وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
الهيئة القطاعية للعلوم التربوية

مناهج قسم الفيزياء
لكليات التربية

مفردات منهج مادة فيزياء الحالة الصلبة   الصف الرابع   عدد الساعات الاسبوعية (3)

1-التركيب البلوري

المقدمة، الحالة البلورية والحالة غير البلورية، وحدة الخلية، الشبيكة البرافيزية والشبيكة غير البرافيزية، انواع الشبائك (مكعب بسيط، مكعب متمركز الجسم، مكعب متمركز الجسم، مكعب متمركز السطوح، كلوريد الصوديوم، تركيب سداسي متلاصق الرص) التناظر معامل ملر.

2-الحيود في البلورات

الحزم الساقطة وقانون براك، (الاشعة السينية، النيوترنات، الالكترونات)
الطرق التجريبية للحيود، طريقة لاري، طريقة البلورة الدوارة، طريقة المسحوق، الشبيكة المقلوبة، عامل تركيب الشبيكة.

3-ديناميكية الشبيكة حركات الشبكية

اهتزاز الشبيكة، اهتزاز الشبيكة ذات ذرة واحدة في بعد واحد، اهتزاز الشبيكة ذات الذرتين في بعد واحد الحرارة النوعية للشبكية النظرية الكلاسيكية، نموذج انيشتاين، نموذج ديباي، التمدد الحراري، معالجات، المقاومة الحرارية للشبيكة.

4-الالكترونات الحرة

النظرية الكلاسيكية للالكترونات الحرة، نظرية درود، نموذج لورنتز ، فشل النظرية الكلاسيكية، احصاء فيرمي، ديراك للالكترونات الحرة في ثلاث ابعاد، طاقة فيرمي، كثافة الحالات النوعية الالكترونية.

5- نظرية الانطقة للمواد الصلبة

الالكترونات الحرة، أصل فجوة الطاقة، دالة بلوخ، ديناميكية حركة الالكترونات (سرعة الطور وسرعة المجموعة) الكتلة الفعالة، تاثير هل، المعادن، العوازل، اشباه الموصلات.

6- العيوب البلورية

العيوب النقطية – الثغرات – عيوب شوتكي – عيوب فرنكل – العيوب الخطية – الانخلاعات – الانخلاع الحاني – الانخلاع البريمي – العيوب السطحية – العيوب الحجمية.

7- التوصيل المفرط

حالة فرط التوصيل، المجال المغناطيسي الانتقالي، ظاهرة مازنر، نظرية التوصيل المفرط، عمق الاختراق

المصادر

- فيزياء الحالة الصلبة – تاليف: د. يحيى نوري الجمال
- فيزياء الحالة الصلبة - تاليف: د. مؤيد جبرائيل يوسف

مصادر اضافية:

- فيزياء الحالة الصلبة – تأليف: د. صبحي سعيد الراوي د. شاكر جابر شاكر د. يوسف مولود حسن
- فيزياء الجوامد – تأليف: د. محمد امين د. احمد فؤاد باشا د. شريف احمد خيري

- Kittel, C., 2005,. Introduction to solid state physics, 8th ed., Wiley.
- Omar MA., 1975, Elementary solid state physics, principles and applications, Addison-Wesley Publishing Company.
- Virtual Materials Science and Engineering by wiley
https://www.wiley.com/college/callister/CL_EWSTU01031_S/vmse/index.htm
https://www.wiley.com/college/callister/CL_EWSTU01031_S/vmse/xtalc.htm

بسم الله الرحمن الرحيم

الفصل الاول

التركيب البلوري Crystal Structure

المقدمة

الحالة البلورية والحالة غير البلورية

وحدة الخلية

الشبيكة البرافيزية والشبيكة غير البرافيزية

انواع الشبائك

(مكعب بسيط، مكعب متمركز الجسم، مكعب متمركز الجسم، مكعب متمركز السطوح، كلوريد الصوديوم، تركيب سداسي متلاصق الرص)

التناظر

معامل ملر

المقدمة :

العناصر والمركبات تكون بثلاث حالات في الطبيعة هي الحالة الصلبة والسائلة والغازية وتختلف المادة في كونها تمتلك احدى هذه الحالات باختلاف المسافات البينية ومقدار قوة الترابط بين الذرات. ويمكن ان تملك المادة شكلاً اخر تظهر به يسمى بالبلازما (Plasma).

