الفصل الأول

التركيب البلوري

المقدمة

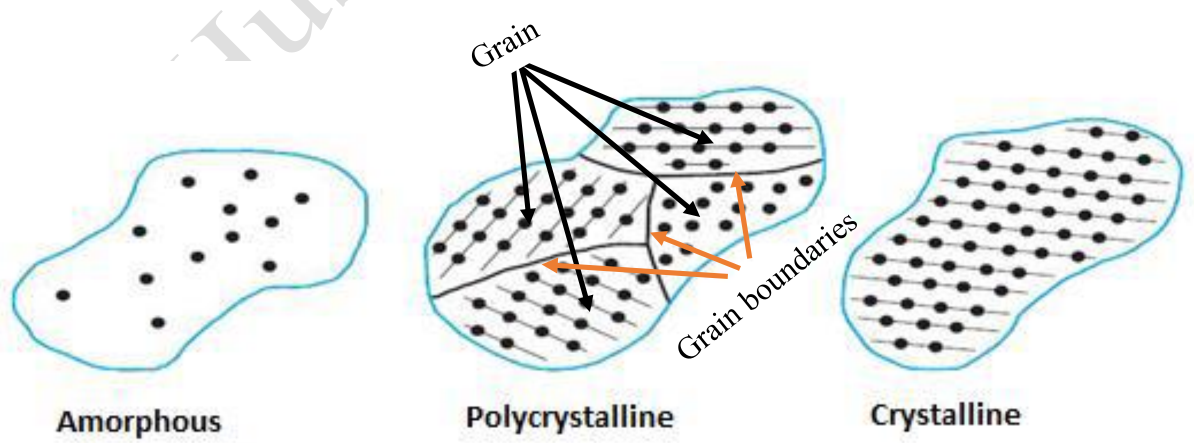
تتكون المادة في حالاتها الثلاث المعروفة، الغازية والسائلة والصلبة، من ذرات أو جزيئات دائمة الحركة. ويعزي وجود المادة في إحدى هذه الحالات إلى طبيعة وحدود التأثيرات المتبادلة بين ذراتها وجزيئاتها. ويمكن تمييز كل حالة عن الأخرى فيزيائيا بالنظر في خاصية السريان أو التدفق Flow حيث تكون المادة في حالتيها الغازية والسائلة قابلة للانسياب والتشكل بشكل الإناء الذي توضع فيه، بينما تفقد المادة الغازية أو السائلة قدرتها على التدفق عندما تتحول إلى الحالة الصلبة بعد تبريدها، وتتخذ شكلاً وحجماً ثابتين.

يمكن تصنيف المواد الصلبة إلى نوعين: مواد صلبة متبلورة كما هو الحال في المعادن وأغلب المركبات الكيميائية والسبائك ومواد صلبة غير متبلورة كالزجاج والشمع. كما أن بعض المواد السائلة والغازية تتحول إلى مواد متبلورة عند تجمدها مثل الثلج والغازات الخاملة. تتركب المواد الصلبة من وحدات أساسية محددة هي الذ رات أو المجموعات الذرية. تتوزع هذه الذ رات أو هذه المجموعات الذرية في التركيب البنائي للمواد غير المتبلورة بشكل عشوائي، بينما تكون الذ رات أو المجموعات الذرية في المواد المتبلورة موزعة بشكل منتظم. يشار إلى كل مجموعة من الذ رات أو المجموعات الذرية المرتبة في المواد المتبلورة بالبلورة والتي يمكن أن توجد على شكل منفصل. تتميز البلورات بأن لكل مها شكل هندسي منتظم وأسطح متشابهة ومتوازية وملساء. يوجد العديد من أنواع التراكيب البلورية يعتمد كل منها على هندسة الترتيب وانتظام الذرات في كل البلورة وهذا يؤثر بشكل كبير في الخصائص الفيزيائية المختلفة للجسم الصلب.

تصنف المواد الصلبة إلى نوعين رئيسيين هما:

1. **المواد الصلبة البلورية Crystalline Solids:** وفيها ينتظم ترتيب الذرات في الفراغ بحيث تشكل نمطاً هندسياً دورياً. اذا امتدت صفة الدورية او التكرارية خلال المادة المتبلورة عندئذ نحصل على بلورة منفردة او احادية (Single Crystal) اما اذا اضطربت التكرارية عند الحدود الجيبية (Grain boundaries) فسوف نحصل على تركيب متعدد التبلور (Poly- Crystalline).

2. **المواد الصلبة غير البلورية Non-Crystalline Solids :** وتضم المواد الصلبة التي تتخذ ذراتها أو جزيئاتها توزيعاً عشوائياً، حيثما يتسنى لها، عندما تتحول من الحالة المائعة (الغازية أو السائلة) إلى الحالة الصلبة وتوصف هذه المواد الصلبة اللابلورية أيضاً بأنها "لا شكلية" أو "أمورفية" Amorphous بمعنى أنها لا تتخذ شكلاً مميزاً كما توصف بأنها "زجاجية" نظراً لأنها تتشابه مع الزجاج في عشوائية ترتيب الذرات.



هناك مواد لا تنتمي تماماً لأي من النوعين المذكورين، حيث أنها تقع بدرجات متفاوتة بين الحالتين: الكاملة التبلور وغير البلورية، ويمكن وصف الترتيب الجزئي للذرات فيها بتعيين ما يسمى " بدرجة البلورة" Degree of Crystallinity ويمتد الترتيب المنتظم في بعض هذه المواد الصلبة الشبه بلورية إلى مسافات قصيرة، فيوصف بأنه ذو مدى قصير Short – Range Order مقارنة بالترتيب ذي المدى الطويل في المواد الصلبة كاملة التبلور Long-Range Order .

مفاهيم ومصطلحات أساسية:

علم البلورات: - هي عبارة عن دراسة البنية الداخلية للبلورات وارتباطها بالصفة الأساسية بما فيها الاشكال الخارجية وكذلك ارتباط التركيب الكيميائي مع البنية.

البلورة: - تعرف على انها جسم صلب تحتوي على عدد من الذرات او الجزيئات وله شكل هندسي معين ويتكون من وحدات غاية في الصغر تتكرر بانتظام في الابعاد الثلاثة. ان أساس البناء البلوري هو التكرار الذي يمكن تشبيهه بتكرار الطابوق في البناء.

الشبيكة البلورية: - هي نوع من التمثيل الرياضي لنمط ترتيب الوحدة البنائية الأساسية للمادة البلورية. وهذا التمثيل يكون بعدد لانهائي من النقاط الهندسية المرتبة ترتيباً شبكياً متوازياً ويتميز بالتماثل والتكرار المنتظم (الصفة الدورية) في الفراغ.

القاعدة Base او الأساس Basis:- هي عبارة عن ذرة او جزيئة او مجاميع من الذرات او الجزيئات تلتصق مع نقاط الشبيكة البلورية وتمثل البناء البلوري الحقيقي. وللأساس دورا مهماً في البناء البلوري بحيث يجب ان يكون متماثلا في البنية والاتجاه والترتيب.

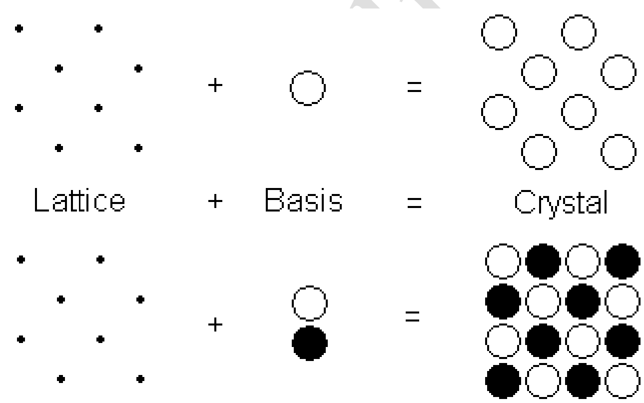
وحدة الخلية Unit Cell:- هي اصغر شكل هندسي يمكن بتكراره الحصول على الشبيكة البلورية.

ثابت الشبيكة: هو أقصر مسافة عمودية بين مستويات الشبيكة.

التركيب البلوري Crystal Structure

يدرس التركيب البلوري عادة بدلالة بنية بلورية او شبيكة فضائية دورية واحدة مع مجموعة من الذرات ترافق كل نقطة من نقاط الشبيكة الفضائية بصورة تماثلية وتدعى هذه المجموعة من الذرات بالأساس وهذا الأساس يعيد نفسه في الفضاء ليكون البلورة.

الشبيكة الفراغية + الوحدات الأساسية (القواعد) = التركيب البلوري



وفي أبسط التركيبات البلورية توجد ذرة واحدة لكل نقطة شبيكية، كما والحال في بلورات النحاس والذهب والفضة، وقد تكون الوحدة البنائية الأساسية (أو القاعدة) مجموعة من الذرات، ويشترط حينئذ أن تكون الوحدات البنائية متطابقة في تركيبها وترتيبها وتوجيهها، كما يجب أن يكون لها نفس الميل والاتجاه.

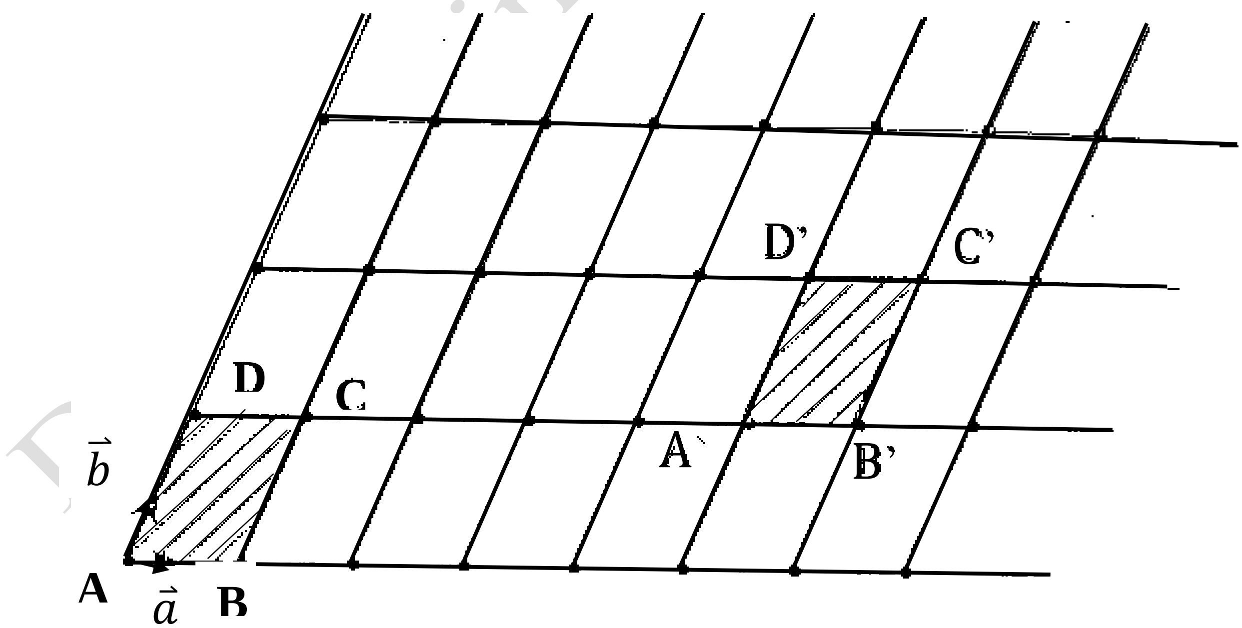
وتتركب البلورة المثالية من وحدات بنائية أساسية مرتبة على شبيكة بلورية فراغية (ثلاثية الأبعاد) بحيث يبدو هذا الترتيب عند النظر إليه من نقطة شبيكية ذات متجه موضع $\vec{r}$ هو نفسه عند النظر إليه من نقطة أخرى $\vec{r}'$ طبقاً للمعادلة:

