالـي:

C: $2\theta_{hkl}$	θ_{hkl}	$\sin\theta_{hkl}$	$\frac{4}{\lambda^2}\sin^2\theta_{hkl}$	N	(hkl)	$a(\mathring{A})$
42,8	21,4	0,3648	0,2355	3	(111)	3,571
73,2	36,6	0,5962	0,629	8	(220)	3,571
89,0	44,5	0,700	0,867	11	(311)	3,571
115,0	57,5	0,8433	1,258	16	(400)	3,566

القيمة العامة للثابت $a = 3,57\ \mathring{A}$. والتركيب الماسي.

جـ - من ملاحظة عامل البنية نستنتج أن الانعكاسات الممنوعة هـي :

للماس عندما تكون القرائـن مختلطة.

عندما تكون كلها زوجية بحيث أن $h+k+l = 4n+2$.

ZnS : عندما تكون القرائن مختلطة فقط . وترتيب الانعكاسات هو:

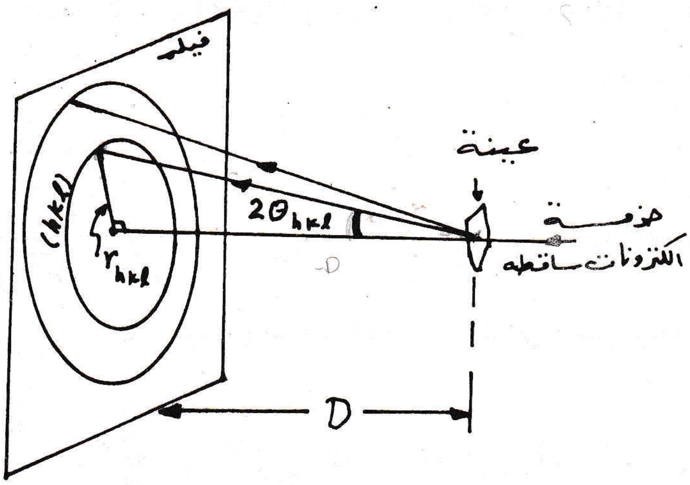
الماسي :	(111) ,		, (220)	, (311) ,		, (400)
ZnS :	(111)	و (200)	, (220)	, (311)	, (222)	, (400)
N =	3	4	8	11	12	16

لذلك فالانعكاسات الاربعة الاولى لكبريتيد الزنك ZnS هي (111)، (200)، (220)، (311). وحيث أن $a = 3,57$ ، $\lambda = 1,5$. اذن الانعكاسات الاربعة الاولى للمركب ZnS هي: $\sin\theta_{hkl} = \frac{\lambda(h^2+k^2+l^2)^{1/2}}{2a}$

θ°_{hkl} :	~ 21,4	24,8	36,6	44,5
N :	3	4	8	11
(hkl) :	(111)	(200)	(220)	(311)

20 ـ عينـة على هيئـة صفيحـة رقيقـة جدا من السليكـون ($a = 5,34 \ \mathring{A}$).وهذه العينة متعددة البليرات. سقطت عليها حزمـة الكترونية متحركة تحت فرق جهد 30 كيلو فولت. فاستلم مخطط انعراج الالكترونات على فيلم يبعد مسافـة $D = 30$ سـم عن العينة. وكان الفيلم عموديا على الحزمة الساقطة فظهر مخطط الانعراج عبـارة عن دوائر متمركزة. ما هي أنصاف أقطار (r_{hkl}) الدوائر الستـة الاولى، أشرها.

الحـل:



شكـل تمريـن 20

طاقة الالكترونات الساقطـة 30 كيلو الكترون ـ فولت، وطول الموجة المترافقـة مـع حركة الالكـترونات تسـاوي:

$$\lambda = \frac{12,26}{\sqrt{30 \times 10^3}} \simeq 0,07 \mathring{A}$$

والسليكون ذو تركيب المـاسـي حيث تختفـي الانعكاسات عن المستويات التي لهـا:

- قرائن مختلطة : (/)

- كل القرائن زوجية تحقق العلاقة $h + k + l = 4n + 2$: (//).

