الفصل الثاني:

انعراج الأشعة السينية على المسحوق

د/ بوزيد ص.

1- مقدمة

يمكن الحصول على معلومات مفيده حول تركيب بعض المواد الصلبة المتبلورة من ملاحظات مجهرية او بالعين المجرده للمظهر الخارجي للبلوره .ولكن لغرض دراسة تفاصيل التركيب البلوري فأن مثل هذه المعلومات تكون غير كافية وغير دقيقه حيث أن استخدام المجهر لدراسة البلورات له حدود معينه من ناحية التراكيب المختلفة للبلورات. ان سبب قصور المجهر في هذا المجال لايعود اساسا الى قوة تكبيره بل طبيعة الشعاع المستخدم حيث يكون عادة ضوءا مرئيا ذا طول موجي يتراوح بين 4000 A الى 7000 A، أي أن أكبر وحدة طول يمكن رؤيتها باستخدام الضوء المرئي لاتتجاوز 2000 A بينما الفسح بين ذرات البلوره لاتزيد عن بضعة انغشترومات .لذلك لايفيد اي نوع من الاشعاع ذي طول موجي أكبر من بضعة انغشترومات للحصول على تفاصيل وافية عن التركيب البلوري مثل حجم اصغر خلية في البلورة ومواضع نوى الذرات في داخل الخلية والتوزيع الالكتروني داخل الخلية وأنماط اهتزاز ذرات البلورة وغيرها.

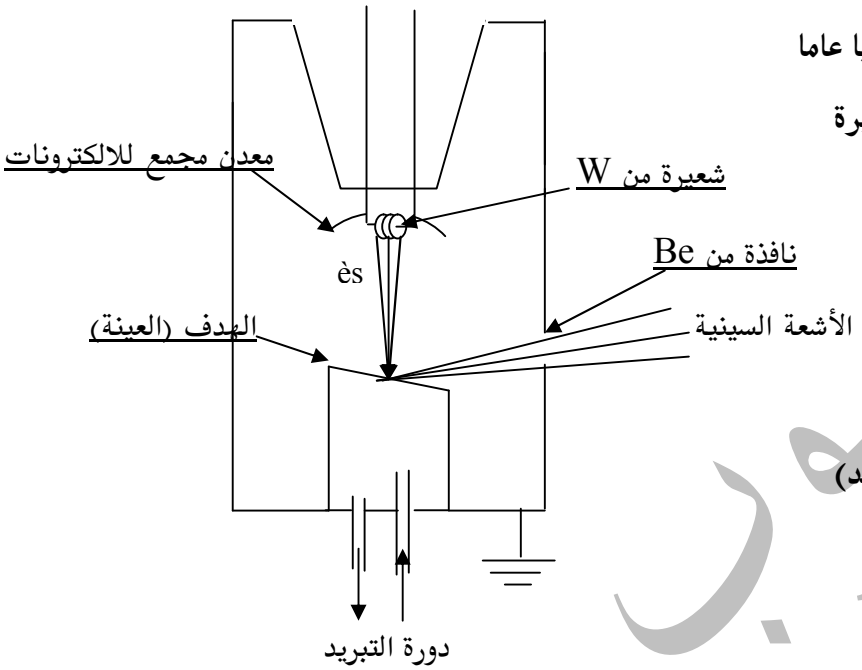
وعلى هذا الاساس تتطلب دراسة التركيب البلوري استخدام اشعاع ذي طول موجي مساوي او اقصر من المسافات البينية بين الذرات ويتم ذلك من خلال الانعطاف او الانعراج (Diffraction) وفي بعض الاحيان تدعى العملية بالتشتت او الاستطاره (Scattering).

أن تعريف كلمة الاستطاره : هو أنحراف اي أشعاع عن مساره نتيجة تفاعله هو والماده اي تغير اتجاه جسيم أو فوتون عند تفاعله هو والنواة أو الالكترون .فأذا فقد الجسم او الفوتون المتشتت (المنحرف عن مساره) قسما من طاقته فأن العملية تدعى تشتتا غير مرن أوأستـــــــطاره غير مرنه (Inelastic scattering). و إذا لم يحدث تغير في الطاقة تدعى تشتتا (Elastic scattering). و تنتمي الأشعة السينية إلى الإشعاعات الكهرومغناطيسية ذوات أطوال الموجات بين 0.1Å و 100 Å، و عملية التفاعل مع المادة لا تسمح برؤية التوزيع الذري بشكل مباشر غير أنها يمكن أن تعطينا مخططات تسمح بعد المعالجة الرياضية بتعيين مواقع الذرات في بلورة ما.

2-إنتاج الأشعة السينية:

كان رونتجين مهتما بتوليد أشعة المهبط وبالصدفة لاحظ حدوث انبعاث وميض(أشعة) من شاشة فلورسنتية (fluorescent) موضوعة عن بعد عند حدوث تفريغ كهربي في أنبوبة أشعة المهبط. منذ تلك اللحظة كرس رونتجين كل طاقته لدراسة خصائص هذه الأشعة المجهولة التي تسبب هذا الأثر وسماها الأشعة السينية (بمعنى الأشعة المجهولة) . وقد قوبل هذا الاكتشاف بكثير من الاهتمام في الاوساط العلمية وما لبث وأن أستخدم في التصوير في المجال الطبي. لقد تمخضت الخمس عشرة سنة اللاحقة فقط عن معلومات قليلة عن طبيعة هذه الأشعة الموجية الى ان استطاع العالم ماكس فون لاوى (Max Von Laue) عام 1912 الجزم بذلك عمليا .كما استطاع كنيبنج و فريدريك - (Knipping

(Friedrich بعد عدة محاولات إجراء تجربة ناجحة لتشتت الأشعة السينية على بلورة كبريتات النحاس وقد لوحظ وجود بقع منتشرة حول البقعة المركزية مكان سقوط الأشعة على اللوح نتيجة تشتت الإشعاع بواسطة المستويات الذرية للبلورة .وقد توصلوا بشكل قاطع إلى استنتاج أن الإشعاع يتكون من موجات وأن البلورة تتركب من ذرات مرتبة في شبكة فضائية.

