

حساب الشدة النسبية للأشعة السينية المحادة عن المركب (NiAs)

علي حسين عبد الرزاق
قسم الفيزياء، كلية التربية - ابن الهيثم، جامعة بغداد

الخلاصة:

أُجري في هذا البحث حساب الشدة النسبية للأشعة السينية المُحادة عن المركب (NiAs)، مع الأخذ بنظر الاعتبار العوامل التي تؤثر على شدة تلك الأشعة، ووجد إن هناك تقارب كبير بين نتائج الشدة النسبية المحسوبة نظريا مع مثيلاتها المُسجلة عمليا، ويمكن أن يُعزى سبب الاختلافات البسيطة بينهما إلى إن جميع البلورات في الطبيعة هي بلورات حقيقية وليست مثالية، من جهة أخرى فإن دقة تحديد الموقع الذري تنعكس بشكل مباشر على حساب الشدة النسبية. وقد تم الاعتماد على المصادر (7-11) في تحديد المواقع الذرية.

المقدمة

عند ملاحظ شدة طيف حيود الأشعة السينية المُسجل يتضح عدم التجانس في شدتها حيث تتفاوت من الضعيفة جدا إلى الشديدة، ويتجمع في كل خط الأشعة التي تحيد عن المستويات البلورية التي تمتاز بفواصل (d) متساوية، وإن هذا يقود إلى الاستنتاج المهم الذي يتلخص في اعتماد شدة الخط على نوع وطريقة توزيع الذرات في خلية الوحدة.

إن شدة خط الحيود عبارة عن مجموع شدة اشعة X التي تنشئت من قبل جميع الذرات في خلية الوحدة وتكون قيمتها متناسبة مع مربع عامل التركيب (F) الذي يعتمد بدوره على إحداثيات مواقع الذرات في خلية الوحدة (u,v,w) وعامل التشتت الذري (f). (1)

الجانب النظري

تتأثر شدة الأشعة السينية المُحادة عن المستويات البلورية لبلورة ما

بالعوامل

١. عامل الاستقطاب (Polarization factor) .
٢. عامل التركيب (Structure factor) .
٣. العامل التعددي (Multiplicity factor) .
٤. عامل لورنتز (Lorentz factor) .
٥. عامل الامتصاص (Absorption factor) .
٦. عامل الحرارة (Temperature factor) .

ولحساب شدة الأشعة السينية المُحادة لابد من ذكر نبذة بسيطة عن هذه

العوامل ومدى تأثيرها على الشدة وعلى ماذا تعتمد:

- تعتمد شدة الأشعة المنعكسة على طبيعة العنصر أو عناصر المركب الذي تشتت الأشعة عليه، وبما إن التشتت يحصل في المدارات الإلكترونية للذرات فإن عدد الإلكترونات حول النواة والذي يمثل العدد الذري للعنصر (Z) هو الذي يحدد كفاءة الذرة على تشتيت الأشعة الساقطة عليها، وتطلق على كفاءة الذرة الواحدة في تشتيت الأشعة السينية عامل التشتت الذري (Atomic scattering factor) (f) .

- ان اشتقاق صيغة للتعبير عن الشدة المنعكسة للأشعة يستوجب جمع سعات الأشعة المنعكسة من قبل جميع الذرات في خلية الوحدة، وتطلق على هذه المحصلة بعامل التركيب (F) (structure factor). والذي يعتمد على عامل التشتت الذري (f) من جهة ومواقع الذرات في خلية الوحدة (unit cell) من جهة أخرى، و وفق المعادلة الآتية:

$$F_{hkl} = \sum_{n=1}^{n=N} f_n e^{2\pi i(hu_n + kv_n + lw_n)} \dots\dots\dots (1)$$

حيث ان:

F = عامل التركيب

f_n = عامل التشتت الذري للذرة n

N = عدد الذرات في خلية الوحدة

hkl = معاملات ميلر

$u_n v_n w_n$ = موقع الذرة (n) في خلية الوحدة

$$\sqrt{-1} = i$$

• يرافق مرور الأشعة السينية خلال النموذج امتصاص جزء من طاقته مؤديا إلى هبوط في شدة الأشعة المُحادة ويسمى هذا العامل بعامل الامتصاص ويعتمد هذا العامل على زاوية براك فعند الزوايا الواطئة يكون معدل الامتصاص كبير نسبيا، مسببا هبوط في شدة الأشعة المنعكسة.

