حل التمرين الثالث :

1/ حساب فرق جهد العتبة :

$\lambda_{K_{cu}} = 1,54 A°$ $\quad$ $\lambda_{K_{\alpha}\text{تنغستن}} = 0,21 A°$

$$eV_K = \frac{hc}{\lambda_{K_{cu}}}$$

$$\text{Donc} \Rightarrow V_K = \frac{hc}{\lambda_{K_{cu}} \cdot e} = \frac{6,626 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^{8}}{1,54 \times 10^{-10} \times 1,6 \times 10^{-19}} = 8,03 Kev$$

2/ فرق الجهد اللازم للحصول على أعلى قيمة لشدة الأشعة السينية المميزة :

$$\frac{d}{dV}\left(\frac{I_K}{I_{ph}}\right) = 0 \Rightarrow \frac{d(k(V-V_K)^{3/2})}{dV(kZ \cdot V^2)} = \frac{1}{Z}\frac{d}{dV}\left(\frac{(V-V_K)^{3/2}}{V^2}\right)$$

$$\frac{3}{2}(V-V_K)^{1/2} \cdot V^2 - 2V(V-V_K)^{3/2} = 0$$

$$(V-V_K)^{1/2} \cdot V(3V - 4(V-V_K)) = 0$$

Donc $\Rightarrow$ $\boxed{4V_K = V}$

$$V = 4 \times 8,03 = 32,12 Kev$$

حل تمرين الرابع :

1/ تعيين نوعية شبكة بيرافي للمادة A وقيمة ثابتة الشبكة وقرائن ملر الموافقة لزوايا الانعراج العشرة السابقة

2θ	θ	$\sin\theta$	$\sin^2\theta$	CS	CC	CFc	(hkl) $\frac{CFc}{j}$
36.93	18,465	0,3167	0,1003	1	2	3	(111)
42,91	21,455	0,3657	0,1337	1,333	2,666	3,999	(200)
62,30	31,15	0,5173	0,2676	2,667	5,335	8,0039	(220)
74,64	37,32	0,6063	0,3676	3,665	7,330	10,995	(311)
78,64	39,32	0,6337	0,4015	4,002	8,005	12,0089	(222)
94,06	47,03	0,7317	0,5354	5,337	10,675	16,556	(400)
105,75	52,875	0,7973	0,6357	6,3379	12,675	19,013	(331)
109,78	54,89	0,8180	0,6692	6,6719	13,349	20,015	(420)
127,29	63,645	0,8961	0,8029	8,0049	16,0099	24,014	(422)
143,77	71,885	0,9504	0,9033	9,0059	18,0119	26,936	(333)

نوعية شبكة بيرافي للمادة A هي: شبكة بيرافية مكعبية ممركزة السطوح CFc

تعيين ثابتة الشبكة البيرافية :

$$2d_{400}\sin\theta = \lambda \Rightarrow a = \frac{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}{2\sin\theta}\lambda \Rightarrow a = \frac{\sqrt{16}}{2\times 0,7317}\times 1,54$$

$$\boxed{a = 4,20A^\circ}$$

2/ برهان أنه كلما كانت زاوية الانعراج أكبر كلما كانت الدقة أكثر:

- حساب الارتياب:

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \Rightarrow d = \frac{a}{N} \quad / \quad \frac{\Delta d}{d} = \frac{\Delta a}{a}$$

$$2d\sin\theta = n\lambda \Rightarrow 2\Delta d \sin\theta + 2d\cos\theta \cdot \Delta\theta = 0$$

$$\frac{2\Delta d\sin\theta}{2d\sin\theta} + \frac{2d\cos\theta\,\Delta\theta}{2d\sin\theta} = 0 \Rightarrow \frac{\Delta d}{d} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\Delta\theta = 0$$

$$\frac{\Delta d}{d} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\Delta\theta = 0 \Rightarrow \frac{\Delta d}{d} = |-\cot g\theta|\Delta\theta$$

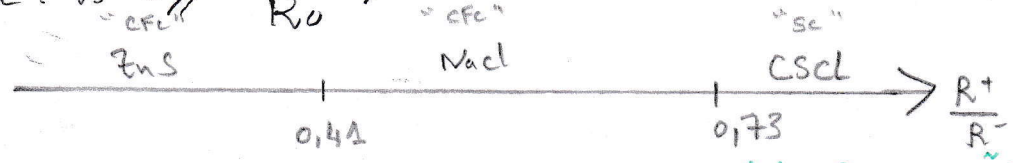
$$\boxed{\Delta a = a\,|\cot g\theta|\,\Delta\theta}$$