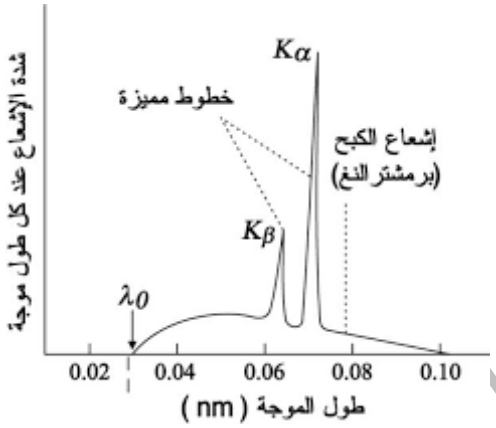


الشكل 1: شكل يبين كيفية إنتاج الأشعة

إن الشكل الموضح (الشكل 1) يمثل رسما تخطيطيا عاما لجهاز إنتاج أشعة X فهو يتركب أساسا من شعيرة تصنع عادة من التنغستان w حيث انه عند تسخين هذه المادة من جراء مرور تيار كهربائي تشع (تطلق، ترسل) الكترونات بفعل ظاهرة الإشعاع الكهروحراري، تسرع هذه الالكترونات تحت تأثير فرق الكمون (الجهد) المطبق بين القطبين الكهربائيين السالب المتصل بالشعيرة و الموجب A المتصل بالمصعد أو الهدف Anticathode.

كما أن حزمة الالكترونات تركز أثناء مرورها بقطب معدني اسطواني مركز. يقع كل من المهبط و المصعد و المجمع داخل غرفة مفرغة من الهواء كما أن هذه الغرفة بها نافذة تسمح بمرور أشعة X و هي تصنع عادة من البريليوم Be. إن المصعد أو مقابل المهبط يصنع عادة من معادن ثقيلة مثل: Pt,Co,W,Cu... ، و تستعمل دورة تبريد من الماء لخفض درجة حرارة المصعد المرتفعة بفعل التأثير الكهروحراري.

و تنتج الأشعة السينية نتيجة لقصف مصعد معدني بحزمة مسرعة من الالكترونات، فينتج نوعان من الأشعة: الأولى تسمى طيف أشعة الاستيقاف (الكبح او الفرملة) كنتيجة لتباطؤ حزمة الالكترونات في مادة المصعد، و الثانية تسمى بطيف الأشعة المميزة لذرات المصعد المثارة (الشكل 2).



الشكل 2: طيف الاشعة السينية المكون من اشعاع الكبح (الفرملة) و طيف الخطوط المميزة

ملاحظات:

في علم البلورات أطوال الموجات المستعملة عادة هي $\lambda_{K\alpha}(Cu)=1.54\,\mathring{A}$ et $\lambda_{K_\alpha}(Mo)=0.7071\,\mathring{A}$ و $\frac{I_{k_{\alpha_1}}}{I_{k_{\alpha 2}}}\approx 2$

الجدول 1 – الأطوال الموجية (بالـ Å) للخطوط المميزة الرئيسية لمواد المصعد المستخدمة في علم البلورات

Élément	Numéro atomique *Z*	$\lambda(K_{\alpha 1})$	$\lambda(K_{\alpha 2})$	$\lambda(K_{\beta})$
Chrome	24	2,28891	2,28503	2,0806
Fer	26	1,93601	1,93207	1,7530
Cuivre	29	1,54123	1,53739	1,3893
Molybdène	42	0,71280	0,70783	0,6310
Argent	47	0,56267	0,55828	0,4960
Tungstène	74	0,21345	0,20862	0,1842

3- أطوال أمواج الأشعة السينية:

إن أطوال أمواج الإشعاعات السينية أقصر من أطوال أمواج إشعاعات الضوء المختلفة و تعطى علاقة الأطوال بـ:

$E=h\nu$ حيث h هو ثابت بلانك و يساوي 6.62×10^{34} J.s

$$\nu=\frac{c}{\lambda}\Rightarrow E=\frac{hc}{\lambda}\Leftrightarrow \lambda\left(\mathring{A}\right)=\frac{12.4}{E(kev)}$$

4- أنواع الأشعة السينية:

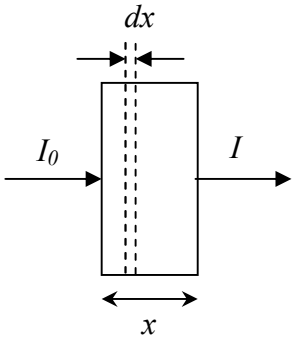
إن اجتياز الأشعة السينية للمواد أكثر سهولة كلما كان طول الموجة أقصر و على العكس من ذلك يكون امتصاصها متناسب مع طول الموجة. و تنقسم الأمواج السينية إلى:

النوع	النفاذية	الامتصاص	الطول الموجي (Å)	الطاقة (KeV)
الأمواج القاسية	كبيرة	ضعيف	0.125-2.5	5-100
الأمواج اللينة	قليلة	كبير	2.5-120	0.1-5

5- قانون الامتصاص للأشعة السينية:

يوصف امتصاص المواد للأشعة بمعامل الامتصاص μ المعتمد على نوع المادة المتصة و طول الموجة λ.

فأثناء مرور الأشعة السينية على معدن يحدث امتصاص و بالتالي فان شدة الأشعة تنقص (الشكل 3).



الشكل 3

$$dI = -\mu\rho I dx$$

$$\int_{I_0}^{I}\frac{dI}{I} = -\int_{0}^{x}\mu\rho dx \quad \Rightarrow \quad Ln\frac{I}{I_0} = -\mu\rho x$$

$$\Rightarrow \qquad I(x) = I_0 e^{-\mu\rho x}$$

مع ρ الكتلة الحجمية للمادة المعدنية المسلط عليها الأشعة السينية،

μ معامل الامتصاص الخطي للمادة.

μ/ρ معامل الامتصاص الكتلي للمادة.