$$\vec{r}' = \vec{r} + \vec{T}$$

ويعرف المتجه الانتقالي $\vec{T}$ الذي يصل بين أي نقطتين في الشبيكة بالعلاقة التالية:

$$\vec{T} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}$$

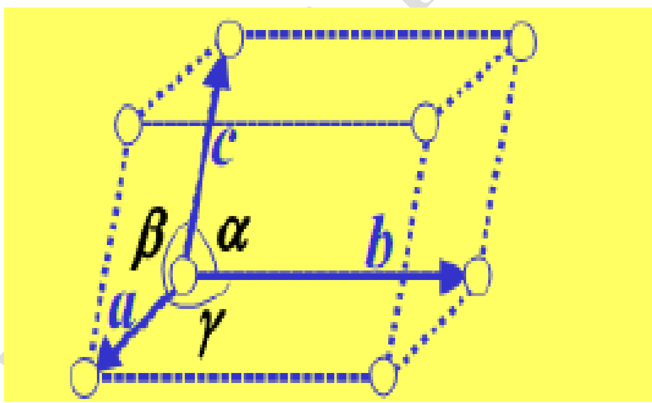
حيث $\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$ وتسمى "المتجهات الانتقالية الأساسية" وهي محددة وثابتة في أية شبيكة بلورية, وتمثل $n1, n2, n3$ أعداداً صحيحة اختيارية تعتمد على موضع النقطة الشبيكية.



شبيكة بلورية ثنائية الابعاد

الشكل أعلاه تمثل جزءاً من شبيكة بلورية في بعدين فيها نقاط الشبيكة A ,B ,C ,D تكون رؤوس متوازي الاضلاع ABCD يؤدي انتقاله المتكرر باستعمال المتجهين $\vec{a}$ و $\vec{b}$ إلى تكوين النموذج الكلي للشبيكة البلورية ويطلق عليه "خلية الوحدة" . يلاحظ من الشكل ان المتجه الانتقالي $\vec{T} = 5\,\vec{a} + \vec{b}$ يربط بين أي نقطة شبيكة في خلية الوحدة ABCD والنقطة المكافئة لها في خلية أخرى A'B'C'D'.

اما بالنسبة للبلورة ذات الشبيكة فراغية (ثلاثة الأبعاد) تحدد فيها "خلية الوحدة" بمتوازي السطوح المجسم ذي المحاور الثلاثة a , b, c والزوايا المقابلة لها α , β , γ وكما موضح في الشكل ادناه. ولقد أمكن تصنيف البلورات على أساس الأشكال المحتملة لخلية الوحدة وعناصر تماثلها التي تحقق شروط الشبيكة البلورية.



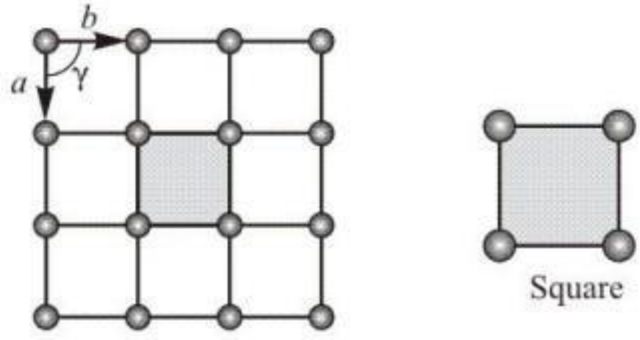
وحدة خلية ثلاثية الابعاد

انواع الشبيكة في بعدين:

هناك خمسة أشكال للشبيكّة في بعدين اعتمادا على اطوال المتجهين البدائيين في الشبيكة المستوية والزاوية المحصورة بينهما.

1- شبيكة مربعة بدائية Square Lattice

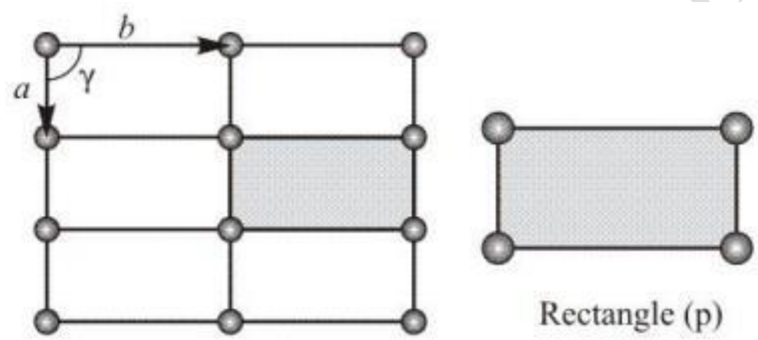
$|\vec{a}| = |\vec{b}| \qquad \gamma = 90$



Square

2- شبيكة مستطيلة بدائية (P) Rectangle lattice

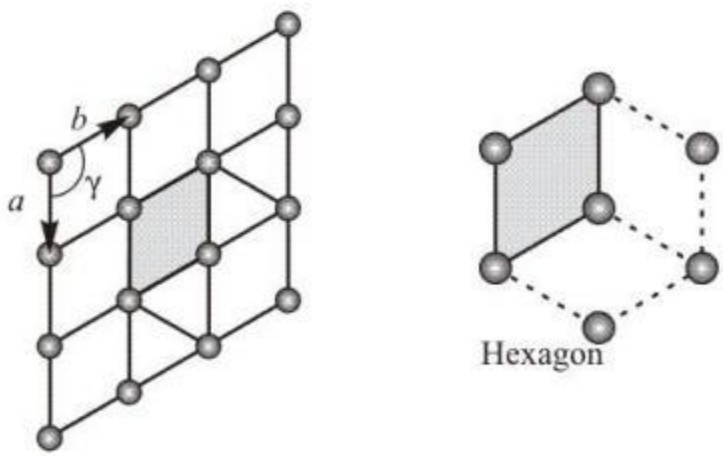
$|\vec{a}| \neq |\vec{b}| \qquad \gamma = 90$



Rectangle (p)

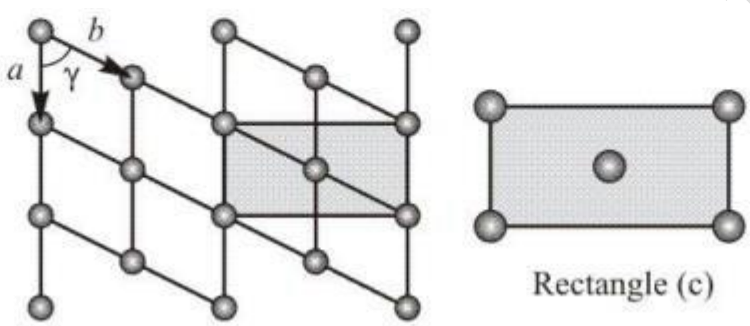
3- شبيكة سداسية بدائية Hexagonal lattice

$|\vec{a}| = |\vec{b}| \qquad \gamma = 120$



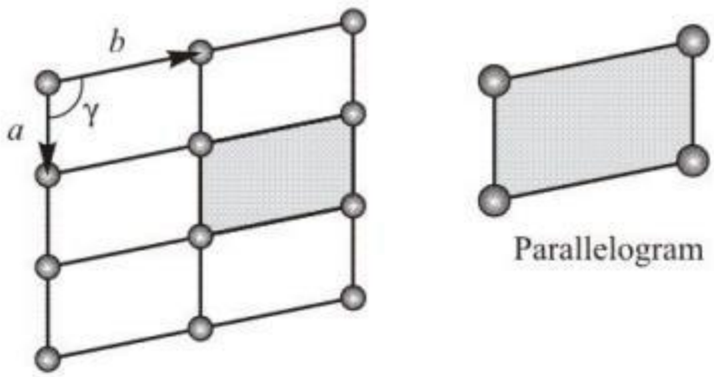
4- شبكة مستطيلة متمركزة الجسم (I) Rectangle lattice

$|\vec{a}| \neq |\vec{b}| \qquad \gamma = 90$



5- شبكة متوازية الاضلاع مائلة Oblique lattice

$|\vec{a}| \neq |\vec{b}| \qquad \gamma \neq 90$



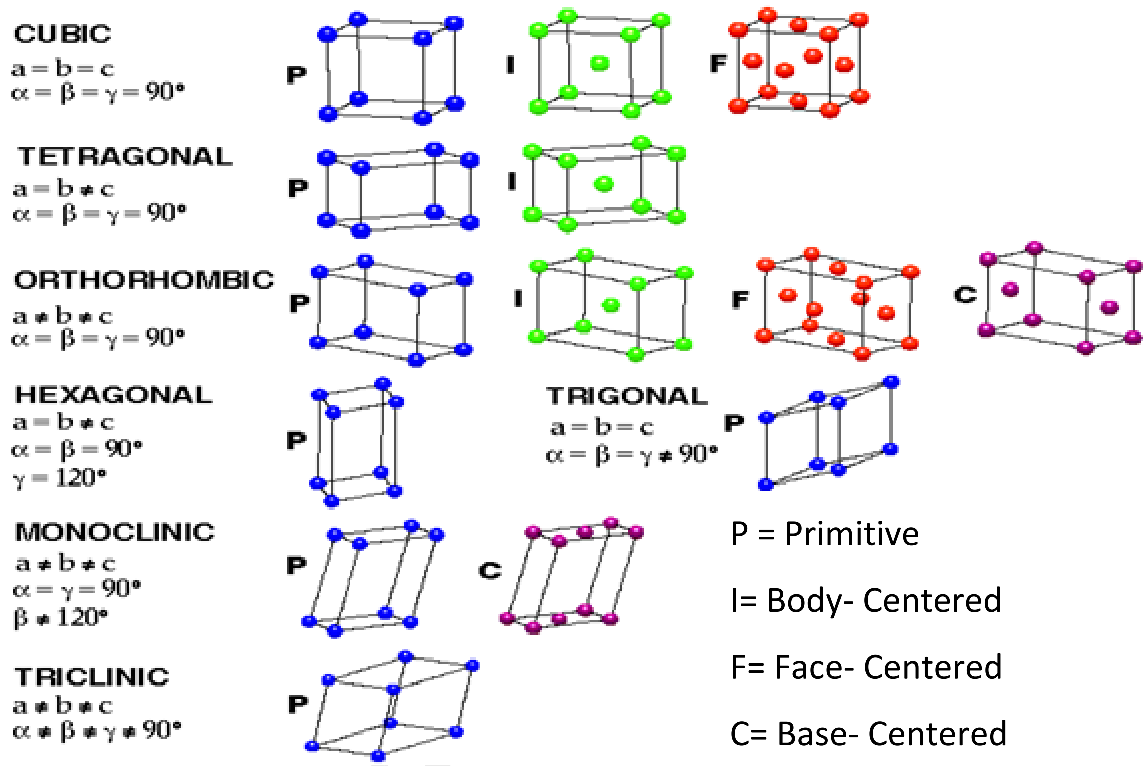
انواع الشبيكة في الابعاد الثلاثة (شبيكات برافية):

ينسب إلى عالم البلورات الفرنسي Bravais " تصنيف الشبيكات البلورية Crystal System إلى أربع عشرة شبيكة موزعة على سبعة أنظمة بلورية. عدد الشبيكات البرافية الأربع عشرة والنظم البلورية السبعة محدود بعدد الطرق الممكنة لترتيب النقاط الشبيكية بحيث تكون البيئة المحيطة بأي نقطة منها مماثلة تماماً للبيئة المحيطة بأية نقطة أخرى. وتكون "شبيكة برافية" بسيطة (أولية, بدائية) إذا كانت نقاطها عند الأركان فقط ويرمز لها بالحرف P، وعندما تشتمل على نقاط إضافية في مواضع خاصة فإنها تكون ممركزة الأوجه (F) أو ممركزة الجسم (I) أو ممركزة القاعدة (C).

