



Determination of the lattice constant of NaCl crystal using X-ray diffraction

Hanan Abdu Allah Kardom¹, Ahlam Taher Baiej^{2*}, Nawara Mohamed Saleh³
^{1,2,3}Department of Physics, Faculty of Science, University of Gharyan, Gharyan, Libya

تعيين ثابت الشبكة لبلورة NaCl باستخدام حيود الأشعة السينية

حنان عبد الله كردوم¹، أحلام الطاهر بعيج^{2*}، نوارا محمد صالح³
^{1,2,3}قسم الفيزياء، كلية العلوم، جامعة غريان، غريان، ليبيا

*Corresponding author: Ahlaam.baeij@gu.edu.ly

Received: October 23, 2025

Accepted: December 25, 2025

Published: December 31, 2025

Copyright: © 2025 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

Abstract:

X-rays are characterized by a wavelength that is close to the interatomic distance, which is about 10^{-8} cm. This makes them suitable for studying the crystal structure of solid materials. When X-rays are incident on a solid material, they are diffracted by atomic planes, and by analyzing their paths and interactions, an interference pattern is formed that carries information about the material's internal structure. This study investigates the theoretical basis of the penetration of X-rays into sodium chloride crystals, where their behavior is observed inside the crystal. The diffraction phenomenon resulting from this interaction is analysed using Bragg's Law, along with discussing its importance in understanding the biological structure using X-ray diffraction techniques. In this research, information was obtained through the analysis of NaCl crystal models and by calculating the interplanar spacing between atoms using Bragg's Law for the (100) and (110) planes. From these results, the lattice constant of the crystal was determined.

Keywords: Characteristic X-ray radiation, energy levels, crystal structures, Miller indices, Bragg scattering, structure factor.

الملخص:

تتميز الأشعة السينية بطول موجي يقارب المسافة البينية بين الذرات، والذي يكون في حدود 10^{-8} cm، وهو ما يجعلها مناسبة لدراسة التركيب البلوري للمادة في الحالة الصلبة. فعند سقوط الأشعة السينية على المادة الصلبة فإنها تنتشر بواسطة المستويات الذرية وتحيد عن مسارها وتتداخل معا مكونة نموذج حيود يحمل في طياته معلومات عن التركيب البنائي للمادة. تتناول هذه الدراسة الأسس الفيزيائية لحيود الأشعة السينية داخل بلورة كلوريد الصوديوم، مستعرضة بناء الشبكة لهذه البلورة، والتحليل الطيفي الناتج عن الحيود، والعوامل المؤثرة في نمط التداخل مثل اتجاه الأشعة، كثافة الإلكترونات، والمعامل البلوري، مع تسليط الضوء على التطبيقات العملية والتقنية الناتجة عن هذا الفهم الدقيق للتركيب البلوري عبر تقنيات الحيود، حيث تم استنتاج ذلك عمليا عن طريق تحليل نماذج الحيود داخل بلورة NaCl وحساب المسافة البينية بين الذرات من قانون براغ للمستويين (100)، (110)، ومنها ثم حساب ثابت الشبكة لهذه البلورة.

الكلمات المفتاحية: الاشعة السينية المميزة، مستويات الطاقة، البناء البلوري، معاملات ميلر، تشتت براغ، ثابت الشبكة.

مقدمة:

تُعد دراسة حيود الأشعة السينية ($X - ray Diffraction$) من أهم الظواهر الفيزيائية التي ساهمت في إحداث نقلة نوعية في فهم البنية البلورية للمواد الصلبة، حيث مكّنت العلماء من دراسة التركيب الذري للمركبات البلورية بدقة فائقة. وتشكل بلورة كلوريد الصوديوم ($NaCl$)، لما تتمتع به من انتظام بلوري مكعب ($face - centered cubic - FCC$)، نموذجًا مثاليًا لفهم آليات التداخل البنّاء للأشعة السينية عند سقوطها على مستوياتها الذرية.

يعتمد مبدأ حيود الأشعة السينية على قانون براغ ($Bragg's Law$)، الذي يربط بين زاوية السقوط وطول الموجة والمسافة بين المستويات الذرية في البلورة. فعندما تسقط الأشعة السينية ذات طول موجي مناسب على بلورة $NaCl$ ، تنعكس هذه الأشعة من مستويات ذرية متعاقبة، وتنتج نمطًا من الحيود يُعبّر عنه رياضياً بالشروط التي وضعها براغ. وتمثل هذه الظاهرة تجسيدًا مباشرًا للطبيعة الموجية للأشعة السينية وللبنية الدورية للمادة الصلبة.