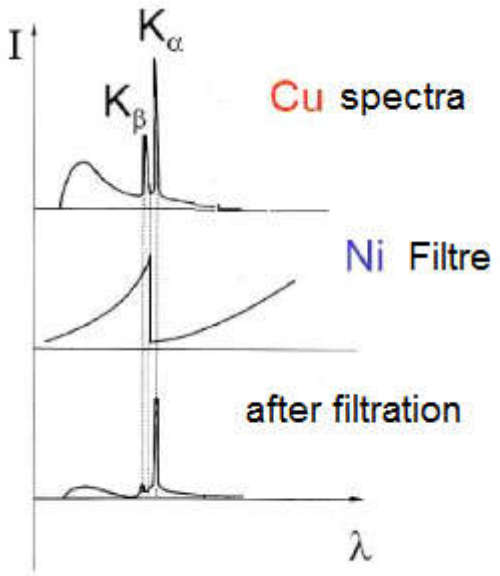
ان معامل الامتصاص الكتلي هو خاصية مميزة لاي عنصر كيميائي ولا يعتمد على الحالة الفيزيائية للجسم. عندما نريد إشعاعًا أحادي اللون، فإننا نستخدم خطًا من الطيف المميز (بشكل عام جدًا خط K_α وهو الأكثر شدة، انظر الشكل 2) و هذا هو السبب في ضرورة استخدام ما نسميه بـ: المرشح.

6- المرشحات:

في علم البلورات – في أغلب الأحيان – يرغب المرء في استخدام إشعاع أحادي اللون. ومع ذلك، إذا كانت إشعاعات **K** في الطيف المميز للمصعد أكثر شدة من الخلفية المستمرة، فإنها تشمل بجانب الثنائي $K_{\alpha 1} - K_{\alpha 2}$ الذي يمكن الاحتفاظ به في معظم التجارب الحالية، إشعاع K_β ذو الشدة الضعيفة. إن وجود هذا الخط يخاطر بإحداث تداخل و بالتالي اخطاء خلال مرحلة تفسير نتائج الأشعة السينية و بالتالي يصبح من الضروري إزالته. يمكن تحقيق ذلك بكل بساطة، وبطريقة تقريبية، باستخدام مرشح يشتمل على عنصر يمتلك عدم استمرارية امتصاصه بين طولي الموجات K_α وK_β. و يوضح الشكل **4** مبدأ ترشيح خط K_β من النحاس **Cu** بواسطة مرشح النيكل **Ni**.

نأخذ المثال التالي: في حالة النحاس حيث $\lambda_{k_\alpha} = 1.54\,\overset{o}{A}$ و $\lambda_{k_\beta} = 1.39\,\overset{o}{A}$

نستعمل النيكل Ni الذي يحقق شرط الترشيح بفضل قيمة حافة الامتصاص له و التي تساوي $\lambda = 1.49\,\overset{o}{A}$



الشكل **4**: الطيف المميز للنحاس قبل و بعد الترشيح بـ **Ni**

7- الكشف عن الأشعة السينية

في حين تعتبر الأشعة السينية غير مرئية للعين البشرية بشكل عام ، إلا أنها يمكن أن تكون مرئية في ظروف خاصة. في تجربة قام بها براندز بعد وقت قصير من ورقة رونتجن الشهيرة عام **1895**، تم الإبلاغ عنها بعد التكيف الداكن و وضع عينه بالقرب من أنبوب الأشعة السينية، ورؤية توهج "أزرق رمادي" خافت بدا أنه نشأ داخل العين نفسها. عند سماع ذلك ، راجع رونتجن كتب تسجيلاته ووجد أنه أيضًا قد رأى هذا التأثير. عند وضع أنبوب الأشعة السينية على الجانب الآخر من الباب الخشبي، لاحظ رونتجن نفس التوهج الأزرق، و يبدو أنه ينبعث من العين نفسها، لكنه لم يعر الامر اي اهمية. أدرك لاحقًا أن الأنبوب الذي أحدث هذا التأثير هو الأنبوب الوحيد القوي بما يكفي لجعل التوهج مرئيًا بوضوح وأن التجربة بعد ذلك أصبحت قابلة للتكرار بسهولة.

لقد تم تناسي أن الأشعة السينية مرئية بشكل ضعيف للعين المجردة المكيفة للظلام إلى حد كبير اليوم، ربما يكون هذا بسبب الرغبة في عدم تكرار ما يمكن اعتباره الآن تجربة خطيرة ومضرة بشكل متهور للإشعاع المؤين.

و يعتمد الكشف عن الأشعة السينية على طرق مختلفة، و الطريقة الأكثر شيوعًا هي لوحة التصوير الفوتوغرافي او فيلم الأشعة السينية، عداد جيجر و كذلك العداد التناسبي الخ....

7-1- اللوحة فوتوغرافية

تم استخدام فيلم التصوير الفوتوغرافي بواسطة رونتغن **(Röntgen)** كأحد أجهزة الكشف عن الأشعة السينية الأولى ، ولا تزال هذه التقنية البسيطة مستخدمة على نطاق واسع في التطبيقات الطبية. تبدأ عملية التعرض بفوتونات الأشعة السينية المؤينة بلورات هاليد الفضة الحساسة للإشعاع في مستحلب على سطح الفيلم ؛ يؤدي التغيير الكيميائي الضوئي الناتج من البلورات المصابة إلى تعتيم المنطقة المعرضة (الشكل **5**).

الشكل 5 : صورة بالاشعة السينية ليد زوجة رونتغن

على الرغم من أن تقنيات التصوير الفوتوغرافي قد تحسنت كثيرًا منذ زمن رونتجن وما زالت مفيدة للغاية للتطبيقات النوعية ، إلا أنها ليست مناسبة تمامًا لمزيد من القياسات الكمية لشدة الأشعة السينية والمحتوى الطيفي. فقد تم تطوير عدد من طرق الكشف الأكثر فعالية كعداد جيجر.