3/ حساب نسبة $\frac{R_{Mg}}{R_O}$ التي تجعل تركيب MgO مستقر:

$$\begin{cases} \sqrt{3}a > 2\sqrt{3}R^- \\ \sqrt{3}a = R^+ + R^- \end{cases} \Rightarrow R^+ + R^- > 2\sqrt{3}R^- \Rightarrow \boxed{\frac{R^+}{R^-} \geq (\sqrt{3}-1)}$$

$$\begin{cases} \frac{\sqrt{2}}{2}a > 2R^- \\ \frac{\sqrt{2}}{2}a = R^+ + R^- \end{cases} \Rightarrow R^+ + R^- > \frac{2}{\sqrt{2}}R^- \Rightarrow \boxed{\frac{R^+}{R^-} > (\sqrt{2}-1)}$$

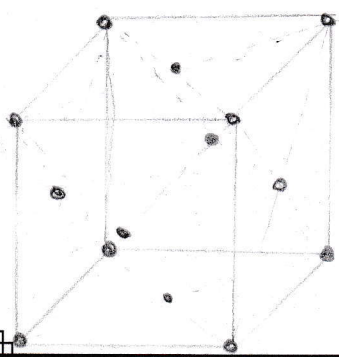
Donc: $\sqrt{3}-1 \geqslant \frac{R_{Mg}}{R_O} > \sqrt{2}-1$

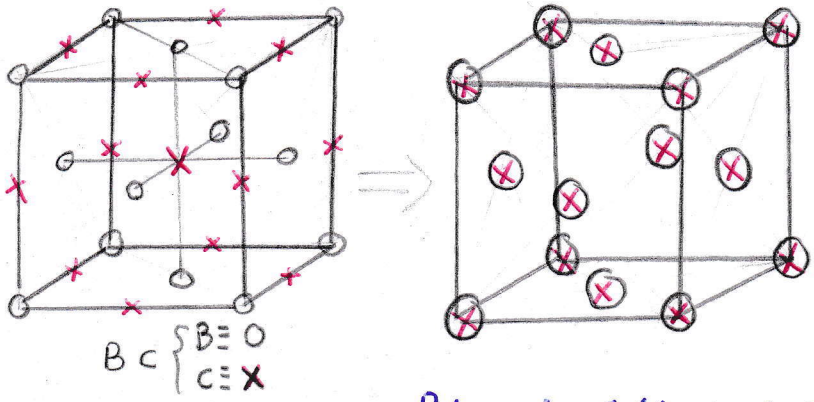


حل التمرين الخامس:

1/ تعيين قاعدة التركيب البلوري وشبكة برافي لكل من الحركيبين:

- للعنصر A:





Bc $\begin{cases} B \equiv O \\ C \equiv X \end{cases}$

مركب Bc :

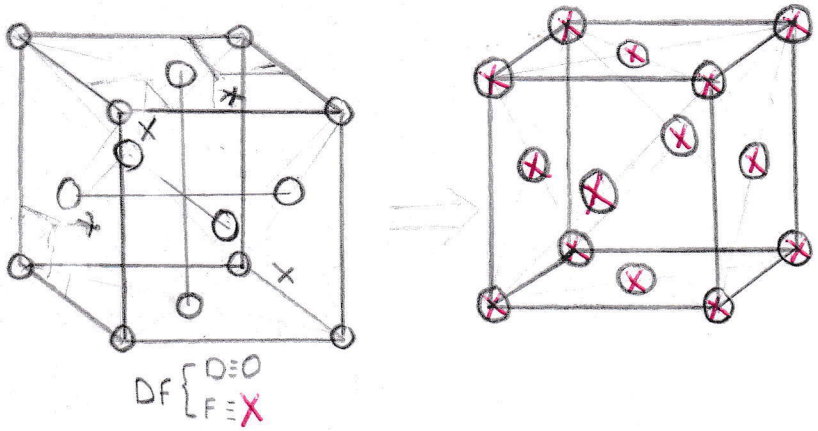
$Bc \equiv NaCl$

$B \begin{cases} (0,0,0) \\ (\frac{1}{2},\frac{1}{2},0) \\ (\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}) \\ (0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}) \end{cases}$ $C \begin{cases} (\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}) \\ (0,0,\frac{1}{2}) \\ (0,\frac{1}{2},0) \\ (\frac{1}{2},0,0) \end{cases}$