عدد االشبيكات البلورية تبلغ 230 شبيكة فضائية او مجموعة فضائية (Space groups) , حيث كل مجموعة من هذه الشبيكات البلورية تتشابه في تماثلها بحيث ارجعت ال 32 مجموعة

نقطية (Point groups). كل مجموعة من هذه المجاميع النقطية تتشابه في العلاقة بين اطوال محاورها (a ,b , c) والزوايا المحصورة بين هذه المحاور بحيث صنفت الى الأنظمة البلورية السبعة المنسوبة للعالم برافيس في 1848م.

النظام البلوري	شبيكات برافيه	خصائص خلية الوحدة
ثلاثي الميل	P	$a \neq b \neq c$
Triclinic		$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$
أحادي الميل	P,C	$a \neq b \neq c$
Monoclinic		$\alpha = \gamma = 90° \neq \beta$
معينى قائم	P, C, I, F	$a \neq b \neq c$
Orthorhombic		$\alpha = \gamma = 90° = \beta$
رباعي	P , I	$a = b \neq c$
Tetragonal		$\alpha = \beta = \gamma = 90°$
مكعب	P, I, F	$a = b = c$
Cubic		$\alpha = \beta = \gamma = 90°$
ثلاثي	P	$a = b = c$
Trigonal		$\alpha = \beta = \gamma < 120°, \neq 90°$
سداسي	P	$a = b \neq c$
Hexagonal		$\alpha = \beta = 90°, \gamma = 120°$



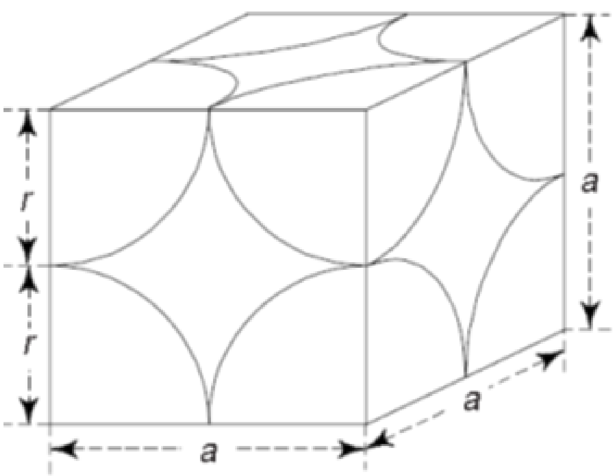
أنواع النظام البلوري المكعبي

في النظام البلوري المكعبي هناك ثلاث أنواع من الخلايا المكعبة هي: المكعب البسيط (P) ، مكعب متمركز الجسم (I) ، مكعب متمركز الأوجه (F) . خصائص هذه الخلايا المكعبة تتلخص في الدول ادناه:

1- **خلية الوحدة المكعب البسيط (P) (SC) (Simple Cubic Unit Cell) :**

تسمى أيضا الخلية البدائية المكعبة (Primitive Cubic Unit Cell) , هذا النوع يحوي ثمان ذرات او ايونات او جزيئات موجودة في اركان المكعب (نقاط المكعب عند الزوايا فقط) .

ان كل جزيء او ذرة او ايون في نقاط الزوايا في خلية الوحدة المكعبة البسيطة مشتركة بين ثمان خلايا مكعبة, لذا تكون نصيب الخلية الواحدة 1/8 من كل نقطة واقعة في الزاوية وبالتالي نقطة واحدة فقط.



∴ عدد الذرات في كل وحدة خلية هو $8 \times \frac{1}{8} = 1$

من خلال الشكل المجاور يمكننا حساب نصف القطر الذري والذي يعرف على انه نصف المسافة بين مركزي اقرب ذرتين متجاورتين ومتلامستين في البلورة. في خلية الوحدة المكعبة البسيطة تعطى بالعلاقة :

$$r = \frac{a}{2} \Longrightarrow a = 2r$$

r : نصف القطر الذري

a : ثابت الشبيكة الاولية

كما يمكن حساب حجم وحدة الخلية الاولية من خلال العلاقة التالية:

$$V = |\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}| \quad \text{or} \quad V = |\vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c}|$$

V: حجم الخلية الأولية

حيث $\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$: المتجهات الانتقالية الأساسية

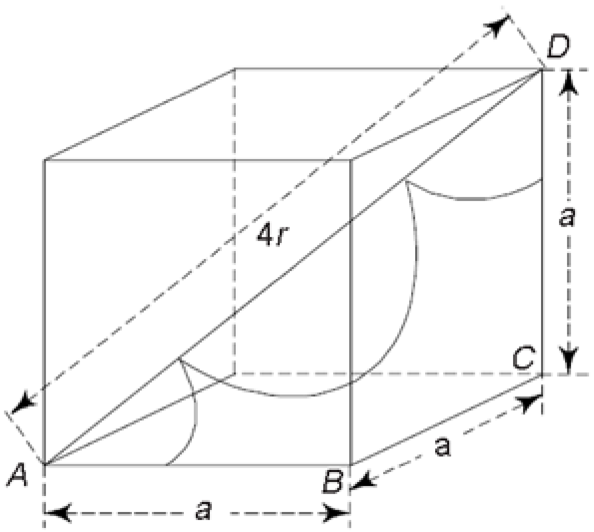
بالنسبة للخلايا المكعبة فان a =b =c

2- **خلية الوحدة المكعبة المتمركزة الجسم (I) (Body-Centered Cubic Unit Cell)**: في هذا النوع من الخلايا المكعبة هناك نقطة في مركز الخلية إضافة الى النقاط الموجودة في اركان المكعب وبالتالي تحتوي هذا النوع من الخلايا المكعبة على نقطتين شبيكة.

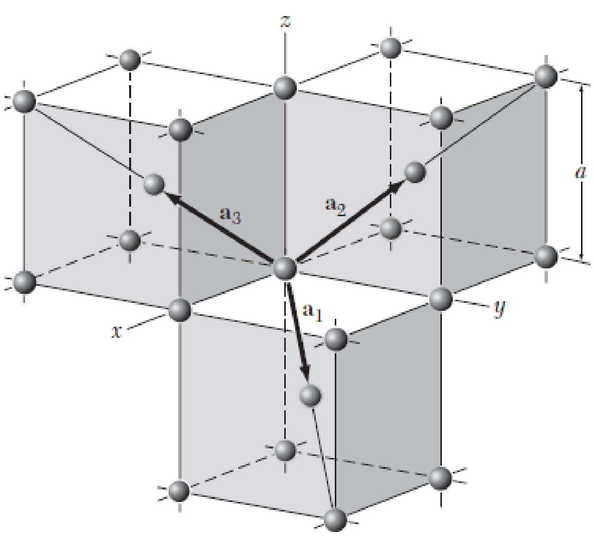
∴ عدد الذرات في كل وحدة خلية

هو $8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$

يمكننا حساب نصف القطر الذري من خلال الشكل المجاور:-



$$AC^2 = AB^2 + BC^2 = a^2 + a^2 = 2a^2$$
$$AD^2 = AC^2 + CD^2 = 2a^2 + a^2 = 3a^2$$
$$\therefore \quad (4r)^2 = 3a^2$$
$$\text{or} \quad a = \frac{4r}{\sqrt{3}} \text{ and } 2r = \frac{a\sqrt{3}}{2}$$
$$\therefore \quad r = \frac{a\sqrt{3}}{4}$$



بالنسبة المتجهات الانتقالية الأساسية

$\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$

بالنسبة للخلايا المكعبة فان $a = b = c$

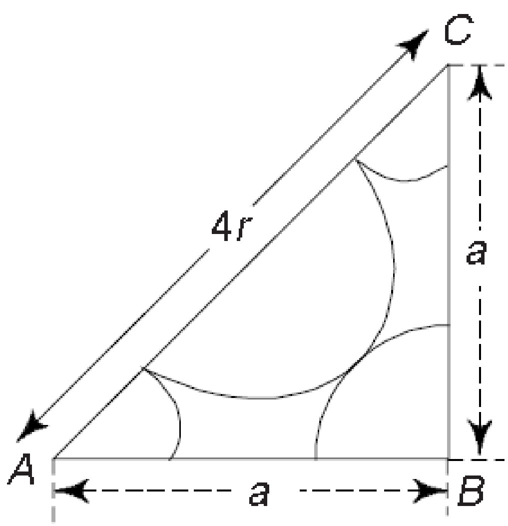
$$a_1 = \tfrac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}) \; ; \qquad a_2 = \tfrac{1}{2}a(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) \; ;$$
$$a_3 = \tfrac{1}{2}a(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}) \; .$$

3- خلية الوحدة المكعبة المتمركزة الوجه **(F) (Face-Centered Cubic Unit Cell)**: في هذا النوع من الخلايا المكعبة هناك نقطة شبيكة في مركز كل وجه من الأوجه الستة في الخلية إضافة الى النقاط الموجودة في اركان المكعب. كل نقطة شبيكة في مركز وجه تكون مشتركة بين خليتين , لذا تكون نصيب الخلية المكعبة الواحدة من هذه النقاط في الأوجه السته هي ثلاث نقاط وبالتالي تكون مجموع النقاط ثلاثة زائدا واحد (نقاط الشبيكة في الأركان) , أي اربع نقاط شبيكة.

