

حساب عامل التشتت الذري للأشعة السينية في النحاس

محسن حسن علي

قسم الفيزياء، كلية التربية للعلوم الصرفة، جامعة تكريت، تكريت، العراق

الملخص

في هذا البحث حسب عامل التشتت الذري $f(\sin \theta / \lambda)$ للأشعة السينية في النحاس باستخدام الدالة الموجية المشتملة على التقريب المستقل للجسيم للقيم $0 \leq (\sin \theta) / \lambda \leq 1A^{0-1}$ ، حيث تكمن الأهمية الفيزيائية لعامل التشتت الذري في علاقته بالعديد من الخواص الذرية المهمة مثل شدتي الاستطارة المتشاكهة والكلية ودالة الاستطارة غير المتشاكهة والمقاطع العرضية للاستطارات المتشاكهة وغير المتشاكهة والتفاضلي لاستطارة الإلكترونات بواسطة الذرات وعامل التركيب الهندسي، إذ وجد أن هنالك اختلاف بحوالي 23% بين القيم التي تم التوصل إليها مع القيم المقاسة لعامل التشتت الذري.

الكلمات مفتاحية: عامل التشتت الذري، سعة الاستطارة، المقطع العرضي التفاضلي، الاستطارة المتشاكهة.

المقدمة

ان الطرق المستخدمة لوصف تفاعل الأشعة السينية مع الذرة تتطلب وصفاً للدالة الموجية الذرية، حيث ان الدالة الموجية الكلية للذرة Ψ يجب ان تحقق معادلة شرودنجر [3].

$$H|\Psi(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)\rangle = E|\Psi(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_N, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)\rangle \quad (4)$$

حيث \vec{R}_I احداثيات النواة و \vec{r}_i احداثيات الإلكترون و H المؤثر الهاملتوني و E الطاقة الكلية، إذ يمكن كتابة المعادلة السابقة كمجموع

$$H = T_n + V_{n-n} + V_{n-e} + T_e + V_{e-e} \quad (5)$$

حيث

$$T_n = -\sum_{I=1}^N \frac{p_I^2}{2M_I}, \quad V_{n-n} = \sum_{I < J}^N \frac{Q_I Q_J}{R_{IJ}} + V_{strong}$$

$$V_{n-e} = -\sum_{I=1}^N \sum_{i=1}^n \frac{Q_I}{|\vec{R}_I - \vec{r}_i|} \quad (6)$$

حيث T_n و T_e هما الطاقة الحركية للنكليونات والإلكترونات على التوالي، V_{n-n} هي طاقة كولوم، Q_I شحنة النكليون وهي +1 للبروتون و 0 للنيترون، V_{n-n} و V_{e-e} هما القوة النووية للنكليونات وقوة التنافر للإلكترونات على التوالي.

الغرض من هذه المقدمة هو لتوضيح إهمال جميع التفاعلات ما عدا تفاعل كولوم بين النواة والإلكترونات وحد التنافر بين الإلكترونات، حيث ان التركيب النووي والانتقالات النووية (V_{n-n} و T_n) يمكن ان تكون تفاعلات مهمة ضمن الطاقة 2MeV أو أكثر [5].

ان تأثيرات الكتلة المختزلة على طاقة الفوتون يتم تجاهلها من خلال اعتبار كتلة النواة كبيرة جداً نسبة إلى كتلة الإلكترون والتي يمكن ان نميزها بالنسبة للذرات ذات العدد الذري الواطئ، ومن ناحية أخرى فان حد تفاعل البرم مع المدار ($V_{L.S}$) يكون صغيراً ويمكن معالجته كأضطراب للحلول التقريبية التي يتم الحصول عليها، لذلك نعتبر ان الحل لمعادلة القيمة الذاتية يكون للإلكترونات فقط [6]،

$$H|\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)\rangle = E|\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)\rangle \quad (7)$$

والمؤثر الهاملتوني يعطى بـ

يصف عامل التشتت الذري للأشعة السينية الانتقالات المكانية ومستويات الطاقة للإلكترونات الذرية، حيث يمكن من خلاله إيجاد الخصائص البصرية للمادة، إذ يسمح بحساب معاملات الانكسار والتوهين والمقاطع العرضية للاستطارة، ويستخدم عامل التشتت الذري لوصف عمل العدسات والمرابا متعددة الطبقات وبلورات الحيود والمرشحات [1].

