الفهرس

-المقدمة.....3
1- تمهيد.....4
2- إنتاج الأشعة السينية.....4
3- أشعة التباطؤ.....4
4- الأشعة المميزة.....6
5- امتصاص الأشعة السينية.....8
6- المرشحات..... 10
7- انعراج الأشعة السينية شرط براغ.....11
8- انعراج الأشعة السينية تفسير لاوي.....11
9- سعة الموجة المنعكسة.....13
10- تكافؤ شرطي براغ ولاوي.....13
11- بناء ايوالد.....14
12-عامل البنية.....15
13-عامل التشتت الذري.....15
14-تأثير درجة الحرارة على شدة الأشعة السينية المنعرجة.....17
15-الطرق التجريبية لانعراج الأشعة السينية.....18
15-1) _طريقة لاوي.....18
15-2)_طريقة البلورة الدوارة.....20
15-3)_طريقة المسحوق.....22
16-العوامل الرئيسية المؤثرة على شدة المكاملة.....23
17- دراسة البعد الحبيبي بواسطة الأشعة السينية.....24
18- الأبعاد البلورية.....24
19-الاستنتاج.....28
20- الخاتمة.....29
المراجع.....30

- مقدمة:

تصنف المواد الصلبة عموما إلى صنفين، مواد بلورية كالمعادن، واغلب المركبات الكيماوية والسبائك والمواد الصلبة لا بلورية كالزجاج كما أن بعض المواد السائلة والغازية عند تجمدها تتحول إلى مواد بلورية كالثلج والغازات الخاملة .

والمظهر الخارجي للبلورة يعكس طبيعة التراكيب الداخلية و وحدات البناء الداخلية التي كونت البلورة، وذلك باختلاف أشكال وجوهها أو باختلاف الزوايا بين هذه الوجوه وبالتالي اختلاف تناظرها وتماثلها .كما وان عدم انتظام أشكال البلورات الناتجة عن الظروف العفوية التي حدثت فيها عملية تنميتها أو بنائها يعقَد تعين طبيعة وحداتها الداخلية المكونة لها في الوقت الحاضر تستخدم الأشعة السينية لتحديد الوحدات الداخلية للبلورة. ومنذ اكتشاف حيود الأشعة السينية من البلورات سنة 1912 م أصبحت أي دراسة علمية تعتمد على معلومات عن مواقع الذرات في البلورة يمكن إجراؤها باستخدام علم البلورات حيث أصبح من الممكن تحديد تركيب المواد مثل الجزيئات العضوية و البروتينات، و أصبحت تطبيقات هذا العلم بدون حدود فهو ذو فائدة للفيزيائيين، والكيميائيين، والبيولوجيين، والعاملين في مجال الكيمياء الحيوية. وفي كل مرة كانت المعلومات التي يتم الحصول عليها تزيد من فهم أساسيات علم الفيزياء وغيرها من العلوم.

إن الحكم على كون مادة بلورية لا يكون بسبب مظهرها الخارجي وإنما على مدى انتظام ذراتها و جزيئاتها في ترتيب دوري على المستوى الميكروسكوبي. فالبرهان العلمي عليها قد تأكد عام 1913 م عندما برز علم البلورات مستندا على الأشعة السينية وإمكانياتها. ومن خلال ما أفادتنا به الأشعة السينية سوف نرى كيف تستخدم البيانات المستخرجة من حيود الأشعة السينية للوصول لمعرفة البعد الحبيبي للبلورات.

1- تمهيد:

اكتشفت الأشعة السينية عام 1895م من طرف رونتجن و تأكدت طبيعتها الموجية عام 1913م عندما أجريت أولى تجارب الحيود التي اقترحها (فون لاوا). ثم بينت التجارب اللاحقة أن الأشعة السينية موجات كهرومغناطيسية مستعرضة. يتراوح الطول ألموجي للأشعة السينية بين 0.1A° (و هو الحد الأقصى لأشعة جاما) و 100A°و الحد الأدنى للموجات فوق البنفسجية و يناظر هذا المدى تراوح طاقتها من 0.1kev إلى 100kev. و تحسب طاقة الفوتون من الأشعة السينية (بوحدات الفولت الالكتروني) و الذي طول موجته λ بـالانجستروم A° من العلاقة :

$$E = \frac{12400}{\lambda}$$

$$(1\ ev = 1.6 \times 10^{-19}, E = h\nu = \frac{hc}{\lambda})$$

و يتراوح الطول ألموجي للأشعة السينية المستخدمة في دراسة التركيب البلوري من 1 إلى 2A° .

2-إنتاج الأشعة السينية:

تنتج الأشعة السينية عن تصادم حزمة الالكترونات مع الهدف صلب و ذلك في جهاز خاص معد لهذا الغرض، حيث يتركب أساسا من شعيرة (Filament) تصنع من التنكستنW و هي تطلق الالكترونات عند تسخينها أثناء مرور التيار الكهربائي فيها حسب ظاهرة الإشعاع الكهروحراري. وهذه الالكترونات تعجل تحت تأثير فرق الجهد المسلط بين قطبين كهربائيين السالب (k) المتصل بالشعيرة و الموجب المتصل بالمصعد و حزمة الإلكترونات تركز عند مرورها بقطب معدني اسطواني مركز و المصعد (الهدف) يصنع عادة من معادن ثقيلة (W، Cu، pt.....الخ) و أثناء تصادم الالكترونات مع المصعد فإنها تتحرك فيها مسافة صغيرة جدا و تفقد طاقتها الحركية. أغلب طاقتها (بحدود 97%) تتحول إلى حرارة مما يؤدي إلى ارتفاع كبير في درجة حرارة المصعد، و ذلك يبرد هذا الأخير باستمرار عن طريق الماء أو الزيت الذي يسيل عبر قنوات خاصة.

3-أشعة التباطؤ (استيقاف):

عند تسليط فرق الجهد u (في حدود 50 كيلو فولت) بين المصعد A و المهبط (أو الشعيرة) k فإن كل إلكترون سيكتسب طاقة حركية مقدارها eu عند وصولها إلى المصعد. و عند دخولها إلى داخل مادة المصعد فإنه سيعاني تباطؤا كبيرا و يصبح نتيجة ذلك مصدرا لإشعاع الموجات الكهرومغناطيسية و هذا الإشعاع يسمى إشعاع التباطؤ أو الاستيقاف.

1)- التفسير الكلاسيكي لأشعة التباطؤ:

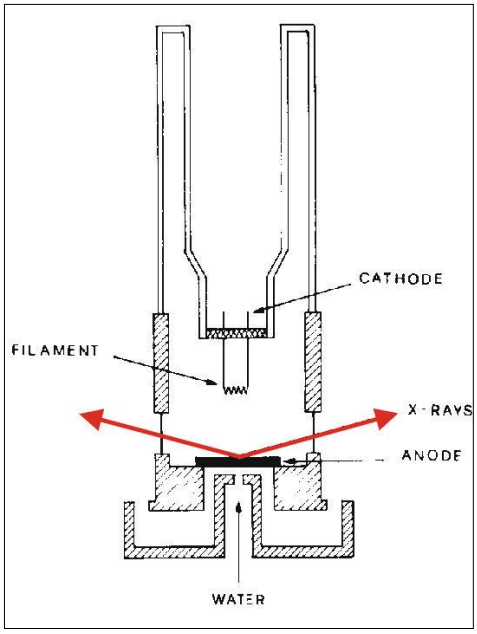
طبقا للنظرية التقليدية فإن الإلكترون المتباطئ يشع موجات كهرومغناطيسية بكل أطوال الأمواج من الصفر حتى اللانهاية و الشكل (2) يبين منحنيات توزيع شدة الأشعة السينية من معدن تنكستن W كهدف مع طول الموجة $(I - \lambda)$ متحصله لقيم مختلفة لفرق الجهد U و يظهر منها تطابقا عاما مع استنتاجات النظرية التقليدية و لكن الاختلاف الواضح عن هذه النظرية هو أن تفسير المنحيات $(I - \lambda)$ لا تبدأ من مبدأ المحاور بل تقطع

المحور λ عند قيم معينة λ_{min} (تعتمد على U) و معنى هذا لا يوجد إشعاع طول موجته λ أقل من λ_{min} (الموافقة لفرق جهد معين) و

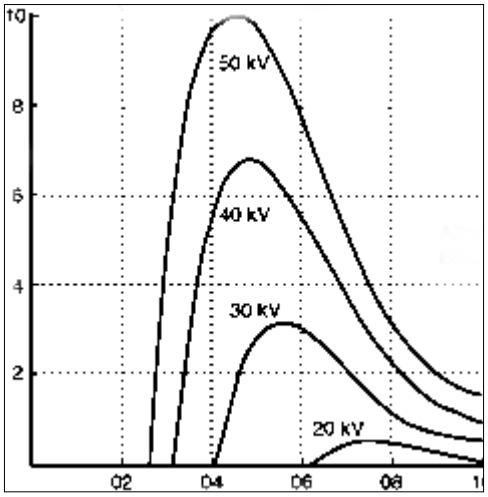
تفسير هذه الحالة يعالج من قبل نظرية الميكانيك الكمي في الإشعاع فإذا كان الإشعاع ناتجا عن الطاقة المفقودة من قبل الإلكترون المتباطئ فإن طاقة الإشعاع $\hbar\omega$ لا يمكن أن تكون أكبر من طاقة الإلكترون الابتدائية eu أي: $\hbar\omega \leq eU$ هذا

فإن تردد الإشعاع بدوره لا يمكن أن يتجاوز القيمة : $\omega_{max} = eU/\hbar$ طول الموجة لا يمكن أن يكون أقل من λ_{min} حيث :

$$\lambda_{min} = \frac{2\pi c}{\omega_{max}} = \left(\frac{2\pi\hbar c}{eU}\right)$$



الشكل (1):توليد الأشعة السينية ....."f"



الشكل(2):شدة الأشعة السينية $(I - \lambda)$....." f "

2)- التفسير العملي لأشعة التباطؤ:

أما النتائج العملية تبين أن كمية إشعاع التباطؤ (I_{ph}) لأشعة السينية (الشدة العظمى) تتوقف على:

1- درجة حرارة الشعيرة، و بالتالي عدد الالكترونات المتحررة منها و بالتالي تيار أنبوبة الأشعة السينية (i).

2- مربع جهد المصعد (U)

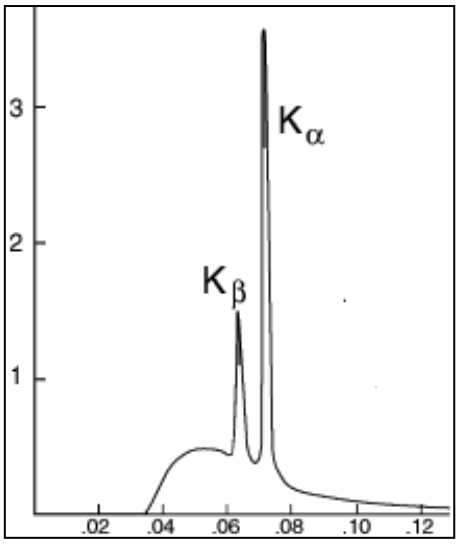
3 - العدد الذري لمادة الهدف (Z)

$$I_{ph} \approx i\,ZU^2$$

4-الأشعة المميزة:

بزيادة شدة الالكترونات القاصفة يمكن أن تظهر أشعة سينية أخرى غير أشعة الاستيقاف ناتجة عن تهيج ذرات مادة المصعد و بالتالي نحصل على طيف متكون من تراكب نوعين من الأشعة السينية.