∴ عدد الذرات في كل وحدة خلية هو

$$8 \times \frac{1}{8} + 3 = 4$$

يمكننا حساب نصف القطر الذري من خلال الشكل المجاور

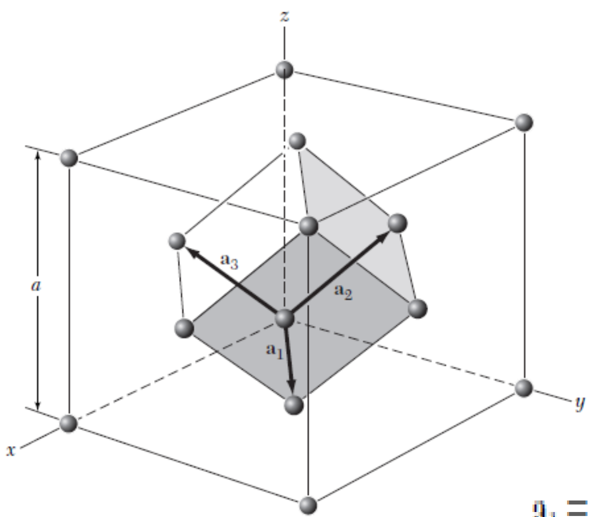


$$AC^2 = AB^2 + BC^2$$

or $$(4r)^2 = a^2 + a^2$$

∴ $$r^2 = \frac{2a^2}{16}$$

or $$r = \frac{\sqrt{2}a}{4} = \frac{a}{2\sqrt{2}}$$

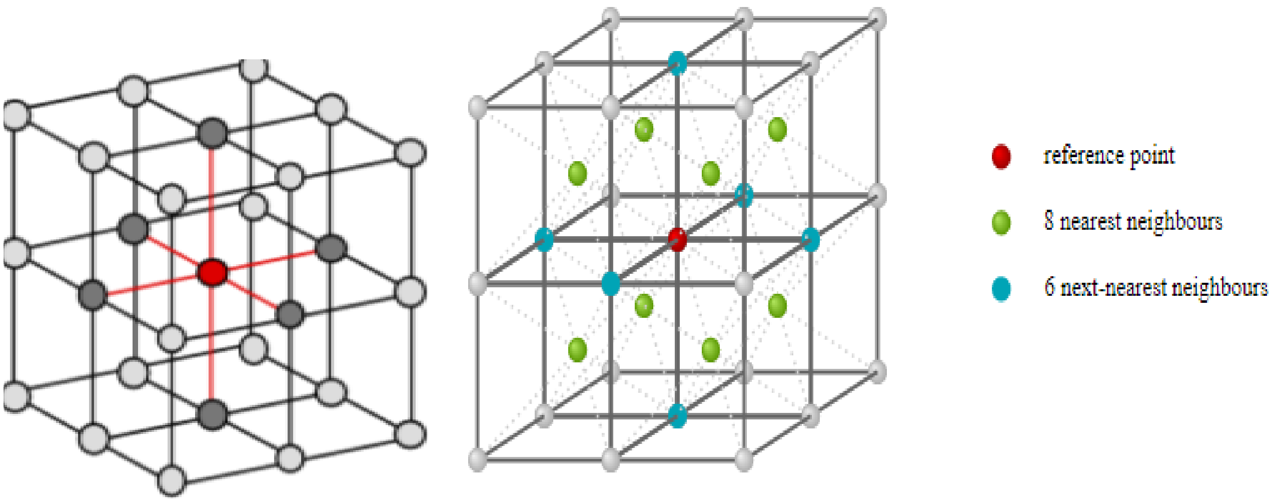


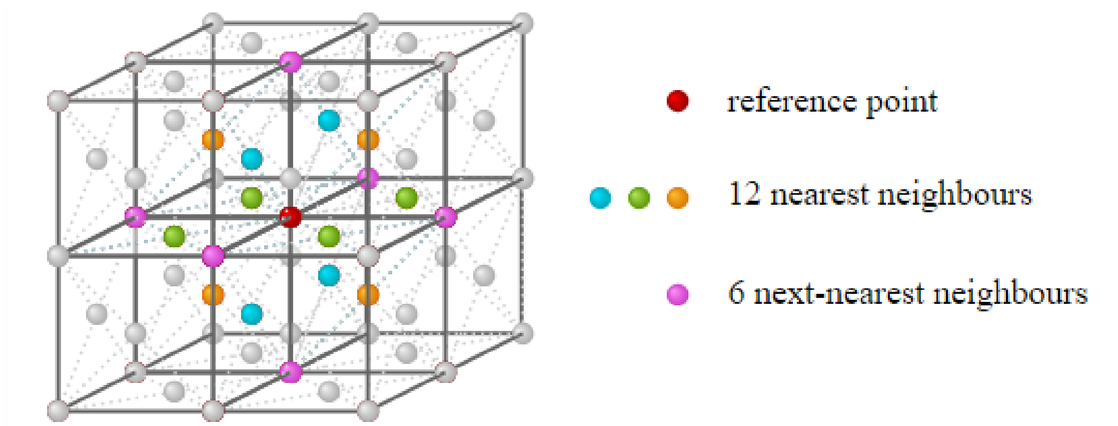
بالنسبة المتجهات الانتقالية الأساسية

$\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$

بالنسبة للخلايا المكعبة فان a =b =c

$$a_1 = \tfrac{1}{2}a(\hat{x}+\hat{y}) \; ; \quad a_2 = \tfrac{1}{2}a(\hat{y}+\hat{z}) \; ; \quad a_3 = \tfrac{1}{2}a(\hat{z}+\hat{x})$$


reference point
8 nearest neighbours
6 next-nearest neighbours


reference point
12 nearest neighbours
6 next-nearest neighbours

الخاصية	المكعب البسيط sc	المكعب متمركز الجسم bcc	المكعب متمركز الأوجه fcc
حجم خلية الوحدة (طول الضلع a)	a^3	a^3	a^3
عدد نقط الشبيكة لكل خلية وحدة	1	2	4
عدد نقط الشبيكة لكل وحدة حجم	$1/a^3$	$2/a^3$	$4/a^3$
عدد الجوار الاول (النقط المحيطة)ويعرف بعدد التناسق أو الجوار	6	8	12
المسافة للجوار الاول (النقط المحيطة)	a	$a\frac{\sqrt{3}}{2}$	$a/\sqrt{2}$
عدد الجوار الثاني	12	6	6
المسافة للجوار الثاني	$a\sqrt{2}$	a	a

مثال/ يتبلور الحديد بترتيب ذري تكعيبي متمركز الجسم (bcc) احسب مقدار ثابت الشبيكة Lattice Constant (طول ضلع خلية الوحدة a) علما بان :

كثافة الحديد $\rho = 7.94\ g/cm^3$ ووزنه الذري (w) =55.58 وعدد افوكادرو $N_A=6.02\times10^{23}$

الحل/

الكثافة = كتلة وحدة الحجوم = $\frac{\text{كتلة خلية الوحدة}}{\text{حجم خلية الوحدة}}$

وبما أن عدد الذرات الحقيقية لكل خلية وحدة في بلورة الحديد 2=(n)

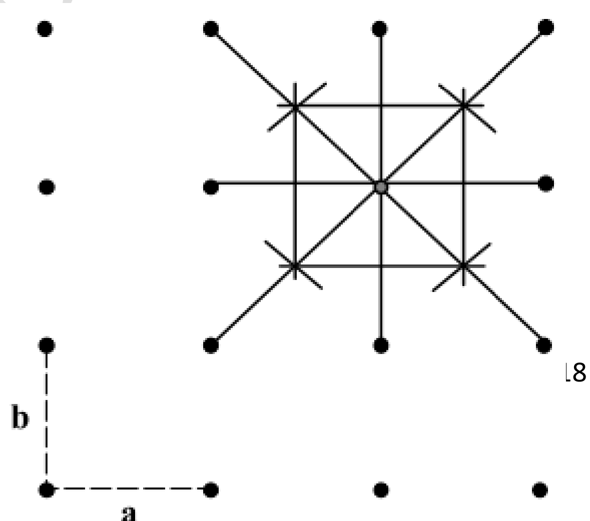
$$\therefore \rho = \frac{n\,w}{a^3 N_A}$$

$$\therefore a = \sqrt[3]{\frac{n\,w}{\rho N_A}} = \sqrt[3]{\frac{2\times 55.85}{7.94\times 6.07\times 10^{23}}} = 2.86\times 10^{-8}\ \text{cm} = 2.86\,A^\circ$$

خلية فيجنر – زايتس الأولية Wigner Seitz Primitive Cell

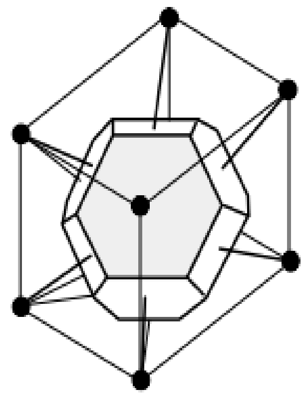
تعتبر طريقة فيجنر-زايتس (نسبة للعالم فيجنر-زايتس) طريقة مبسطة لتعيين الخلية الأولية, حيث تتلخص هذه الطريقة بالخطوات التالية:

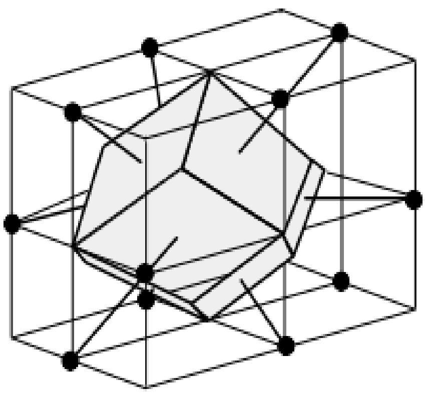
1- نختار نقطة شبيكة معينة.
2- نوصل بين نقطة الشبيكة المعينة و النقاط المجاورة لها بواسطة خطوط مستقيمة.
3- نرسم خطوط او مستويات متعامدة في منتصف الخطوط المستقيمة الموصلة.
4- المساحة (في حالة بعدين) او الحجم الاصغر (في حالة ثلاثة ابعاد) المحصور بين المستقيمات المتعامدة تمثل وحدة خلية فيجنر-زايتس و هي خلية تحتوى على نقطة شبيكة واحدة.



خلية فيجنر- زايتس في بعدين

خلية فيجنر- زايتس في ثلاثة ابعاد





مكعب متمركز الجسم BCC

مكعب متمركز الاوجه FCC

التماثل في البلورات Symmetry Of Crystals

تختلف المواد البلورية الصلبة باختلاف شكل الشبيكات البلورية لها , وهذا الاختلاف ينشأ من تباين ابعاد وزوايا وحدات التركيب البلوري . من هنا يأتي أهمية مبدأ التماثل في تصنيف الشبيكات البلورية.

التماثل : تكرار أو تطابق أجزاء معينة لشكل ما عند اجراء مجموعة من العمليات , ويعتبر التماثل أهم الخصائص الهندسية التي تميز خلايا الوحدة للجسم الصلب المتبلور، حيث تتميز كل خلية بنوع واحد أو أكثر من أنواع التماثل الهندسي.