قاعدة Bc هي : $B(0,0,0) + C(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}) = Bc(0,0,0)$

- نوع الشبكة هو : شبكة برافي مكعبية ممركزة السطوح cFc من نوع NaCl

مركب DF :



DF $\begin{cases} D \equiv O \\ F \equiv X \end{cases}$

$DF \equiv ZnS$

$D \begin{cases} (0,0,0) \\ (\frac{1}{2},\frac{1}{2},0) \\ (\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}) \\ (0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}) \end{cases}$ $F \begin{cases} (\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4}) \\ (\frac{3}{4},\frac{3}{4},\frac{1}{4}) \\ (\frac{3}{4},\frac{1}{4},\frac{3}{4}) \\ (\frac{1}{4},\frac{3}{4},\frac{3}{4}) \end{cases}$

- قاعدة DF هي $D(0,0,0) + F(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4}) = DF(0,0,0)$
- نوع الشبكة هو : شبكة برافي مكعبية ممركزة السطوح cFc من نوع ZnS

12 تبيين أنه يمكن الحصول على "6" خطوط إنعراج نظريا و "5" تجريبيا فقط في حالة عنصر A :

13

نظريا :

$N_{Max} = \left(\frac{2a}{\lambda}\right)^2 \sin^2\theta$

$N_{Max} \leqslant \left(\frac{2a}{\lambda}\right)^2 \Leftrightarrow N_{Max} \leqslant \left(\frac{2a_0}{\frac{a_0}{2}}\right)^2 = (4)^2$

$N_{Max} \leqslant 16$

تجريبيا :

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

$\sin\theta = \frac{\lambda}{2d_{hkl}} = \frac{\frac{a}{2}\sqrt{N}}{2a}$

$\sin\theta = \frac{\sqrt{N}}{4}$

N	(h k l)	θ
3	(1 1 1)	25
4	(2 0 0)	30
8	(2 2 0)	45
11	(3 1 1)	56
12	(2 2 2)	60
16	(4 0 0)	90

14 حساب عامل البنية لـ Bc و DF

- أولا المركب Bc:

$$F_{hkl/Bc} = \sum_{j=1}^{5} f_j\, e^{i2\pi(hx_j+ky_j+lz_j)} =$$

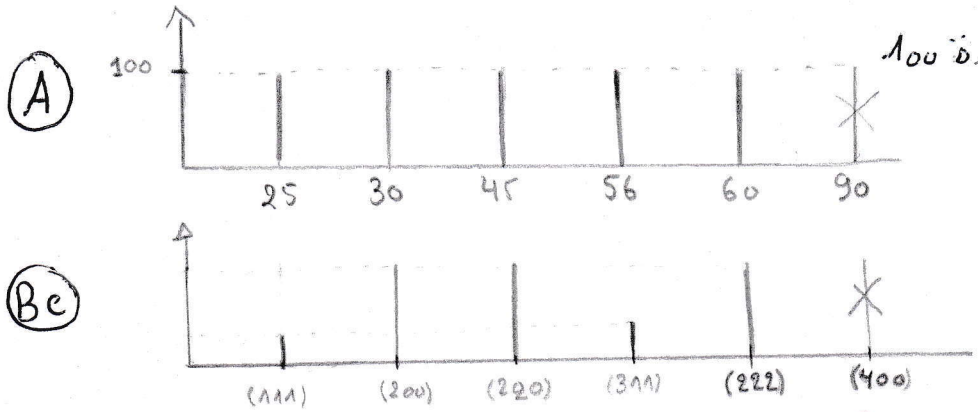
$$= f_B\left(1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)}\right) + f_c\left(e^{-i\pi(h+k+l)} + e^{ih\pi} + e^{ik\pi} + e^{il\pi}\right)$$

$$= f_B\left(1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)}\right) + f_c\, e^{i\pi(h+k+l)}\left(1 + e^{i\pi(-k-l)} + e^{i\pi(-h-l)} + e^{i\pi(-h-k)}\right)$$

$$= \alpha\left(f_B + e^{i\pi(h+k+l)} f_c\right)$$

- $F_{hkl} = 0$: مختلطين : h,k,l
- $F_{hkl} \simeq f_B - f_c$: كلهم فرديين
- $F_{hkl} \simeq f_B + f_c$: كلهم زوجيين

شروط انعدامه: مختلفين فقط.