أشعة التباطؤ التي لا تعتمد على نوع مادة المصعد و طيفها مستمر و يدعى بالخلفية و الأشعة السينية المميزة الصادرة عن ذرات مادة المصعد و طيفها متقطع نتيجة لمصدرها الذري كما هو موضح في الشكل (3).



الشكل(3): الأشعة المميزة ....."f"

4-1)-تفسير الأشعة المميزة:

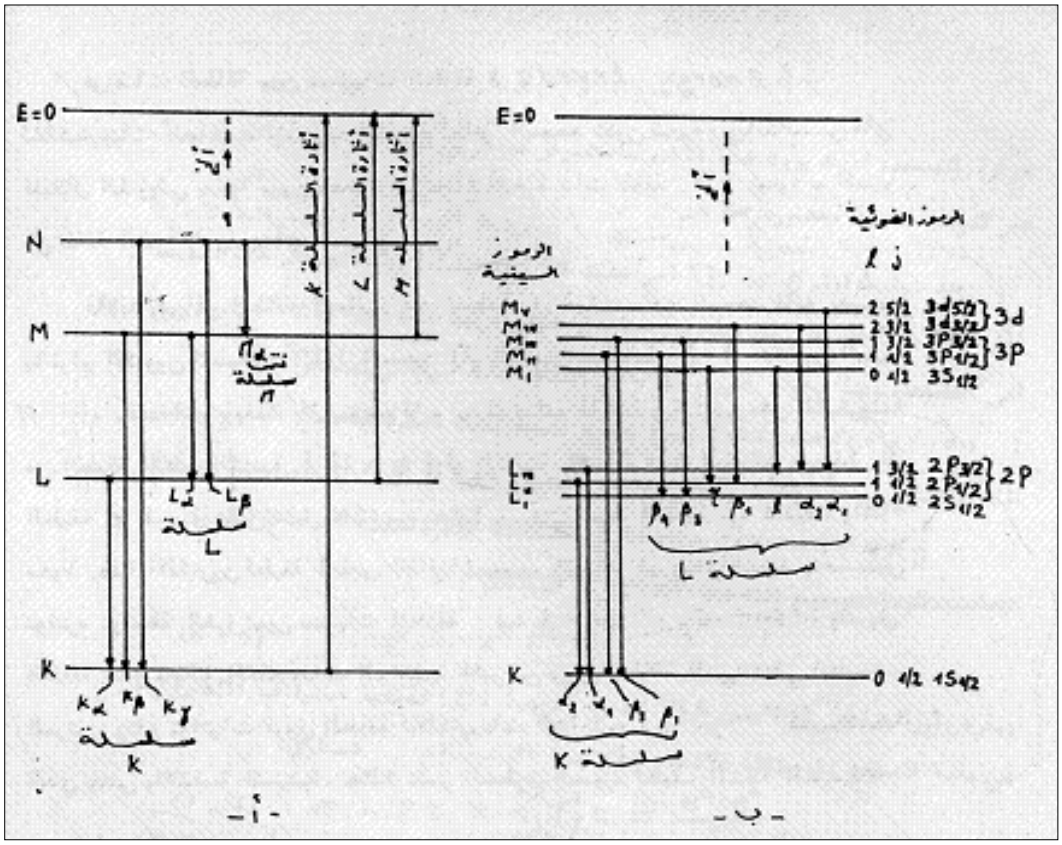
عند إخراج إلكترون المدار الأول (الطبقة k) فإن إلكترونا من الطبقة L أو M أو N ...الخ، سيسقط إلى الطبقة k ليحل مكان هذا الإلكترون، فتصدر بذلك أشعة سينية نسميها سلسلة k عناصرها تسمى حسب مصدر انتقال الإلكترون أي حسب زيادة تتردد الإشعاع بالأحرف α, β, γ... الخ أي أن سلسلة تحتوي على الخطوط الطيفية k_α، k_β، k_γ.....الخ. نفس الشيء يقال عند إخراج إلكترون المدار الثاني (الطبقة L)، حيث تصدر السلسلة L المتكونة من خطوط L_α، L_β، L_γ.....الخ. وهكذا لدينا أيضا السلسلة M (M_α، M_β.....الخ).

ولقد لوحظ تجريبا أن أي خطا طيفي من خطوط سلسلة ما يتكون من خطين دقيقين منفصلين أو أكثر.نسمي هذه بحالة التركيب الدقيق .وهذه الحالة آتية من أن سوي الطاقة M و L.....الخ منقسم في الواقع طاقيا إلى عدة سويات طاقة فرعية كما هو موضح في الشكل(4). فلوصف التركيب الدقيق للأطياف يستخدم مخطط سويات الطاقة الفرعية . يوصف سوي الطاقة الفرعية بقيم الأعداد الكمية (n ، l، j). وعلى هذا الأساس يوصف سوي الطاقة بالرمز الضوئي $3d_{3/2}$ مثلا

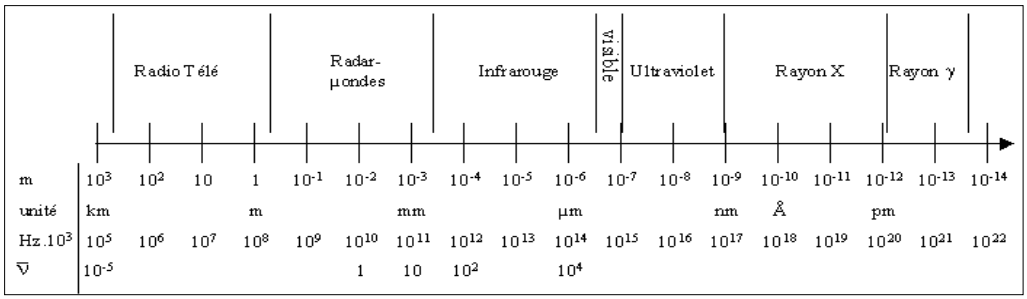
وهو يمثل $n=3 ، l=2 ، j=\frac{3}{2}$ بالرمز M_{IV} المستخدم في دراسة الأشعة السينية وهذا كله موضح في الشكل (4) حيث يتبين أن "الخط" k_{α} مثلا متركب من خطين متجاورين $k_{\alpha 1}$ ، $k_{\alpha 2}$ ناتجان عن الانتقال من L_{III} ، L_{II} الى k على التوالي (طاقة $k_{\alpha 1}$ اكبر من طاقة $k_{\alpha 2}$ بقليل) . والانتقال بين سويات الطاقة الفرعية يتم طبقا لقواعد الاصطفاء

$$\Delta j = 0 ، \pm 1 \quad ، \quad \Delta l = \pm 1 \quad ، \quad \Delta n \neq 0$$

حيث Δ يمثل التغير.والانتقالات المسموح بها أي التي لا تخالف قواعد الاصطفاء تختلف بشدتها عن بعضها البعض حسب احتمالية الانتقال التي استنتجها اينشتين . ونذكر بان عملية إخراج الإلكترون k مثلا من ذرة مادة الهدف يمكن إحداثها ليس فقط باصطدام الكترونات سريعة بل وباصطدام يفوتون أشعة سينية ملائمة من منبع عندئذ تسمى الأشعة السينية المتولدة عن ذرة الهدف بالأشعة المتفلورة . وأخيرا نذكر بان الأشعة السينية كأشعة كهرومغناطيسية يمكن أن تدرج في الطيف العام للأشعة الكهرومغناطيسية الموضحة في الشكل (5)



الشكل (4) :الانتقالات المسموحة حسب قواعد الاصطفاء ....."a"



الشكل (5) :أطياف الأشعة الكهرومغناطيسية....."a"

5_امتصاص الأشعة السينية:

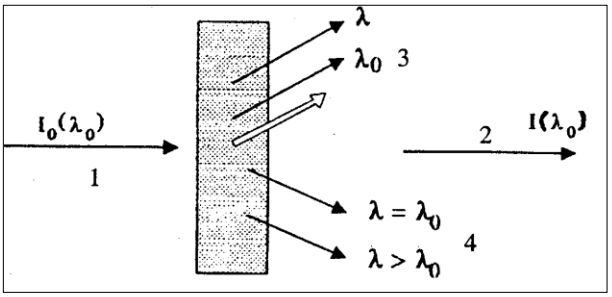
الشكل (6) يوضح مرور حزمة متوازية لأشعة سينية شدتها I_0 خلال مادة ممتصة لها سمكها منتظم أو كثفتها ρ غم/سم^3.

بعد مرور الأشعة السينية خلال الممتص فإن شدتها تنقص نحو القيمة I ($I < I_0$) و تحقق العلاقة التالية:

$$\frac{dI}{I} = -\mu\, dt \quad \text{.....(1)}$$

أي أن النقصان بشدة الأشعة خلال مرورها بسمك dot من المادة الممتصة يتناسب مع شدة I و السمك dot ثابت السمك μ يسمى المعامل الخطي للامتصاص وحداته (cm^{-1}) و الإشارة السالبة تبين أن الشدة في حالة تناقص خلال مرور الأشعة بالمادة الممتصة لو كانت μ غير معتمدة على t فإن تكامل المعادلة (1) من $_0$ إلى I عند تغير السمك من الصفر إلى t هو:

$$I = I_0 e^{-\mu t} \quad \text{.....(2)}$$



الشكل (6):امتصاص الأشعة السينية....."b"

و عامل الامتصاص يحسب عمليا من المعادلة (2) و نميز أربع صيغ لمعامل الامتصاص

5-1/ معامل الامتصاص الخطي μ_m :

يعطي مقدار الامتصاص لوحدة المساحات لوحدة السمك من المادة الممتصة :

$$\mu = \frac{\ln(I_0/I)}{t}\,[cm^{-1}] \quad \text{.....(3)}$$

5-2/ المعامل الكتلي للامتصاص μ_m:

يعطي مقدار الامتصاص لوحدة المساحة لوحدة الكتلة المادة الممتصة :

$$\mu_m = \mu/\rho \quad \text{.....(4)}$$

3-5/ المعامل الذري للامتصاص μ_a:

مقدار الامتصاص لوحدة المساحة لذرة واحدة:

$$\mu_a = \frac{\mu}{\rho}\frac{A}{N_a} = \frac{\mu}{n}\frac{[cm^2]}{[atom]} \quad \text{.....(5)}$$

حيث :

A: الكتلة المولية *g/ml*

N_a: عدد أفوقادرو = $6.02 \times 10^{23}\, g/atom$

n: عدد الذرات لكل عزام

4-5/ المعامل المولي للامتصاص μ_{mol}:

يعطي مقدار الامتصاص لوحدة المساحة لمول واحد من المادة الممتصة:

$$\mu_{mol} = \frac{\mu}{\rho} A \frac{[cm^2]}{[mol]} \quad \text{.....(6)}$$

و المعادلات الأربع مرتبطة مع بعضها بالعلاقة التالية :

$$\mu = \mu_m \rho = \mu_a \rho \left(\frac{N_a}{V}\right) = \mu_{mol}\rho/A \quad \text{.....(7)}$$

و من هذه المعاملات يستعمل μ_m بكثرة و خاصية ذرية و يعتمد فقط على طول موجة الأشعة و على العدد الذري للمادة الممتصة بعض النظر عن طور تلك المادة. فامتصاص خليط الأكسجين و الهيدروجين أو الماء أو الثلج متساوي في كل الحالات. لهذا السبب يستخدم μ_m و ليس μ و معامل الامتصاص μ_m للمركب أو السائل أو الخليط من العناصر A، B، C ... الخ يعطي العلاقة :

$$\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{ABC} = w_A\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_A + w_B\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_B + \cdots = \sum_k w_k \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_k \quad \text{.....(8)}$$

و على فرض استعمال μ_m تأخذ المعادلة (2) الشكل التالي :

$$I = I_0 e^{-\left(\frac{\mu}{\rho}\right)\rho t} = I_0 e^{-\mu_m \rho t} \quad \text{.....(9)}$$

حيث ρt يقاس بوحدة g/cm^2 و نرمز بالرمز $\mu_{n,z}$ أو $\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_z$ ليشير إلى معامل الامتصاص لعنصر معين Z و حيث أن $\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_z$ يعتمد على طول الموجة الأشعة السينية، لذلك يستخدم رمز آخر هو: $\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{z,\lambda}$ أو $\mu_{m,z,\lambda}$ للإشارة إلى معامل الكتلي للامتصاص عنصر معين عدده الذري Z للأشعة السينية ذات الطول λ.