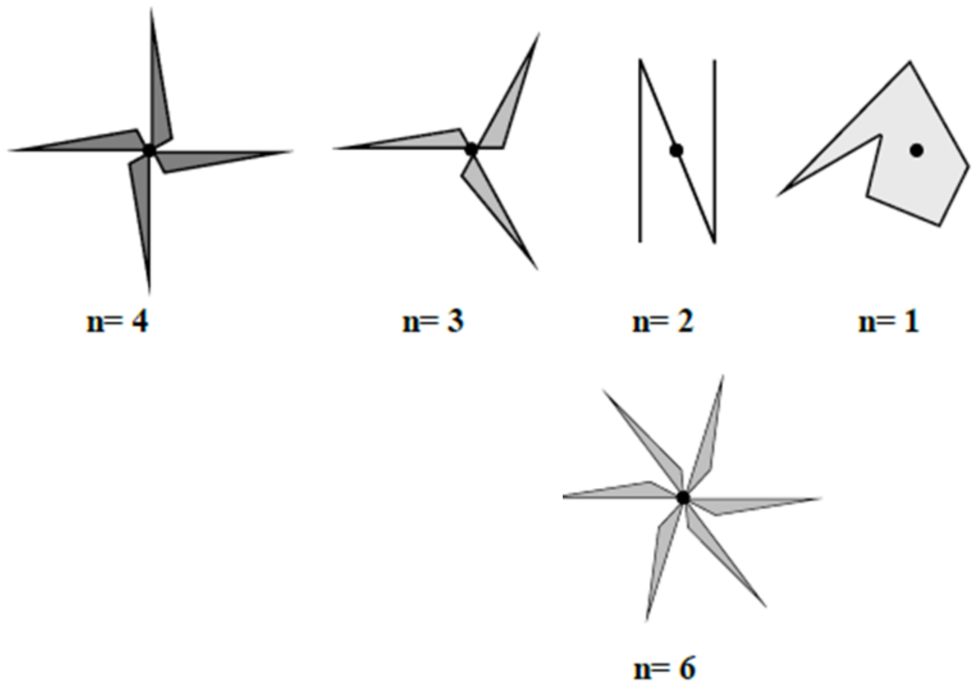
عناصر التماثل Symmetry Elements

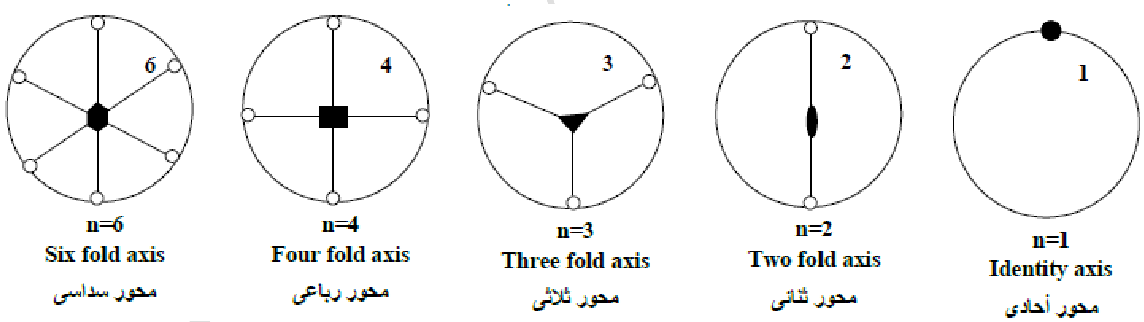
1- محور التماثل (Symmetry axis) : و هو عبارة عن مستقيم اذا ما دار الشكل حوله بزاوية معينة حل الشكل محل نفسه ، و تسمى أصغر زاوية يدورها الشكل حول محور التماثل كي يحل الشكل محل

نفسه بزاوية الدوران البدائية (Primitive rotation angle) لذلك المحور و تحدد زاوية الدوران لمحور الدوران بعدد المرات التي يحل الشكل فيها محل نفسه عند دورانه حول ذلك المحور دورة كاملة . فإذا كان عدد مرات احلال الشكل محل نفسه عند الدوران $360°$ هو n فأن:

$$n = \frac{360}{\theta}$$

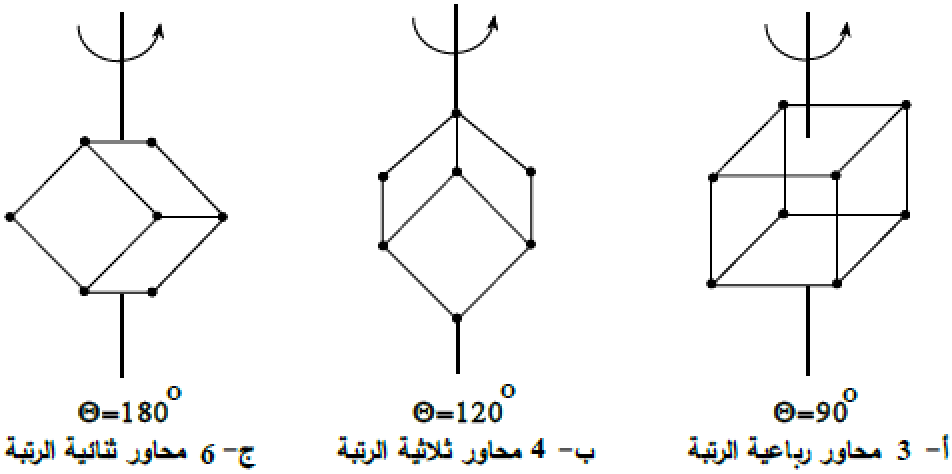
يسمى **n** بدرجة محور الدوران او رتبة التماثل ، فاذا كان تكرار الشكل مرة واحدة في الدورة الكاملة اي ان البلورة تعيد نفسها كل $360°$ فيقال لمحور التماثل الدوراني بأنه احادي التماثل أما اذا كان التكرار للأشكال مرتين في الدورة الكاملة، أي تعيد نفس الوضع كل $180°$ فيقال لمحور التماثل الدوراني بأنه ثنائي التماثل. اما اذا استعادت البلورة وضعه ثلاث مرات في الدورة الكاملة أي كل $120°$ فيسمى المحور في هذه الحالة بثلاثي التماثل و هكذا للمحور رباعي التماثل أي كل $90°$ و سداسي التماثل أي كل $60°$. لذا تكون المحاور الدورانية (1 ، 2 ، 3 ، 4 ، 6) و لا وجود للمحاور الخماسية و السباعية و الثمانية في البلورات و ذلك لأنه لا يتفق مع الترتيب الذري في النظم البلورية المختلفة.





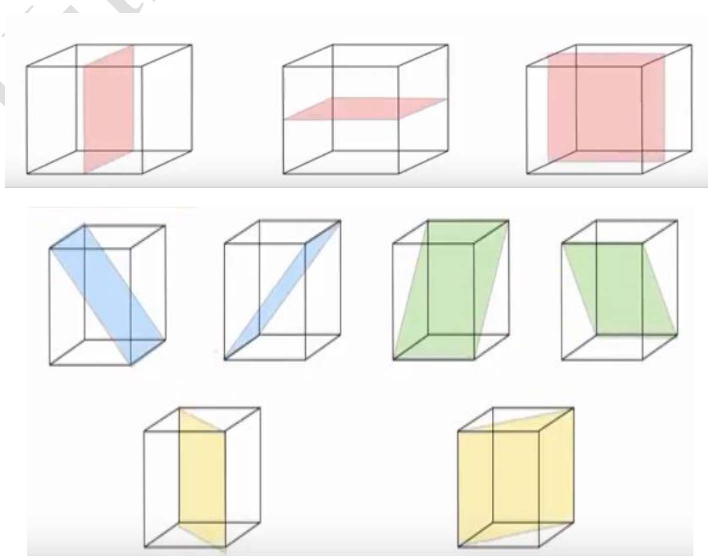
على سبيل المثال الخلايا المكعبة تمتلك ثلاثة عشر محور تماثل , هي:

1- عدد 3 محاور من الرتبة الرابعة يصل كل منها بين مراكز الأوجه المتقابلة.
2- عدد 4 محاور من الرتبة الثالثة يصل كل منها بين زاويتين مجسمتين متقابلتين.
3- عدد 6 محاور من الرتبة الثانية يصل كل منها بين النقطتين المنصفتين لحرفين متقابلين.



2- مستوى التماثل (Plane of symmetry)

يعرف مستوى التماثل بأنه المستوى الذي يقسم البلورة إلى نصفين متساويين ومتشابهين بحيث يكون أحد النصفيين صورة مرآة للنصف الأخر و يرمز لمستوى التماثل بالرمز m. في البلورة المكعبة هناك ثلاث مستويات تماثل كل منها يوازي وجهيين متقابلين من المكعب وستة مستويات تماثل باتجاه اقطار المكعب. اذا يمتلك المكعب تسعة مستويات تماثل.



3- **مركز التماثل Center of Symmetry**

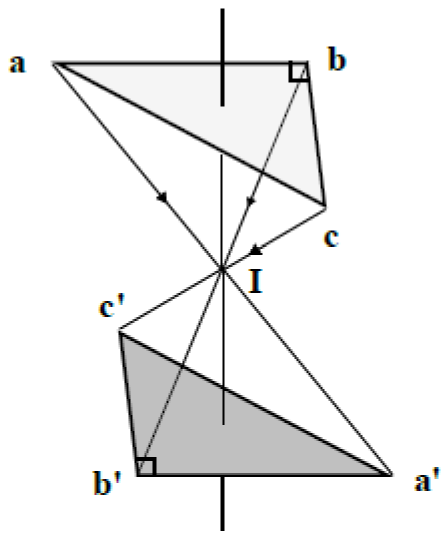
هو عبارة عن نقطة وهمية تتوسط البلورة حيث تتميز بأن أي وجهين أو حرفين أو زاويتين مجسمتين تتماثلان عبرها.

4- **مركز الانقلاب Center of Inversion**

مركز انقلاب هي نقطة تماثل انقلابي التي تبقي الخلية كما هي عند اجراء الانتقال الرياضي $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$

$$\vec{r} = a_x i + a_y j$$

$$-\vec{r} = -a_x i - a_y j$$



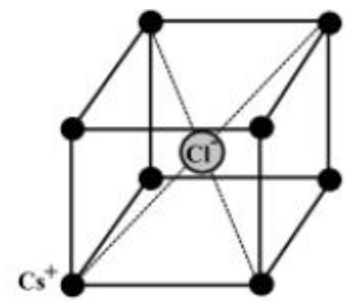
المثلث abc ينطبق على نفسه بعملية انقلاب عبر مركز الانقلاب I فيتحول إلى المثلث $a'\ b'c'$. في هذا المثال يقال للمثلث بانها متماثل تماثلا انقلابيا عبر مركز التماثل I.

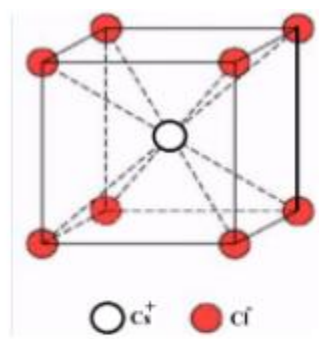
تراكيب بلورية بسيطة شائعة الاستخدام

1- كلوريد السيزيوم CsCl

تمتلك هذه البلورة شبيكة مكعبة متمركزة الجسم (bcc) تحتل فيها ايونات السيزيوم Cs^+ اركان خلية الوحدة أي النقاط 000, بينما تحتل ايونات الكلور Cl^- مركز جسم الخلية $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ وبذلك تمتلك

وحدة الخلية جزيئا واحدا CsCl. تعتبر بلورة كلوريد السيزيوم بلورة غير برافيسية لانها تتكون من بلورتين من نوع المكعب البسيط تبعد كل منهما عن الاخرى بمسافة نصف قطر المكعب.