ان المعرفة الدقيقة لعامل التشتت الذري يمكن ان تؤدي الى التصميم الأفضل للمنظومات البصرية الأكثر دقة للتحليل في مجالات الفيزياء المختلفة كالفيزياء الطبية [2]، وفيزياء الطاقة العالية [3]، وعلم البلورات، ودراسات كثافة الشحنة، والتصوير بالأشعة السينية [4].

الأسس النظرية

ان تفاعل الفوتون مع الذرة يوصف بـ

$$\langle \Psi', \gamma', env' | I | \Psi, \gamma, env \rangle \quad (1)$$

حيث تمثل $|\Psi, \gamma, env\rangle$ الحالة الابتدائية للذرة، Ψ الدالة الموجية للحالة الابتدائية، γ الفوتون الساقط، env وسط التفاعل، I التفاعل، $\langle \Psi', \gamma', env' |$ الحالة النهائية للذرة، Ψ' الدالة الموجية للحالة النهائية سواء حالة تأين أو حالة تهيج للذرة، γ' الفوتون النهائي اذا لم يمتص من قبل الذرة، env' وسط التفاعل النهائي [5].

عندما لا يكون هنالك تغير في بيئة التفاعل فان العلاقة السابقة تكتب بالشكل التالي

$$\langle \Psi'_{env}, \gamma' | I | \Psi_{env}, \gamma \rangle \quad (2)$$

تمثل Ψ'_{env} و Ψ_{env} الحالة الابتدائية والنهائية للذرات ذات الاواصر الجزيئية والايونية أو في حالة وجود مجال كهربائي أو مغناطيسي خارجي.

عندما يتم إهمال جميع تأثيرات وسط التفاعل فان المقطع العرضي لتفاعل الفوتون مع الذرة يعطى بـ

$$\langle \Psi', \gamma' | I | \Psi, \gamma \rangle \quad (3)$$

ان إهمال تأثيرات الوسط على متجه الحالة الذرية يشير أساساً إلى تقريب الذرة المنفردة.

حيث Ψ^* الدالة الموجية المرافقة، $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ الموجة الساقطة، \vec{k} متجه الموجة ($k = 2\pi/\lambda$)، \vec{r} متجه الموضع.

يمكننا تطبيق المعادلة (15) على حالة ذرة مفردة، حيث نلاحظ ان الالكترونات ليس لها مواضع محددة بل على هيئة سحابة شحنة متصلة تنتشر على امتداد حجم الذرة، لذلك فان

$$f = \int |\Psi|^2 e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} dv \quad (16)$$

يمكننا أن نشير باختصار إلى سمة مهمة من سمات التشتت وهي خاصية الترابط المصاحبة لعملية التشتت، وتعني هذه الخاصية أن الأجسام المشتتة تحافظ على علاقات طورية محددة فيما بينها [9].

يمكن تبسيط التكامل وذلك بأعتبار كثافة الشحنة متماثلة كروياً حول النواة، لأنه حينئذ يمكن اجراء التكامل على الجزء الزاوي من عنصر الحجم، ويكون التعبير الناتج هو

$$f = \int_0^\infty 4\pi |\Psi|^2 \frac{\sin(kr)}{kr} dr \quad (17)$$

يتضح من المعادلة (17) ان عامل التشتت يعتمد على زاوية التشتت.