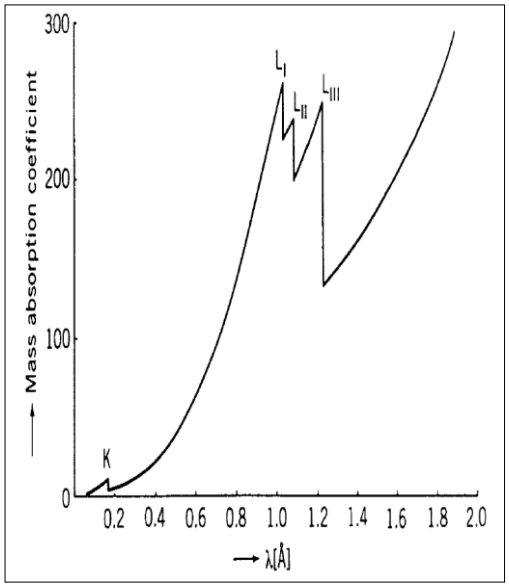
و لمعرفة علاقة $\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{z,\lambda}$ كدالة لطول الموجة λ ينبغي مسبقا معرفة سبب نقصان شدة الأشعة السينية عند مرورها خلال المادة فأشعة الحزمة المار خلال المادة تفقد جزءا من شدتها للأسباب الأساسية التالية:

1- حدوث الظاهرة الكهروضوئية.

2- حدوث ظاهرة أوكر.

3- حدوث ظاهرة استطارة الأشعة السينية و خروجها من الحزمة.

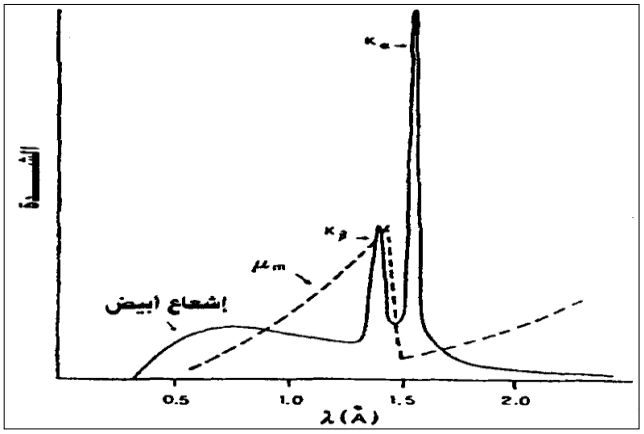
لهذا عموما نقول بأن منحني علاقة $\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{z,\lambda}$ مع $\boldsymbol{\lambda}$ يكون معقدا و يحتوي على ما يسمى بحافات الامتصاص. كما هو موضح في الشكل (7) و على العموم يلاحظ نقصان الامتصاص بنقصان طول الموجة. حافات الامتصاص تبين وصول طاقة فوتون الأشعة السينية إلى حد بإمكانه أن يطلق إلكترون k لذلك نسمي الحافة k.



الشكل (7) : المنحنى لوغاريتمي الإحداثيات....."f"

6 _ المرشحات:

تستخدم ظاهرة امتصاص الأشعة السينية ووجود حافات الامتصاص بصناعة المرشحات التي تهدف إلى فصل خط سيني معين من الخطوط السينية المجاورة وسنتطرق إلى المرشح البسيط نسعى لدراسة خط الأشعة السينية$\boldsymbol{\lambda_2}$ و ذلك عن طريق ترشيحه من الخط $\boldsymbol{\lambda_1}$ القريب منه.عندئذ نمرر حزمة الأشعة السينية المحتوية على الخطين $\boldsymbol{\lambda_1}$ و $\boldsymbol{\lambda_2}$ خلال صفيحة مرشحة مادتها هو عنصر له حافة الامتصاص k أقل بقليل من الخط المطلوب دراسة $\boldsymbol{\lambda_2}$ فعند مرور الحزمة بالمرشحة أعلاه فإنها تقوم بامتصاص الخط $\boldsymbol{\lambda_1}$ تاركة الخط $\boldsymbol{\lambda_2}$ يمر بدون امتصاص.



الشكل(8): ترشيح الأشعة السينية....."b"

7-انعراج الأشعة السينية شرط براغ :

اكتشف براغ في عام 1913 م بأن حزمة الأشعة السينية الوحيدة اللون (أي ذات طول موجي معين λ) الساقطة باتجاه معين على بلورة معينة، تشتت بحيث تظهر لوحة التشتت هذه نهايات عظمى لشدة الأشعة السينية المشتتة أو المتعرجة.و لظهور هذه النهايات العظمى بحيث تحقق شرط براغ و لتفسير ملاحظاته العملية افترض براغ احتواء البلورات على مستويات ذرية متوازية فاصلتها d. و ظروف حدوث النهاية العظمى لشدة الأشعة السينية تستوجب مايلي:

- ✓ تنعكس الأشعة السينية عن المستويات الذرية المتوازية حسب قوانين الانعكاس في المرايا أي زاوية السقوط تساوي زاوية الانعكاس.
- ✓ لا تنعكس كل حزمة الساقطة عن أول مستوى ذري عاكس بل ينعكس جزءا فقط من شدة الحزمة الساقطة و الجزء المتبقي يتوغل أكثر داخل البلورة لينعكس جزء آخر منه من المستوى العاكس الثاني الموازي للأول. و هكذا لذلك فإن الأشعة السينية ستخترق لتصل حتى طبقات عميقة داخل البلورة المتوازية.
- ✓ انعكاس أشعة المستويات المتوازية يتداخل ليعطي لنا تداخلا بناء.

ولكي يكون هذا التداخل بناءا يجب أن يساوي فرق المسار Δ إلى أعداد كاملة لطول موجة الأشعة الساقطة λ أي أن :

$$\mathbf{2d\ sin\theta = n\lambda} \quad \text{.....(10).}$$

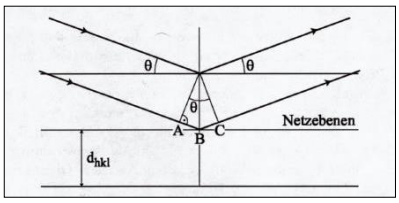
n : عدد صحيح يسمى رتبة الانعكاس

المعادلة (10) تسمى بشرط براغ عند سقوط الأشعة X على بلورة ما لا يحدث الانعكاس إلا إذا تحقق هذا الشرط فنلاحظ من شرط براغ:

1- الطول ألموجي للأشعة السينية أقل أو يساوي من $2d$

2- n رتبة الانعكاس تعتمد على الزاوية θ_B

3- عند سقوط أشعة X بيضاء على بلورة تقوم المستويات البلورية بانتقاء أطوال الأمواج التي تحقق شرط براغ و بالتالي نحصل على مجموعة كبيرة من الانعكاسات.



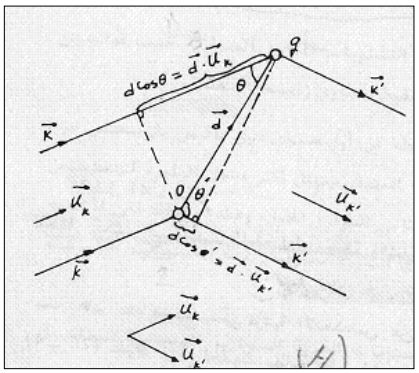
الشكل (9): تفسير شرط براغ....."d"

8-انعراج الأشعة السينية تفسير لاوي(1921م):

عند سقوط الأشعة السينية على عقد الشبكة البلورية التي تسمى هنا مراكز التشتت فإنها تمتص و يعاد إشعاعها في جميع الاتجاهات فتتداخل هذه الإشعاعات مع بعضها فإذا كان التداخل الناشئ من هذه الإشعاعات المتشتتة من كل عقدة في البلورة تداخلا بناء عندئذ تظهر هذه على لوحة الانعراج كقمة تسميها انعكاس براغي.

ندرس أولا مركزين للتشتت (q, o) المسافة بينهما d تكتب شعاعيا $\vec{d}$ الشكل (10) شعاع الموجة السينية الساقطة $\vec{k'} = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{\mu}_{k'}$ حيث $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{\mu}_k$ وحدة الشعاع $\vec{\mu}_k$ و نفرض أن $\vec{k}$ هو شعاع الموجة المنعكسة في اتجاه معين و هو يساوي:

حيث $\vec{\mu}_{k'}$ وحدة الشعاع $\vec{k'}$



الشكل(10):تفسير لاوي لانعراج الأشعة السينية....."a"

وشرط تداخل البناء بين موجتين يعتمد على فرق المسار Δ بينهما، و من الشكل (10) يتبين أن الفرق المسار بين الموجتين المنعكستين في الاتجاه $\vec{\mu}_k$ هو:

$$\Delta = \left|\vec{d}\overrightarrow{\mu_k} - \vec{d}\overrightarrow{\mu_{k'}}\right| = \vec{d}\left|\overrightarrow{\mu_k} - \overrightarrow{\mu_{k'}}\right| \quad \ldots\ldots(11)$$

و فرق الطور يساوي:

$$\varphi = \frac{2\pi}{\lambda}\Delta$$

و شرط التداخل البناء هو أن يكون فرق المسار عدداً صحيحاً لطول الموجة:

$$\vec{d}\cdot\Delta\vec{k} = 2\pi n \quad \ldots\ldots(12)$$

حيث n عدد صحيح.