حيث يمكن تقسيم المواد الصلبة الى:

- المواد الصلبة البلورية Crystalline Solid
- المواد الصلبة غير البلورية العشوائية Non-Crystalline Solid (Amorphous)

كما يمكن تصنيف المواد الصلبة حسب توصيلها الكهربائي الى :

- الموصلات
- اشباه الموصلات
- العوازل

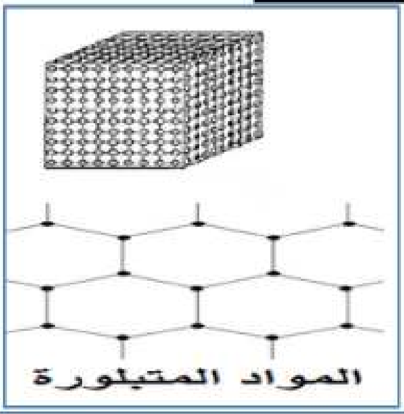
كما يمكن تصنيف المواد الصلبة حسب خواصها المغناطيسية الى:

- المواد البارامغناطيسية
- المواد الدايامغناطيسية
- المواد الفيرومغناطيسية

كما يمكن تصنيف المواد الصلبة حسب طاقة الربط بين الذرات او الجزيئات الى:

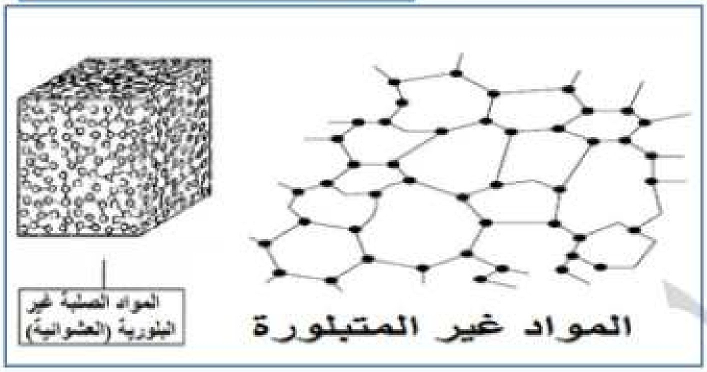
- البلورات الآيونية
- البلورات التساهمية
- البلورات الجزئية
- البلورات المعدنية

<u>الحالة البلورية والحالة غير البلورية (المواد الصلبة المتبلورة وغير المتبلورة) :</u>



<u>المواد البلورية (المتبلورة) Crystalline :</u> تحوي صفوفا من الذرات المتجمعة والمرتبة بشكل دوري مكونة تشكيلة pattern ثلاثية الابعاد (وتشكل نمطاً هندسياً دورياً). ويمكن اعتبار تركيبها تكرار لنموذج او خلية الوحدة unit cell الثلاثية الابعاد. ومن هذه المواد هي الحديد والذهب وكلوريد الصوديوم وغيرها.

فالمواد <u>الصلبة البلورية</u> تكون فيه الذرات مرتبة بشكل هندسي بحيث تكون مواقعها دورية، وتسمى هذه الدورية بالترتيب ذي المدى الطويل في المواد الصلبة كاملة التبلور (البلورية) – Long Range order .



<u>المواد غير المتبلورة:</u>

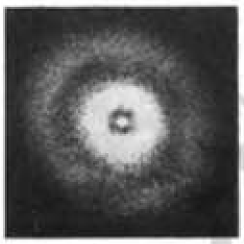
<u>non–Crystalline :</u> وتسمى ايضا بالمواد العشوائية (لا شكلية) (Amorphous) وهي المواد التي تتجمع ذراتها بصورة عشوائية وبدون ترتيب مكونة تشكيلة معقدة بحيث لا يمكن اعتبار تركيبها تكراراً لأي خلية وحدة ومن هذه المواد الزجاج (اوكسيد السليكون).