عند قنادة 100.

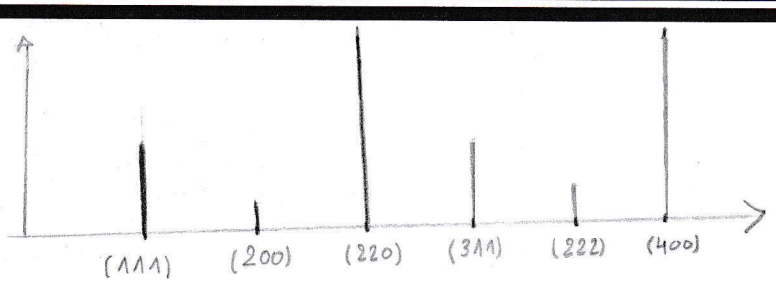
- ثانيا المركب DF:

$$F_{hkl/DF} = \sum_{j=1}^{8} f_j\, e^{i2\pi(hx_j+ky_j+lz_j)}$$

$$= f_D\left(1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)}\right) + f_F\left(e^{i\frac{\pi}{2}(h+k+l)} + e^{i\frac{\pi}{2}(3h+3k+l)} + e^{i\frac{\pi}{2}(3h+k+3l)} \dots\right.$$

$$= \alpha\left(f_D + f_F\, e^{i\frac{\pi}{2}(h+k+l)}\right)$$

- كلهم فرديين: $F = f_D$
- كلهم زوجيين: $f_D + f_F \Leftarrow h+k+l = 2(2n)$
- $|f_D - f_F| \Leftarrow 2(2n+1)$



حل التمرين السادس :

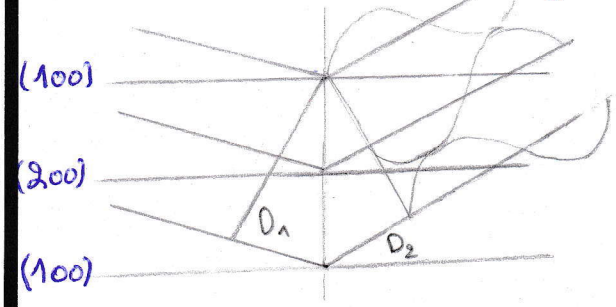
1/ تحديد جميع مستويات الإنعراج الممكن ظهورها :

$$N_{Max} = \left(\frac{2a}{\lambda}\right)^2 \sin^2\theta$$

$$N_{Max} \leq \left(\frac{2(4.04)}{1.54}\right)^2 \Rightarrow \boxed{N_{Max} < 28}$$

N	(hkl)	N	(hkl)
3	(111)	16	(400)
4	(200)	19	(331)
8	(220)	20	(420)
11	(311)	24	(422)
12	(222)	27	(333)

2/ تفسير عدم ظهور مستويات الإنعراج (100) (110) :



$$D_1 + D_2 = \lambda$$

$$D_1 + D_2 = \frac{1}{2}\lambda$$

ب/ ① : قاعدة التركيب البلوري :

$$Zn(0,0,0) + S\left(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4}\right) = ZnS(0,0,0)$$

② - تحديد مستويات الانعراج الخمسة الأولى :

(111) ، (200) ، (220) ، (311) ، (222)

③ - لايمكن : $f_{ZnS}^{Fake} = \alpha_{Fcc}\left(f_{Zn} + f_S\, e^{i\frac{\pi}{2}(h+k+l)}\right)$

Donc : $f_{Al}^{Fake} = \alpha\, f_{Al}$

حل التمرين السابع

① - تحديد نوعية شبكة برافي :

للعنصر A : شبكة برافي مكعبة ممركزة السطوح Fcc

للمركب BC : $B(000) + C\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right) = BC(000)$

شبكة برافي مكعبة ممركزة الحجم bcc ~~NaCl (ملح الطعام)~~

② - تحديد قيم λ الواجب استعماله للحصول على الأقل على 7 خطوط انعراج

$$\frac{2a}{\sqrt{N}}\sin\theta = \lambda \Rightarrow \frac{2a}{\sqrt{N}} \leq \lambda \Rightarrow \boxed{\frac{2a}{\sqrt{14}} \leq \lambda}$$

