دراسة وتحليل التركيب البلوري لعنصر مجهول بواسطة نظام تكاملي في الحاسبة الالكترونية

توفيق عبدالخالق عباس
قسم الحاسبات/ كلية العلوم
جامعة بابل

محمد حمزة المعموري
قسم الميكانيك/ كلية الهندسة
جامعة بابل

الخلاصة

يهدف هذا البحث الى تقديم طريقة (اسلوب) يتم من خلالها التعرف على التركيب البلوري وعناصر الجدول الدوري ومركباتها الكيمياوية في نموذج مجهول بالاعتماد على تحليل اطياف حيود الـ X- RAY لها، وذلك في خلال بناء نظام تكاملي بين قواعد البيانات ولغة البيسك بالاعتماد على بناء واجهة مستفيد تحقق تكامل وسائل قواعد البيانات من استرجاع وتحديث وعرض مع امكانيات لغة البيسك بما توفره من ابعازات نقل السيطرة والرسم. ان هذا التكامل يتم بالاستفادة من قشرة نظام التشغيل shell ، وبهذا يمكن الاستفادة من النظام كوسيلة مساعدة للعاملين في تحليل التربة والفيزياء الصلبة ودوائر المسح الجيولوجي.

المقدمة

نظرا للامكانيات والاهداف التي تحققها قواعد البيانات database في الاستغلال الجيد للذاكرة من خلال تقليل التكرار والوقت والجهد وهذا يتم من خلال تكامل الملفات وتشارك البيانات وسهولة التحديث وزيادة الدقة وتطبيق التحديدات الامنية.

لقد ادت هذه الامكانيات الى استخدام الحاسبات الالكترونية في الكثير من مجالات الحياة وبالذات التي تتعامل مع عدد هائل من البيانات وهذا ما يبرز واضحاً في الجوانب الادارية، ولكن بعد ازدياد الحاجة الى الحاسبات في الحياة اليومية اتجهت الكثير من الجهود لاستغلال هذه الامكانيات في جوانب الحياة الاخرى ومنها الجانب العلمي، وحيث ان قواعد البيانات لا تلبي بمرونة كبيرة بعض الاحتياجات الاخرى مثل الرسم والتحليل والذكاء والمحاكات، لذا نجد ان المهتمين في هذا الجانب والذين لديهم عدد هائل من البيانات ولم يجدوا في انظمة قواعد ما يرضي طموحهم في تحقيق الاسترجاع الامثل مع الرسم والتحليل والمحاكات والذكاء، لهذا نجد بعض البحوث التي اتجهت الى تكامل عدة انظمة في نظام واحد وكل جزء فيه يؤدي مهمة معينة بالاعتماد على احد لغات البرمجة التي تناسب طبيعة عمل تلك المهمة وبالنتيجة فان جميع الاجزاء تعمل على نفس البيانات ولكن بأوجه مختلفة مثل تكامل انظمة الـ CAD مع انظمة قواعد البيانات (١).

في الجانب الفيزياوي وفي مجال فيزياء الحالة الصلبة يعاني الباحثون في ايجاد نوعية التركيب البلوري او معرفة نوعية المادة الكيمياوية في نموذج مجهول وخاصة عند دراسته بواسطة حيود اشعة الـ X- ray ، حيث يتم استخدام العلاقة الرياضية التالية

والمعرفة بقانون براك لحيود الـX- ray من البلورات (٢).

$$n = 2d \times \sin O$$

حيث ان O تمثل زاوية الحيود و n تمثل رتبة الحيود و تمثل طول موجة الـ X-ray وتساوي 1.5477 A و d تمثل المسافة البينية بين الذرات.