لذلك سنؤشر على الانعكاسات الممنوعة حسب زيادة $N(hkl) = h^2 + k^2 + l^2$.

$N(\cancel{100}) = 1$ و $N(\cancel{110}) = 2$ و $N(111) = 3$ و $N(\cancel{200}) = 4$

$N(\cancel{210}) = 5$ و $N(\cancel{211}) = 6$ و $N(220) = 8$ و $N(\cancel{221}) = 9$ $\underset{300}{}$

$N(\cancel{310}) = 10$ و $N(311) = 11$ و $N(\cancel{222}) = 12$ و $N(\cancel{320}) = 13$

$N(\cancel{321}) = 14$ و $N(400) = 16$ و $N(\cancel{410}) = 17$ و $N(\cancel{411}) = 18$

$N(331) = 19$ و $N(\cancel{420}) = 20$ و $N(\cancel{421}) = 21$ و $N(\cancel{332}) = 22$

$N(422) = 24$

وباستعمال العلاقة :

$$2d_{hkl}\sin\theta_{hkl} = \lambda \ , \ \left(d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \right)$$

نستخرج قيم $\sin\theta_{hkl}$ وندرجها في الجدول التالي حسب زيادة N :

قرائن الانعكاس	$d_{hkl}(\mathring{A})$	$\sin\theta_{hkl} \simeq \theta_{hkl} = \frac{\lambda}{2d_{hkl}}$	$r_{hkl} = D\,tg\,\theta_{hkl} \simeq D\,\theta_{hkl}$
(111)	3,14	0,0111	6,65
(220)	1,92	0,0182	10,9
(311)	1,64	0,0213	12,75
(400)	1,36	0,0256	15,4
(331)	1,25	0,0279	16,7
(422)	1,11	0,0314	18,8

حيث r_{hkl} - نصف قطر حلقة الانعراج ويساوي من الشكل : $tg\,\theta_{hkl} \simeq \theta_{hkl} = \frac{r_{hkl}}{D}$

21 ـ زاوية براغ لانعكاس معين من عينة مسحوق الرصاص $51,96^{\circ}$ عند $300^{\circ}K$ و $51,11^{\circ}$ عند $1000^{\circ}K$. ما هو معامل التمدد الحجمي للرصاص β.

الحل: $\frac{d_{1000}-d_{300}}{d_{300}\cdot\Delta T} = \frac{a_{1000}-a_{300}}{a_{300}\cdot\Delta T} = \alpha \; ; \; 1 = \frac{2d_{300}\sin\theta_{300}}{2d_{1000}\sin\theta_{1000}}$

$$= \frac{1}{\Delta T}\left(\frac{\sin\theta_{300}}{\sin\theta_{1000}} - 1\right)$$

(الرصاص ـ مكعب): $\alpha = 16,9\times10^{-6}/^{\circ}K$ و $\beta = 3\alpha = 5,08\times10^{-6}/^{\circ}K$

22 ـ أشعة سينية بيضاء صادرة عن أستيقاف حزمة الكترونية ($40\,keV$) بمصعد نحاسي. استعملت هذه الأشعة في تجربة لاوي على عينة الموليبدينيوم Mo ($a=3,15\mathring{A}$). أعتبر الأشعة السينية ذات الطول الاكبر من $2\mathring{A}$ ضعيفة جداً ومهملة. أ ـ ما هو طيف الأشعة المستعملة ب ـ هل يوجد انعكاس عن المستويات (110) بالمرتبة الأولى بزاوية براغ $\theta > 45^{\circ}$. ج ـ اذا كانت الأشعة الساقطة تصنع زاوية 64° مع المستويات (110). ما هي مراتب الانعكاسات عن هذه المستويات.

الحل: أ ـ $2\mathring{A} \geqslant \lambda \geqslant 0,31$: $\lambda_{min}(\mathring{A}) = \frac{12,4}{E(keV)} = 0,31\mathring{A}$

ب ـ $n\lambda = 4,4547\sin\theta,$ و $2d\sin\theta = n\lambda$

$\lambda(\mathring{A}) \geqslant \frac{3,1499}{n}$ و $\sin\theta \geqslant 0,707$

ولكي تكون λ ضمن الطيف، يجب أن تكون $n \geqslant 2$. فالجواب هو: كلا.