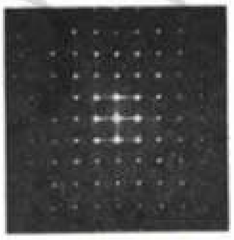
-بعض العناصر والمركبات يمكن ان توجد بصيغة المواد الصلبة المتبلورة والمواد الصلبة غير المتبلورة مثل الجرمانيوم والسيليكون. تبعاً لطريقة تحضير هذه المواد او كيفية تكونها.

- بعض المواد الصلبة لا تنتمي تماماً لأي من النوعين المذكورين، حيث أنها تقع بدرجات متفاوتة بين الحالة الكاملة التبلور والحالة غير البلورية، ويمكن وصف الترتيب الجزئي للذرات فيها بتعيين ما يسمى بدرجة البلورة Degree of Crystallinity ويمتد الترتيب المنتظم في بعض هذه المواد الصلبة (شبه البلورية) إلى مسافات قصيرة فيوصف بالترتيب ذي المدى القصير Short – Range Order .

يمكن التمييز عمليا بين المواد الصلبة المتبلورة وغير المتبلورة بثلاث معايير مستقلة:

1- تنصهر المواد المتبلورة فجأة وعند درجة حرارة معينة ثابتة دائما اما المواد غير المتبلورة فتنصهر من خلال مدى معين لدرجات الحرارة.


غير المتبلورة


المتبلورة

2- تُكون المواد غير المتبلورة تشكيله منتشرة ومتبعثرة عند حيود الاشعة السينية منها على شكل حلقات متحدة المركز ، بينما هذه التشكيلة تكون للمواد المتبلورة عبارة عن بقع spots متميزة ومنفصلة بعضها عن بعض وذات تماثل معين.

3- تكون جميع المواد المتبلورة متباينة الخواص الاتجاهية anisotropic وبدرجات متفاوتة اي ان بعض صفاتها المميزة تعتمد على الاتجاه الذي تقاس معه تلك الصفات بالنسبة الى محاور البلورة. اما المواد غير المتبلورة فتكون جميعها متماثلة الخواص الاتجاهية Isotropic اي لا يظهر اي تاثير للاتجاه على خواصها.

<u>مصطلحات اساسية :</u>

<u>علم البلورات Crystallography</u>: هو العلم الذي يهتم بدراسة المواد الصلبة بجميع اشكالها وظواهرها.

<u>البلورة</u> : عبارة عن جسم صلب يحتوي على عدد من الذرات مرتبة بشكل هندسي معين بحيث تكون مواقعها دورية (وتسمى هذه الدورية في الغالب بترتيب طويل المدى) فالبلورة تتكون من وحدات غاية في الصغر تُكرر بانتظام في الابعاد الثلاثة ، تسمى **خلية الوحدة (وحدة الخلية) units cell.**

يعبر عن فكرة الدورية في البلورات بالقول ان البلورة تمتلك تناظراً انتقالياً، يعني انه اذا تحركت نقطة ما وبواسطة اي متجه يربط بين نقطتين تبدو النقطة وكأنها لم تتحرك اي ان ما يجاورها لم يتغير.

وتحتفظ **البلورة التامة** بهذه **<u>الدورية</u>** وفي الابعاد الثلاثة والى <u>ما لانهاية</u> لكل من المحاور ويترتب على العملية الدورية ان تكون مواقع الذرات في البلورة متكافئة بعبارة اخرى تبدو البلورة التامة للناظر المستقر في اي من هذه المواقع الذرية نفسها.

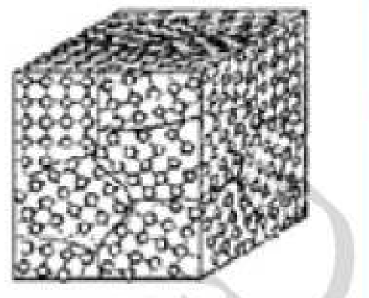
ان اساس البناء البلوري هو التكرار وهناك بلورات على انواع:

1- <u>البلورات الحقيقية Real crystal</u> وتمثل معظم البلورات الموجودة في الطبيعة وتحتوي على بعض العيوب والتشوهات.