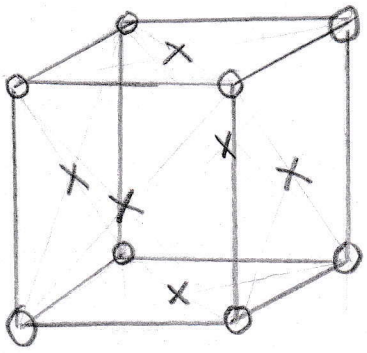
③ - تحديد قرائن ميلر للمستويات 3 الأولى ~~لعنصر~~ لمركب فقط :

(100) (111) (210)

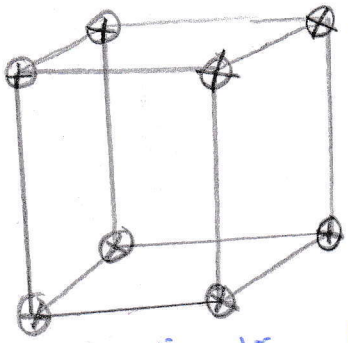
2	(110)
4	(200)
6	(211)
8	(220)
10	(310)
12	(222)
14	(321)

حل التمرين الثامن :

① - نوع شبكة برافي لهذا التركيب : مكعب بسيط مثل نوع CsCl



$\Rightarrow$



$(X) = A_3B = \begin{cases} (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0) \\ (\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}) \\ (0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}) \\ + \\ (0\ 0\ 0) \end{cases}$

القاعدة $\equiv A_3B \equiv (0,0,0)$.

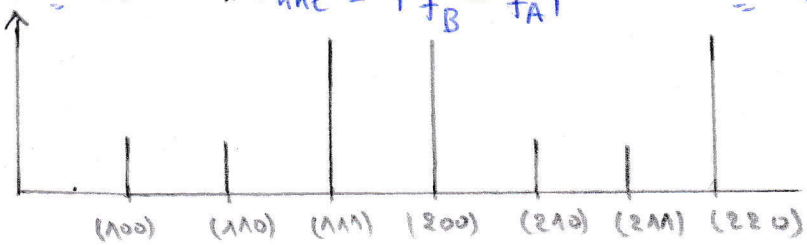
② - حساب عامل البنية :

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

$$= f_B + f_A\left(e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(l+k)}\right)$$

أكبر قيمة : كلهم زوجيين أو كلهم فرديين . $\rightarrow F_{hkl} = f_B + f_A$

أدنى قيمة : مختلطين $\rightarrow F_{hkl} = |f_B - f_A|$



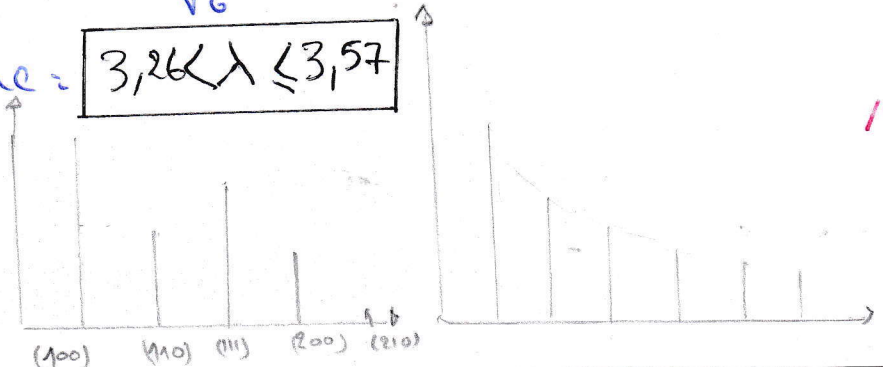
(3)

④ - قيمة طول الموجة :

$$2\cdot\frac{4}{\sqrt{5}}\sin\theta \not< \lambda \Rightarrow 2\cdot\frac{4}{\sqrt{5}}\cdot 1 \not> \lambda \Rightarrow 3{,}57 > \lambda$$

$$\frac{2\cdot 4}{\sqrt{6}}\sin\theta < \lambda \Rightarrow \frac{2\cdot 4}{\sqrt{6}} < \lambda \Rightarrow 3{,}26 < \lambda$$