الحسابات والنتائج

لكي نتمكن من حساب عامل التشتت الذري فانه من الضروري معرفة الدالة الموجية، إذ تم حل المعادلة (14) لاجاد الدالة الموجية، حيث وجد ان [6]،

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-zr/a_0} \quad (18)$$

حيث z العدد الذري للعنصر، r المسافة بين الالكترون والنواة، a_0 نصف قطر بوهر لذرة الهيدروجين.

بتعويض المعادلة (18) في (17) واجراء عملية التكامل، وجد ان عامل التشتت الذري يعطى بالمعادلة،

$$f(k) = \frac{z}{(1+4\pi^2 k^2 a_0^2)^2} \quad (19)$$

حيث ان k طول متجه الانسطارا والذي يساوي $(\sin \theta)/\lambda$ ، ولإيجاد قيم عامل التشتت الذري تم اعتماد المعادلة (19) وبناء برنامج على الحاسبة الالكترونية باستخدام برامج الـ MATLAB ولقيم $0 \leq (\sin \theta)/\lambda \leq 1A^{0^{-1}}$ ، الجدول (1) يوضح قيم عامل التشتت الذري التي تم الحصول عليها.

ان تغير عامل التشتت الذري مع $(\sin \theta)/\lambda$ موضح بالشكل (1)، وعندما تكون قيمة $(\sin \theta)/\lambda$ مساوية للصفر تكون قيمة عامل التشتت الذري مساوية لعدد الالكترونات في الذرة وعند زيادة $(\sin \theta)/\lambda$ تقل قيمة عامل التشتت للذرة لان الاشعة السينية المشتتة من إلكترون في جزء ما من الذرة يكون لدرجة متزايدة غير متحد في الطور مع الاشعة المشتتة من اجزاء اخرى من السحابة الالكترونية، وعلى هذا فان التغير في عامل التشتت هو نتيجة الحجم المحدد للذرة باعتبارها هي المصدر المشتت.

$$H = -\sum_{i=1}^n \frac{\nabla_i^2}{2} - \sum_{i=1}^n \frac{Z}{r_i} + \sum_{i<j}^n \frac{1}{r_{ij}} \quad (8)$$

حيث ان المؤثرات تكون فقط على احداثيات الموقع للالكترون، الحدود في المؤثر الهلنتوني تمثل الطاقة الحركية للالكترون وجذب النواة وتتافر الالكترونات على التوالي، اول حدين من هذه الحدود هي حدود للجسيم المنفرد تعتمد فقط على الدوال الموجية للالكترون والمؤثر الهلنتوني لهذه الحدود فقط يمكن ان يعطي حلولاً مضبوطة، لذلك فان الحد الثالث وهو حد التفاعل لكل الكترون مع الالكترونات الاخرى في النظام هو الحد الذي يؤثر على المعادلة (7) و(8) ولا تعطي حلول مضبوطة، لهذا السبب يجب اللجوء الى الطرق التقريبية لحل مثل هذه المعادلات.

ان الهدف من استخدام أي طريقة من طرق التقريب هو ايجاد الدالات المسموحة التي تمثل النظام والقيم المسموحة لطاقة النظام.

ان طريقة استقلالية الجسيمات في رتبها الصفرية (independent particles method in zero order) تتم من خلالها اهمال حدود التناظر بين الالكترونات، حيث ان معادلة شرودنكر لنظام متعدد الالكترونات تكون [7]،

$$H_{(1,2,\dots,n)} \Psi_{(1,2,\dots,n)} = E_{(1,2,\dots,n)} \Psi_{(1,2,\dots,n)} \quad (9)$$

اذا استعنا كتابة المؤثر الهلنتوني بالصورة التالية

$$H_{(1,2,\dots,n)} \Psi_{(1,2,\dots,n)} = \sum_{i=1}^n h_i \quad (10)$$

حيث h_i هو المؤثر الهلنتوني لالكترون واحد فقط عندما يتوفر شرط اهمال حدود التناظر في المرتبة الصفرية، لذلك يمكننا ان نأخذ الدوال