فعند وضع النموذج المجهول في مسير اشعة الـ X-ray ذات الطول الموجي المعلوم سوف تحيد الاشعة نتيجة لتشتتها من ذرات النموذج والتي تؤدي الى تداخلها مسببة الحيود والذي يتم تسجيله عن طريق عداد كايكر على شكل خطوط بيانية بين 20 على X-ray وشدة الاشعة المحادة على Y-axis، [3,4,5] ومن العلاقة (١) اعلاه يمكن استخراج قيم d ومقارنتها مع بطاقات الـ ASTM القياسية [2] والتي ستدخل الى الحاسبة لكل المواد من العناصر ومركباتها وبعد المطابقة يمكن معرفة معاملات ميلر (hkl) للمادة وبعد ذلك يمكن استخراج ثوابت الشبيكة البلورية (a,b,c) من القوانين البلورية بعد معرفة نوع التركيب البلوري [2,6] فعلى سبيل المثال للبلورة ZnO المكعبة يمكن استخراج قيم ثوابت الشبيكة من القانون التالي:

$$a = d / L + k + h \qquad [٤،٢]$$

وبعد معرفة ثوابت الشبيكة البلورية لنموذج يمكن التأكد من نوعية النموذج المجهول وتركيبه بشكل ادق.

وموضوع هذا البحث يهدف الى بناء نظام تكاملي يتكون من جزأين، الاول يهتم بالتعامل مع العدد الهائل من البيانات من خلال خزن البيانات الخاصة بالعناصر الكيمياوية ومركباتها وتم استخدام نظام قواعد البيانات العلاقي DBASE 4 لكتابة هذا الجزء، والجزء الثاني يهتم بالتحليل والرسم وتم استخدام لغة البيسك BASIC لكتابة هذا الجزء.

والنظام يقدم الامكانيات التالية:

١- بناء قاعدة بيانات قابلة للتوسع تحتوي على معلومات عن العناصر واكاسيدها ومركباتها وذلك بالاعتماد على بطاقات الـ ASTM القياسية.

٢- التحاور مع المستفيد عن استرجاع البيانات والرسوم.

٣- تحليل مركبات اجريت عليها تجربة معينة بالاعتماد على البيانات المخزونة.

لقد تمت الاستفادة من امكانيات نظام التشغيل DOS في الانتقال من الـ DBASE 4 بصورة تكاملية الى لغة البيسك وبالعكس.

هيكل عمل النظام

يمكن توضيح هيكل عمل النظام بالمخطط في الشكل رقم ١ .

ان التعامل مع النظام يتم من خلال ثلاثة مراحل هي كالتالي:-

المرحلة الاولى: بناء قاعدة البيانات.

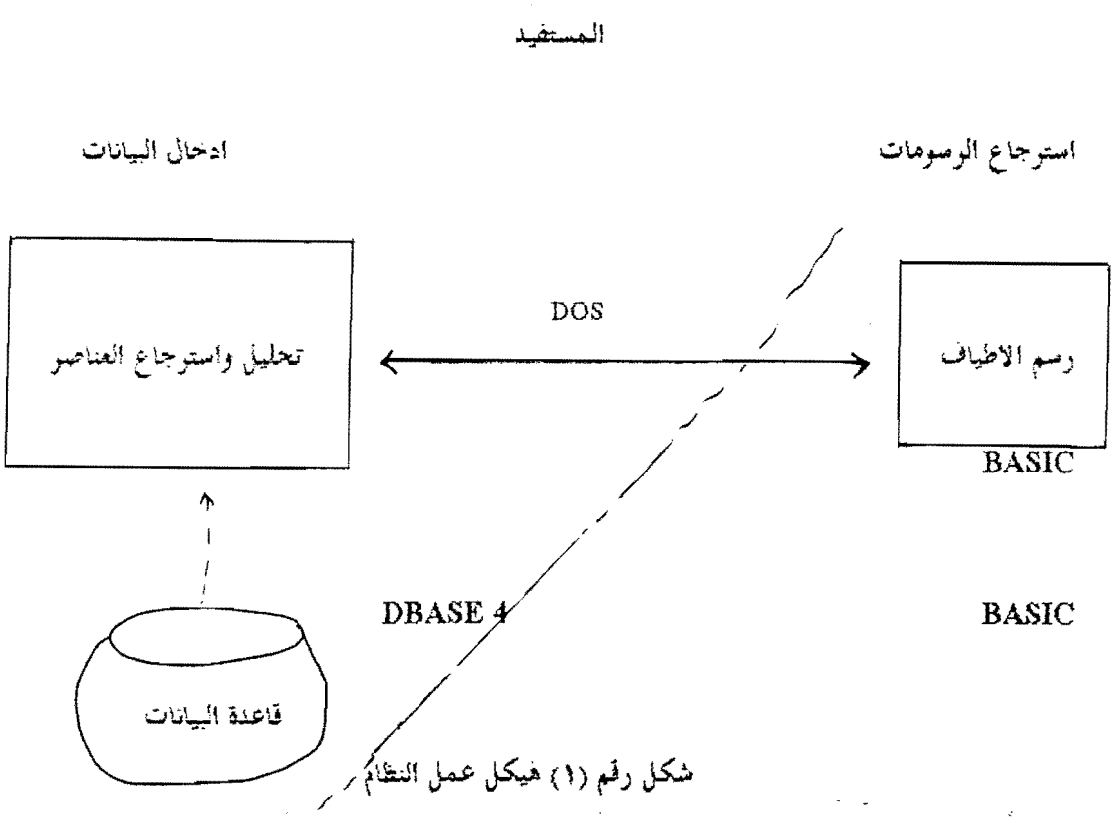
المرحلة الثانية: المحاورة والتحليل وعرض النتائج، وهذه المرحلة تتكون من الخطوات التالية:-