ولا تقتصر أهمية دراسة حيود الأشعة السينية في $NaCl$ على التوصيف البلوري فحسب، بل تمتد إلى مجالات متعددة تشمل علم المواد، والفيزياء الصلبة، والكيمياء البلورية، حيث يُستخدم $NaCl$ كمرجع معياري لمعايرة أطيف الحيود ودراسة نقاوة البلورات. إن بساطة التركيب البلوري لكلوريد الصوديوم وانتظامه المثالي يجعلان منه حجر الأساس في تعليم وفهم علم البلورات التجريبي والنظري على حدٍ سواء.

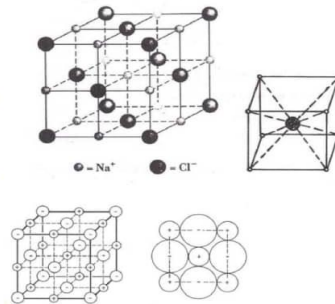
الهدف من البحث:

استخدام بلورة كلوريد الصوديوم الاحادية ذات الاتجاهات (100) و (110) بشكل منفصل لإيجاد شدة الاشعاع المنبعث من أنبوبة الاشعة السينية، وكذلك إيجاد زوايا براغ للأشعة المميزة من الطيف وحساب المسافة بين مستويات الشبكة لكل اتجاه ومن ثم تعيين ثابت الشبكة للبلورة.

النظرية:

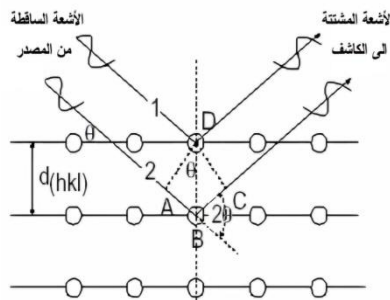
يتبلور $NaCl$ على شكل شبكة مكعب وفيه تتبادل أيونات الصوديوم والكلور الأماكن على امتداد الاتجاهات الأساسية، كما هو موضح بالشكل (1) حيث يبين خلية الوحدة في الأبعاد الثلاثة، نلاحظ أن الخلية تكون من النوع المتمركز الاوجه (FCC).

وتكون مواضع أيونات الصوديوم الأربعة ($0\ 0\ 0, 1/2\ 1/2\ 0, 1/2\ 0\ 1/2, 0\ 1/2\ 1/2$) وأيونات الكلور الأربعة في المواضع ($1/2\ 1/2\ 1/2, 0\ 0\ 1/2, 0\ 1/2\ 0, 1/2\ 0\ 0$)، إن شبائك Na^+ و Cl^- مزاحة عن بعضها البعض بمقدار $\frac{a}{2}$ ، كما هو موضح في الشكل (1).



الشكل (1): بلورة (وحدة خلية) كلوريد الصوديوم $NaCl$

عندما تسقط أشعة سينية على بلورة، تتفاعل مع سحب الإلكترونات المحيطة بالذرات. يؤدي هذا التفاعل إلى تشتت الأشعة السينية في جميع الاتجاهات. ونظرًا لأن الذرات في البلورة مرتبة بشكل منتظم ودوري في ثلاثة أبعاد، فإن الأمواج المشتتة تتداخل مع بعضها البعض. هذا التداخل يمكن أن يكون بناءً أو هدامًا، اعتمادًا على فرق المسار بين الأمواج المشتتة كما هو موضح بالشكل (2).



الشكل (2): انعكاس الاشعة من المستويات الذرية

شرط حدوث الحيود أي التداخل البناء هو أن يكون فرق المسار بين الأمواج المشتتة من مستويات بلورية متتالية مساوياً لعدد صحيح من الأطوال الموجية. هذا الشرط يعرف بقانون براغ، والذي يمثل الأساس الرياضي لتفسير أنماط الحيود. والذي ينص على أن:

$$n\lambda = 2d \sin \theta \quad ; (n = 1, 2, 3, \dots) \dots (1)$$

حيث n رتبة الحيود (عدد صحيح موجب)، λ طول موجة الأشعة السينية الساقطة، d المسافة بين المستويات البلورية المتوازية، θ زاوية سقوط الأشعة السينية على المستويات البلورية.

ويمكن حساب المسافة بين المستويات البلورية لبلورة كلوريد الصوديوم باستخدام المعادلة:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \dots \dots \dots (2)$$

حيث a ثابت الشبكة البلورية، و (hkl) مستويات ميلر التي تحدد اتجاه المستوى البلوري.