ج ـ لدينا $\theta = 64^{\circ}$ أذن: $\left(n = \frac{4,00}{\lambda(\mathring{A})}\right)$

$\lambda = 0,31\mathring{A},\; n = 12,9$ و $\lambda = 2,00\mathring{A},\; n = 2$

اذن: يتراكب على بقعة الانعكاس (110) ـ بزاوية براغية 64° ـ الانعكاسات بالمراتب $n = 2 \div 13$ حسب طول الموجة طبقا للعلاقة $n = 4/\lambda$.

23 ـ سقط شعاع سيني أحادي اللون على بلورة الحديد الاحادية ($a=2,9\mathring{A}$) المحمولة على محور يوازي الاتجاه البلوري [100] العمودي على الشعاع الساقط. أ ـ ما هي أقل طاقة ممكنة للشعاع السيني حتى نحصل على ثلاثة مراتب كحد أقصى للأشعة المنعكسة عن المستويات (110). ب ـ أستعملت المرتبة الاولى للأشعة المنعكسة أعلاه في موقع ما، كيف يجب تدوير البلورة حتى نحصل وفي نفس الموقع على الانعكاس (200). كم عدد مراتب الانعكاس (200).

الحل: أ ـ

$$(110): \frac{2a \sin\theta}{\sqrt{h^2+k^2+\ell^2}} = n\lambda \quad \text{و} \quad n\lambda = 4{,}1 \sin\theta$$

$$n_{max}=3,\ \theta_{max}=\frac{\pi}{2} \therefore \lambda_{max}=1,367\mathring{A} \quad \text{و} \quad E=\frac{12,4}{\lambda(\mathring{A})}=9,07\ KeV.$$

$$\therefore \theta_{110}(n=1)=19,47^\circ,\ \theta_{110}(n=2)=41,81^\circ,\ \theta_{110}(n=3)\simeq 90^\circ$$

ب ـ

$$\theta_{110}(n=1)=19,47^\circ,\ \theta_{200}(n=1)=28,12^\circ$$

يجب تدوير البلورة بزاوية $8,6^\circ$ حول المحور نفسه، وموقع الاستلام يقع في مستوي الأشعة السينية الساقطة:

$$(200):\ \theta(n=1)=28,12^\circ \quad \text{و} \quad \theta(n=2)=70,5^\circ$$

أي مرتبتان فقط.

24 ـ أ ـ ما هو أكبر طول موجي λ_{max} سيني يمكن أن ينعرج عن المستويات (111) لبلورة الماس ($a = 3,57\,\mathring{A}$).

ب ـ من أية مستويات بلورية يمكن أن ينعرج الشعاع $5\mathring{A}$ اذا سقط على بلورة (1) الماس (2) الرصاص ($FCC\ 4,95\,\mathring{A}$) (3) الباريوم ($BCC\ \ 5,02\,\mathring{A}$).

الحل: أ ـ $2\frac{a}{\sqrt{3}}[\sin\theta]_{max} = n\lambda_{max}\quad (n=1)\ ;\ \lambda_{max} = 4,12\,\mathring{A}$

ب ـ (1) $2\,\frac{3,57}{\sqrt{N}}\sin\theta = 5n\ ;\ n\sqrt{N}\,0,7 = \sin\theta\ ;\ n\sqrt{N} \leqslant 1,428$

$n = 1 \qquad N \leqslant 2,039\ ;\ N = 1(100),\ N = 2(110)$

ولكن هذه الانعكاسات غير مسموحة للماس، اذن لا يوجد انعكاس عن الماس اذا كانت $\lambda = 5\mathring{A}$.

(2) $FCC\ :\ 2\,\frac{4,95}{\sqrt{N}}\sin\theta = 5n\ ,\qquad n\sqrt{N} \leqslant 1,98$

$n=1$ $N=1$(100 ممنوع), $N=2$(110 ممنوع) , $N=3$(111 مسموح)

أي يمكن أن يوجد أنعكاس واحد فقط هو (111) وبالمرتبة الاولىفقط.