١- تحليل رسم الـ X-ray لنموذج مجهول ومرسوم من قبل منظومة الـX-ray حيث يتم استخراج المعلومات من قبل المستفيد حسب العلاقة (١).

٢- ادخال زاوية الحيود وقيمة المسافات البينية بين المستويات البلورية الناتجة من الخطوة (١) اعلاه.

٣- استرجاع العناصر التي مواصفاتها قريبة من المعلومات المدخلة، حيث يتم الاسترجاع حسب ثوابت الشبيكة.

٤- مطابقة (مقارنة قيم a,b,c,d مع القيم الناظرة لها من بطاقات ASTM والمخزونة في الحاسبة وعرض النتائج.



شكل رقم (١) هيكل عمل النظام

بناء قاعدة البيانات

نظام قاعدة البيانات يتكون من مجموعة من

الملفات هي:-

الملف الاول: وهيكله يكون كالتالي:-

اسم العنصر	ثابت الشبيكة a	ثابت الشبيكة b	ثابت الشبيكة c
Au	4.0786	–	–
Fe	50458	–	4.361

الملف الثاني: وهيكله يكون كالتالي:-

اسم العنصر	المسافة البينية d	الشدة I/I o	معاملات ملر HKL
Au	2.355	100	111
Au	2.039	52	200

التحليل واسترجاع المعلومات

بعد استرجاع المعلومات من النموذج المجهول عملياً من طيف الـ X-ray يقوم المستفيد بادخالها الى النظام وهي كالتالي:-

١ - المسافة البينية (مجموعة قيم).

٢- الشدة (مجموعة قيم).

٣- ثابت الشبيكة a.

٤- ثابت الشبيكة b.

٥- ثابت الشبيكة c.

يقوم النظام بمقارنة المعلومات اعلاه مع البيانات المخزونة في قاعدة البيانات وهذه المقارنة تتم على مراحل هي:-

اولاً: المقارنة بالاعتماد على قيم المسافة البينية حيث تتم مقارنة هذه القيم مع المناظرة لها من قيم عناصر الملف الثاني الواحد بعد الاخر، ونتيجة لذلك يتم حساب عامل الاقتراب لكل عنصر وهو مقدار قرب قيم المسافات البينية لعنصر الملف مع القيم المدخلة، وفي نهاية المقارنةيسترجع النظام قائمة بالعناصر التي عامل الاقتراب فيها اقل من واحد، وفي حالة عدم وجود اي عنصر يحقق هذا الشرط يمكن تغيير الشرط حسب رغبة المستفيد، كما ان مقدار الاقتراب بين اي قيمتين في المقارنة هو +0.05 .