$\Psi_{(1,2,\dots,n)}$ والطاقات $E_{(1,2,\dots,n)}$ بالصورة التالية

$$E_{(1,2,\dots,n)} = \sum_{i=1}^n E_i \quad (11)$$

$$\Psi_{(1,2,\dots,n)} = \prod_{i=1}^n \phi_i \quad (12)$$

تتفصل المعادلة (9) الى مجموعة من المعادلات كل منها تخص إلكترون واحد فقط ولها الصورة التالية،

$$h_i \phi_i = E_i \phi_i \quad (13)$$

لذلك سيكون عدد المعادلات يساوي عدد الالكترونات، ومن ناحية رياضية بحثة فان المعادلة (13) لالكترون منفرد تكافئ معادلة شرودنكر لذرة الهيدروجين،

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{ze^2}{r} \right] \phi = E \phi \quad (14)$$

ان عامل التشتت الذري يعرف بأنه النسبة بين انسطارا الاشعة من الذرة الى انسطارا الاشعة من الكترون حر، ويعبر عنه بوحدة (electrons/atom). ان الانسطارا الناتجة عن الذرة يمكن الحصول عليها عن طريق معالجة كل عنصر الحجم dv كأسطارا كلاسيكية لعناصر الشحنة dv . حيث $|\Psi|^2$ يمثل كثافة الاحتمالية لوجود الالكترون في الموقع r في اللحظة t ، لذلك فان عامل التشتت الذري يعطى بالعلاقة التالية [8]،

$$f = \int \Psi^* e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \Psi dv \quad (15)$$

الشكل (1) يوضح العلاقة بين عامل التشتت الذري مع $(\sin\theta)/\lambda$ ، فعندما تكون قيمة $(\sin\theta)/\lambda$ مساوية للصفر تكون قيمة عامل التشتت الذري مساوية للعدد الذري Z وهذا يتفق مع كل من [15 - 10]، ومن خلال مقارنة النتائج التي تم التوصل اليها مع ما توصل اليه Cromer باستخدام طريقة هارتر- فوك [16] و Hubbell [13] والموضحة بالشكل (1)، نلاحظ ان هنالك سلوك متقارب لقيم عامل التشتت الذري الا ان الاختلافات بين القيم المحسوبة يعتمد على الاسلوب المتبع في ايجاد الدوال الموجية.

بتطوير التقنيات الحاسوبية اصبح من الممكن ايجاد الحلول للدالة الموجية الذرية لمدى واسع من العناصر والطاقات، هذه الحسابات تباعا مكنت من حساب المقاطع العرضية للامتصاص الكهروضوئي. ان الجداول المستخدمة لعامل التشتت الذري تختلف بالحلول للعديد من العناصر ولمدى الطاقات الهامة. ان النماذج النظرية المطورة لا تعطي بالضرورة اتفاقاً افضل مع القيم التجريبية. ان الاختلافات الرئيسية بين النتائج تنتج من الأطر النظرية المختلفة التي استخدمت لحساب الدالة الموجية حيث ان كل منها يعالج التبادل والارتباط والتداخل الذي يحدث بطريقة مختلفة لذلك تنجم الاختلافات عن التطبيق المتنوع للطرق التقريبية ومعايير التقارب [13].