• **العامل التعددي** : هو عبارة عن عدد صحيح يعبر عن مجموعة من المستويات المتكافئة التي تتميز بفواصل متساوية وتعكس الأشعة السينية إلى خط حيود واحد. إن لكل نظام بلوري جدول خاص به يتم من خلاله احتساب قيمة هذا العامل بالاعتماد على قيم دلائل ميلر ، ويبين الجدول (1) قيم العامل التعددي للنظام السداسي.

• **عامل الاستقطاب**: تكون الأشعة المتولدة غير مستقطبة ولكن حيود الأشعة من المستويات البلورية يسبب استقطابا جزئيا للأشعة ويؤدي هذا إلى هبوط في شدة

$$\text{الأشعة بمقدار } \left(\frac{1 + \cos^2 2\theta}{2} \right).$$

• **عامل لورنتز** : بالإضافة الى عامل الأستقطاب تتأثر شدة الأشعة السينية المُحادة بعامل اخر يسمى عامل لورنتز والذي يعبر عن الوقت النسبي الذي تبقى فيه

المستويات في وضع حيود، يؤدي هذا العامل إلى زيادة في شدة الأشعة التي

$$\text{تحديد من المستويات البلورية بمقدار } \left(\frac{1}{4 \sin^2 \theta \cos \theta} \right) \cdot$$

*ملاحظة: يدمج العاملين بعامل واحد يسمى عامل لورنتز-الاستقطاب والذي يساوي

$$\left(\frac{1 + \cos^2 2\theta}{\sin^2 \theta \cos \theta} \right) \cdot$$

• عامل درجة الحرارة: ان الصورة المثالية للبلورة تتلخص في تمركز الذرات في مواقع ثابتة ضمن البنية البلورية، وهذا بعيد عن الواقع، إن الذرات تخضع عادة إلى حركة اهتزازية، وتزداد سعة اهتزاز الذرات مع زيادة درجة الحرارة مؤدية إلى هبوط في شدة الأشعة التي تحيد منها.

*ملاحظة هامة: يكون تأثير عاملي الحرارة والامتصاص في اتجاهين متعاكسين، وعلى الرغم من أن هذين العاملين لا يلغي أحدهما الآخر تماماً فإن تأثيرهما على شدة الأشعة السينية التي تحيد من المستويات الذرية يكون محدود جداً بحيث إن إهمالهما سوف لا يسبب أي تأثير ملحوظ على دقة النتائج. (2)
وقد تم التوصل لوضع معادلة لحساب شدة الأشعة السينية وهي (2)

$$I = |F|^2 \cdot p \cdot \left(\frac{1 + \cos^2 2\theta}{\sin^2 \theta \cos \theta} \right) \dots \dots \dots (2)$$

حيث ان

I = الشدة النسبية

$|F|^2$ = مربع عامل التركيب

P = العامل التعددي

$$= \left(\frac{1 + \cos^2 2\theta}{\sin^2 \theta \cos \theta} \right) = \text{عازل لورنتز-الاستقطاب}$$

لقد تناولت العديد من البحوث المنشورة للمركب (NiAs) ومن عدة جوانب فمنها من تطرق إلى طريقة التحضير وظروف التحضير من حيث درجة حرارة التحضير والغاز المستخدم أثناء التحضير (3)، ومنها تناول دراسة الخواص

الكهربائية والمغناطيسية والبصرية للمركب والعوامل المؤثرة فيها⁽⁴⁾، ولذلك وجدنا من الضروري دراسة موضوع الشدة النسبية للأشعة السينية المُحاددة عن المركب (NiAs).