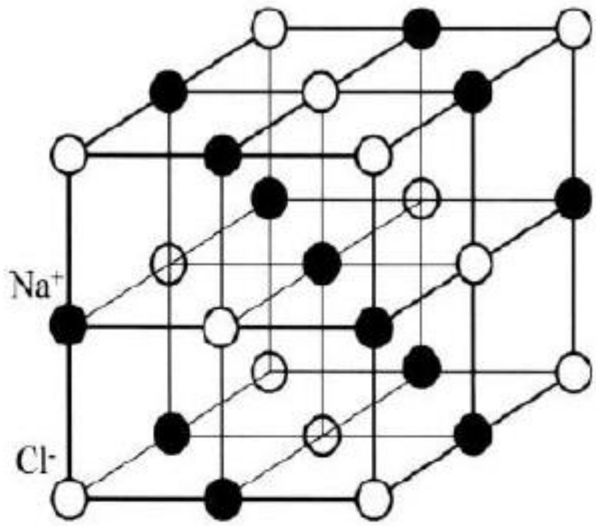
2- كلوريد الصوديوم NaCl

تمتلك هذه البلورة شبيكة مكعبة متمركزة الوجه. تمتلك وحدة الخلية اربعة جزيئات NaCl ومواضع (الاحداثيات) لايوناتها هي:

Cl-: (000); (½½0); (½0½); (0½½)

Na+: (½½½); (00½); (0 ½0); (½00)

في هذا التركيب تشغل ايونات الصوديوم Na^+ رؤوس المكعب ومراكز وجوهه , بينما تحتل ايونات الكلور Cl^- منصفات اضلاع ومركز المكعب او بالعكس. يعتبر التركيب البلوري لكلوريد الصوديوم بانها متكونة من شبيكتين متداخلتين من نوع المكعب متمركز الوجوه، إحداهما لأيونات الصوديوم والأخرى لأيونات الكلور، ثم أزيحت هاتان الشبيكتان الفرعيتان بالنسبة لبعضهما البعض بمقدار نصف طول ضلع المكعب (a/2) .

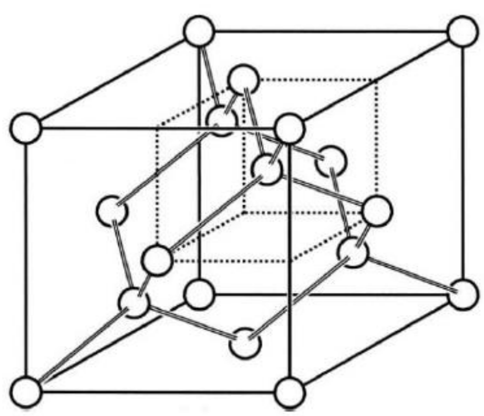


3- تركيب الماس Diamond

تمتلك هذا التركيب شبيكة مكعبة متمركزة الأوجه بحيث تحتل ذرات الكاربون رؤوس المكعب و مراكز وجوهه وتقسمه الى ثمانية مكعبات صغيرة وتشغل اربع ذرات كاربون مراكز أربعة من هذه المكعبات وفي هذه الحالة تحاط كل ذرة كربون بأربع ذرات مجاورة. احداثيات الذرات في هذا التركيب هي :

$$C : 000\ , \quad 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}\ , \quad \frac{1}{2}0\frac{1}{2}\ , \quad \frac{1}{2}\frac{1}{2}0$$

$$C : \frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}\ , \quad \frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4}\ , \quad \frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4}\ , \quad \frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}$$



ويمكن اعتبار التركيب الماسي مكوناً من شبيكتين متداخلتين من نوع المكعب متمركز الأوجه.

تركيب الرص المتلاصق Closed-Packed Structure

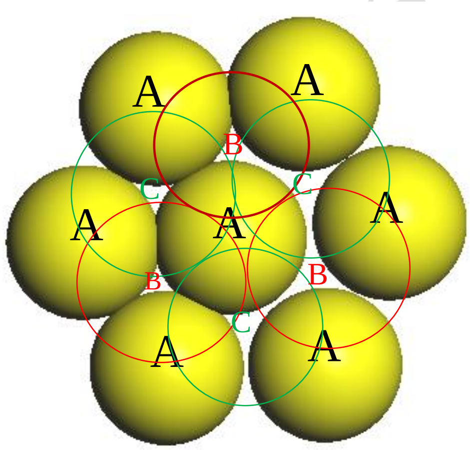
ترص ذرات المادة الصلبة والتي تشبه كرات صلدة متساوية الحجم ومتمركزة حول نقطة الشبيكة، بطريقتين بحيث يكون حجم الفراغات المحصورة بينها أقل وفي كلتا الطريقتين نبدأ برص الطبقة الأولى A بحيث تلامس كل ذرة (كرة) ست ذرات أخرى تحيط بها، ثم توضع الطبقة الثانية B فوق الأولى بنفس الكيفية، بشرط أن تلامس أي ذرة فيها ثلاث ذرات في الطبقة الأولى، أي تكون كل ذرة في الطبقة B فوق احد الفجوات في الطبقة A.

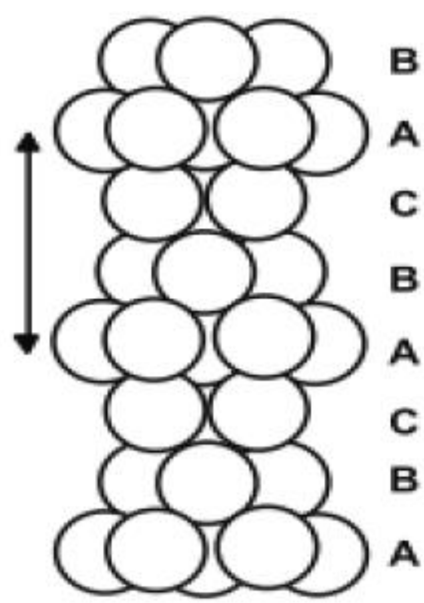
اذا اضيف طبقة ثالثة سوف تنشأ نوعين من الرص:-

1- الرص المكعبي المحكم Cubic Close Packing (ccp)

تترتب كرات الطبقة الثالثة C فوق فجوات الطبقة الأولى التي لم تحتلها كرات الطبقة الثانية وتتكرر البنية في هذا الترتيب بعد ثلاث طبقات أخرى وبذلك نحصل على ترتيب ABCABC و الذي يكّون وحدة خلية مكعبة متمركزة الأوجه.

ان كل كرة في هذه البنية تكون في تماس مع ثلاث كرات التي فوقها والتي تحتها.

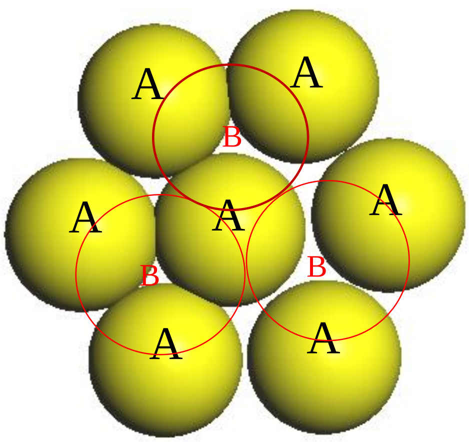


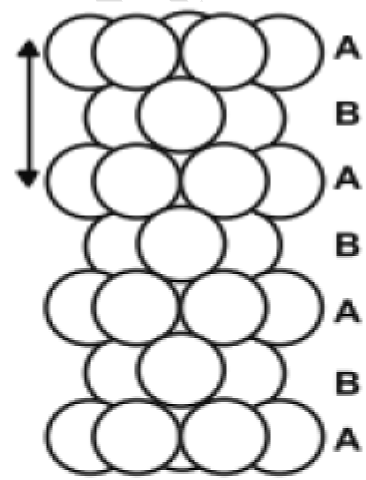


2- الرص السداسي المحكم **Hexagonal Close-Packing (hcp)**

تترتب كرات الطبقة الثالثة فوق طبقات الكرة الأولى مباشرة وعند تكرار هذا النوع من الترتيب نحصل على بنية متكررة بعد كل طبقتين أي ان ABAB .

ان كل كرة في هذا البنية مع تماس مع ست كرات بنفس المستوي ومع ثلاث كرات في الطبقة التي فوقها ومع ثلاث كرات في الطبقة التي تحتها.





نسبة الملئ (عامل الرص) Filling Factor or Packing Factor

يعرف عامل الرص على انه أعظم نسبة من حجم الخلية الاعتيادية يمكن أن تشغله ذرات متماثلة موجودة في مواضع نقاط الشبيكة او مرافقة لنقاط الشبيكة.

عند حساب نسبة الملئ نفترض ان الذرات المتجاورة في حالة تلامس وهذا يعني ان اقصر مسافة بين نقطتي شبيكة تمثل قطر الذرة عندما ترافق نقطة شبيكة واحدة , وعندما ترافق ذرتان نقطة شبيكة واحدة كما في بلورة الماس او كلوريد الصوديوم حيث تمثل المسافة بين ذرتين او ايونين قطر الذرة.

$$\text{Filling Factor} = \frac{\text{The volume of one atom} \times \text{The number of atoms in the unit cell}}{\text{The volume of unit cell}} \quad 100\%$$

مثال: احسب عامل الرص لكل من

1- المكعب البسيط SC؟
2- المكعب المتمركز الجسم BCC؟
3- المكعب المتمركز الأوجه؟

الحل

نفترض أن الذرات عبارة عن كرات صلدة متساوية القطر ومتماسكة، أي متلاصقة الرص. فإذا كان عدد الذرات في خلية الوحدة N, وحجم كل ذرة V ونصف قطرها r , وطول ضلع المكعب a فان :

$$P.F = \frac{V\,N}{a^3}$$

$$F_{sc} = \frac{1 \times 4\pi r^3}{3 \times 8r^3} = \frac{\pi}{6} = 0.52$$

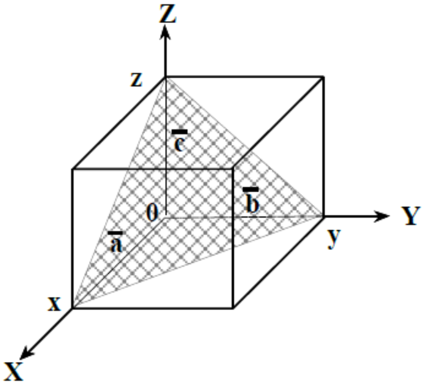
$$F_{bcc} = \frac{2 \times 4\,\pi\,r^3}{3\,(4r/\sqrt{3})^3} = \frac{\pi\,\sqrt{3}}{8} = 0.68$$

$$F_{fcc} = \frac{4 \times 4\,\pi\,r^3}{3\,(2\,\sqrt{2}\,r)^3} = \frac{\pi\,\sqrt{2}}{6} = 0.74$$

معاملات ميلر Miller Indices

تختلف الخواص الفيزيائية للمواد البلورية باختلاف اتجاهات البلورة او مستويات البلورة نظرا لعدم تجانس خواص البلورة في الأبعاد الثلاثة. لذا اصبح من الضروري تحديد هذه الاتجاهات والمستويات البلورية عند دراسة الخواص الفيزيائية المختلفة. يمكن وصف هذه الاتجاهات والمستويات بواسطة احداثيات معينة تدعى معاملات ميلر Miller Indices (نسبة العالم الانجليزى ميلر). تحدد المستويات البلورية بإحداثيات ميلر طبقاً للخطوات التالية:

1- نختار نقطة اصل وثلاث محاور كمرجع.
2- نقيس المسافة بين نقطة الأصل ونقطة تقاطع المستوي مع المحاور ولتكن A على المحور X ولتكن B على



المحور Y وc على المحور Z . من المحتمل ان تكون

A وB وC اعداد صحيحة سالبة او موجبة او كسرية.

