* الطرق التجريبية لانعراج الأشعة السينية

1- طريقة فون لاوي Von_Laue

و هي طريقة سريعة ومجدية لكشف توجهات البلورة و
العيوب البلورية حيث تتعرض البلورة الأحادية الى
حزمة من الأشعة السينية ذات أطوال موجية مختلفة
تتراوح بين ($0.2\,\mathring{A}$ و $3\,\mathring{A}$) وهذا لتغطية كافة الاحتمالات
الممكنة للابعاد بين المستويات الذرية وهنا كل مستوى
انعكاس يختار الطول الموجي المناسب مع الابعاد الذرية
و زاوية السقوط وعند تحقق قانون براغ يحدث الانعكاس
وعند وضع لوح فوتوغرافي في طريق الاشعة المنعكسة
نلاحظ بقع سوداء تمثل انعكاسات براغ على مختلف
المستويات البلورية

2- طريقة البلورة الدوارة - طريقة براغ -

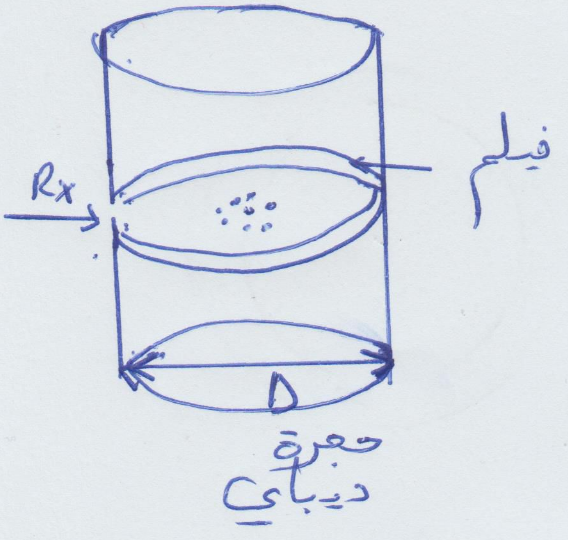
في هذه الطريقة تدور البلورة الوحيدة (أبعادها حوالي
1 mm) حول محور ثابت عمودي على منحى حزمة الاشعة
السينية الوحيدة اللون والتي طول موجتها λ.
تتم دراسة الانعكاس على جملة معينة من المستويات
المتوازية و ذلك عند تدوير البلورة، ووفق قانون
براغ يلاحظ الانعكاس من اجل زوايا سقوط معينة
تحقق شرط الانعراج ويتم من خلالها التعرف
على المسافة d لجملة المستويات المتوازية

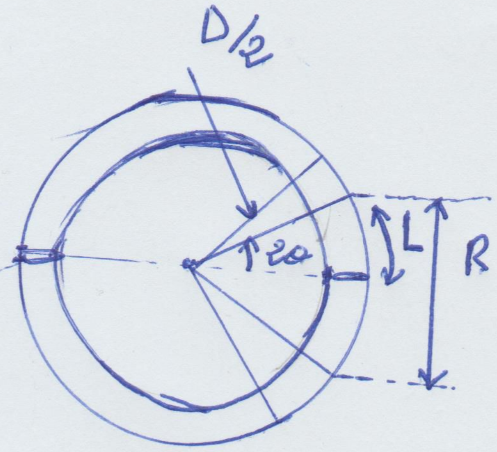
3- طريقة المسحوق أو طريقة ديباي - شرر

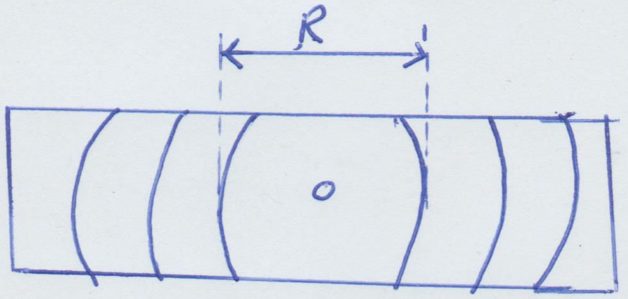
تستخدم هذه الطريقة أيضا لتحديد البنية البلورية وهي بخلاف الطريقتين السابقتين قد صممت لتستخدم مسحوقا يحتوي على عدد كبير من البلورات الصغيرة جدا أو البليرات (أبعادها صغيرة جدا).