النتائج والحسابات والمناقشة:

تم الاستعانة بملفات حيود المسحوق الخاصة بالمركب (NiAs) في تحديد قيم كل من مساحة السطوح (d) ومعاملات ميلر (hkl) والشدة النسبية عملياً. ولغرض حسب قيمة (I) نظرياً تم إتباع الخطوات التالية :

لإيجاد قيمة عامل التركيب (F) لابد من حساب قيمة عامل الاستطارة الذرية (f) ولكلا الذرتين المكونتين للمركب وللانعكاسات المُسجلة، وقد تم الاعتماد على الجدول (2) والشكل (1) لحسب قيمة (f)، وأدرجت القيم المستحصلة منه ضمن الجدول (4).

بعد تحديد قيم $(f_{mn}), (f_{sb})$ ، كن لابد من معرفة مواقع الذرات لكلا عنصري المركب ضمن خلية الوحدة، وكانت كما موضح في الجدول (3).

باعتقاد القواعد الرياضية وبالرجوع إلى قوانين تبسيط المعادلات التي تحتوي دالة آسية (e) تم تبسيط المعادلة (1) (لأنه لا يمكن إيجاد قيمة حقيقية لها كونها تحتوي على عدد مركب) وعلى النحو التالي:

$$F = \sum_{n=1}^{n=N} f_n [\cos 2\pi(hu_n + kv_n + lw_n) + i \sin 2\pi(hu_n + kv_n + lw_n)] \dots\dots\dots (3)$$

ان المعادلتين (1) و(3) تعني وجود مركبتين لأية سعة موجة مستطيرة هما a و b حيث إن :

$$F = a + ib \dots\dots\dots (4)$$

$$a = \sum_{n=1}^{n=N} f_n \cos 2\pi(hu_n + kv_n + lw_n).....(5)$$

$$b = \sum_{n=1}^{n=N} f_n \sin 2\pi(hu_n + kv_n + lw_n).....(6)$$

$$|F|^2 = (a + ib)(a - ib) = a^2 + b^2(7)$$

$$|F|^2 = [f_1 \cos 2\pi(hu_1 + kv_1 + lw_1) + f_2 \cos 2\pi(hu_2 + kv_2 + lw_2) +]^2 + [f_1 \sin 2\pi(hu_1 + kv_1 + lw_1) + f_2 \sin 2\pi(hu_2 + kv_2 + lw_2) +]^2(8)$$

وقد تم استخدام المعادلة (8) لحساب عامل التركيب، وبالتعويض عن قيم المواقع الذرية ولكل سطح من اسطح ميلر ينتج القيم المثبتة في الجدول (4). أُدرجت جميع النتائج ضمن الجدول (5) لغرض حساب الشدة النسبية.

الاستنتاجات:

من ملاحظة النتائج المثبتة في الجدول (5) يمكن استنتاج التالي:

١. هناك تطابق في تسلسل شدة الخطوط من حيث الخط الأكثر شدة نزولا إلى الخط الأقل شدة وبنفس الترتيب بين الشدة المحسوبة والملاحظة.
٢. هناك تقارب نسبي بين القيم المحسوبة والمسجلة ويمكن أن يُعزى إلى جملة من الأسباب أهمها:

أ- تم الاعتماد في حساب الشدة النسبية نظريا على مواقع الذرات والتي تم الاستعانة بالمصادر (7-11) لتحديد. ومن المنطقي أن هذه المواقع تختلف عن المواقع الحقيقية كونها مواقع افتراضية نموذجية إذ انه لا وجود لذرة نموذجية في الطبيعة.

- ب- لا بد لهذه الذرات من حركة ما دامت عملية القياس لم تتم في درجة الصفر المطلق، وعليه فمن المتوقع إن تكون مجموعة من الذرات قد تركت مواقعها مُخلفة عيوب بلورية.
3. لوحظ إن هناك انعكاسات تكاد تكون متطابقة في الشدة وأخرى تختلف بنسب معينة ويمكن تعليل ذلك إلى إن التقارب يحدث للسطوح الأكثر تجانس في توزيع الذرات.
4. لوحظ إن السطحين (205) و (222) لهما نفس قيمة فسحة السطوح ($d = 0.847\text{\AA}$) وعليه فإن الشدة المُسجلة تمثل محصلة الشدتين معاً، في حين إن الشدة المحسوبة نظرياً تمثل الشدة المنعكسة من كل سطح على حدة، ولذلك نلاحظ إن الاختلاف بين القيم العملية والنظرية للشدة لهذين السطحين عالية نسبياً.
5. يمكن القول انه لا غني عن الدراسة العملية ولكن الدراسة النظرية يمكن أن تجنبنا الأخطاء المختبرية كافة، سواء في أجهزة القياس أو في تحضير العينة والتي أدت إلى وجود هذا الاختلاف بين النتائج العملية والنظرية.