ويتم تحديد الكثافة النسبية لجميع الانعكاسات من خلال قوة التشتت وموقع الذرة الأحادية في خلية الوحدة للشبكة

البلورية مع موقع الذرة عند (000) ، $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ ، $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ، $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ عند محاور الخلية (FCC) من العلاقة:

$$F(hkl) = \sum_n f_n \cdot \exp[-2\pi i(hu_n + kv_n + lw_n)] \dots \dots (3)$$

حيث $F(hkl)$ الكثافة النسبية، f_n عامل التشتت الذري، w_n, v_n, u_n إحداثيات لعدد n من ذرات خلية الوحدة. نجد أن $F = 0$ عندما (h, k, l) تحتوي على أعداد زوجية وفردية، و $F = 4f$ عندما تكون جميع الأدلة زوجية أو فردية.

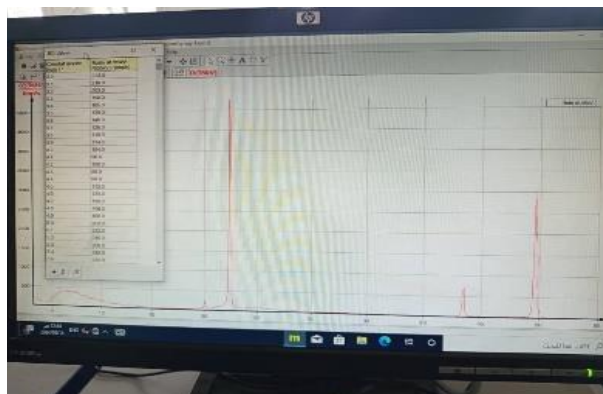
الجانب العملي:

يتم استخدام وحدة (X-Ray unit, 35kv) مصنعة من الشركة الألمانية Phywe متكونة من انبوبة للأشعة السينية وكذلك جانوميتر لقياس الاشعاع بزوايا مختلفة، كما هو موضح بالشكل (3).



الشكل (3): وحدة الأشعة السينية

وبلورة كلوريد الصوديوم (NaCl) الموضحة بالشكل (4) و جهاز كومبيوتر وبرنامج (measure software) خاص بوحدة (X-Ray unit 35 KV) الموضح بالشكل (5)



الشكل (5): جهاز كومبيوتر وبرنامج (measure soft wear)



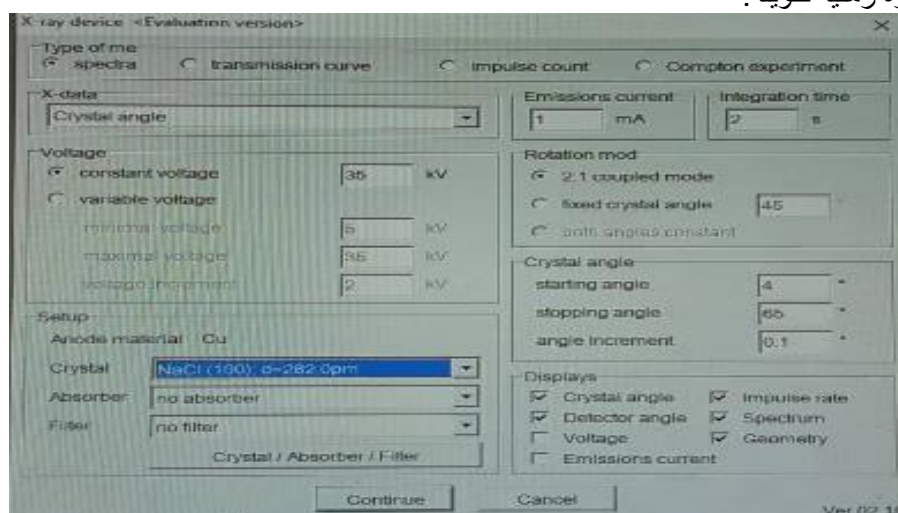
الشكل (4): بلورة كلوريد الصوديوم

يتم إعداد التجربة كما هو موضح بالشكل (6)، حيث تم توصيل وحدة الأشعة السينية باستخدام وصلة (Rs232) بجهاز الكمبيوتر، وتثبيت المحدد في مخرج أنبوب الأشعة السينية بقطر 1mm وتوصيل الجانوميتر وأنبوبة عداد جايجر في اللوحة الأساسية لمنطقة التجربة بضبط الجانوميتر مع بلورة كلوريد الصوديوم في المنتصف، ومن ثم قفل وحدة الأشعة السينية، ثم يتم التشغيل، يتم فتح البرنامج المستخدم في جهاز الكمبيوتر (Measure) والضغط على (Gauge) ويتم اختيار (x-ray Device).