و لطالما أن عقد الشبكة مزاحة عن بعضها البعض بالأشعة R لذلك يمكن تعميم المعادلة (11) إلى :

$$\vec{R}\cdot\Delta\vec{k} = 2\pi n \quad \ldots\ldots(13)$$

أن الشعاع $\Delta\vec{k}$ يحقق الشرط إذا تحققت في نفس الوقت المعادلات الثلاثة التالية:

$$\begin{cases} \overrightarrow{a_1}\Delta\vec{k} = 2\pi h \\ \overrightarrow{a_2}\Delta\vec{k} = 2\pi k \\ \overrightarrow{a_3}\Delta\vec{k} = 2\pi l \end{cases} \quad \ldots\ldots(14)$$

و هي معادلات لاوي للانعراج حيث l, k, h هي أعداد صحيحة تحقق المعادلة

$$h n_1 + k n_2 + l n_3 = n \quad \ldots\ldots(15)$$

و n_1, n_2, n_3 تحقق المعادلة

$$\vec{R} = \overrightarrow{a_1}n_1 + \overrightarrow{a_2}n_2 + \overrightarrow{a_3}n_3 \quad \ldots\ldots(16)$$

و شرط التداخل يمكن أن يكتب بصورة التالية:

$$e^{i(\vec{R}\cdot\Delta\vec{k})} = 1 \quad \ldots\ldots(17)$$

لأن $e^{i2\pi m} = 1$ و بمقارنة المعادلة (17) و $e^{i\vec{G}\cdot\vec{R}} = 1$ (المحددة لأشعة الأساسية لشبكة المعكوسة) يتضح أن شرط حدوث التداخل البناء (حل معادلة لاوي) هو:

$$\Delta\vec{k} = \vec{G} \qquad \vec{G} = \vec{k'} - \vec{k} \quad \text{.....(18)}$$

حيث $\vec{G} = \vec{b_1} + k\vec{b_2} + l\vec{b_3}$

وبما أن الشعاع $\vec{G}(hkl)$ عمودي على مستوى (h k l) لذلك فإن الأعداد الصحيحة (h k l) في معادلات لاوي هي بالذات قرائن ملر للمستويات البلورية

9-سعة الموجة المنعكسة :

انعراج الأشعة عند النقطة . مركز المحاور في النقطة p هي:

$$\text{"O"} \quad \varepsilon_x = \varepsilon_0 e^{i\omega t}$$

وتعطى الموجة المنعرجة عند العقدة g في نفس النقطة f بالعلاقة

$$\varepsilon_x = \varepsilon_0 e^{i(\omega t+\varphi)} = \varepsilon_0 e^{i\omega t} e^{i\vec{R}\cdot\Delta\vec{k}} \quad \text{حيث:} \quad \varphi = \vec{R}\cdot\Delta\vec{k}$$

وبالتالي الموجة الكلية المنعرجة عن جميع العقد الشبكة في النقطة

$$E_{sc} = \sum \varepsilon_{sc} = \varepsilon_0 e^{i\omega t} \sum_{n_1,n_2,n_3} e^{i\vec{R}\cdot\Delta\vec{k}} \quad \text{.....(19)}$$

ويتم الجمع على كل عقدة الشبكة المحددة بالشعاع $\vec{R}$ وسعة الموجة الكلية

$$(A_{\Delta k}) = \sum_{n_1,n_2,n_3} e^{i\vec{R}\cdot\Delta\vec{k}} \quad \text{.....(20)}$$

وتكون السعة العظمة إذا كان:

$$A_G = \sum_{n_1=0}^{M-1}\sum_{n_2=0}^{M-1}\sum_{n_3=0}^{M-1} e^{i\vec{G}\cdot\vec{R}} = M^3 (A_{\Delta k})_{max} = A_G \quad ,$$

$$|A_G| = M^3 \quad \text{.....(21)}$$

لأنه لدينا M^3 من العقد أو نقول لدينا

M^3 خلية أساسية في الشبكة وهكذا فإن القيمة العظمى لشدة الموجات المتداخلة عندP التي عندها يحدث التداخل البناء:

$$I = A_G A_G^* = M^6 \quad \text{.....(22)}$$

10- تكافؤ شرطي براغ لاوي:

يمكن استنتاج تكافؤ تفسيرات لانعراج الأشعة السينية في البلورات من علاقة الشعاع الأساسي للشبكة المعكوسة ومجموعة المستويات البلورية.

$$\vec{G} = \vec{k'} - \vec{k} \Rightarrow \Delta\vec{k} = \vec{G}(h\,k\,l)$$

حيث: $k = k'$ ونعلم أن $G \perp (h\,k\,l)$

من الشكل(11) يمكن استنتاج أن الشعاعين $\vec{k}$ و $\vec{k'}$ يشكلان نفس الزاوية مع المستوى *(h k l)* العمودي على الشعاع $\vec{G}_{(h\,k\,l)}$ لهذا يمكن النظر إلى الانعراج بطريقة لاوي كعملية إنعكاس المرآة عن المستويات البلورية المتوازية العمودية على$G(h\,k\,l)$ مثل هذا الانعكاس افترضه براغ .

من الشكل (11) نجد أن:

$$k = k' = \frac{2\pi}{\lambda}\frac{1}{2}\vec{G} = k' sin\theta$$

$$\Rightarrow \vec{G} = 2k' sin\theta \Rightarrow \vec{G} = \frac{4\pi}{\lambda} sin\theta$$

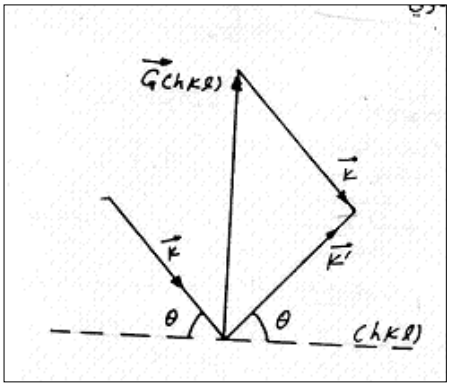
ونعلم أن:

$$G = nG_{hkl} = \frac{n2\pi}{d_{hkl}}$$

$$\Rightarrow \frac{n2\pi}{d_{hkl}} = \frac{4\pi}{\lambda} sin\theta$$

$$\Rightarrow 2d_{hkl}\, sin\theta = n\lambda$$

ومنه نستنتج أن فرضيات براغ ومعادلاته موجودة ضمنيا في شروط لاوي الانعراج

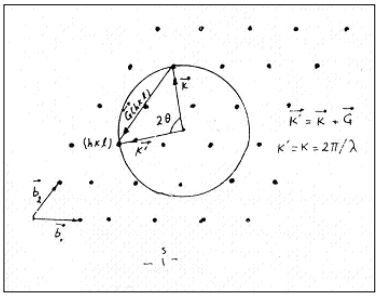


الشكل (11): تفسير شرط براغ و لاوي....."a"

11- بناء ايوالد:

عمل ايوالد بناءا هندسيا يستخدم في تحليل النتائج العملية حيث نتبع الخطوات التالية:

- ✓ نرسم الشبكة المعكوسة .
- ✓ نأخذ أي نقطة $''O''$
- ✓ نجعل O رأس الشعاع $\vec{k}$ المعرف المقدار و الاتجاه.
- ✓ نعتبر ذنب الشعاع $\vec{k}$ مركز الكرة ايوالد نصف قطرها $R = \frac{2\pi}{\lambda}$ عند حدوث الانعراج يجب ان تمر كرة ايوالد على الأقل بعقدة واحدة من عقد الشبكة المعكوسة (عدا $''O''$) تعليم هذه العقدة هو نفسه تعليم بقعة الانعراج على لوحة الانعراج وهي تبين معاملات ميلر بالمستويات العاكسة .



الشكل (12):يمثل بناء ايوالد....."a"

12- عامل بنيـــــــــــة:

نأخذ عقدة ما من عقد الشبكة ''O'' ونعتبرها مبدأ لقياس أشعة الانسحاب أي نعتن موقع أي عقدة أخرى g بالشعاع $\vec{k}$ حيث يقم الانعراج عن عقد الشبكة بالشكل التالي:

$$(A_{\Delta k}) = \sum_{n_1,n_2,n_3} e^{i\vec{R}\cdot\Delta\vec{k}} \quad \text{.....(23)}$$

والعقدة g بدورها تعتبر مبدأ لقياس أشعة موقع ذرات القاعدة (المستعاض عنها بالعقدة g) أو $\vec{r_0}$ حيث j بتغير من1 إلى S (عدد الذرات التابعة لأية عقدة من عقد شبكة براغي) وعند إدخال التشتت عن ذرات التركيب البلوري تصبح المعادلة (23) من الشكل:

$$(A_{\Delta k}) = \sum_{n_1,n_2,n_3} \sum_{j=0}^{s} f_j e^{i(\vec{k}+\vec{r_j})\Delta\vec{k}} \quad \text{.....(24)}$$

حيث f_j يسمى عامل التشتت الذري ويعتمد على خواص التركيب الالكتروني للذرة المتشتتة فسعة الموجة المنعرجة في المعادلة (24) آتية عن جميع الموجات المستطارة عن كل ذرات التركيب البلوري

$$(A_{\Delta k}) = \left(\sum_{n_1,n_2,n_3} e^{i\vec{R}\Delta\vec{k}}\right)\left(\sum_{j=1}^{s} f_j e^{i(\vec{r_j}-\Delta\vec{k})}\right) \quad \text{.....(25)}$$

والسعة العضمة للموجة المنعرجة (إنعكاس براغ) تحدث عندما $\Delta\vec{k} = \vec{G}$ وبإستعمال المعادلة (20) نجد أن:

$$A_G = M^3 F_G \quad \text{.....(26)}$$

الكمية A_G والتي هي:

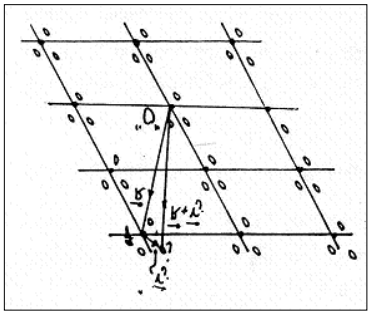
$$F_G = \left(\sum_{j=1}^{s} f_j e^{i(\vec{r_j}-\Delta\vec{k})}\right) \quad \text{.....(27)}$$

تسمى بعامل البنية حيث: $\vec{G} = h\vec{b_1} + k\vec{b_2} + l\vec{b_3}$ $\qquad$ $\vec{r_j} = x_j\vec{a_1} + y_j\vec{a_2} + z_j\vec{a_3}$

حيث x_j, y_j, z_j إحداثيات الذرة بالنسبة للعقدة المنتهية لها و تصبح F من الشكل:

$$F_G = \left(\sum_{j=1}^{s} f_j e^{i2\pi(h x_j + b y_j + l z_j)}\right) \quad \text{.....(28)}$$

وهذه العلاقة تتعامل مع المحاور الأساسية للشبكة وفي حالت الشبكات cFc و bcc فيمكن أن تعتبر المحاور الأساسية منطبقة على المحاور الكارتيزية (أحرف الشبكة) عندما تعتبر الشبكة المعقدة كشبه بسيطة + قواعد عقدية



الشكل (13): يمثل عامل البنية ....."a"

13-عامل التشتت الذري:

f_j عامل التشتت الذري يعتمد هذا العامل على نوع الذرة المشتتة وكذالك طول الموجة المشتتة و زاوية التشتت

لما زاوية $\theta = 0$

معامل التشتت يصبح النسبة بين التشتت الحادث عن ذرة و التشتت الحادث عن إلكترون واحد

$$f_j = \frac{\text{تشتت الذرة}}{\text{تشتت الكترون واحد}} \quad \text{.....(29)}$$

أما إذا كانت الزاوية $\theta \neq 0$ فإن $f_j < Z$

تعريف f_j بالنظرية التقليدية :