2- <u>البلورات المثالية Perfect crystal</u> وهي بلورت مفترضة حيث اننا نفرض وجود بلورة مثالية خالية من العيوب والتشوهات لغرض الدراسة ولا توجد بلورة مثالية في الطبيعة وتمتاز البلورة المثالية بالدورية Periodicity المنتظمة ثلاثية الابعاد حيث ان المجاميع المتماثلة من الذرات تكرر نفسها عند فواصل او فسح متساوية تماما.

انواع البلورات الحقيقية:

أ- **<u>البلورة الاحادية Single crystal</u>:** حيث تمتد دورية التشكيلية او النموذج البلوري الثلاثي الابعاد خلال البلورة باكملها.



متعددة التبلور

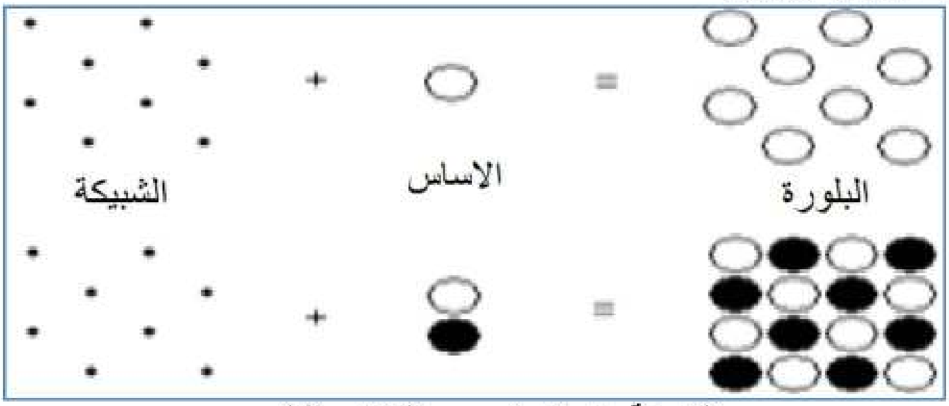
ب- **<u>البلورة متعددة التبلور Polycrystalline</u>:** حيث لا تمتد دورية النموذج البلوري خلال البلورة باكملها بل تنتهي عند حدود داخل البلورة تدعى **<u>بحدود الحبيبات</u> <u>grain</u> boundaries.**

عندما ينتشر النمط الهندسي الدوري ليشغل كل أجزاء المادة، فإن هذا يعني أن لدينا "بلورة وحيدة أما إذا توقف انتشار دورية النمط الهندسي عند تخوم، أو حدود فإن المادة حينئذ تكون **متعددة الحبيبات** أي تتكون من مجموعات صغيرة جداً من البلورات الحبيبات، أو البلورات الأحادية الصغيرة في اتجاهات مختلفة.

أن الحالة البلورية هي الحالة الطبيعة لغالبية المواد الصلبة، نظراً لأن طاقة الترتيب المنتظم للذرات تكون أقل من طاقة ا لتوزيع العشوائي لها. وعموماً إذا لم تتح لذرات المادة فرصة ترتيب نفسها كما ينبغي، كأن تكبح حركتها فإنه يمكن أن تتكون مادة غير بلورية.

في حالات أخرى لا تتاح الفرصة لنمو بلورات من سوائل عالية اللزوجة عند تبريدها بسرعة، حيث يؤدي التبريد الفائق Supercooling الى تجميد السائل بنفس النمط غير الدوري لترتيب جزيئاته. لكن مثل هذه المواد الزجاجي يمكنها اكتساب الحالة البلورية بصورة كلية أو جزئية، عن طريق معالجتها وهي عملية تسخين، حرارياً بعملية تسمى التلدين أو التخمير Annealing يعقبه تبريد بمعدلات بطيئة منتظمة.