7-2- عداد جيجر

في البداية ، اعتمدت أكثر طرق الكشف شيوعًا على تأين الغازات ، كما هو الحال في عداد جيجر مولر. يحتوي هذا النموذج على حجم مغلق(عادةً أسطوانة) مع نافذة معدنية رقيقة تحتوي على غاز و كذلك سلك. يطبق بين الاسطوانة (تلعب دور الكاثود او المهبط) والسلك (يلعب دور الأنود او المصعد) جهدا عاليا. عند دخول فوتون الأشعة السينية إلى الأسطوانة فإنه يؤين الغاز، تتسارع هذه الأيونات نحو القطب الموجب ، مما يتسبب في مزيد من التأين على طول مسارها. وبذلك ينتج شلال من الإلكترونات ينزل على المصعد، مما يحدث تيارا كهربائيا قصير المدة بين المصعد والمهبط، ويتحول هذا التيار بواسطة مقاومة في الدائرة الكهربية إلى نبضة في الجهد. وتضخم تلك النبضة في الجهاز الإلكتروني ويظهرها كصوت متردد (الشكل 6).

تكمن سلبية هذه الطريقة في ان النبضة الناتجة من أنبوب جيجر تكون دائمًا من نفس الحجم بغض النظر عن طاقة الإشعاع الساقط على عكس العداد التناسبي.

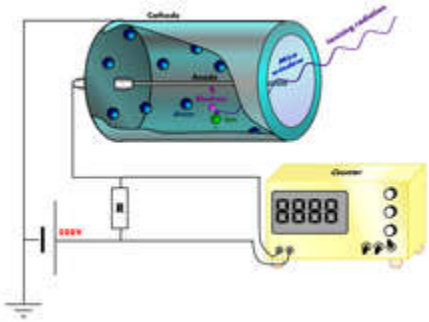
الشكل 6 : شكل نموذجي لعداد جيجر.

7-3- العداد التناسبي

ان تركيب العداد التناسبي (الشكل 7) يشبه تركيب عداد جيجر وهو يتكون من غرفة أو أنبوب ممتلئ بغاز، وعندما يدخل فيه شعاع مؤين من الخارج يحدث تأين في الغاز. و تتجة الإلكترونات المتحررة أثناء التأين وهي سالبة الشحنة إلى المصعد، وتتجه أيونات الغاز (وهي موجبة الشحنة) إلى المهبط السالب. ويضبط المجال الكهربائي في الأنبوب على جهد عالي بحيث تكتسب الشحنات المتولدة عن تأين الغاز سرعات عالية وبالتالي طاقة حركة عالية تعمل على إنتاج أيونات إضافية كثيرة في الغاز. بذلك يحدث تضخيم كبير للنبضة الكهربائية الناتجة على المصعد، ويسهل قياسها.

يختلف العداد التناسبي عن عداد جيجر في أن العداد التناسبي يعمل بجهد كهربائي أقل، وبهذا يعتمد عدد الأيونات المتكونة وبالتالي مقدار النبضة الكهربائية الناتجة على المصعد على طاقة الشعاع الساقط، وتكون النبضة متناسبة مع طاقة الشعاع الساقط. أما في حالة عداد جيجر فهو يعمل عند جهد التشبع، وهذا يعني أن قوة جذب المصعد للإلكترونات المتولدة عن التأين تكون كبيرة جدا بحيث تنتج نبضة كهربائية دائما كبيرة متساوية لا تعتمد على طاقة الشعاع الساقط المتسبب في تأين الغاز.

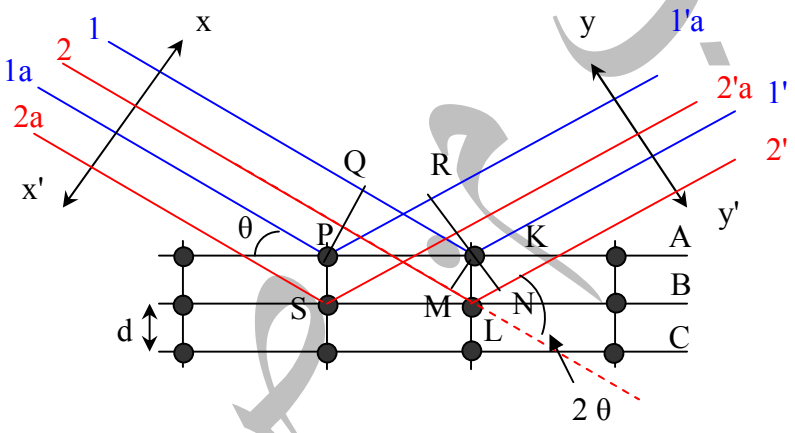
أي أن عداد جيجر يستطيع اكتشاف سقوط شعاع مؤين في الأنبوب، أما العداد التناسبي فيستطيع بالإضافة إلى ذلك معرفة طاقة الشعاع الساقط.



الشكل 7 : شكل توضيحي للعداد التناسبي

8- علاقة براغ:

لنعتبر الشعاعين 1 و 1a من حزمة الأشعة السينية الساقطة اللذين ينعكسان بفعل ذرتين P و Q المنتميتين إلى مستوي الذرات **A** (انظر الشكل **8**).



الشكل **8**: شكل يمثل حيود أشعة **X** بواسطة بلورة (مقطع شاقولي للعينة)

الشعاعان المنعرجان (المنعكسان) 1' و 1'a اللذان لهما نفس الطور تماما و بالتالي تضاف شداتاهما معا و ذلك لان لهما نفس طول المسير بين جبهتي الموجتين xx' و yy' أي:

$Qk-PR=PK\cos\theta-PK\cos\theta=0$، ومن ثم يمكن القول بان جميع الأشعة المنعكسة من طرف الذرات المنتمية للمستوي الأول و الموازية إلى 1' لهما نفس الطور و تضاف مثنى مثنى.

إن هذه الخاصية سارية المفعول بالنسبة لجميع المستويات كلا على حدا.

بقي الآن أن نبحث على الشرط اللازم لتضاف شدات أشعة **X** المنعكسة بفعل الذرات المنتمية إلى مستويات مختلفة.