الشكل (6): توصيل التجربة

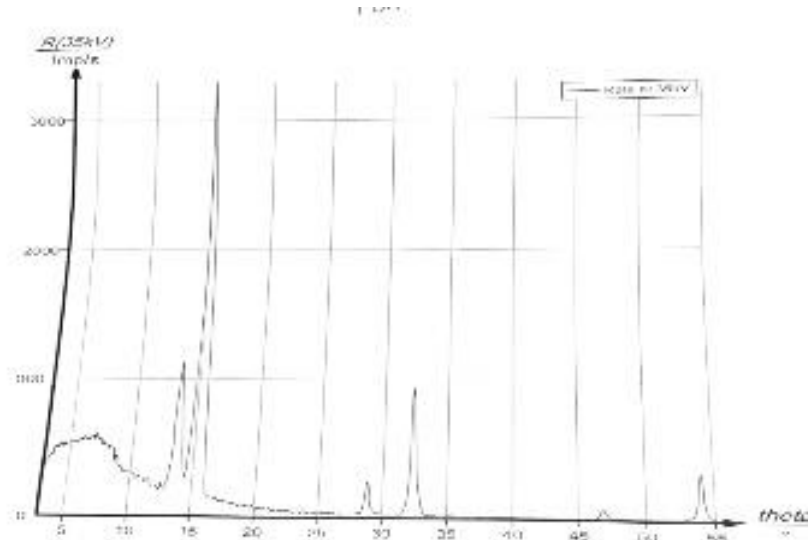
نقوم باختيار القيم التشغيلية كما هو موضح بالشكل (7) وتحديد نوع البلورة التي نضعها في هذه الحالة (NaCl) ذات معاملات ميلر (100)، ويتم استبدال بلورة كلوريد الصوديوم ذات معاملات ميلر (100) بأخرى ذات المعاملات (110) واختيار القيم التشغيلية لها، يغلق باب وحدة الأشعة السينية ومن ثم البدء في القياس، مع مراعاة عدم ترك أنبوب عداد جايجر يعمل لفترة زمنية طويلة.



الشكل (7): القيم التشغيلية للتجربة

النتائج:

- 1- حيود المستوى (100)
- يوضح الشكل (8) نموذج الحيود للمستوى (100)

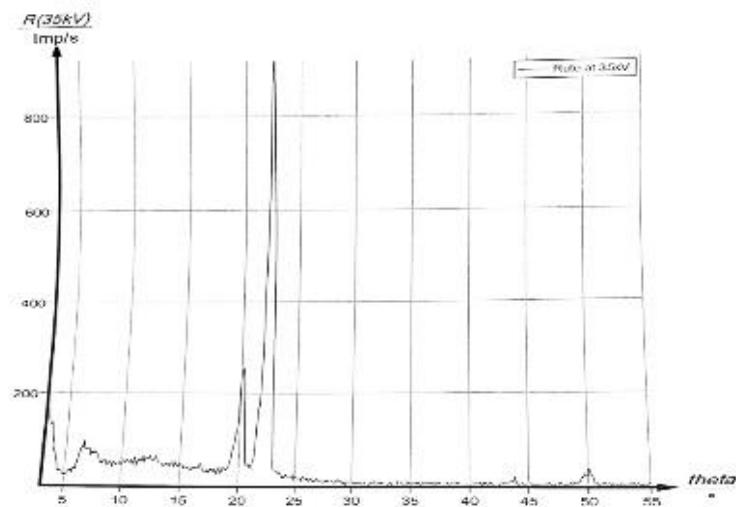


الشكل (8): نموذج الحيود للمستوى (100)

تم تحديد الزوايا (K_α, K_β) التي يحدث عندها التداخل البناء عند الرتب ($n = 1, n = 2$) عند الموضع $(\frac{1}{2}, 0, 0)$ حيث تم منها استنتاج مستويات ميلر (200)، و بالتعويض في المعادلة (1) لحساب d_1k_β, d_1k_α و d_2k_β, d_2k_α مع مراعاة أن ($\lambda_{k_\beta} = 139.2Pm, \lambda_{k_\alpha} = 154.4Pm$)، كما هو موضح بالجدول (1).