(3) $BCC\ :\ 2\times\frac{5,02}{\sqrt{N}}\sin\theta = 5\lambda$ و $n\sqrt{N} \leqslant 2,008$

$n=1:$ $N=1$(100ممنوع) و $N=2$(110 مسموح) و $N=3$(111 ممنوع)

وكذلك لدينا $n=2:$ $N=1$(100ممنوع) و $N=4$(200 مسموح) . معنى هذا أنه يوجد فقط أنعكاسين مختلفين ممكنين.

25 ـ أستعمل شعاع سيني متكون من الثنائي $K\alpha_1$ و $K\alpha_2$ Pb (حيث: $\lambda_{\alpha_1} = 1,540\ \mathring{A}$ ، $\lambda_{\alpha_2} = 1,5443\,\mathring{A}$) في تجربة ديباي شرر (قطر الحجرة 6 سم) على مسحوق النحاس(FCC، $a = 3,61\,\mathring{A}$) أو الفضة (FCC ، $a = 4,09\,\mathring{A}$) فاذا كان عرض كل خط سيني منعكس على الفيلم بحدود 0,03 سم فما هو أول أنعكاس ($hk\ell$) مزدوج بشكل واضح.

الحـل:

نتيجة وجود طولين موجيين فان الانعكاس الوارد عن المستويات المعينة (hkl) والناشيء عن λ_{α_1} يتراكب مع ذلك الناشيء من λ_{α_2} مما يسبب في زيادة عرض الانعكاس (hkl) بالنسبة للقيمة 0,03 سم (أنعكاس مزدوج). ولكي نميز الانعكاس الناشيء من λ_{α_1} عن أنعكاس λ_{α_2} (عن نفس المستويات (hkl)) يجب أن يكون عرض الانعكاس المزدوج (ΔL) يساوي أو أكبر من 0,06سم.

لدينا: $\lambda = 2d\sin\theta = 2d\sin\frac{L}{2r}$ حيث $2L$ـ قطر حلقه أنعكاس ديباي (hkl) و $2r$ ـ قطر الحجرة. اذن:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = ctg\theta\frac{\Delta L}{2r}, (\Delta\lambda = 0,0038\,\text{Å}, \Delta L = 0,06\,cm, 2r = 6\,cm, \lambda = 1,5443)$$

ومنه نجد $\theta = 76,1^{\circ}$ ، عندئذ يبدأ التمايز عند ما $\theta \geqslant 76,1^{\circ}$ أي أن:

$$\sin^2\theta \geqslant \sin^2 76,1^{\circ} \text{ و } N \geqslant \frac{4a^2\sin^2 76,1^{\circ}}{\lambda^2_{\alpha_2}}$$

- في حالة النحاس: $N \geqslant 20,6$ حيث: $N = 21$ (تقابل 421 وهي ممنوعة - مختلطة)، $N = 22$ (تقابل 332 وهي ممنوعة - مختلطة) $N = 23$ (لا يجوز ذلك)، $N = 24$ (تقابل 422 وهو مسموح).

فالمفروض أن يكون أول أنعكاس يفي بالغرض المنشود هو 422 ولكنه لا يظهر في الحالة الراهنة لأن $\sin\theta_{422} > 1$. لذلك لا يظهر التحليل K_{α_1} عن K_{α_2} في ضروف التجربة هذه على النحاس.

- في حالة الفضة : $N \geqslant 26,4$. أول انعكاس نبحث عنه هو $N = 27$ (511 أو 333) حيث : $\theta_{\lambda_1} = 78,1^{\circ}$

$$\theta_{\lambda_2} = 78,8^{\circ}, \Delta\theta = 0,7^{\circ} = 0,012\,rad, \Delta L = \Delta\theta(2r) = 0,073\,cm$$

26 ـ أجريت تجربة ديباي ـ شرر على مسحوق مكعب الفئة وظهرت النتائج التالية بعد ازالة أحد الانعكاسات:

$2\theta^{\circ}$: 31,7 45,5 53,9 56,5 66,3 73,2 75,4

ما هو التركيب البلوري ، ثابت الشبكة ، أشر على الانعكاسات.