لنأخذ على سبيل المثال الشعاعين 1 و 2 المنعكسين بفعل الذرتين K و L ففرق المسير للشعاعين '1K1 و '2L2 يعطى بالعلاقة التالية:

$$ML+LN=d'\sin\theta+d'\sin\theta=2d'\sin\theta.$$

إن هذا الفرق في المسير هو نفسه بالنسبة للشعاعين المتراكبين و المنعكسين بفعل الذرتين S و P (في الاتجاه المشار إليه في الشكل التوضيحي **8**). و هذا يرجع إلى عدم وجود فرق في المسير بين الأشعة المنعكسة بفعل S و L أو P و K.

لقد بين براغ بان الشعاعين المنعكسين '1 و '2 متوافقان في الطور عندما يكون فرق المسير بينهما مساويا إلى عدد صحيح n من طول موجة أشعة **X** الساقطة λ أي: $2d'\sin\theta = n\lambda$ حيث **n** عدد صحيح. تعرف هذه العلاقة بقانون براغ. كما تبين هذه العلاقة الشرط اللازم لحدوث الانعراج أو حيود أشعة **X** حيث يسمى n رتبة الانعكاس.

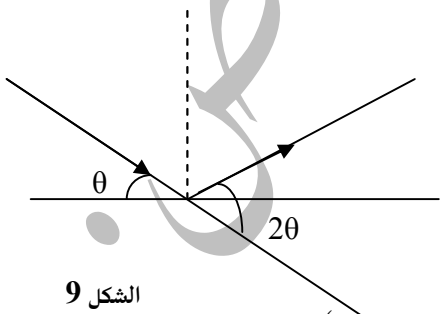
إذا ثبتنا λ و 'd فانه يمكننا إيجاد عدة زوايا θ_1 ، θ_2 وθ_3 تحقق شرط براغ من اجل n=1,2,3..... على الترتيب. ففي حالة الانعكاس من الرتبة الأولى n=1 مثلا يكون فرق مسير الشعاعين المنعكسين '1 و '2 مساويا لطول الموجة. أما بالنسبة للشعاعين المنعكسين '1 و '3 فيساوي ضعف طول الموجة 2λ كما يساوي ثلاثة أضعاف طول الموجة 3λ في حالة الشعاعين '1 و '4 و هكذا.

[إن الأشعة المنعكسة بفعل جميع ذرات البلورة المنتمية لجميع المستويات متوافقة في الطور و بالتالي فان شدتها تضاف مثنى مثنى لتعطي محصلة شدة الأشعة المنعكسة. أما الأشعة ذات الاتجاهات المغايرة لتلك الموضحة بالشكل السابق فهي غير متوافقة في الطور و بالتالي تنعدم مثنى مثنى أي أن البلورة تعكس جزء صغيرا فقط من الأشعة الساقطة و التي تحقق شرط براغ].

ملاحظات هامة (انظر الشكل **9**):

1- تقع كل من الحزمة الساقطة (الأشعة **X**) و الناظم على العينة (المستوي العاكس) و الحزمة المنعكسة في نفس المستوي.

2- الزاوية بين الحزمة المنعكسة و الحزمة النافذة هي دوما 2θ و هي التي نقيسها تجريبيا بدلا من θ أما θ فتسمى بزاوية براغ.



الشكل **9**

3- $\lambda < 2d\ (n=1) \Rightarrow n\lambda < 2d' \Rightarrow \frac{n\lambda}{2d'} < 1 \Rightarrow \sin\theta < 1\ (experimentalement)$

إذا كانت مثلا : $d' \approx 3\,\mathring{A}$ $\Leftarrow$ يجب أن نستخدم **X** ذات طول الموجة اقل من 6 Å.

4- في اغلب الحالات نضع $n=1$ و بالتالي يمكننا استعمال العلاقة: $2d\sin\theta = \lambda$

9- عامل البنية:

9-1- تعريف:

رياضيا، حتى يكون هناك تطابق في التوزيع الدوري للشبكة البلورية $\Leftarrow$ $e^{i\vec{R}.\vec{G}}=1$

و هذا ما يسمح لنا باستخراج العلاقة التالية: $F_g=\sum_j f_j e^{i\vec{R}.\vec{r}_j}$

حيث:

F_j يسمى عامل البنية

f_j يسمى معامل التشتت للذرة j

j هو عدد ذرات القاعدة

نعوض عن $\vec{G}$ و $\vec{r}_j$ بقيمهما:

$$\vec{G}=h\vec{a}^*+k\vec{b}^*+l\vec{c}^* \quad \text{و} \quad \vec{r}_j=x_j\vec{a}+y_j\vec{b}+z_j\vec{c}$$

$$\vec{r}_j.\vec{G}=\left(x_j\vec{a}+y_j\vec{b}+z_j\vec{c}\right)\left(h\vec{a}^*+k\vec{b}^*+l\vec{c}^*\right)$$

$$=2\pi\left(x_jh+y_jk+z_jl\right)$$

ومنه: $F_{hkl}=\sum_j f_j \exp\left[2\pi i\left(x_jh+y_jk+z_jl\right)\right]$

مع العلم ان الشدة تتناسب طرديا مع مربع عامل البنية $I_{diff} \alpha |F_{hkl}|^2$

بعض العلاقات الهامة:

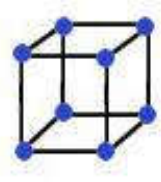
إذن يمكن كتابة:

$$e^{\pi i}=e^{3\pi i}=e^{5\pi i}=-1$$
$$e^{2\pi i}=e^{4\pi i}=e^{6\pi i}=+1$$
$$e^{n\pi i}=(-1)^n \quad / \quad n\in Z$$
$$e^{xi}+e^{-xi}=2\cos x$$

كذلك: $e^{\frac{\pi}{2}i}=i \qquad e^{\frac{3\pi}{2}i}=-i$

9-2- حساب عامل البنية في بعض الحالات الخاصة:

أ-شبكة مكعبة بسيطة:



1-عدد ذرات القاعدة = 1

2- إحداثياتها $(0,0,0)$

3-التعويض في عبارة F_{hkl}:

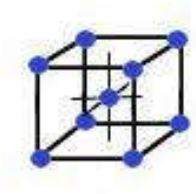
$$F_{hkl} = f\ \exp[2\pi i(0.h + 0.k + 0.l)]$$

$$F_{hkl} = f$$

دوما $F_{hkl} = f$ مهما كانت (h,k,l).