تسقط الأشعة السينية الوحيدة اللون على المسحوق البلوري وتصبح كل بلورة عرضة لتحقق قانون براغ وبما أن العينة عبارة عن مجموعة كبيرة من البليرات "cristallites" ذات توجهات عشوائية في الفضاء فإذا كان في بليرة ما توجه المستويات (hkl) لا يحقق قانون براغ فإنه في بليرة أخرى يحققه ومن هنا يمكن الحصول على جميع الانعكاسات الممكنة التي تحقق قانون براغ.

عمليا يتم وضع العينة داخل حجرة اسطوانية تعرف بحجرة ديباي شرر تكون محاطة بفيلم حساس من الداخل (cliché) تسجل فوقه جميع الانعكاسات الممكنة وتكون على شكل أقواس متتالية لدوائر مشتركة المركز كما في الشكل التالي







$$\left.\begin{aligned} L &= \frac{D}{2} \times 2\theta \\ \frac{R}{2} &= L \end{aligned}\right\} \Rightarrow \frac{R}{2} = D\theta \Rightarrow \theta = \frac{R}{2D}$$

و θ في هذه الحالة بالراديان

اما بالدرجة فتعطى بالعلاقة

$$\theta \longrightarrow \frac{R}{2D}$$
$$180° \longrightarrow \pi \qquad \Rightarrow \theta° = \frac{R}{2D} \times \frac{180}{\pi}$$

عامل البنية Facteur de structure

تتناسب شدة الأشعة المنعرجة على مجموعة من العوامل أهمها عامل البنية F_{hkl} (الذي يعتمد على قرائن المستوى العاكس (hkl) الذي يمثل دور ذرات أو جزيئات قاعدة التركيب البلوري في تكوين شدة الأشعة المنعرجة.

انعدام F_{hkl} يعني انعدام الانعكاس عن المستويات (hkl)

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^{S} f_j \, e^{i2\pi(x_j h + y_j k + z_j l)}$$

حيث: (x_j, y_j, z_j) يمثل احداثيات الذرة المشتتة j الموجودة في القاعدة

f_j: عامل التشتت الذري المعتمد على التركيب الإلكتروني للذرة المشتتة

(hkl): معاملات ميلر بالنسبة للمحاور $\vec{a_1}, \vec{a_2}, \vec{a_3}$ المنطبقة على وحدة التركيب البلوري (الخلية الأساسية)

مثال 1: ايجاد عامل البنية لشبكة مكعبة بسيطة CS

$$F_{hkl} = f \, e^{i2\pi(0\times h + 0\times k + 0\times l)} = f$$

ومنه كل المستويات تظهر في مخطط الانعراج

في هذه الحالة القاعدة تتكون من ذرة واحدة تقع (0,0,0)

مثال 2 : ايجاد عامل البنية للشبكة المكعبة الممركزة الوجوه تحتوي على نوع واحد من الذرات .

الحل : باعتبارها شبكة مكعبة ممركزة الوجوه فان القاعدة تتكون من 4 ذرات

$(0,0,0)$, $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$; $(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})$

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^{4} f\, e^{i2\pi(x_j h + y_j k + z_j l)}$$

$$F_{hkl} = f\left(\underbrace{e^{0}}_{1} + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)}\right)$$

$$F_{hkl} = \begin{cases} 4f & / \ h,k,l \text{ من نفس النوع أي زوجية أو فردية} \\ 0 & h,k,l \text{ مختلطة} \end{cases}$$

مثلاً : المستوى (210) لا ينعكس

اما المستوي (311) ينعكس وكذلك المستوي (200)

ومنه في الشبكة المكعبة الممركزة الوجوه تختفي الانعكاسات على المستويات التي تكون قرائنها مختلطة

مثال 3 : حساب عامل البنية للحديد Fe يتبلور في بنية مكعبة ممركزة الجسم (CC)