الحل:

لا يمكن للارقام : 0,1255 أو $\frac{0,1255}{2}$ أو $\frac{0,1255}{3}$ أن تكون قواسم مشتركة ، لذلك نتوقع أن الانعكاس الملغى هو الأول للشبكة FCC بالاستنتاج.

$2\theta^{\circ}$	$4\sin^2\theta/\lambda^2$	N	(hkl)
27,3°	0,094	3	(111)
31,7	0,1255	4	(200)
45,5	0,2516	8	(220)
53,9	0,3455	11	(311)
56,5	0,3768	12	(222)
66,3	0,503	16	(400)
73,2	0,598	19	(331)
75,4	0,629	20	(420)

وتستنتج قيمة الانعكاس الأول من القيمة : $\frac{4\sin^2\theta}{\lambda^2} = 0,1255 \times \frac{3}{4}$

27 ـ مخطط أنعراج مسحوق الالمنيوم بطريقة ديباي ـ شرر: تعطى قيم $\sin\theta$ طبقا للجدول التالي:

0,298	0,330	0,344	0,381	0,487	0,540
0,571	0,596	0,632	0,660	?	0,750
0,763	0,770	0,830	0,852		

حيث استعمل للانعراج خطان طيفيان سينيان:

$$\lambda_{\alpha} = 1,537\ \text{Å} \quad , \quad \lambda_{\beta} = 1,389\ \text{Å}$$

أشر على الانعكاسات وأنسبها الى λ_{α} أو λ_{β} ، عين ثابت الشبكة ونوعها وحدد $\sin\theta$ لخط لم يدرج في الجدول.

الحـل:

$\sin^2\theta$	$\frac{4\sin^2\theta}{\lambda_\alpha^2}$	$\frac{4\sin^2\theta}{\lambda_\beta^2}$	طيف λ_α	طيف λ_β
0,0888		0,1841		111
0,1084	0,1844		111	
0,1183		0,2452		200
0,1452	0,2458		200	
0,2372		0,491763		220
0,2916	0,4937		220	
0,3261		0,67607		311
0,3552		0,7364		222
0,3994	0,67626		311	
0,4356	0,7375		222	
0,5625		1,1662		(?) 331
0,5822	0,9857		400	
0,5929		1,2292		420
0,6889	1,16644		331	
0,7259	1,2291		420	

بعد التجربة والخطأ وجد أن القاسم المشترك هـو:

, 0,0613(λ_β)

0,0614(λ_α)

للشبكة Fcc والخط الأول تابع الى λ_β لأنها أصغر من λ_α . الخط الملغى (400) تابع الى طيف λ_β له $\sin\theta = 0,6895$ من العـلاقـة (للخط 400):

$$\frac{\sin\theta_\alpha}{\sin\theta_\beta} = \frac{\lambda_\alpha}{\lambda_\beta}$$

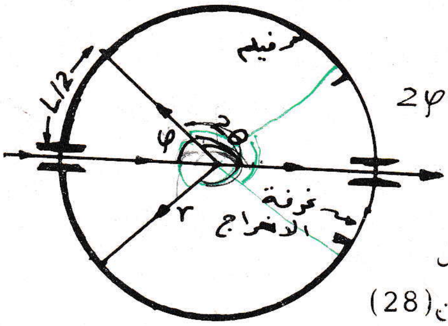
ثابت الشبكة يستنتج من الزوايا الكبيرة ويساوي:

$$2d\sin\theta = \lambda \Rightarrow a = 4,03\,\mathring{A}$$

28 ـ دراسة أنعراج الأشعة الراجعة ($2\theta > 90^\circ$) في غرفة (كاميرا) ديباي ـ شرر (قطرها 9سم) لعينة مكعبة التركيب البلوري ولكنها تحوي على شوائب تنتج ثلاثة إنعكاسات مرئية على شريط الانعراج. أقطار دوائر الأنعراج L على شريط الأنعراج هي:

17,06 و 18,16 و 19,33 و 20,62 و 20,80 و 22,09 و 23,94
11,20 و 11,88 و 12,94 و 13,50 و 13,93 و 14,95 و 15,99

طول الموجة السينية المستخدمة $\lambda = 1,55 \text{Å}$ والمطلوب تحديد نوع الشبكة وثابتها مع تأشير الخطوط السينية وتحديد خطوط الشوائب.