المصادر

1. اسس علم البلورات (1990) ، تاليف د. نجاح صادق جميل، جامعة الموصل
2. B.D.Cullity (1978) , (Element of X-Ray diffraction)^{2nd} edition Addison-wesley publishing company, Inc,(U.S.A)
3. Y. Xie, J. Lu, P. Yan, X. Jiang and Y. Qian (2000), The chemical. Society. of Japan. , Vol. 29 , No. 2, p.114 (A Safe Low Temperature Route to Nanocrystalline Transition Metal Arsenides)
4. J. W. Allen and J. C. Mikkelsen(1977), Phys. Rev. B 15, p. 2952 - 2960 , (Optical properties of CrSb, MnSb, NiSb, and NiAs)

5. H.S.Peiser, H.P.Rooksby, and A.J.C.Wilson (1955), (X-Ray diffraction polycrystalline materials), London .Institute of physics .

6. N.F.M.Henry, H.Lipson , and W.A.Wooster .(1951), (The interpretation of X-Ray diffraction photographs, London .Macmillan .

7. J.-C. ZHENG AND J. W. DAVENPORT.(2004), Phys. Rev. B 69 ,p (144415-1) to (144415-9) , (Ferromagnetism and stability of half-metallic MnSb and MnBi in the strained zinc-blende structure: Predictions from full potential and pseudopotential calculations).

8. M. S. Miao, P. Lukashev, A. Herwadkar, and W. R.L. Lambrech .(2005), phys. stat. sol. (c) 2, No. 7, 2516–2519 ., (Crystal structure, electronic structure and magnetism of transition metal nitrides).

9. T. Jeong, Ruben Weht, and W. E. Pickett1.(2005), Phys. Rev . B 71, p (184103-1) to(184103-7). (Semimetallic antiferromagnetism in the half-Heusler compound CuMnSb)

10. Y.Yamaguchi, H.Watanafe, and T.Suzuki. (1976), J.Phys.soc.Japan .vol.41, no.2, 703-704 (magnetic moment of excess Mn in Mn_{1+&}Sb)

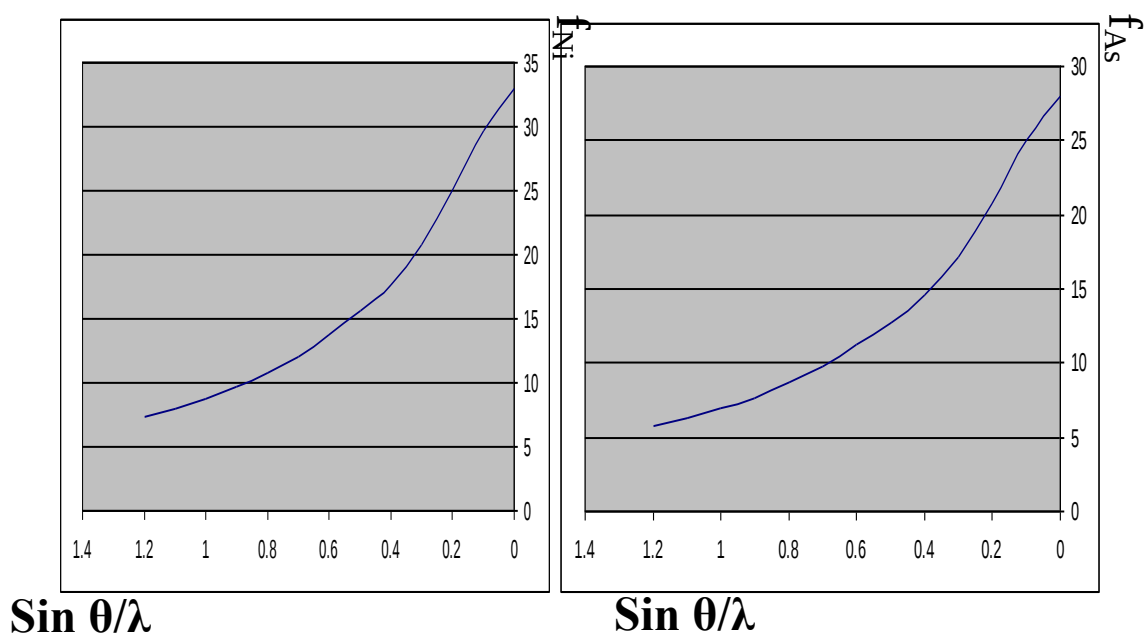
11. W.Rimers, E.Hellner, and W.Treutmann. (1983), J.phys.chem.solid.svol.44, no.3, 195-204 (polarized neutron diffraction study of Mn_{1.09}Sb)