لدينا: $$f_j(\vec{G}) = \int_v^{\infty} f(\vec{r}) e^{i\vec{G}\vec{r}} dv$$

نأخذ حالة ذرات بسيطة معناه أن التوزيع متناظر $f(\vec{r}) = f(r)$

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

$$= 2\pi \int_{r=0}^{\infty} f(r)\, r^2 \, dr \cdot \frac{e^{i\vec{G}\vec{r}} - e^{-i\vec{G}\vec{r}}}{2iGr}$$

مع العلم أن $$\sin(\vec{G}\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{G}\vec{r}} - e^{-i\vec{G}\vec{r}}}{2iGr}$$

$$f_j = 4\pi \int_{\gamma=0}^{\infty} f(r)\, r^2 \, dr \cdot \frac{\sin(\vec{G}\vec{r})}{2iGr}$$

ونعلم أنه: $$\vec{k'} = \vec{k} + \vec{G} \qquad ,k'^2 = k^2 + G^2 + 2\vec{k}\vec{G}$$

$$k'^2 = k^2$$

$$G + 2kG\sin\theta = 0$$

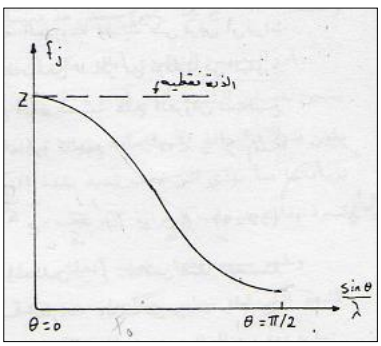
$$|\vec{G}| = 2k\sin\theta = \frac{4\pi}{\lambda}\sin\theta$$

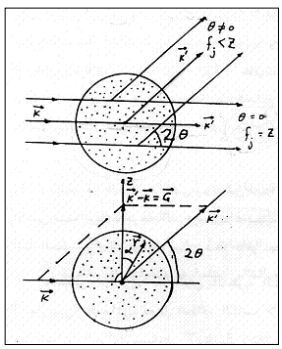
$$f_j\left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right) = \int_{r=0}^{\infty} 4\pi f(r)\, r^2 \, dr \cdot \frac{\sin\left(4\pi r \cdot \frac{\sin\theta}{\lambda}\right)}{4\pi r \cdot \frac{\sin\theta}{\lambda}} \quad \text{.....(30)}$$

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

$$f_j = Z$$

الشكل(14): يمثل عامل التشتت الذري ....."a"





14-تأثير درجة الحرارة على شدة الأشعة السينية المنعرجة :

لدينا من خلال سعة الموجة المنعرجة

$$A_G = \sum_{n_1,n_2,n_3}^{M-1} f_j \; e^{i(\vec{R}+\vec{r_j}).\vec{G}}$$

ومن خلال تأثير التذبذب الحراري:

$$\vec{r_j} \rightarrow \vec{r'_j} = \vec{r_j} + \vec{u}(t)$$

ومنه تصبح:

$$A_G = \sum_{n_1,n_2,n_3}^{M-1} f_j \; e^{i\vec{G}\vec{R}} \cdot e^{i\vec{r_j}\vec{G}} \cdot e^{i\vec{u_j}\vec{G}} \quad \text{.....(31)}$$

$$A_G = M^3 \sum_{j=1}^{M-1} f_j \; \cdot e^{i\vec{r_j}\vec{G}} \cdot e^{i\vec{u_j}\vec{G}}$$

والظروف العملية تأخذ معدل

$$< e^{i\vec{u}\vec{G}} >$$

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

$$< e^{i\vec{u_j}\vec{G}} > = 1 + < i\,\vec{u}\vec{G} > - < \frac{1}{2}(\vec{u}\vec{G})^2 >$$

بما أن الحركة التذبذبية غوغائية تستجوب أن يكون مجموع الساقط $\vec{u_j}$ على $\vec{G}$ معدوما وبالتالي:

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

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

1/3 : نتيجة لدرجة الحرية مثلا: $T = \frac{3}{2}KT$ في الحركة الحرارية

$$e^{i\vec{u}\vec{G}} = \frac{1}{6} < (u_j)^2 > G^2 \approx e^{\frac{1}{6}<(u_j)^2>G^2}$$

$$A_G = M^3 \sum_{j=1}^{s} f_j \; \cdot e^{i\vec{r_j}\vec{G}} \cdot e^{\frac{1}{6}<(u_j)^2>G^2}$$

$e^{\frac{1}{2}<(u_j)^2>G^2}$:حد ديباي_ والر الحراري وهو غالبا يستنتج عمليا $\vec{u_j}$ يعتمد على درجة الحرارة وموقع الذرة ونوعها ويمكن وضع حد ديباي-والر الحراري خارج إثارة الجذر عندها:

1 كل الذرات البلورة من نفس النوع.

2 التذبذب الذري لا يعتمد على موقع الذرة في البلورة.

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

$$< u^2 > = < u_j^2 >$$

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

حيث: I_0 نتصوره الشدة في الصفر المطلق (حيث الحركة الحرارية المهملة)

$$< u > = \frac{3}{2} k_B T = \frac{1}{2} m \, \omega^2$$

حيث: $m\ \omega^2$:هو ثابت قوة المتذبذب

m:كتلة الذرة المتذبذبة

ω:تردد التذبذب

k_B:ثابت بولتزمان

$$< u^2 > = \frac{3k_BT}{m\omega^2}$$

$$M = \frac{1}{6}\frac{3k_BT}{m\omega^2}\left(4\pi.\frac{sin\theta}{\lambda}\right)^2 \text{.....(32)}$$

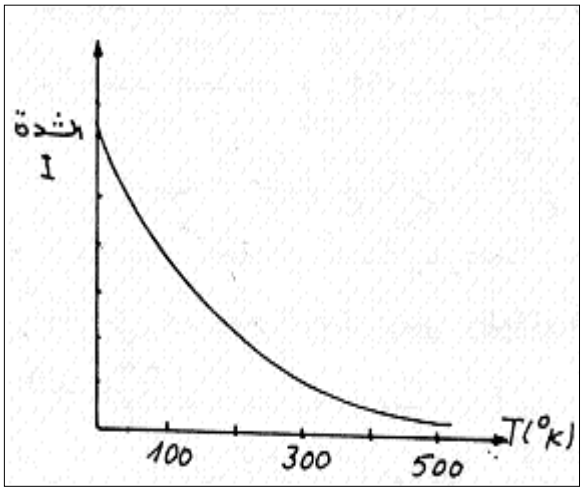
من المعادلة (32)

1- زيادة درجة الحرارة من شدة انعكاس براغ

2- زيادة درجة الحرارة تنقص من شدة الانعكاس براغ بزاوية θ قليلة اقل مما هوا عليه بزوايا θ صغيرة

3- تركيز انعكاس براغ لا يتغير بتغير درجة الحرارة وإنما بتغير درجة الإضاءة

زيادة درجة الحرارة تؤدي إلى زيادة نسبة تشتت الأشعة السينية الغير المرنة و التي فيها يكون $\lambda \neq' \lambda \quad \vec{k} \neq \vec{k'}$ و هذا يؤدي إلى نقصان بعدد الفوتونات التي تسجل خط طيفي معين أما الفوتونات المصدمة تصادما غير مرنا تؤدي إلى زيادة الخلية (Bg) back grand



الشكل (17): تأثير درجة الحرارة على شدة الانعكاس...."a"

15-الطرق التجريبية لانعراج الأشعة السينية :

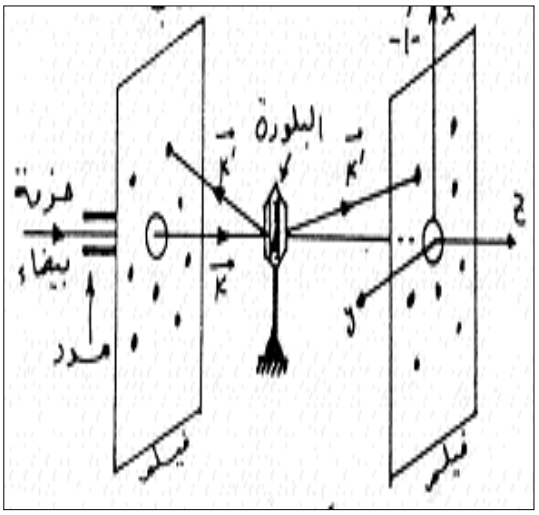
ندرس الآن أهم الطرق التجريبية التي تدرس تركيب البلورات بواسطة انعراج الأشعة السينية و من بين هذه الطرق

15-1)-طريقة لاوي:

من خلال مسداد صغير لاختبار حزمة ضيقة متوازنة تسقط حزمة من الأشعة السينية على بلورة أحادية صغيرة لا تزيد أبعادها عن 1mm هذه البلورة مثبتة بحيث يكون لها توجه ثابت بالنسبة للحزمة الساقطة $\vec{K}$، يثبت فيلمان مستويان أمام العينة (البلورة) -الفيلم أ – و خلفها –الفيلم ب- و بصورة عمودية على الحزمة الساقطة و على بعد حوالي D =5cm من العينة كما في الشكل (18) و يكون الفيلم (ب) مثقوب لمرور الحزمة الساقطة . يسجل الفيلم (أ) الأشعة المنعرجة إلى الأمام (النافذة) و يسجل الفيلم (ب) الأشعة المنعرجة إلى الخلف (الراجعة) ستختار المستويات الطول المرجعي الذي تعكسه مع تحقيق شرط براغ

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

طيف الانعراج يمثل بقع أ و لطخات على الفيلم .طريقة لاوي تكون ملائمة لتحديد تناظر و اتجاه البلورات المعروفة التركيب كما تستخدم التشوهات و العيوب التي تنشا عند المعالجة الميكانيكية أو الحرارية للبلورات .



الشكل (18): تمثيل طريقة لاوي ....."a"

ـ تفسير مخطط لاوي بطريقة بناء ايوالد:

بالإمكان تحليل و تأشير بقع انعراج لاوي على أساس بناء ايوالد. نفرض أن طيف الأشعة الساقطة البيضاء في الحدود من λ_1 إلى λ_2.

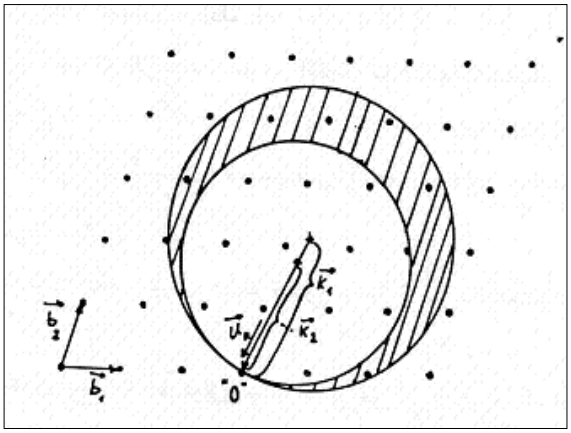
نرسم الشبكة المعكوسة للبلورة المدروسة، و نرسم كرتا ايوالد المناظرتان لأطوال الأمواج الساقطة λ_1 و λ_2 حيث تتماسان في نقطة البداية "0" . اتجاه الأشعة الساقطة $\overrightarrow{U_K}$

إذن

$$(K_1>K_2) \quad \overrightarrow{K_1} = \frac{2\pi}{\lambda 1}\overrightarrow{U_K}\ ,\ \overrightarrow{K_2} = \frac{2\pi}{\lambda 2}\overrightarrow{U_K}$$

و هذا موضح في الشكل (19)عندئذ سوف تلاحظ عمليا انعكاسات براغ التي تناظر كل عقد الشبكة المعكوسة التي تقع على و بين الكرتين و التي عددها يتحدد بالمدى $(K_1 - K_2)$ و طبيعة الشبكة البلورية .