شكل
تمرين (28)

الحل: من الشكل يتبين أن:

$$2\varphi(rad)=\frac{L}{r},\ \varphi^\circ=\frac{L}{2r}\frac{180}{\pi};\ \varphi^\circ=180^\circ-2\theta^\circ,$$

$$90^\circ-\theta^\circ=3{,}183\,L(cm)$$

من قياس L نحدد زوايا براغ ونجدولها ونختار المضاعف المشترك الأصغر لقيم $\sin^2\theta$:

L	$(90-\theta)^\circ$	$\sin^2\theta$	N	(hkl)
23,94	76,2	0,0569	2	110
22,09	70,4	0,1125	4	200
20,80	66,2	0,1628	5,74	شائبة
20,62	65,9	0,1667	6	211
19,33	61,5	0,2277	8	220
18,16	57,9	0,2824	10	310
17,06	54,3	0,3405	12	222
15,99	50,9	0,3978	14	321
14,95	47,6	0,4547	16	400
13,93	44,4	0,5105	18	411,330
13,50	43,0	0,5350	18,82	شائبة
12,94	41,1	0,5679	20	420
11,88	37,8	0,6244	22	322
11,20	35,7	0,6595	23,20	شائبة

القاسم المشترك: 0,02845

الشبكة: BCC

وبأخذ أكبر زاوية وتطبيق قانوني براغ نجد $a = 4,60 \text{Å}$.

لو أعتبرت الشبكة Sc لظهر $N=7$ وهو غير ممكن (وفي الحالة المعاكسة تماما يظهر $N=28$ وهو غير مسموح)

29 ـ تجربة البلورة الدوارة في الحجرة (الكاميرا) الأسطوانية ذات الطول 8سم ونصف القطر 3 سم : درست البلورة الأحادية (TiO_2) باستخدام شعاع النحاس (K_α ($\lambda = 1,54\ \mathring{A}$) . أختير الاتجاه البلوري [001] موازياً للشعاع السيني في تجربة لاوي فوجد أن تناظر لوحة الانعراج هو $4mm$. ثم جعل هذا الاتجاه موازيا لمحور الدوران في تجربة البلورة الدوارة فوجد أن الفاصلة (x) بين البقعة المركزية (موضع خروج الأشعة السينية من الكاميرا وهي تقع وسط الفيلم) وبقع خط الانعراج المركزي (الصفري) هي: 1,24، 1,77، 2,55، 2,87، 3,73، 4,00 سم . والفاصلة بين الخط الصفري والخط الثالث تساوي 1,70سم :

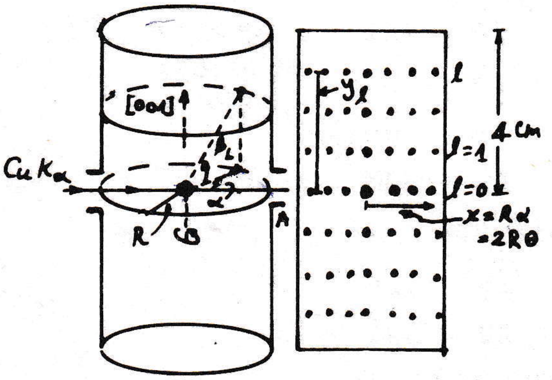
أ ـ ما هي دورية الشبكة في الاتجاه [001] وكم هو أكبر عدد من خطوط الانعراج التي تظهر على الفيلم، حدد مواقعها.

أجريت على نفس البلورة تجربة لاوي بجعل الاتجاه البلوري [100] موازيا للشعاع الساقط فوجد أن تناظر لوحة لاوي للانعراج هو $2mm$:

ب ـ ما هي فئة الشبكة وتناظرها، أحسب ثوابتها.

أجريت بعد ذلك وعلى نفس البلورة تجربة البلورة الدوارة بحيث يتوازى الاتجاه البلوري [111] مع محور الدوران فوجدت الفاصلة بين خط الانعراج الصفري والخط الثاني مساوية الى 2,10 سم :

ج ـ ما هو نوع الشبكة البلورية . وما هو عدد الجزيئات المنتسبة لعقدة واحدة من عقد الشبكة اذا كانت الكثافة 3,9 غم /سم3 (الكتل الذرية : "O" ـ 16 و "Ti" ـ 48).