جدول (1) قيم العامل التعددي (p) لخطوط الحيود في طريقة المسحوق وللنظام السداسي. (2, 6)

Hexagonal system	$\frac{hk.l}{24}$	$\frac{hh.l}{12}$	$\frac{0k.l}{12}$	$\frac{kk.0}{12}$	$\frac{hh.0}{6}$	$\frac{0k.0}{6}$	$\frac{00.l}{2}$
------------------	-------------------	-------------------	-------------------	-------------------	------------------	------------------	------------------

جدول (2) عامل الأستطارة الذرية (f) لعنصري (Ni) و (As). (2, 5)

$\sin \theta / \lambda$	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1	1.1	1.2
$f_{(Ni)}$	28	25	20.7	17.2	14.6	12.7	11.2	9.8	8.7	7.7	7	6.3	5.8
$f_{(As)}$	33	29.7	25	20.8	17.7	15.6	13.8	12.1	10.8	9.7	8.7	7.9	7.3



شكل (1)

(a) تغيير عامل اللأستطارة الذرية (f) لعنصر الـ (As) مع $\sin \theta/\lambda$ (Z=33)
(b) تغيير عامل اللأستطارة الذرية (f) لعنصر الـ (Ni) مع $\sin \theta/\lambda$ (Z=28)

جدول (3) المواقع الذرية لكل من ذرتي (As) و (Ni) ضمن خلية الوحدة. (11-7)

نوع الذرة	موقع الذرة الأولى	موقع الذرة الثانية
Ni	000	$00 \frac{1}{2}$
As	$\frac{1}{3} \frac{2}{3} \frac{1}{4}$	$\frac{2}{3} \frac{1}{3} \frac{3}{4}$

جدول (4) حساب قيم (f_{Ni}) , (f_{As}) ومربع القيمة المطلقة لعامل التركيب ولكل انعكاس

Line no.	hk.l	Sin θ/λ	f_{Ni}	f_{As}	$ F ^2$	
1	100	0.159236	22.463	26.927	$[2f_{Ni}-f_{As}]^2$	323.964
2	101	0.18797	21.216	25.564	$3f_{As}^2$	1960.554
3	102	0.254972	18.775	22.69	$[2f_{Ni}+f_{As}]^2$	3628.858
4	110	0.276091	18.04	21.808	$[2f_{Ni}+2f_{As}]^2$	6351.452
5	201	0.334001	16.316	19.746	$3f_{As}^3$	1169.714
6	103	0.338983	16.186	19.591	$3f_{As}^3$	1151.422
7	202	0.376506	15.198	18.413	$[2f_{Ni}+f_{As}]^2$	2382.318
8	004	0.398089	14.652	17.762	$[2f_{Ni}+2f_{As}]^2$	4202.67
9	211	0.434028	13.954	16.986	$3f_{As}^3$	865.5726
10	203	0.437828	13.878	16.902	$3f_{As}^3$	857.0328
11	212	0.466853	13.327	16.293	$[2f_{Ni}+f_{As}]^2$	1844.445
12	300	0.479386	13.099	16.041	$[2f_{Ni}+2f_{As}]^2$	3396.558
13	114	0.484027	13.004	15.936	$[2f_{Ni}+2f_{As}]^2$	3356.348
14	213	0.517063	12.445	15.294	$3f_{As}^3$	701.7193
15	105	0.521921	12.37	15.204	$3f_{As}^3$	693.4848
16	220	0.552486	11.905	14.646	$[2f_{Ni}+2f_{As}]^2$	2819.822
17	311	0.584112	11.44	14.088	$3f_{As}^3$	595.4152