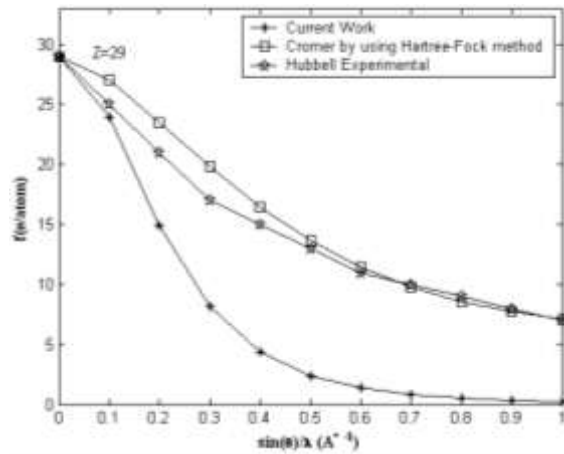
ان فترات الثقة (Confidence intervals) عموماً من المتطلبات التي وضعت على التقارب والتطابق بالرغم من ان مثل هذه التخمينات للخطأ قد تكون ملائمة للمنطق الداخلي للحساب وهي لا تمثل الخطأ او التطبيق النموذجي، ان مجموع الأخطاء الصغيرة في حساب الدوال الموجية للمدارات الداخلية، يؤثر على حساب المدارات الخارجية، ويؤدي الى اخطاء اكبر من تلك المتوقعة من معايير التقارب لوحدها [12].

التقريبات المختلفة قد تكون صحيحة في مناطق مختلفة للطاقة، لذلك لا توجد جداول يمكن ان تفضل لجميع الطاقات، ان نتائج القياسات جدولت عدة مرات لإيجاد مجموعة البيانات الأكثر دقة من القياسات الفردية. على اية حال، تعرض هذه الجداول اختلافات غير مفسرة من (10- 50) % في الانظمة المختلفة لحل الاختلافات بين جداول القيم المحسوبة [14].

[1] E. M. Dufresne, D. A. Arms, R. Clarke, N. R. Pereira, S. B. Dierker, and D. Foster, (2001) "Lithium metal for x-ray refractive optics", Appl. Phys. Lett. 79(25), 4085-7.
[2] J. F. Seely, C. N. Boyer, and G. E. Holland, (1998) " Dual-energy bone densitometry using a single 100 ns x-ray pulse", Medical Physics 25(10), 2027-36.
[3] C. Q. Tran, C. T. Chantler, Z. Barnea, D. Paterson, and D. J. Cookson, (2003) "Measurement of the x-ray mass attenuation coefficient and the imaginary part of the form factor of silicon using synchrotron radiation", Phys. Rev. A 67, 042716/1-12.

الجدول (1) قيم عامل التشتت الذري

$\sin\theta/\lambda$ Å^{-1}	$f(k)$ (e/atom)
0.0	29.000
0.1	24.023
0.2	14.906
0.3	8.1334
0.4	4.3596
0.5	2.4121
0.6	1.3989
0.7	0.8514
0.8	0.5417
0.9	0.3585
1.0	0.2455



الشكل (1) يوضح العلاقة بين $(\sin\theta)/\lambda$ وعامل التشتت الذري

المناقشة والاستنتاجات

ان الصيغة التي تم التوصل اليها لعامل التشتت الذري تعطي تقريباً جيداً ضمن المدى $0 < (\sin\theta)/\lambda < 2A^{-1}$ ، بينما لا تعطي تقريباً جيداً في المدى $(\sin\theta)/\lambda > 2A^{-1}$ ، حيث يكون هنالك انحراف الى حد كبير عن القيمة المضبوطة، لكن الصيغة لاتزال مفيدة لان قيمة $(\sin\theta)/\lambda$ يجب ان تكون دائما اقل من $2A^{-1}$ ، حيث ان الاشعة السينية سيكون لها طول موجي اطول من $0.5A^0$ وهي القيمة المستخدمة للقياسات العملية.

المصادر

[4] D. C. Creagh, (1991) "The atomic form factor, the dispersion corrections and their role in x-ray crystallography", Chinese Journal of Physics 29(4), 299-325.
[5] R. Nathans and P. F. Yergin, (1955) "Photoneutron cross sections in Mg^{24} , Mg^{25} , Zr^{90} , Zr^{91} ", Phys. Rev. 98, 1296-9.
[6] د.سالم حسن الشماع، (1988) " اساسيات ميكانيك الكم " دار الكتب للطباعة والنشر، جامعة الموصل.
[7] J. C. Slater, (1951) "A simplification of the Hartree-Fock method", Phys. Rev. 81(3), 385-90.