شكل تمرين (29)

الحل:

دورية الشبكة في الاتجاهات [001]،[010]،[100] هي على التوالي c ، b ، a .

لدينا :

$$tg\,\beta_l = \frac{y_l}{R},\ \sin\beta_l = \frac{l\lambda}{c}$$

حيث: $\ell = 3$ ، $y_3 = 1,7\,cm$ ، $R = 3\,cm$ ، $\lambda = 1,54\,\mathring{A}$

نجد $\beta_3 = 29,53°$ ، $\underline{c = 9,37}\ \mathring{A}$. وعلى أساس المعادلات أعلاه

نجدول:

ℓ =	0	1	2	3	4	5
β_ℓ° =	0	9,46°	19,18°	29,53°	41,08°	55,23°
y_ℓ (سم) =	0	0,50	1,04	1,70	2,61	4,32 cm

وهكذا يتضح ظهور 4 خطوط في النصف "العلوي" للفيلم تُناظِرُها 4 في النصف السفلي، لذلك يتولد على الفيلم 9 خطوط أنعراج.

ب ـ تجربة لاوي تبين أن الاتجاه البلوري هو اتجاه تناظري $4mm$ والاتجاه [100] ـ $2mm$ نستنتج أن فئة الشبكة هي رباعية

$(Tetragonal):\ a = b \neq c$ ، $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$

تناظرها $\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$ (أو $4/mmm$). لهذه الفئة:

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2+k^2}{a^2} + \frac{\ell^2}{c^2} \quad , \quad \sin^2\theta = \frac{\lambda^2}{4a^2}(h^2+k^2) + \frac{\lambda^2\ell^2}{4c^2}$$

الخط الصفري في الفرع (أ) يمثل $\ell = 0$ عندئذ $\sin^2\theta \sim (h^2+k^2)$

لذلك نجدول ما يلي طبقا للعلاقة $\theta^{\circ} = \frac{x}{2R}\left(\frac{180}{\pi}\right)$

$x(cm)$	1,24	1,77	2,55	2,87	3,73	4,00
θ°	11,84°	16,90°	24,35°	27,40°	35,62°	38,19°
$\sin^2\theta$	0,0421	0,0845	0,1700	0,2118	0,3392	0,3823
$\sin^2\theta \sim (h^2+k^2)$	1	2	4	5	8	9
$(hk\ell)$	100	110	200	210	220	300

على أساس الجدول أعلاه نحسب $a = b$ طبقا للعلاقة التالية $(\ell = 0)$:

$\sin\theta = \frac{\lambda}{2a}\sqrt{h^2+k^2}$ فنجد معدل القيمة هو $a = b = 3,74\,\mathring{A}$.

جـ ـ من المعلومات المعطاة نجد الدورية في الاتجاه [111]

باستخدام العلاقات $tg\,\beta_n = \frac{y_n}{R}$ ، $\sin\beta_n = \frac{n\lambda}{a_{111}}$ حيث

$\lambda = 1,54\,\mathring{A}$ ، $R = 3\,cm$ ،

$n=2$ ، $y_2=2,1\,cm$ فنجد $\beta_2=35^\circ$ و $a_{111}=5,37\,\AA$. ولكن من قيم a ، c نجد القطر الجسمي للخلية الأولية = $10,75\,\AA$. أي أن القطر الجسمي يساوي ضعف الدورية في الاتجاه [111] ـ المنطبق على القطر الجسمي ـ لذلك فان الشبكة هي من النوع الممركز الجسم Bc.

نأخذ Z ـ عدد "الجزيئات" ـ TiO_2 ـ التابعة لخلية أولية ، v ـ حجم الخلية الأولية = a^2c ، والكتلة المولية = $M=48+2\times16$

ولدينا $\rho=\frac{M}{N_{av.}}\frac{Z}{v}$ ومنه نجد $Z\simeq 4$ ، لذلك تنتسب لكل عقدة "جزيئتين".