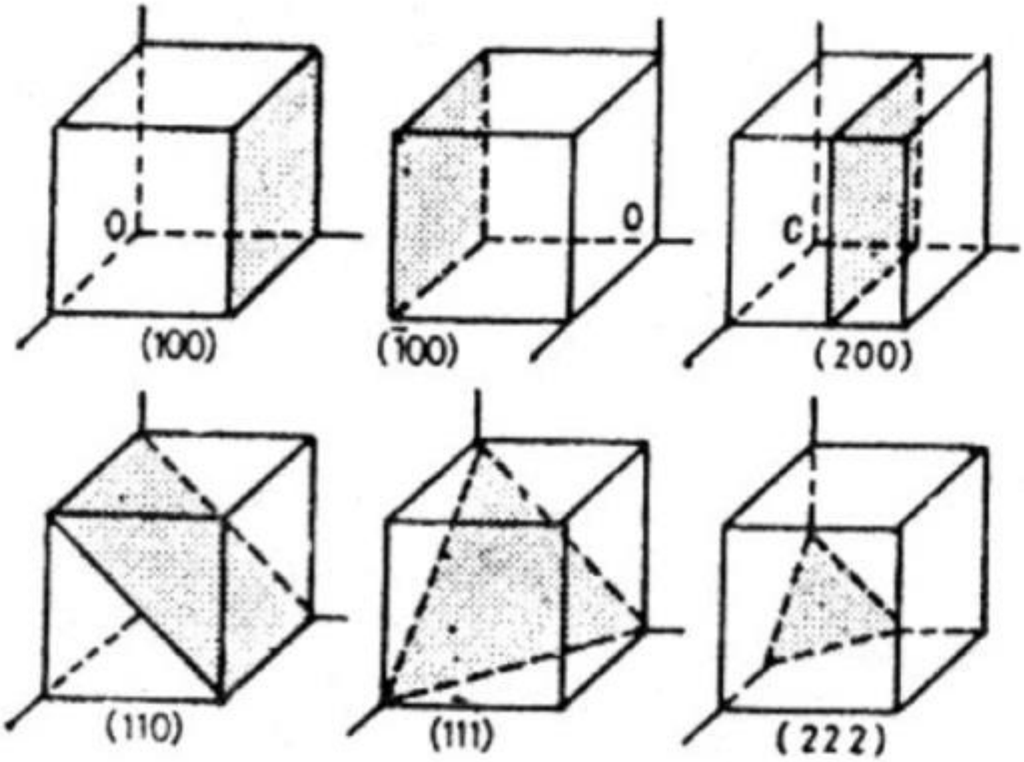
3- نأخذ مقلوب قيم هذه الاعداد ونضرب كل مقلوب باصغر

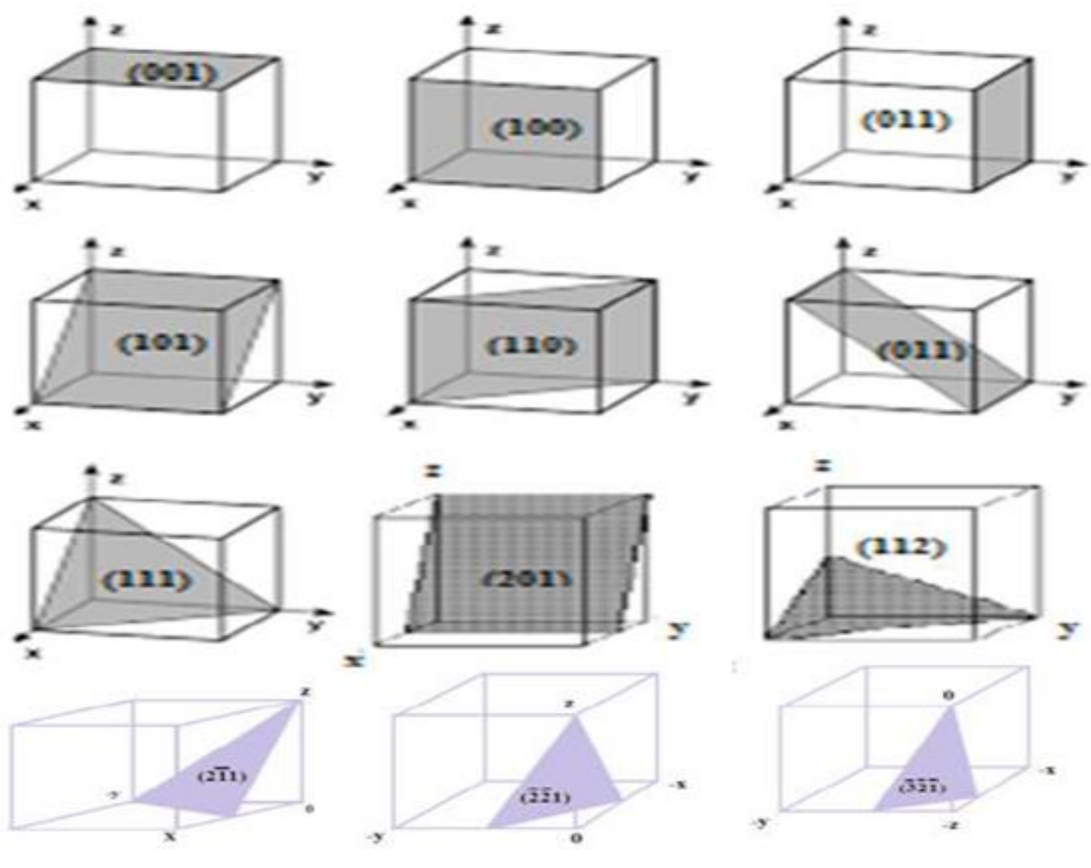
قاسم مشترك بحيث يحول جميع المقلوبات الى اعداد صحيحة

فيكون الناتج حينئذ هو معاملات ميلر لذلك المستوي.

نضع المعاملات بين قوسين صغيرين من دون فارزة او إشارة

بين هذه الاعداد ويرمز لها hkl , أي (hkl).


(100)
($\bar{1}$00)
(200)
(110)
(111)
(222)

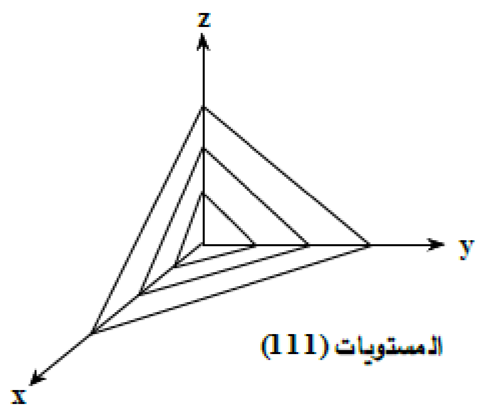

(001)
(100)
(011)
(101)
(110)
(011)
(111)
(201)
(112)

ملاحظات مهمة:

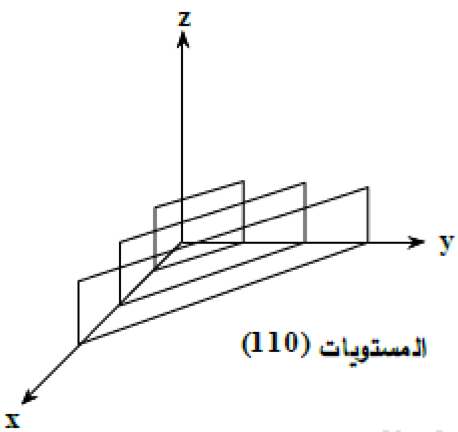
1- المستوي الذي يقطع المحور في المالانهاية ∞ يوازي ذلك المحور و له معامل ميلر على هذا المحوريساوى صفر.

2- لا تصف معاملات ميلر مستوى معين فقط بل تصف أيضا مجموعة المستويات الموازية له. فعلى سبيل المثال , المستوي (622) هو نفسه المستوي (311) , المستوي (442) هو نفسه المستوي (221) , المستوي (246) هو نفسه المستو (123) .

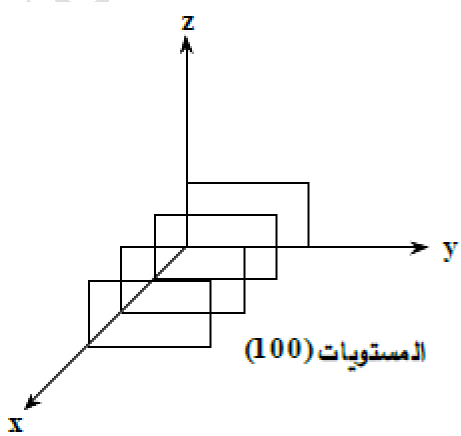
3- اذا قطع المستوي احد الاحداثيات بالاتجاه السالب للمحور, عندئذ تكتب لمعامل ميلر المقابل للإشارة السالبة $\bar{h}$, $\bar{k}$ or $\bar{l}$.



المستويات (111)



المستويات (110)



المستويات (100)

مثال 1: جد معاملات ميلر للمستوي الذي يقطع الاحداثيات الديكارتية عند $x=3$, $y=2$, $z=1$ ؟

الحل

نأخذ مقلوب الاعداد فنحصل على $\frac{1}{1}, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}$

نضرب الكسور الناتجة في القاسم المشترك (هنا = 6) اي ان :

$$\frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{1}{1} \times 6 = (2,3,6)$$

$$\therefore (h\ k\ l) = (2\ 3\ 6)$$

مثال 2: جد معاملات ميلر للمستوي الذي يقطع الاحداثيات الديكارتية عند $x=4$, $y=4$, $z=2$

الحل

نرسم المستوي (واجب بيتي)

نأخذ مقلوب اعداد القطوع فنحصل على $\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$

نضرب الكسور الناتجة في القاسم المشترك (هنا = 4) اي ان :

$$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2} \times 4 = (1,1,2)$$

$$\therefore (h\ k\ l) = (1\ 1\ 2)$$

مثال 3: جد معاملات ميلر للمستوي الذي يقطع الاحداثيات الديكارتية عند $x=2$, $y=2$, $z=1$

الحل

نرسم المستوي (واجب بيتي)

نأخذ مقلوب اعداد القطوع فنحصل على $\frac{1}{1}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

نضرب الكسور الناتجة في القاسم المشترك (هنا = 2) اي ان :

$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{1} \times 2 = (1,1,2)$

$\therefore (h\ k\ l) = (1\ 1\ 2)$

واجب بيتي/ ارسم السطوح البلوري التالية لنظام مكعبي:

$$(200), (004), (023), (120), (0\bar{1}0), (001), (010), (222), (011)$$

$$(331), (420), (2\bar{1}1), (\bar{1}31), (110), (\bar{1}10), (111), (020)$$

<u>ملاحظة /</u>

هناك مجموعة من السطوح تكون متكافئة , لذا توضع بين اقواس كبيرة ذات الشكل { }, فمثلا

1- الأوجه الستة للمكعب تعبر عنها كالاتي:

$$(100), (010), (001), (\bar{1}00), (0\bar{1}0), (00\bar{1}) = \{100\}$$

مثال اخر هو

$$\{333\} = (333), (\bar{3}33), (3\bar{3}3), (33\bar{3}), (\bar{3}\bar{3}3), (\bar{3}3\bar{3}), (3\bar{3}\bar{3}), (\bar{3}\bar{3}\bar{3})$$

2- اذا كانت معاملات ميلر للسطح مختلفة مثل {134} ,{253} , {423}, سوف نحصل على 48 سطح متكافئ لهذه المجموعة. اما اذا كانت اثنين منها متشابهين مثل {133} ,{224} , {115} فأننا سوف نحصل على 24 سطح متكافئ.