- [8] B. H. Bransden and C. J. Joachain, (1988), "Physics of atoms and molecules", Longman Scientific & Technical, Hong Kong.
- [9] M. D. de Jonge, C. Q. Tran, C. T. Chantler, Z. Barnea, B. B. Dhal, D. J. Cookson, W-K Lee, and A. Mashayekhi, (2004) "Measurement of the x-ray mass attenuation coefficient and determination of the imaginary component of the atomic form factor of molybdenum over the 13.5–41.5-keV energy range", Physical Review A 71(3),.
- [10] C.T. Chantler, C.Q. Tran D. Paterson, D. J. Cookson and Z. Barnea, (2001) "X-ray Extended-Range Technique for Precision Measurement of The X-ray Mass Attenuation Coefficient and Im(f) for Copper Using Synchrotron Radiation". Phys. Lett. A 286,338–346.
- [11] E.B. Saloman, J.H. Hubbell and J.H. Scofield, (1988) "X-ray Attenuation Cross Sections for Energies 100 eV to 100 keV and Elements Z = 1 to Z = 92" At. Data Nucl. Data Tables 38 1–5 .
- [12] R. Nathuram, I.S.S. Rao, and M.K. Mehta, (1988) "Photoelectric Cross Sections for 6–20-keV Photons in Beryllium, Carbon, Magnesium, Aluminum, Silicon, Copper, Silver, and Lead" Phys. Rev. A 37 4978–81 .
- [13] J.H. Hubbell, Wm.J. Veigele, E.A. Briggs, R.T. Brown, D.T. Cromer, and R.J. Howerton, (1975) "Atomic form factors, incoherent scattering functions, and photon scattering cross sections", J. Phys. Chem. Ref. Data 4, 471-538.
- [14] C.T. Chantler, C.Q. Tran, D. Paterson, Z. Barnea and D.J. Cookson,(2001) "Direct Observation of Scattering Contributions in X-ray Attenuation Measurements, and Evidence for Rayleigh Scattering From Copper Samples rather than Thermal-Diffuse or Bragg-Laue Scattering" Radiation Physics and Chemistry 61, 347–350 .
- [15] C. T. Chantler,(2001) "Detailed Tabulation of Atomic Form Factors, Photoelectric Absorption and Scattering Cross Section and Mass Attenuation Coefficients in The Vicinity of Absorption Edges in The Soft X-ray (Z = 30-36, Z = 60-89, E = 0.1-10 Kev)". J. Phys. Chem. Ref. 29, 597-1048.
- [16] D. T. Cromer, A. C. Larson, and J. T. Waber, (1964) " Hartree scattering factors for elements 37 through 98". Acta Crystallogr. 17, 1044–50.

Calculation of Atomic Scattering Factor For X-ray in Copper

Muhsin Hasan Ali

Department of physics, College of Education for Pure Sciences, Tikrit University , Tikrit , Iraq

Abstract

In this paper the atomic scattering factor $f(\sin \theta / \lambda)$ has been calculated for x-ray in copper using Wave function involves The independent particle approximation for the values $0 \leq (\sin \theta) / \lambda \leq 1 \text{ \AA}^{-1}$, The physical importance of this factor appears in its relation with the several important atomic properties such as, the coherent scattering intensities, the total scattering, the incoherent scattering function, the cross section for coherent, incoherent scattering, the differential of electrons scattering from atom and the geometrical structure factor. There was difference of 23% between the values has been found and the values has been measured for atomic scattering factor.

Key Words: atomic scattering factor, scattering amplitude, differential cross section, coherent scattering.