أمثلة: $(200),(111),(110),(001)$

ب–شبكة مكعبة ممركزة الجسم:



1–عدد ذرات القاعدة = 2

2– إحداثياتها (0,0,0) و (1/2,1/2,1/2)

3–التعويض في عبارة F_{hkl}:

الذرتين من نفس النوع، هذا يعني أن $f_1 = f_2 = f$

$$F_{hkl} = f(1 + \exp[\pi i(h + k + l)])$$

كل المستويات يمكن رؤيتها ماعدا تلك التي تجعل $F_{hkl} = 0$ ، و الذي يحقق هذا الشرط هو: $h+k+l=2n$ حيث n عدد صحيح.

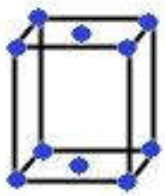
$$F_{hkl} = \begin{cases} 0 & h + k + l = 2n + 1 \\ 2f & h + k + l = 2n \end{cases}$$

أمثلة:

$(211),(200),(310),(110)$ --- يمكن مشاهدتها لان $h+k+l=2n$

$(320),(210),(001)$ --- لا يمكن مشاهدتها لان $h+k+l=2n$

ج–شبكة ممركزة القاعدة:



1–عدد ذرات القاعدة = 2

2– إحداثياتها (0,0,0) و (1/2,1/2,0)

3–التعويض في عبارة F_{hkl}:

الذرتين من نفس النوع، هذا يعني أن $f_1 = f_2 = f$

$$F_{hkl} = f(1 + \exp[\pi i(h + k)])$$

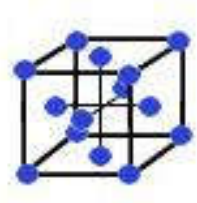
نلاحظ بأن:

$$F_{hkl} = \begin{cases} 0 & \forall\ l\ et\ h + k = 2n + 1 \\ 2f & \forall\ l\ et\ h + k = 2n \end{cases}$$

أمثلة:

$(110),(223),(001),(200)$ --- يمكن مشاهدتها لان $h+k=2n$

$(231),(213),(213),(210)$ --- لا يمكن مشاهدتها لان $h+k=2n+1$



د-شبكة مكعبة ممركزة الوجوه:

1-عدد ذرات القاعدة = **4**

2- إحداثياتها (0,0,0)، (1/2,1/2,0)، (1/2,0,1/2) و (0,1/2,1/2)

3-التعويض في عبارة F_{hkl}:

الذرات من نفس النوع، هذا يعني أن $f_1 = f_2 = f_3 = f_4$

$$F_{hkl} = f\left(1+\exp[\pi i(h+k)]+\exp[\pi i(h+l)]+\exp[\pi i(k+l)]\right)$$

نلاحظ بأن:

$$F_{hkl} = \begin{cases} 0 & h,k\ et\ l\ sont\ mixtes \\ 4f & h,k\ et\ l\ ne\ sont\ pas\ mixtes \end{cases}$$

أمثلة:

$(111),(200),(220),(311),(331),(331),(222)$ --- يمكن مشاهدتها.

$(001),(110),(210),(211),(330),(310)$ --- لا يمكن مشاهدتها.

10- الحصول على مخطط انعراج:

تُشتق التقنيات المختلفة للتحليل البلوري للأجسام الصلبة من ثلاث طرق رئيسية مختلفة ، لكل منها عدة طرق مشتقة. تختلف هذه الطرق الثلاثة حسب نوع الإشعاع المستخدم (أحادي أو متعدد الطول الموجي) وعن طريق الصفة الأحادية أو متعددة التبلور للمادة الصلبة المدروسة. يتم عرضها في الجدول **2**.

وتعتمد الطرق التجريبية المختلفة على تطبيق قانون براغ حيث يجب أن يتوافر مدى متصل من قيم **λ** أو **θ** ولما كان بالإمكان تعيين الطول الموجي **λ** للأشعة السينية بطريقة مستقلة وقياس **θ** مباشرة من تجربة الانعكاس حيث إنها تساوي نصف الزاوية بين الأشعة الساقطة والحائدة كما هو واضح من الشكل **8** فإنه يمكن تطبيق قانون براغ لحساب المسافة العمودية بين مجموعات المستويات المتوازية $\mathbf{d_{hkl}}$ ومن ثم يمكن حساب ثوابت الشبكة البلورية بمعرفة الهندسة الفراغية لها.

تبعا للعلاقة: $2d_{hkl}\sin\theta_i = \lambda_i$ هناك متغيرين **λ** و **θ**.

λ متغير ⇐ **θ** ⇐ ثابت حزمة أشعة بيضاء تسمى طريقة لاوي.

θ متغير ⇐ **λ** ثابت ⇐ أشعة سينية أحادية اللون ⇐ طريقة ديباي شيرر.

θ متغير ⇐ λ ثابت ⇐ أشعة سينية أحادية اللون ⇐ طريقة البلورة الدوارة.

الجدول 2 – تصنيف الطرق التجريبية المختلفة لحيود الأشعة السينية

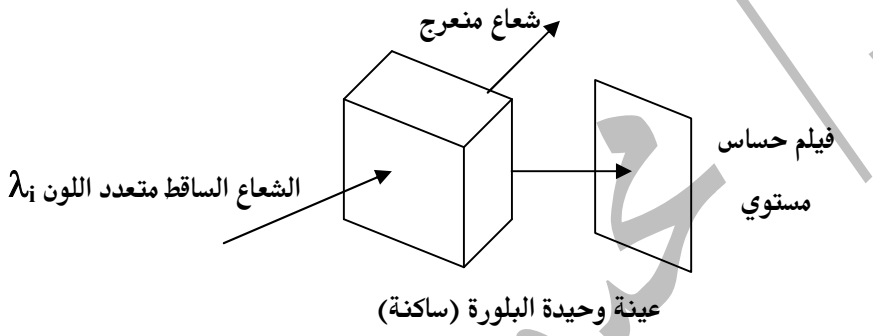
نوع الإشعاع المستخدم		نوع المادة الصلبة المدروسة	
		متعددة التبلور	الأحادية التبلور
أحادي الطول الموجي		طريقة المسحوق او طريقة ديباي شيرر	طريقة البلورة الدوارة
متعدد الطول الموجي			طريقة لاوي

طريقة المسحوق أو طريقة ديباي شيرر (Debye-Scherrer) هي الطريقة المستخدمة بشكل أساسي في مختبرات علم البلورات.