تعيين احداثيات للمستويات داخل البلورة المكعبة

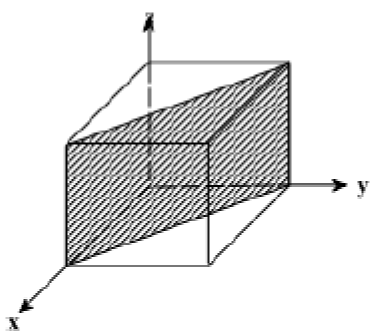
لتعيين ابعاد (الاحداثيات) للمستوي في البلورة المكعبة نتبع لخطوات التالية:

1- نرسم مكعب طول ضلعه وحدة واحدة.
2- نعين المحاور الثلاث (x و y و z).
3- نأخذ مقلوب معاملات ميلر للمستوي البلوري ونضع فواصل (فارزة) بين نواتج المقلوب وبذلك نحصل على نقاط تقاطع المستوي مع المحاور.

مثال/ ارسم المستوي (110) في بلورة مكعبة طول ضلعها وحدة واحدة.

$\frac{1}{1}, \frac{1}{1}, \frac{1}{0} = (1,1,\infty) \Longrightarrow x=1 \quad , \quad y=1 \quad , \quad z=\infty$

∴ النقاط هي $(0,0,\infty)$ ، $(0,1,0)$ ، $(1,0,0)$.

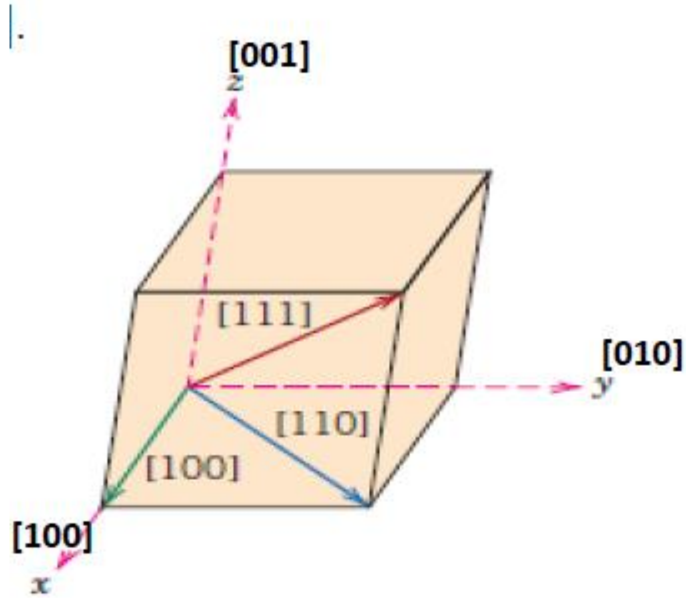


اتجاهات المستويات البلورية

لتحديد اتجاه المستويات في البلورة نستخدم ثلاث معاملات h , k , l توضع بين قوسين مربعين بالشكل [h k l] . ويعبر عن الصيغة الاتجاهية :

$$\vec{R} = h\vec{a} + k\vec{b} + l\vec{c}$$

معاملات الاتجاه [h k l] هي معاملات الاتجاه العمودي على المستوي (h k l) . فعلى سبيل المثال اتجاه المستوي (111) يعبر عنه بالمتجه [111].



في الشكل المجاور المستوي (100) يكون باتجاه

محورx ويعبر عن المتجه ب $[100],\ \vec{R} = \vec{a}$.

بالنسبة للمستوي (010) يكون باتجاه

محورy ويعبر عن المتجه ب $[010],\ \vec{R} = \vec{b}$.

اما المستوي (001) يكون باتجاه

محورz ويعبر عن المتجه ب $[100],\ \vec{R} = \vec{c}$.

هناك مجموعة من الاتجاهات المتكافئة في البلورة

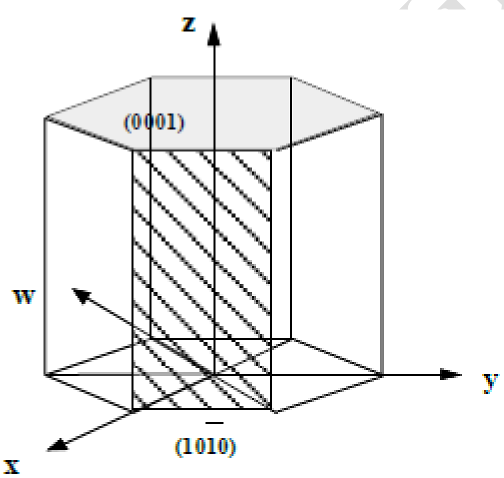
تكون متكافئة , لذا توضع بين اقواس كبيرة ذات الشكل $< >$.

ان $< 100 >$ في البلورة المكعبة يشير الى الاتجاهات التالية:

$$[\mathbf{100}], [\mathbf{010}], [\mathbf{001}], [\mathbf{\bar{1}00}], [\mathbf{0\bar{1}0}], [\mathbf{00\bar{1}}]$$

واجب بيتي / ارسم المستوي (110) والمتجه [110] في المكعب البسيط؟

<u>معاملات ميلر في الخلايا السداسية</u>



ترسم الخلايا السداسية بدلالة أربعة محاور هي X و Y وZ و W ,

حيث ان ثلاثة محاور منها بمستوي واحد (السطح العلوي او القاعدة)

والمحورالرابع يكون عمودي على هذا السطح. تكتب معاملات ميلر

على الصورة (hkil) , حيث ان المعاملات h و k و i و l تمثل

المحاور X و Y وZ و W على التوالي .

مثال/ احسب معاملات ميلر للتركيب السداسي للاحداثيات

$x = 1$	$y = -1$	$z = \infty$	$w = \infty$	
1	-1	∞	∞	*Intersections*
1	-1	0	0	*Reciprocal*

$\therefore$ معاملات ميلر لهذا السطح هي $(1\,\bar{1}\,0\,0)$

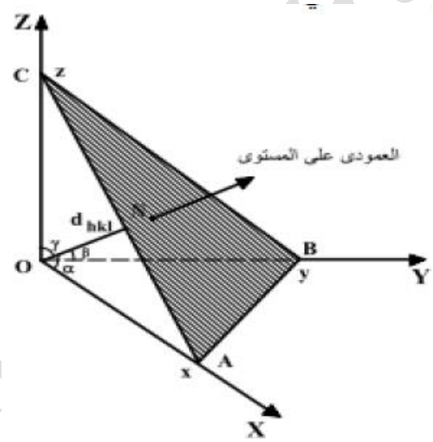
<u>المسافة البينية بين المستويات المتوازية</u>

المستويات المتوازية في البلورة ذات معاملات ميلر hkl تفصلها مسافات بينية <u>d_{hkl} يمكن حسابها كالاتي:</u>

من الشكل المجاور نجد ان α و β و γ هي الزوايا التي تصنعها العمود $\overline{ON}$ المقام من نقطة الأصل على المستوي (hkl) مع الاتجاهات x , y , z على الترتيب . ونسب تقاطع المستوى الأول مع المحاور الرئيسية $\frac{a}{h}, \frac{b}{k}, \frac{c}{l}$ نجد أن جيوب التمام الاتجاهية هي:

$$\cos\alpha = \frac{ON}{OA} = \frac{d_{hkl}}{OA} \quad , \quad \cos\beta = \frac{ON}{OB} = \frac{d_{hkl}}{OB} \quad , \quad \cos\gamma = \frac{ON}{OC} = \frac{d_{hkl}}{OC}$$

$$OA = a \times \frac{1}{h} = \frac{a}{h} \; , \quad OB = b \times \frac{1}{k} = \frac{b}{k} \; , \quad OC = c \times \frac{1}{l} = \frac{c}{l} \; ,$$



$$\therefore \cos\alpha = \frac{d_{hkl}}{\frac{a}{h}} = \frac{h}{a} d_{hkl}$$

$$\therefore \cos^2\alpha = \left(\frac{h}{a}\right)^2 d^2hkl..........(1)$$

$$\Delta ONB : \cos B = \frac{ON}{OB} = \frac{d_{hkl}}{\frac{b}{k}} = \frac{k}{b} d_{hkl}$$

$$\therefore \cos^2\beta = \left(\frac{k}{b}\right)^2 d^2{}_{hkl}.........(2)$$

$$\Delta ONC = \cos\gamma = \frac{ON}{OC} = \frac{d_{hkl}}{\frac{c}{l}} = \frac{l}{c} d_{hkl}$$

$$\therefore \cos^2\gamma = \left(\frac{l}{c}\right)^2 d^2{}_{hkl}.........(3)$$

$$\cos^2\alpha + \cos^2\beta + \cos^2\gamma = 1 \ldots\ldots\ldots..(4)$$

بتعويض المعادلات 1 و2 و3 في 4 نحصل على

$$d_{hkl}^2 \left(\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2 \right) = 1$$

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$$

بالنسبة للمكعب فان a=b=c لذا تصبح العلاقة بالشكل التالي

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

مثال/احسب المسافة البينية في البلورة المكعبة للمستويات (511) و (333) ثم ناقش النتيجة ؟

الحل/ نفرض طول ضلع المكعب a (a=b=c) , نستخدم العلاقة:

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

(511) $$d_{(hkl)} = \frac{a}{\sqrt{5^2+1^2+1^2}} = \frac{a}{\sqrt{27}} = \frac{a}{3\sqrt{3}}$$

(333) $$d_{(hkl)} = \frac{a}{\sqrt{3^2+3^2+3^2}} = \frac{a}{\sqrt{27}} = \frac{a}{3\sqrt{3}}$$

هذه السطوح تمتلك نفس قيمة المسافة البينية مع اختلاف معاملات ميلر لها.

الزاوية بين المستويات

اذا فرضنا ان معاملات ميلر لمستو هي h_1, k_1, l_1 ومعاملات ميلر لمستو اخر هي h_2, k_2, l_2 فان الزاوية المحصورة بين هاتين المستويين يمكن حسابه من العلاقة التالية:

$$\cos\theta = \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2}{\sqrt{(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)}}$$

$$\theta = \cos^{-1}\frac{h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2}{\sqrt{(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)}}$$

مثال/احسب الزاوية المحصورة بين المستويين (100) و (101) ؟

الحل/

$$\cos\theta = \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2}{\sqrt{(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)}}$$

$$\theta = \cos^{-1}\frac{h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2}{\sqrt{(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)}}$$

$$\theta = \cos^{-1}\frac{1 + 0 + 0}{\sqrt{(1^2 + 0^2 + 0^2)(1^2 + 0^2 + 1^2)}}$$

$$\theta = \cos^{-1}\frac{1}{\sqrt{2}} = 45°$$