Diala , Jour , Volume , 31 , 2008

18	205	0.590319	11.35	13.98	$3f_{As}^3$	586.3212
19	222	0.590319	11.35	13.98	$[2f_{Ni}-2f_{As}]^2$	27.6676
20	312	0.609013	11.074	13.647	$[2f_{Ni}+f_{As}]^2$	1281.282
21	106	0.617284	10.962	13.511	$[2f_{Ni}+f_{As}]^2$	1255.639
22	304	0.621891	10.892	13.426	$[2f_{Ni}+2f_{As}]^2$	2365.46

المصدر (حسبت ضمن هذا العمل)

جدول (5) جميع تفاصيل إيجاد الشدة النسبية نظرياً ($\lambda=1.5418 \text{ A}^0$)

θ	$\sin \theta$	d	hk.l	$ F ^2$	p	$\left(\frac{1+\cos^2 2\theta}{\sin^2 \theta \cos \theta}\right)$	(I) المحسوبة	(I/I ₀) المحسوبة
14.21195	0.24551	3.14	100	323.964	6	30.41	59110.47	11.862558
16.8467	0.289812	2.66	101	1960.554	12	21.18	498294.5	100
23.14851	0.393116	1.961	102	3628.858	12	10.35	450704.1	90.4493495
25.19349	0.425676	1.811	110	6351.452	6	8.573	326706	65.5648465
30.995	0.514963	1.497	201	1169.714	12	5.367	75334.23	15.1184159
31.50978	0.522644	1.475	103	1151.422	12	5.181	71586.2	14.3662437
35.48551	0.580497	1.328	202	2382.318	12	4.029	115180.3	23.1149128
37.86288	0.613774	1.256	004	4202.67	2	3.561	29931.41	6.00677192
42.00412	0.669184	1.152	211	865.5726	24	3.038	63110.63	12.6653277
42.45755	0.675044	1.142	203	857.0328	12	2.994	30791.47	6.17937309
46.03752	0.719795	1.071	212	1844.445	24	2.785	123282.7	24.7409306
47.65633	0.739118	1.043	300	3396.558	6	2.74	55839.42	11.2061086
48.26856	0.746273	1.033	114	3356.348	12	2.732	110034.5	22.0822284
52.86429	0.797208	0.967	213	701.7193	24	2.799	47138.7	9.46000775
53.58103	0.804697	0.958	105	693.4848	12	2.828	23534.1	4.72293049
58.41053	0.851823	0.905	220	2819.822	6	3.166	53565.35	10.7497371
64.23495	0.900584	0.856	311	595.4152	24	3.928	56130.98	11.2646211
65.52657	0.910153	0.847	205	586.3212	12	4.166	29311.37	5.8823388
65.52657	0.910153	0.847	222	27.6676	12	4.166	1383.159	0.27757856
69.88044	0.938977	0.821	312	1281.282	24	5.224	160642	32.2383695
72.12499	0.951728	0.81	106	1255.639	12	5.956	89743.05	18.0100424
73.50224	0.958831	0.804	304	2365.46	12	6.524	185187.2	37.164203

**Calculations of relative intensity of X-Ray diffracted
of (NiAs) compound.**

A. H. Abd Al- Razak.

**Department of Physics, College of Education
Ibn Al-Haithem, University of Baghdad.**

Abstract

Relative intensity of X-Ray diffraction Calculated, considering many factors effecting on the relative intensity of diffraction line on powder method, which is clearly comparable with the results obtained from the observed intensity and calculated intensity.

This different between theoretical and experimental values because all real crystal are imperfect, in the sense that they have a mosaic structure, and the degree of imperfection can vary greatly from one crystal to another.

We have considered a crystal as a collection of atoms located at fixed point in the lattice, in order to follow up the accuracy of this atomic position depended on many references to determined accuracy of atomic position in the unit cell.