Done : $\boxed{3{,}26 < \lambda \leq 3{,}57}$



15

حل تمرين "09":

/1

θ	$\sin\theta$	$\sin^2\theta$	cFc
17,32	0,2977	0,0887	β - 3
19,27	0,33002	0,1089	α - 3
20,12	0,34399	0,1183	β - 4
22,40	0,3810	0,1452	α - 4
29,14	0,4869	0,2371	β - 8
32,68	0,5399	0,2915	α - 8
34,81	0,5708	0,3258	β - 11
36,58	0,5959	0,3551	β - 12

- نوع شبكة برافي لهذه البلورة: مكعبة ممركزة السطوح cfc

$4a^2\sin^2\theta = \lambda^2 \cdot N$

- ثابت الشبكة a:

$a = \sqrt{\frac{\lambda^2 N}{4\sin^2\theta}} = 4{,}04\,\text{Å}$

$\boxed{a = 4{,}04\text{Å}}$

② - تحديد قرائن ميلر إذا غيرنا زاوية الانعراج من 0 إلى $\frac{\pi}{2}$

$\frac{2a}{\sqrt{N_{max}}} > \lambda \Rightarrow \left(\frac{2a}{\lambda_\beta}\right)^2 > N_{max} \Rightarrow \boxed{34 > N_{max}}$

حل التمرين العاشر:

① - شبكة برافية مكعبة ممركزة السطوح cfc

القاعدة: $(0,0,0)+\left(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4}\right) = (0,0,0)$

شعاع الانسحاب الأساسي:

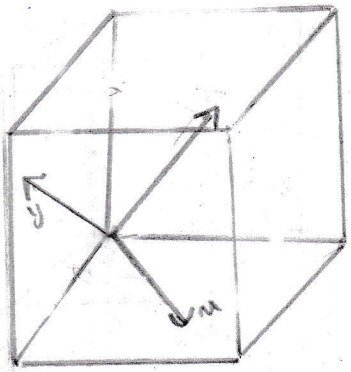
$\vec{a_1} = \frac{a}{2}(\vec{j}+\vec{k})$

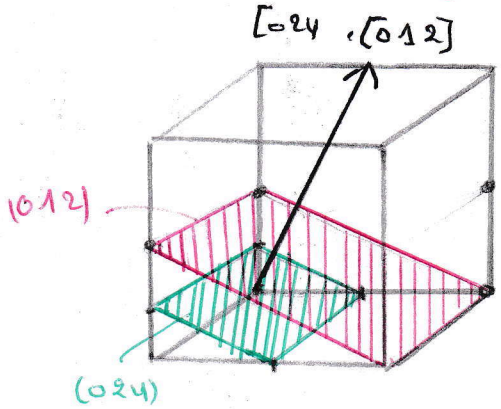
$\vec{a_2} = \frac{a}{2}(\vec{i}+\vec{k})$

$\vec{a_3} = \frac{a}{2}(\vec{i}+\vec{j})$

$\vec{a_n} = \vec{a_1} + \vec{a_2} + \vec{a_3}$

② تعيين المستويات :





(0 1 2)

$\infty, 1, \frac{1}{2}$

(0 2 4)

$\infty, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$

③ - كثافة التعبئة :

$$\tau = \frac{8\left(\frac{3}{4}\right)\pi\left(\frac{\sqrt{3}}{8}a\right)^3 \times 100}{a^3} = 34\,\%$$

- الكتلة الحجمية :

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{8M}{N_A \cdot a^3} = \frac{8 \times 118}{6{,}023 \times 10^{23} \left(6{,}46\right)^3 \times 10^{-24}}$$

$$\boxed{\rho = 5{,}8\ g/cm^3}$$

④ - $Z = 4$ مسافة الحول الأقرب $4r$

هرم رباعي الوجوه منتظم

⑤ - حساب عامل البنية :

$$F = \sum_{j=1}^{8} f_j e^{i2\pi(hx+ky+lz)}$$

$$= \left(1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)}\right)$$

$$+ e^{i\frac{\pi}{2}(h+k+l)} + e^{i\frac{\pi}{2}(3h+3k+l)} + e^{i\frac{\pi}{2}(3h+k+3l)} + e^{i\frac{\pi}{2}(h+3k+3l)}$$

$$= e^{i\frac{\pi}{2}(h+k+l)}\left(1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)}\right).$$