في علم البلورات ، في العديد من المشكلات (تكوين المحاليل الصلبة، دراسة تشتت الحالة الصلبة، إلخ...)، من الضروري تحديد معلمات او ثوابت بلورة شبكية معروفة بدقة .لهذا، يجب استخدام إشعاع أحادي اللون (أحادي الطول الموجي).

10-1- طريقة لاوي Laue Method :

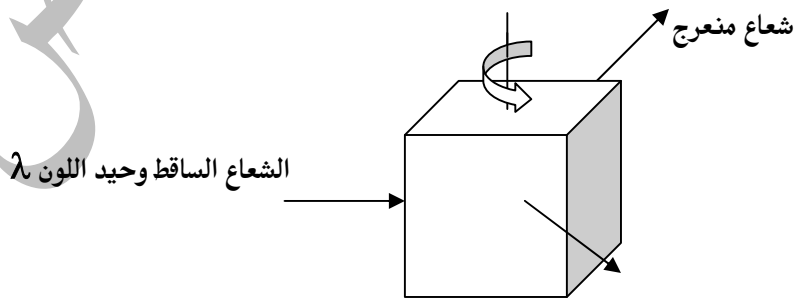
وفيها تسقط حزمة من الأشعة السينية المستمرة على بلورة أحادية ثابتة .تنتقي البلورة حينئذ الموجات ذات الطول λ التي تسقط بزاوية براغ θ_{hkl} التي تحقق تداخلاً بناء للأشعة المنعكسة من المستويات الذرية ذات المسافة البينية d_{hk} طبقاً لقانون براغ. و تستعمل هذه الطريقة لتحديد التناظر و كذا التوجه البلوريين لبلورات معروفة التركيب مسبقا (الشكل 10).



الشكل 10

10-2- طريقة البلورة الدوارة Rotating Crystal Method :

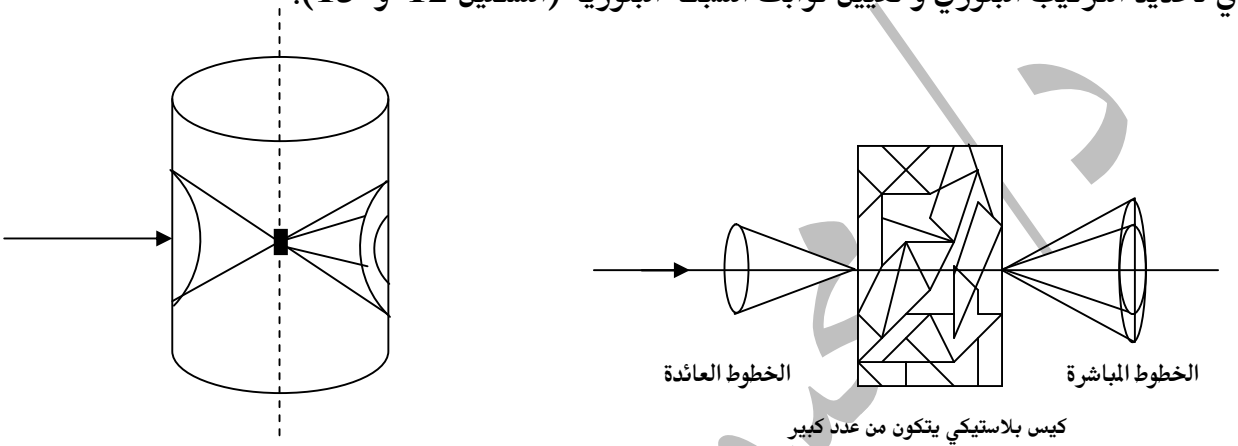
وفيها تسقط أشعة سينية أحادية الطول الموجي على بلورة أحادية أيضاً تدور حول محور ثابت فيها وبذلك نحصل على مدى متصل من زوايا السقوط θ على المستويات البلورية المختلفة في مسافاتها البينية، وتتاح الفرصة لتحقيق قانون براغ. تستعمل هذه الطريقة في تحديد ثوابت الشبكة بعد معرفة التوجه البلوري لمحور دوران البلورة بطريقة لاوي (انظر الشكل 11).



الشكل 11

10-3- طريقة ديباي شيرر Debye– Scherrer Method :

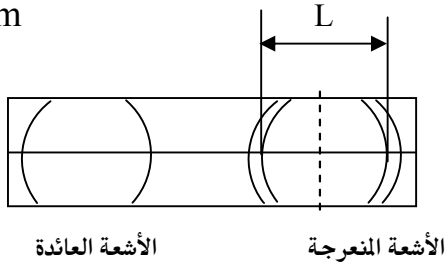
وتسمى أيضاً طريقة "المسحوق" وهي مناسبة للدراسات التطبيقية ولا تشترط أن تكون البلورة أحادية، وفيها تسقط حزمة من الأشعة السينية أحادية الطول الموجي على مسحوق مادة متبلورة. ويكون توزيع اتجاهات حبيبات المسحوق في مدى مستمر تقريباً حيث إن كلا منها تعتبر بلورة صغيرة، ويتحقق قانون براغ بالنسبة لعدد منها. و تستعمل هذه الطريقة في تحديد التركيب البلوري و تعيين ثوابت الشبكة البلورية (الشكلين **12** و **13**).