الشكل (19): يمثل تفسير طريقة لاوي ببناء ايوالد....."a"



-الملاحظات العملية:

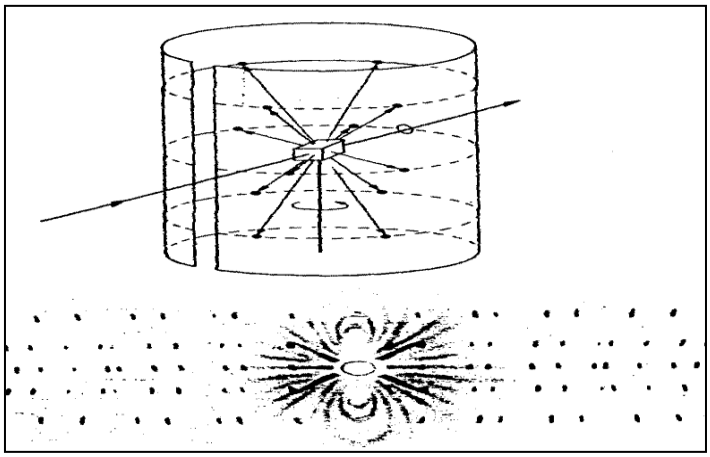
- ✓ تتركب البقع (بقع لوحة الانعراج) على هيئة قطوع ناقصة بالنسبة للأشعة النافذة، كل قطع ناقص يمثل انعكاسات منطقة واحدة، أما الأشعة الراجعة فتشكل قطوعا زائدة .
- ✓ إذا اتجهت الأشعة الساقطة على البلورة باتجاه محور بلوري ذي تناظر n فينعكس هذا التناظر و درجته تظهر في لوحة الانعراج.

2-15)-طريقة البلورة الدوارة:

في هذه الطريقة تحمل البلورة الأحادية (ذات الأبعاد الصغيرة التي لا تزيد عن mm1)على محور ثابت يبرم حول نفسه بسرعة زاوية ω المحور يكون عموديا على حزمة الأشعة السينية الساقطة الأحادية اللون λ.و توضح البلورة عادة بحيث أن احد محاورها البلورية (وليكن $\overrightarrow{a_3}$) موازيا لمحو الدوران و صورة الانفراج تستلم على فيلم حساس مثبت على السطح الداخلي لحجرة الانفراج الاسطوانية التي محورها

هو نفس محور دوران العينة كما في الشكل(20).و هذه الطريقة تستخدم في حساب ثوابت الشبكة c,b,a بحيث يوضح المحور المراد حساب ثابتة باتجاه محور الدوران فمثلا بحساب c باتجاه محور الدوران .$\overrightarrow{a_3}$ يكو ن

$n\lambda = 2d\sin\theta$ و بالتدوير تتغير زاوية السقوط حتى يتحقق شرط براغ



الشكل (20): طريقة البلورة الدوارة....."b"

و شروط الانعراج:

$$\overrightarrow{a_1}\Delta\vec{K} = 2\pi h$$

$$\overrightarrow{a_2}\Delta\vec{K} = 2\pi k$$

$$\overrightarrow{a_3}\Delta\vec{K} = 2\pi \ell$$

و منه

$$\overrightarrow{a_3}\left(\vec{K} - \overrightarrow{K'}\right) = 2\pi\ell$$

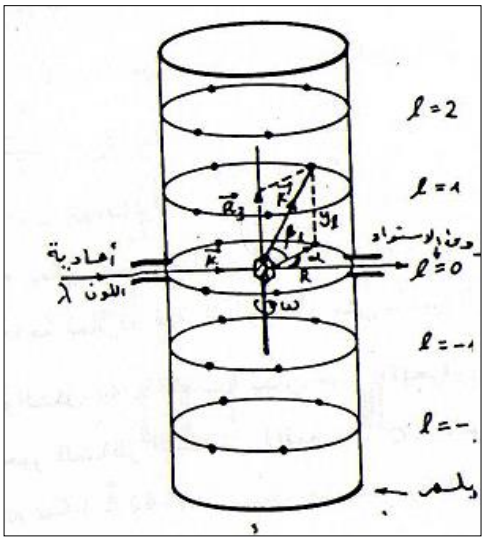
$$a_3\frac{2\pi}{\lambda}\sin 2\theta = 2\pi\ell$$

و على العموم :

$$a_n = \frac{\lambda_n}{\sin 2\theta} \quad ، \quad \tan 2\theta = \frac{y_\ell}{R}$$

حيث : n= 3،2،1

هذه العلاقة تسمح لنا بحساب a_1 , a_2 , a_3

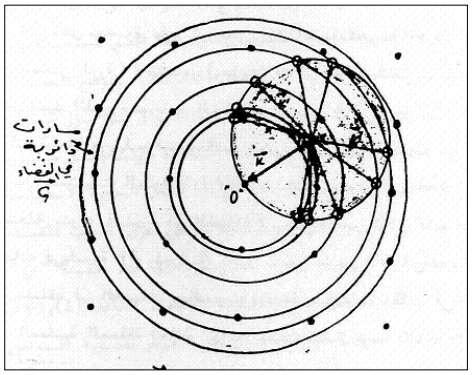


الشكل(21): التمثيل الهندسي لطريقة البلورة الدوارة ....."a"

تفسير مخطط البلورة الدوارة ببناء ايوالد:

و بالإمكان توضيح طبيعة الانعكاسات على الفيلم باستخدام بناء ايوالد عند دوران البلورة فان شبكتها المعكوسة تدور أيضا بنفس السرعة الزاوية و حول نفس المحور . أما كرة ايوالد فثابتة في الفضاء $\vec{G}$ لأنها محددة بالشعاع $\vec{K}$(شعاع الموجة الساقطة)الثابت مقدارا و اتجاها.

عند الدوران تتحرك كل عقدة من عقد الشبكة المعكوسة بمسار دائري معين و انعكاس براغ يحدث في كل مرة يقطع فيها هذا المسار الدائري كرة ايوالد و هذا موضح في الشكل (22).



الشكل(22): تفسير طريقة البلورة الدوارة ببناء ايوالد....."a"

3-15)- طريقة المسحوق (ديباي شرر) :

تهدف هذه الطريقة إلى تحديد التركيب البلوري و هي الطريقة الأكثر استعمالا، نتيجة التوزيع العشوائي في الفضاء للعينات ، فان الأشعة المنعرجة عن مستوى معين(ℓhk) تكون بهيئة مخروطية محوره هو اتجاه الأشعة الساقطة $\vec{K}$ ومولداته هي الأشعة

المنعرجة $\vec{K'}$(عن المستويات(ℓhk) من الحبيبات المختلفة لدينا :

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

حيث : S: هو طول القوس ، D:هو قطر الحجرة

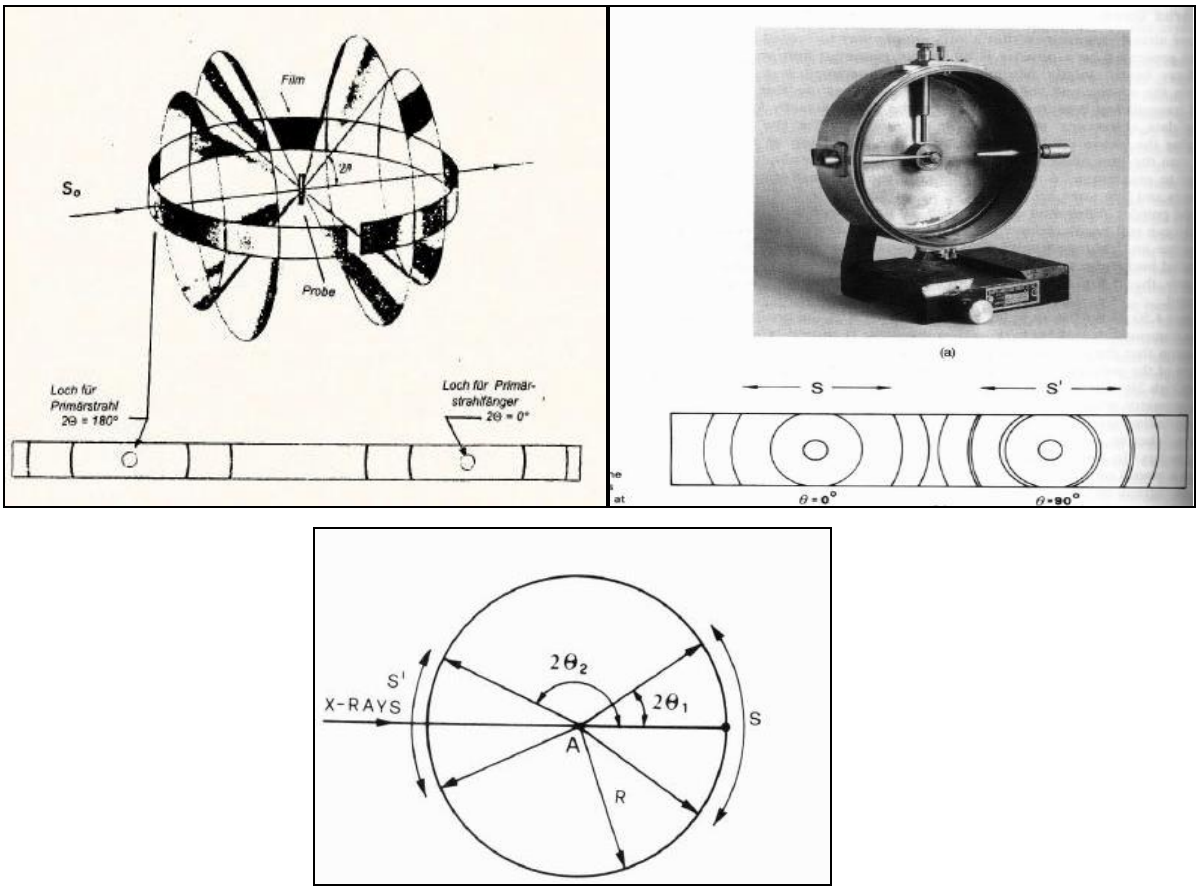
تصمم الحجرات بحيث: $D = \frac{180}{\pi}\,mm = 57.7mm$

مثال: بلورة مكعبة و لدينا شرط براغ $n\lambda = 2d\sin\theta$

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+\ell^2}}$$

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

كلما كانت θ كبيرة يكون قياس a دقيق و لكن ازدياد θ يساهم في تأثير درجة الحرارة مما يسبب بدوره نقصانا في الدقة.