يجب الاشارة الى ان الارقام المذكورة في اعلاه تم اعتمادها حسب استشارة العاملين في هذا المجال (٢)، وللمرونة فأن النظام يسأل مسبقاً عن تحديد القيم المناسبة للشرط ومقدار الاقتراب.

ثانياً: المقارنة بالاعتماد على ثوابت الشبيكة a,b,c حيث تتم مقارنة هذه القيم مع المناظرة لها من العناصر المسترجعة في القائمة الناتجة من المقارنة السابقة، ويكون مقدار الاقتراب بين اي قيمتين هو 0.005 (هذه القيمة يمكن تحديدها مسبقاً من قبل المستفيد)، ولكل عنصر يتم حساب عامل اقتراب يتم ترتيب واسترجاع العناصر بالاعتماد على قيمته وتعتبر هي العناصر الموجودة في النموذج.

الرسم

يقوم النظام برسم الاطياف التي تمثل العلاقة بين الشدة وزاوية الحيود 120 لكل عنصر من العناصر المسترجعة في المرحلة السابقة والتي هي موجودة في النموذج المجهول، حيث يقوم المستفيد بمطابقة الرسم الناتج من طيف الـ X-ray مع الرسم الذي يولده النظام لغرض الدقة.

المناقشة والاستنتاج

١ - النظام يتعامل مع عدد هائل من البيانات بعدة صيغ لكل واحدة من هذه الصيغ طبيعتها واهدافها فهناك استرجاع وتحليل مطلوب انجازه بسرعة وخير من يقوم بذلك هو انظمة قواعد البيانات ومنها DBASE 4 ولكن هذه الانظمة لاتوفر امكانيات وتسهيلات كبيرة في مجال الرسم مقارنة بلغات البرمجة الاخرى مثلAutoCAD, BASIC, PASCAL وعلى هذا الاساس تم تكامل الـ DBASE 4 مع لغة الـ BASIC لانجاز مهمة الرسم، حيث ان احد اهداف تكامل الانظمة هو جعل عدة انظمة تعمل بصورة ذاتية (برامجية دون تدخل المستفيد) وكل نظام يؤدي مهمات ليس بالسهل القيام بها في النظام الاخر.

٢- يمكن جعل مطابقة الرسومات ان تتم في الحاسة دون تدخل المستفيد وهذا يتطلب امكانيات كبيرة في انظمة الرسم والاجهزة التي تتعامل معها مثل الـ AutoCAD.

A Study and Analysis of Crystal Struture for Unknown Element Using Integrated System in Computer

T. A. AL- Assadi
Computer Science Department, College of Scince, Babylon University
M.H. AL- Mamory
Physics Department, College of Science, Babylon University

Abstract

The paper aimed to present a method through which we can recognize the CRYSTAL structure and the element of periodic table element and these chemical components in unknown sample depending on analyzing the differication of the spectrum using X-Ray, this can be done by consturecting integrated system between database and BASIC language through constructing user interface which satisfied integrating the database techinqes from retrieval and update and display along with the BASIC language ability, as control trasication and graphics commands.

This integration depending on shell, so this system can be used helpful to worked in soil analysis and solid state physic.

References

1- Stephenie J. "An interactive data dictionary facility for CAD/CAM . database", The Benjamin/ Cummings Publishing Company, Inc. 1986.

٢- محمد حمزة المعموري "دراسة الخواص التركيبية والكهربائية" جامعة البصرة/ كلية العلوم، ١٩٩٠.

3- Kihel "Introduction to solid physis", John Widy & sone Inc. New York, 1989.

4- B.D. Celilrty "Elements of X-Ray diffraction", 1967.

5- J. Aranovish "J. Vac. Sec. Technol.", Vol. 16. No.4. P. 994, 1974.

6- K. Lchopra, S. Major "Thin Solid Film", Vol. 102, 1983