2- حيود المستوى (110)

يوضح الشكل (9) نموذج الحيود للمستوى (110)



الشكل (9): نموذج الحيود للمستوى (110)

تم تحديد الزوايا (K_α, K_β) التي يحدث عندها التداخل البناء عند الرتب ($n = 1, n = 2$) ويكون هنا الموضع $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ ومنها تم استنتاج مستوى ميلر (220) وبالتعويض في المعادلة (1) لحساب d_1k_β, d_1k_α و d_2k_β, d_2k_α كما هو موضح بالجدول (1).

الجدول (1): المسافة البينية للمستويين (100) (110)

	(hkl)	$\theta(K_\alpha)$ /°	$\theta(K_\beta)$ /°	$d(\theta - k_\alpha)/pm$	$d(\theta - k_\beta)/pm$	d/pm	$d(theor)/pm$	Δ
(100) crystal								
$n=1$	200	15.2	13.6	294.44	295.99	295.215		
$n=2$	200	32	28.1	291.36	295.53	293.445		
						294.33	282.0	4.37%
(110) crystal								
$n=1$	220	22.6	20.3	200.8	200.6	200.7		
$n=2$	220	50.1	43.8	201.3	201	201.15		
						200.925	199.4	0.76%

ومن ثم قمنا بحساب ثابت الشبكة a من المعادلة (2) كما موضح بالجدول (2).

الجدول (2): قيمة ثابت الشبكة المتحصل عليها من التجربة

	a/pm	$a(theor)/pm$	Δ
(100) crystal	588.66		
(110) crystal	568.30		
	578.48	564	2.57%

مناقشة النتائج:

تهدف هذه التجربة إلى دراسة حيود الأشعة السينية في بلورة كلوريد الصوديوم (NaCl) وتحديد المسافة البينية بين الذرات، ثم استخدام هذه القيم لحساب ثابت الشبكة البلورية. وقد تم إجراء هذه التجربة على مستويين بلوريين هما (100) و (110) باستخدام أنبوب أشعة سينية يحتوي على هدف من النحاس (Cu) والذي يولد أشعة بطول موجي $(\lambda_{K\beta} = 139.2pm, \lambda_{K\alpha} = 154.4pm)$ وهو مناسب لدراسة المسافات الذرية في المواد الصلبة، وتعتمد التجربة على قانون براغ في المستوى (100)، تم الحصول على قيم لزاوية الحيود عند رتبتي مختلفتين، ومن خلال تطبيق قانون براغ تم حساب المسافة بين المستويات البلورية، والتي تعادل في هذا الاتجاه ثابت الشبكة مباشرة لأن $a = d$ عندما يكون $(hkl) = (100)$ وكانت النتيجة المحسوبة لثابت الشبكة هي $(a = 588.66 pm)$ وهي أعلى بقليل من القيمة النظرية المعروفة لبلورة NaCl والتي تساوي $564 pm$ ، أما في المستوى (110) فقد تم حساب المسافة بين المستويات باستخدام نفس القانون، مع مراعاة أن $d = \frac{a}{\sqrt{2}}$. وبالتالي تم اشتقاق ثابت الشبكة من العلاقة $a = d\sqrt{2}$. وبلغت القيمة المحسوبة $(a = 568.30 pm)$ وهي قريبة جداً من القيمة النظرية، بفرق نسبي لا يتجاوز 0.76%، ما يشير إلى دقة أكبر في هذه الحالة مقارنة بالمستوى (100).

يمكن تفسير هذا الفرق بين القيمتين بأن هناك عدة عوامل قد تؤثر على دقة القياس، منها دقة تحديد زاوية الحيود θ باستخدام الجانوميتر، وجود انحرافات أو عدم انتظام في العينة البلورية، أو خطأ تجريبي ناتج عن المعايرة أو التركيب، كذلك من الممكن أن يكون المستوى (110) أكثر انتظاماً في البنية البلورية أو أن الجهاز كان أكثر استقراراً أثناء قياسه، مما أتاح الحصول على نتائج أدق.

بشكل عام، فإن التجربة تعد ناجحة في تأكيد نموذج براغ وقدرته على وصف حيود الأشعة السينية في المواد المتبلورة. وقد أظهرت أن تحليل حيود الأشعة السينية أداة فعالة ودقيقة في تحديد البنية الذرية للمواد، حيث أن النتائج التجريبية، رغم بعض الفروقات، جاءت متقاربة جداً من القيم النظرية المعروفة.