البلورة متكونة من نوع واحد من الذرات والقاعدة تتكون من ذرتين في الموقعين $(0,0,0)$ $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^{2} f_{Fe} \left(e^{i2\pi(x_j h + y_j k + z_j l)} \right)$$

$$F_{hkl} = f_{Fe}\, e^{0} + f_{Fe}\, e^{i\pi(h+k+l)}$$

$$F_{hkl} = f_{Fe} \left[1 + e^{i\pi(h+k+l)} \right]$$

إذا كان: $(h+k+l)$ فردي $\Leftarrow F_{hkl} = 0$ لا يحدث انعكاس مثال (100)، (111)، (210)، (300)

إذا كان: $(h+k+l)$ زوجي فإن $F_{hkl} = 2f_{Fe}$

ونستنتج أنه في الشبكة CC المستويات (hkl) التي مجموع قرائنها فردي لا تحدث انعكاس

ملاحظة: على طريقة تحديد قيم $N = h^2+k^2+l^2$ المسموحة في البنى CFC - CC - CS

إن قانون براغ من أجل رتبة الانعكاس الأولى في البنى المكعبة وبعد التعويض بقيمة d_{hkl}. $\left(d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \right)$ يؤول إلى:

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

بوضع $N = h^2+k^2+l^2$ نجد أنه من أجل $N=7$

لا يوجد أي مستوي يحقق $h^2+k^2+l^2=7$ وبصفة

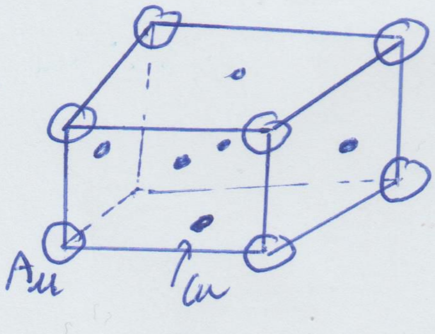
عامة من أجل $N=8n+7$ ومنه يمكننا تحديد

قيم N المسموحة من أجل البنى CS - CC و CFC

CS	1	2	3	4	5	6	X	8	9	10	11	12	13
CC	x	2	x	4	x	6	X	8	X	10	X	12	x
CFC	x	x	3	4	x	x	x	8	X	X	11	12	x

مثال 4: احسب عامل البنية F_{hkl} للملوحة Cu_3Au

ذات البنية المكعبة الموضحة في الشكل



Au تحتل الموقع $(0,0,0)$

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

$(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})\ ,\ (\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})$

$$F_{hkl} = f_{Au}\times e^{0} + f_{Cu}\left(e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)}\right)$$

ومنه

$F_{hkl} = f_{Au} + 3 f_{Cu}$ من نفس النوع l,k,h

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

نلاحظ أنه في حالة h,k,l مختلطة تظهر ولكنها تكون أقل شدة

تمارين محلولة

التمرين الأول: ليكن الكروم ذا الترتيب المكعب وسيطه $a = 2.88 A°$. تتم دراسة هذا البلور بقذفه بإشعاع طول موجته λ يساوي $1.542 A°$

احسب زوايا الانعراج للرتب الخمسة الأولى للمستوي (100)

الحل: حسب قانون براغ

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

وبما أن الترتيب البلوري للكروم (Cr) مكعب فإن

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

بالتعويض في قانون براغ نجد :

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

- $n = 1 \Rightarrow \sin\theta = \frac{1 \times 1,542 \times \sqrt{1}}{2 \times 2.88} \Rightarrow \theta = 15,52°$
- $n_2 = 2 \Rightarrow \sin\theta = \frac{2 \times 1,542 \times \sqrt{1}}{2 \times 2.88} \Rightarrow \theta = 32,37°$
- $n = 3 \Rightarrow \theta = 53.43°$
- $n = 4 \Rightarrow \sin\theta = \frac{4 \times 1,542 \times \sqrt{1}}{2 \times 2.88} = 1,07$

نلاحظ أن $\sin\theta > 1$ ومنه لا توجد انعكاس في هذه الحالة

اذن الانعكاسات توجد من أجل الرتب الثلاثة الأولى فقط