الشكل(23):طرق ديباي وشرر (طريقة المسحوق).....b"

16-العوامل الرئيسية المؤثرة على شدة المكاملة (I):

1-16)-عامل التعددية $M_{\ell hk}$:

ينتج عن تراكب الأشعة المنعكسة من مستويات بلورية مختلفة القرائن و لكن لها نفس الفاصلة مثلا:$M_{\ell hk}$=6

أي أن المستويات التي لها نفس الفاصلة (100) عددها 6

$$d_{100} = d_{010} = d_{001} = d_{00\bar{1}} = d_{0\bar{1}0} = d_{\bar{1}00}$$

2-16)-عامل طول القرص:

لدينا محيط دائرة المخروط S

$$S = 2\pi r_0 \sin 2\theta$$

و الشدة المسجلة تتناسب مع مقلوب محيط دائرة المخروط

$$I \propto \frac{1}{2\pi r_0 \sin 2\theta} \quad \text{.....(33)}$$

3-16)- عامل الاستقطاب :

عند تغيير عامل الاستقطاب فان شدة الأشعة المنعكسة تنقص و هذا راجع إلى:

أن في الحالة العامة سعة الأشعة الساقطة تكون اكبر من سعة الأشعة المنعكسة حيث انه $\overrightarrow{A_r}$و$\overrightarrow{A_c}$ يصنعان زاوية 2θ

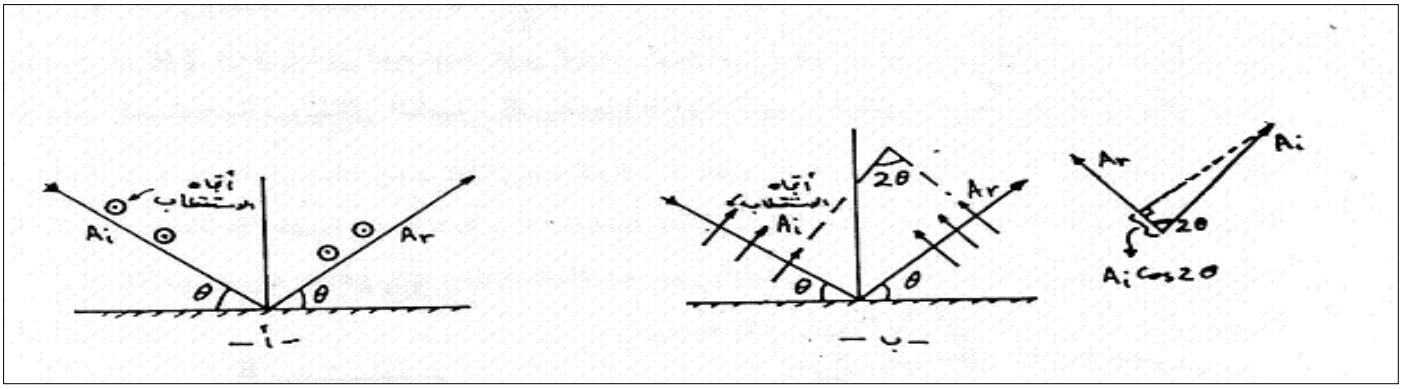
ومن خلال الشكل(24) نجد:

$$\| \overrightarrow{A_r} \| = A_i \cos 2\theta \quad \text{.....(34)}$$

أما في الحالة الأشعة الساقطة غير مستقطبة عندئذ تتناسب شدة الموجة المنعكسة مع كمية التي تسمى عامل الاستقطاب :

$$P = \frac{1+\cos^2 2\theta}{2} \quad \text{.....(35)}$$

و الموجة المنعكسة تكون مستقطبة جزئيا.



الشكل (24):يمثل عامل الاستقطاب....."a"

4-16)- عامل لورانتز:

ينتج هذا العامل نتيجة كبر عقد الشبكة و معناه أن الانعكاس يحدث عند زوايا قريبة من زاوية براغ

$$\delta\theta = \theta_B \pm \varepsilon \quad \text{.....(36)}$$

و هذا العامل يؤثر على الشدة متناسبة مع :

$$L = \frac{1}{2\sin\theta} \quad \text{.....(37)}$$

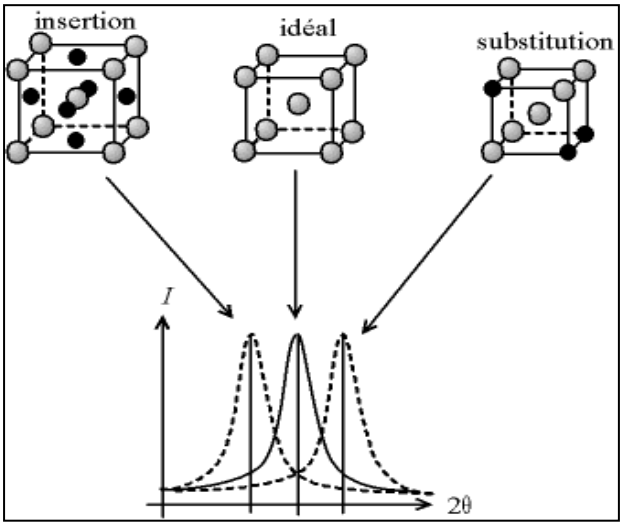
جمعت هذه العوامل الرئيسية في العبارة التالية:

$$I = |A_{\Delta K}|^2 \ |F_G|^2 \ M_{hk\ell} \ e^{-2m} \left(\frac{1+\cos^2 2\theta}{\sin\theta \sin 2\theta}\right) \quad \text{.....(38)}$$

هنالك مجلات تنشر دوريا تفيد في وضع جداول تحتوي على شدة المكاملة النسبية (I)

17-دراسة البعد الحبيبي بواسطة الأشعة السينية:

قبل أن نقوم بدراسة حول أشكال البيانات المستخرجة من انعكاس الأشعة السينية للمواد يجب شرح كيفية تغير قمم و زاوية هذه الانعكاسات بالنسبة لمختلف أنواع العيوب الموجودة في المواد (الشكل25)، في الواقع معرفة كيفية تغير قمم الانعكاسات الناتجة عن وجود عيوب هي في حد ذاتها تشكل أسس لنظريات تحليلية كثيرة. فالعيوب تستطيع أن تكون أعداد صغيرة من الانخلاعات أو الفراغات أو الذرات الانغراسية أو الاحلالية في المادة الأم ، و تركيز هذه العيوب يتغير بشكل دراماتيكي فمن قيم صغيرة جدا للبلورات غير الخاضعة لأي تأثير خارجي و حبيباتها في الأصل كبيرة إلى قيم لا تقارن بالأولى عند تعريض البلورة لأي حقل خارجي . كما أن بعد البلورة الأحادية أو بعد الحبيبة يمكن أن تكون نوعا أخر من العيوب التي تتسبب في تغير عرض قمة الانعكاس وعند الاقتراب من نهاية أبعاد الحبيبة المتكونة من ذرات (غاز أو سائل أو مواد صلبة مثل الزجاج وكثير من المركبات الكيميائية المتبلورة) فانه لايوجد أقصر من هذه القمة، وهي ذات معلومات مهمة لاكتشاف تغير حيود الأشعة السينية في المواد من البلورية إلى اللابلورية، أما عند نهاية أبعاد البلورات الأحادية الخالية من العيوب وذات أبعاد ضخمة من الميليمتر فان شدة الانعكاسات يجب أن تعالج في أسلوب لا يفرق عما درسناه من قبل.



الشكل(25): يمثل تأثير العيوب على زاوية الانعكاس....."d "

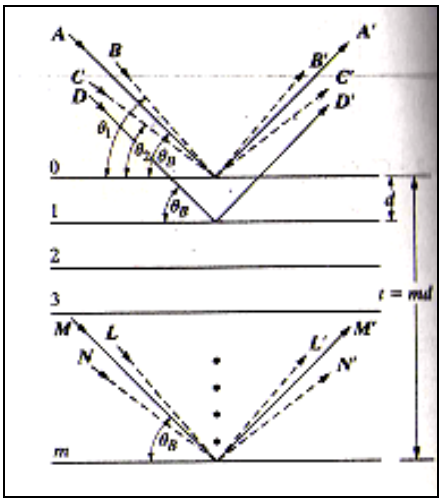
18- الأبعاد البلورية:

من خلال مناقشة عامل البنية اكتشفنا أن هناك تداخلات بناءة وأخرى غير بناءة وهي تتعلق بدورية الذرات وترتيبها. إذا كان مسار حيود فتونات الأشعة السينية عن أول مستوى من الذرات يختلف عن مسار حيود فتونات الأشعة السينية للمسويات

التي تليها اختلافا قليلا في التكامل العددي للأطوال الموجية فان ذرات المستويات كلها تعكس الأشعة السينية إذن الأشعة السينية سوف تتعمق داخل البلورة.

إذا كان سمك البلورة صغير جدا فالمستويات الذرية إذن غير موجودة، عندئذ لن يكون هناك انعكاس للأشعة السينية لهذه المستويات.إذن هنالك علاقة بين مجموع الأشعة المحتمل أنها استطاعت أن تنعكس وأبعاد البلورة. صغر سمك البلورة يسبب لنا توسيع في أشعة الانعراج أو بمعنى أخر الانعراج عند زاوية بالقرب من زاوية براغ، وخاصة الأشعة الساقطة على البلورة بزاوية منحرفة قليلا عن زاوية براغ الدقيقة . على سبيل المثال: نفرض أن هذه البلورة لها سمك t مقاس في اتجاه عمودي بالنسبة لمجموعة خاصة من مستوي براغ الشكل(26) وعدد المستويات في هذا الاتجاه هو$(m+1)$ نعرف أن زاوية براغ هي الزاويةθ_B التي من اجلها شرط براغ يكون محقق:

$$\lambda = 2d \sin \theta_B$$



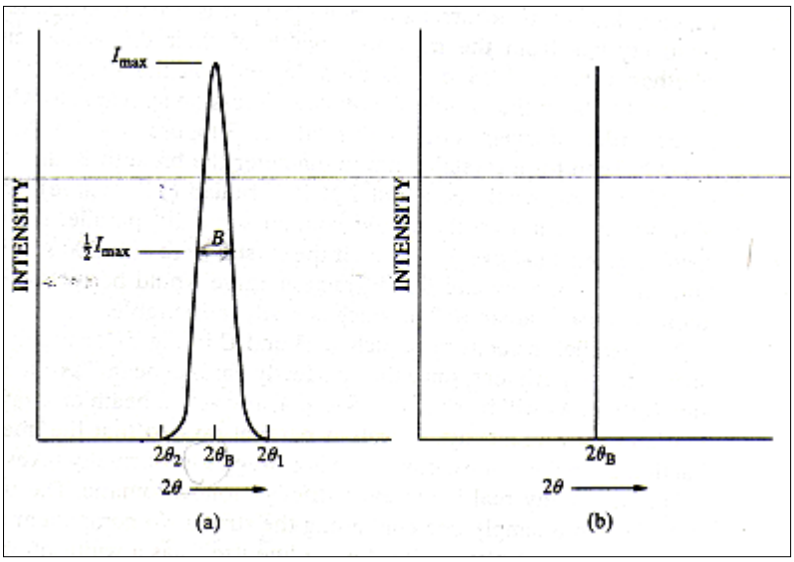
الشكل(26): تأثير أبعاد البلورة على انعراج الأشعة....."d"

في شكل(26) الأشعةM...D.Aهي الأشعة الساقطة التي تصنع لنا الزاوية θ_B مع مستويات الانعراج، الشعاع Ď هو شعاع منعرج عن ذرات المستوي الأول لذلك يوجد طول موجي واحد خارج من الطور، الشعاع Ḿ منعرج عن ذرات المستوي (m) السطح الأدنى ويوجد m طول موجي. الأشعة Ḿ...Ď.A هي أشعة منعرجه عن المستويات $(m...1. 0)$ والتي تصنع زاوية انعكاس هيθ_B

الأشعة Ḿ...Ď.Á توحد إلى شعاع انعكاس وهو يؤثر على شدة الانعكاس (لكي تصبح أعظم) يعني عند الزاوية θ_B يحدث انعكاس تام للطور.