الشكل 12

لدينا غرفة نصف قطرها **R** يحقق العلاقة:

$$R=57.3\ mm \Leftarrow 2\pi R=360\ mm$$
$$360\ mm \rightarrow 360°$$
$$L\ mm \rightarrow 4\theta°$$
$$\Rightarrow \theta°=L/4$$
$$4\theta \langle 180° \Rightarrow \theta \langle 45°$$



الشكل 13

11- قراءة واستغلال مخطط انعراج:

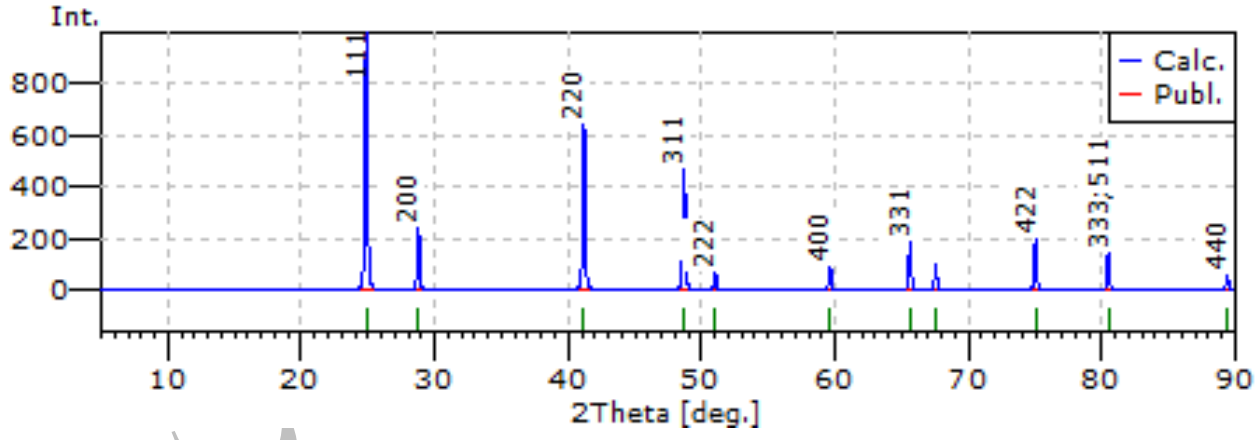
التطبيقات – تحديد اطوار السبيكة:

و يعتبر هذا هو أهم تطبيق للأشعة السينية في مختبر علم البلورات، حيث كل مركب بلوري يوافق مخطط انعراج ديباي-شيرر وحيد والذي يشكل بطاقة تعريفه. يعطي المزيج المكون من عدة اطوار طيفاً وهو تراكب لأطياف كل طور. هناك

بطاقات، على سبيل المثال الملف المنشور من قبل الجمعية الأمريكية لاختبار المواد (تسمى اختصارا **ASTM**)، حيث يتم فهرسة عدد كبير من أطياف المركبات المعروفة وفقاً للانعكاسات **3** إلى **7** اكثر شدة بدلالة الترتيب التنازلي للمسافات الشبكية. يتم تحديد الاطوار بمقارنة مخطط الانعراج مع المخططات القياسية الموضحة على هذه البطاقات.

عمليا، فإن الإجراء الذي سيتم استخدامه كما هو موضح في الجدول **3** ، هو كما يلي:

- يتم قياس موضع خطوط الانعراج وحساب قيم **d** الموافقة له؛
- يتم تقييم الشدة النسبية للخطوط المختلفة بالعين، أو عن طريق القراءة البسيطة على تسجيل مخطط الانعراج ؛
- يتم تحديد الأطوار الموجودة باستخدام ملفات **ASTM** او **JCPDS**، و هذا له نوعان من التصنيف: الأول يتم فيه تصنيف المركبات المعروفة بالترتيب الأبجدي (يفضل استخدامه عندما يشك المرء في طبيعة ما يمكن العثور عليه) ، والآخر يتم فيه تصنيف المركبات حسب القيم المتناقصة لـ d_{hkl}.
- في حالة وجود عدة اطوار، يتم تكرار العملية السابقة مع الخطوط التي لم يتم إلغاءها بواسطة التحديد الأول (تحذير: قد تتداخل او تتراكب الخطوط المتعلقة باطوار مختلفة) ؛ و الشكل **14** و الجدول **3** يمثلان بوضوح بطاقة **ASTM** و المخطط الموافق لها.



الشكل **14**: مخطط انعراج للمركب BaF_2، و هو عبارة عن دالة تربط الموضع 2θ و الشدة (يشار إلى مؤشرات قمم الانعراج في السطر العلوي بينما)

الجدول 3 – بطاقة ASTM للمركب فلوريد الباريوم BaF_2

04 - 0452					
	d (Å)	I	h	k	l
BaF_2 Barium Fluoride	3.579	100	1	1	1
	3.100	30	2	0	0
	2.193	79	2	2	0
	1.870	51	3	1	1
Rad.: Cu_{Ka1} l: 1.5406 Filter: Ni d-sp: Cut Off : Int. : Diffract. I/Icor. : 3.00 Ref. : Swanson, Tatge, Natl. Bur. Stand. (U.S.) Circ., 539,I,70 (1953)	1.790	3	2	2	2
	1.550	6	4	0	0
	1.423	13	3	3	1
	1.386	6	4	2	0
	1.266	14	4	2	2
	1.1933	6	5	1	1
Sys. : Cubic S.G. : Fm3m (225) a = 4.01270 b : c : A : C : a : b : g : Z : 4 mp : Ref. : Ibid Dx : 4.886 Dm : SS/FOM : F_{21}=84(.01119, 21)	1.0959	2	4	4	0
	1.0481	6	5	3	1
	1.0332	<1	6	0	0
	0.9803	2	6	2	0
	0.9455	1	5	3	3
	0.9347	3	6	2	2
	0.8948	1	4	4	4
	0.8682	4	5	5	1
Color : Colorless Sample specially purified by Mallinckrodt. CAS #: 7787-32-8 Fluorite group, fluorite subgroup. PSC: cF12. To replace 1-533, Mwt: 175.33, Volume [CD]: 238.34	0.8599	1	6	4	0
	0.8285	5	6	4	2
	0.8072	6	7	3	1