الخاتمة:

تمثل دراسة حيود الأشعة السينية في البلورات أحد أهم الأساليب العلمية المعتمدة في تحليل البنية الداخلية للمواد الصلبة وفهم ترتيب الذرات داخل الشبكات البلورية. ومن خلال هذه التجربة التي استهدفت فحص بلورة كلوريد الصوديوم وتحديد المسافات البينية بين الذرات اعتماداً على قانون براغ، أمكن الحصول على مجموعة من النتائج التي تؤكد أهمية هذه التقنية ودقتها في توصيف الخصائص البلورية.

لقد أظهرت القياسات الخاصة بالمستويين البلوريين (100) و (110) أن قيمة ثابت الشبكة المستخرجة من المستوى (100) جاءت متقاربة جداً من القيمة النظرية المعروفة، مما يعكس جودة القياسات ودقة العلاقة الرياضية التي يعتمد عليها قانون براغ. أما النتائج المتعلقة بالمستوى (110)، فقد سجلت انحرافاً أكبر عن القيمة الحقيقية، وهو ما يمكن إرجاعه إلى عدة عوامل مرتبطة بالجوانب العملية للتجربة؛ مثل جودة العينة البلورية، واحتمالية وجود اهتزاز في الجهاز

أثناء القياس، إضافة إلى حدود دقة تحديد زاوية الحيود. وتبين من ذلك أن زيادة ضبط الجهاز وتحسين نقاء العينة سيؤديان إلى تقليل نسبة الخطأ وإلى نتائج أكثر اتساقاً مع القيم النظرية.

كما توضح النتائج أهمية اختيار المستويات البلورية المناسبة عند الحساب، إذ تختلف دقة القياسات باختلاف اتجاهات المستويات داخل البلورة، مما يؤكد أن البنية الفراغية للشبكة البلورية تؤثر بشكل مباشر على موثوقية النتائج المستخلصة. وتبرز التجربة أيضاً مدى حساسية ثابت الشبكة لأي تغيرات صغيرة في زاوية الحيود، مما يعزز ضرورة الالتزام بأعلى درجات الدقة أثناء القياس.

وبشكل عام، تثبت هذه التجربة فعالية قانون براج كأداة أساسية في دراسة البنى الذرية، وتؤكد القيمة العلمية للأشعة السينية في توصيف المواد الصلبة، حيث تتيح هذه التقنية إمكانية الكشف عن المسافات الذرية بدقة عالية مقارنة بالطرق التقليدية. كما تفتح النتائج مجالاً واسعاً لإجراء تجارب أكثر تطوراً تعتمد على مصادر أشعة أكثر استقراراً، وأجهزة قياس دقيقة، ونماذج بلورية ذات جودة أعلى، بما يسهم في تحسين فهم البنى البلورية وتطوير التطبيقات العلمية والصناعية المرتبطة بها.

المراجع:

1. مبادئ فيزياء الحالة الصلبة، أ.د. أحمد سالم صالح، 2014.
2. فيزياء الحالة الصلبة وتطبيقاتها، أ.د. يسرى مصطفى، أ.د. أحمد الغامدي، 1434هـ.
3. فيزياء الجوامد. د. سعود بن حميد اللحياني، 1998.
4. فيزياء الحالة الصلبة أ.د. تغريد مسلم مريوش، 2001.
5. مذكرة فيزياء الحالة الصلبة. أ.د. ناصر بن صالح الزايد، 2019.
6. حيود الأشعة السينية في البنية البلورية، د. مصطفى محمد عبد الله نور الهدى غيث، منى مهدي كرى، 2016-2015.
7. Introduction to Solid State Physics. Nanostructures was written by Professor Paul McEuen of Cornell University 2005.
8. Elements of X-RAY DIFFRACTION. Morris Cohen Consulting Editor 1999.
9. High- pressure X-ray diffraction study on the structure of NaCl melt using synchrotron radiation. S Urakawa, N Igawa, O Shimomura-American-1999
10. Strength and equation of state NaCl from radial x-ray diffraction. L Xiong, L Bal, J Liu – Journal of Applied Physics, 2014 .
11. Facile preparation, characterization, and investigation of mechanical strength of Starchy NaCl –binder as a lightweight construction material. A Fahmi, SR Zavaragh, MR Hanafi, H Rahimpour- Scientific nature.com –reports, 2023.
12. Deep removal of phosphorus and synchronous preparation of high- strength gypsum from phosphogypsum by crystal modification in NaCl-HCl solutions. Q Guan, Y Sui, W Yu, C Zeng, C Liu – Separation and Elsevie-2022.