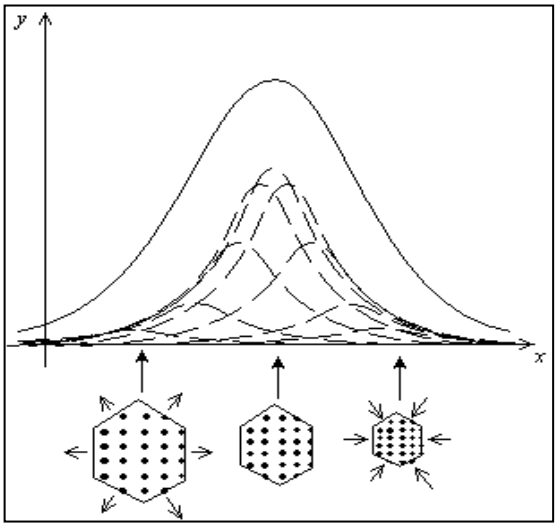
أما الأشعة السينية الساقطة التي تصنع لنا زاوية θ التي تفرق قليلا عن زاوية θ_B فهذه الأشعة تنتج لنا تداخلات غير بناءة مثل الشعاع B يصنع زاوية θ_1 تفرق قليلا عن زاوية θ_B، الشعاع Ĺ المنعرج عن ذرات المستوي(m) السطح الأدنى ويوجد $(m+1)$ طول موجي خارج من طور مثل شعاع Ḃ المنعرج من مستوي السطح. هذا يعني انه توجد مستويات داخل البلورة نصف ذرات هذا المستويات تقوم بعكس الأشعة السينية وينتج عن هذا نصف طول موجي خارج من طور، هذه الأشعة المنعكسة تلغي أشعة أخرى وهذا نتيجة لوجود مستويات متناظرة في البلورة. ومنه الانعكاس هنا عند هذه الزاوية هو الصفر أي شدة الانعكاس عند الزاوية$\theta 2_1$ تساوي الصفر ونفس الشيء شدة الانعكاس عند الزاوية $\theta 2_2$ أيضا مساوية للصفر، بحيث

الزاويةθ_2 هي الزاوية التي يصنعها الشعاع Ń المنعكس من ذرات المستوي (m) ويوجد (m)طول موجي خارج من الطور. شدة الانعكاس عند الزاويتين $\theta 2_1$ و $\theta 2_2$ منعدمة وشدة الانعكاس عند $\theta 2_B$ تكون عظمى وكبيرة ، لكن شدة الانعكاس عند الزاويتين $\theta 2_1$ و $\theta 2_2$ ليستا منعدمتين لكنهما تأخذان قيمتين واحدة قريبة من الصفر وأخرى قريبة من القيمة العظمى لشدة الانعكاس كما هو مبين في منحني شدة الانعكاس الشكل (a -27) أما الشكل .(b - 27) يمثل أعظم قيمة لشدة الانعكاس في الزاوية $\theta 2_B$



الشكل (27): تأثير بعد البلورة على منحنى الانعكاس....."d"

- ✓ نقصان في سمك البلورة وهذا بسبب الفرق الزاوي $(\theta 2_1 - \theta 2_2)$ يزداد معناه أن عدد المستويات في البلورة يتناقص يزداد عرض المنحنى (منحنى شدة الانعكاس)إذا كان سمك البلورة t ينقص، زيادة اتساع منحنى شدة الانعكاس ⇐ وهذا معناه أن: الزاويتين $\theta 2_1$ و $\theta 2_2$ تحققان لنا انعكاسات بسبب عدم وجود مستويات بلورية كثيرة فان هذه الانعكاسات لا تلغى (تدخلات بناءة).
- ✓ ينقص عرض منحنى (منحنى شدة الانعكاس)إذا كان سمك البلورة t يزداد، نقصان اتساع منحنى شدة الانعكاس ⇐ زيادة في سمك البلورة وهذا بسبب الفرق الزاوي ($\theta 2_1 - \theta 2_2$) ينقص معناه أن عدد مستويات في البلورة يزداد هذا معناه انه: الزاويتين $\theta 2_1$ و$\theta 2_2$ لا تحققان لنا انعكاسات بسبب وجود مستويات كثيرة فان هذه الانعكاسات تلغى (التداخلات غير بناءة).



الشكل (28): يمثل تأثير البعد الحبيبي على عرض الزاوي B ....."d".

العرض B عادة يقاس بالراديان (rad)وهو عرض المنحنى عند نصف القيمة العظمى للشدة ($1/2.\ I_{max}$)

ويصطلح على عرض المنحنى انه B_{FWHM} (Full width at half maximan)

ملاحظـــة: B عبارة عن عرض الزاوي و ليس بعرض الخطي إنما هو زاوية 2θ، ليس θ بل 2θ

من خلال الرسم التقريبي للعرض الزاوي الشكل (26-a) فان B هو منتصف الفرق بين الزاويتين $2\theta_1$ و $2\theta_2$ اللتان من اجلهما تكون الشدة تساوي الصفر:

$$B= \frac{1}{2}(2\theta_1 - 2\theta_2) \qquad \text{.....(40)}$$

معادلة فرق المسار بين الشعاعين المنعكسين عند الزاويتين $2\theta_1$ و$2\theta_2$ على الترتيب هما:

$$2t\sin\theta_1 = (m+1)\lambda \quad \text{.....(1')}$$

$$2t\sin\theta_2 = (m-1)\lambda \quad \text{.....(2')}$$

حيث : t هو سمك و(المسافة بين المستوي0 والمستوي m) $t = md$

وبطرح طرف لطرف (1') و(2') نجد :

$$t(\sin\theta_1 - \sin\theta_2) = \lambda$$

و لدينا:

$$\sin\theta_1 - \sin\theta_2 = 2\left(\cos\left(\frac{\theta_1+\theta_2}{2}\right)\sin\left(\frac{\theta_1-\theta_2}{2}\right)\right)$$

إذا:

$$2t\cos\left(\frac{\theta_1+\theta_2}{2}\right)\sin\left(\frac{\theta_1-\theta_2}{2}\right) = \lambda$$

ونعلم أن θ_1 و θ_2 هما قريبتان للزاوية θ_B إذا:

$$\theta_1 + \theta_2 = 2\theta_B \qquad \text{(بالتقريب)}$$

ونعلم أن:

$$\sin\left(\frac{\theta_1-\theta_2}{2}\right)=\frac{\theta_1-\theta_2}{2} \quad \text{(بالتقريب)}$$

ومنه

$$2t\ \frac{\theta_1-\theta_2}{2}\cos\theta_B=\lambda$$

$$t\,(\theta_1-\theta_2)\cos\theta_B=\lambda$$

$$t=\frac{\lambda}{B\cos\theta_B}$$

ومن اجل أكثر دقة وضع المقدار:

$$t=\frac{0.9\,\lambda}{B\cos\theta_B}$$

هذه العلاقة تستعمل في تقدير أبعاد اصغر البلورات وذلك من خلال مقياس عرض منحني شدة الانعراج. أما بالنسبة للمقدار 0.9 أو 1 فهو يتعلق بشكل البلورات. فما هي درجة أهمية هذا العرض؟

أن نفرض $\lambda = 1.5\ \text{Å}$، $\theta = 49^{\circ}$، $d = 1.0\text{Å}$ من اجل بلورة قطرها 1 mm

والبلورة صغيرة وأحادية سيكون العرض ما بين(2×10^{-7} rad) أو (10^{-5} degr) يمكن أيضا أن يكون اصغر). فمثلا بلورة تحتوي على مستويات شبكية متوازية ولو كان سمك البلورة 500Å فإنها تحتوي على 500 مستوي ومنحنى شدة الانعراج (أو الانعكاس) سيكون نسبيا عريض أي بين(4×10^{-3}rad) أو(0.2 degr) وهو سهل قياس.

الأشعة الساقطة الغير متوازية مثل الشعاع B وC في الشكل (25) في الواقع وجودها ثابت في أي تجربة انعكاس. أي شعاع من أشعة السينية يحتوي على أشعة متقاربة وأشعة متباعدة وبالإضافة إلى أشعة أخرى متوازية فإذا الانعكاس عند الزوايا ليس انعكاس دقيق.

الشعاع الحقيقي لايمكن حصره في شعاع أحادي اللون، حيث أن الشعاع الأحادي اللون المألوف هو ببساطة يحتوي على منبع واحد من K_α الذي يتركب من طيف متواصل، فالخط الطيفي K_α هو في حد ذاته لديه عرض من رتبة 0.001 Å وهذه القيمة لا تأثر كثيرا على عرض حزمة الأشعة السينية و تبقى تسمى حزمة الأشعة السينية بالأشعة الأحادية اللون ، و هذا المجال و رغم صغره يؤدي إلى تغير زاوية براغ بين θ و $\theta+\Delta\theta$ و تصبح $\Delta\theta$ محسوسة للقياس عند زاوية الانعكاس الكبيرة أي لما تقترب من 90°.

19-الاستنتاج:

نستنتج من خلال ماسبق أن الأشعة السينية دور كبير في تحديد الوحدات الداخلية للبلورة، ومن فوائد استخدام الأشعة السينية في دراسة البلورات مايلي :

1- تحديد ثابت ونوع الشبكة البلورية.

2- معرفة أنواع العيوب الموجودة في المادة.

3- دراسة الأبعاد الحبيبية للمادة.

20-الخاتمة:

وبعد.....فهذا هو البحث الذي بذلنا فيه مجهودا،متوخين الصدق والأمانة والدقة، اطلنا حيث ينبغي أن نطيل، وأوجزنا حين لا داعي للإطالة، وقد وجدنا كثيرا من الصعوبات استطعنا تذليلها بالمثابرة وطول البحث والتنقيب.

وأخيرا ندعو الله أن يتلقى زملائنا الطلبة وأساتذتنا هذا البحث بالاستحسان والقبول وان يرشدونا إلى ما خفي علينا وما أخطانا فيه، والله هو الموفق والمستعان والسلام عليكم ورحمة الله تعالى وبركاته.

المراجع:

- مقدمة في فيزياء الجسم الصلب (الجزء الأول – القسم الأول)

الدكتور عقيل عزيز داخل .

- Elements of X-Ray Diffraction (2001)

B.D.cullity, S.R. stock.

الأشكال:

الرمز	مرجع الشكل
"a"	مقدمة في فيزياء الجسم الصلب (الجزء الأول – القسم الأول)
"b"	- علم البلورات والأشعة السينية ا.د.نعيمة عبد القادر احمد، ا.د. محمد أمين سليمان
"d "	Elements of X-Ray Diffraction (2001)
"f "	FUNDAMENTALS OF POWDER DIFFRACTION AND STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF MATERIALS Vitalij K. Pecharsky, Peter Y. Zavalij

---