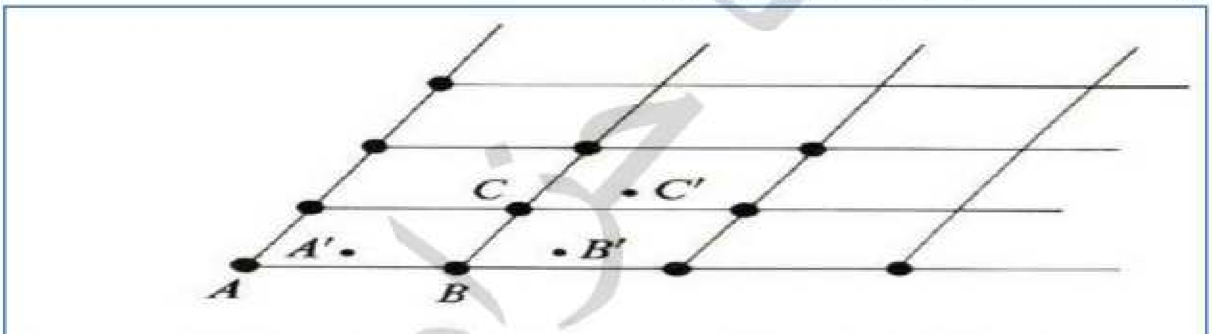
<u>التركيب البلوري Crystal structure :</u> ويمكن تعريفه من العلاقة التي تربط الاساس Basis بكل نقطة من نقاط الشبكية lattice



الشبيكة + الاساس = التركيب البلوري

<u>الاساس :</u> عبارة ذرة او مجموعة من الذرات تتواجد في كل موقع نقطي من نقاط الشبيكة.

<u>الشبيكة :</u> في علم البلورات تكون الخواص الهندسية هي موضع الاهتمام وليست تركيب المادة وعليه نستبدل كل ذرة بنقطة هندسية تقع في موضع استقرار تلك الذرة، وبذلك تكون النتيجة هي هيكل هندسي من النقاط يمتلك الخواص الهندسية للبلورة نفسها.



Bravais lattice & A non-Bravais lattice.

<u>يوجد نوعين من الشبائك:</u>

1- **<u>الشبيكة البرافيزية Bravais Lattice:</u>** في هذا النوع تكون جميع نقاط الشبيكة متكافئة، اي ان جميع الذرات في البلورة تكون من نفس النوع.

2- **<u>الشبيكة غير البرافيزية Non-Bravais Lattice:</u>** في هذا النوع تكون نقاط الشبيكة غير متكافئة. حيث تكون المواقع A،B،C متكافئة مع بعضها ، لكن المواقع A،B & A'،C & B'،C' غير متكافئة مع بعضها.

بمعنى يمكن اعتبارها مزيج من شبيكتين او اكثر من الشبيكات البرافيزية متداخلة مع بعضها بوضع ثابت بالنسبة لبعضها الآخر.

<u>ما الفرق بين التركيب الذري Atomic structure والتركيب البلوري Crystal structure ؟</u>

التركيب الذري يتعلق بعدد النيوترونات والبروتونات في نواة الذرة وعدد الالكترونات في المدارات الالكترونية. اما التركيب البلوري فيعنى بتركيب الذرات داخل المواد الصلبة البلورية بتشكيلات معينة.

المتجهات الانتقالية في البلورة (التماثلات الانتقالية):

تعرف البلورة المفردة المثالية بانها ترتيب منتظم من وحدات متماثلة تمتد الى ما لانهاية. تحدد الشبيكة بدلالة المتجهات الثلاثة $\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$ (في بعض الكتب يستعمل $\vec{a_2}$، $\vec{a_3}$، $\vec{a_1}$)
وتسمى بالمتجهات الانتقالية اما المتجه الذي يربط هذه المتجهات الثلاثة فيدعى بالمؤثر الانتقالي ($\vec{T}$) Translation vector: لشبيكة ثلاثية الابعاد

$$\vec{T} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c} \quad ....(1)$$

حيث ان n_1، n_2، n_3 اعداد صحيحة اختيارية.

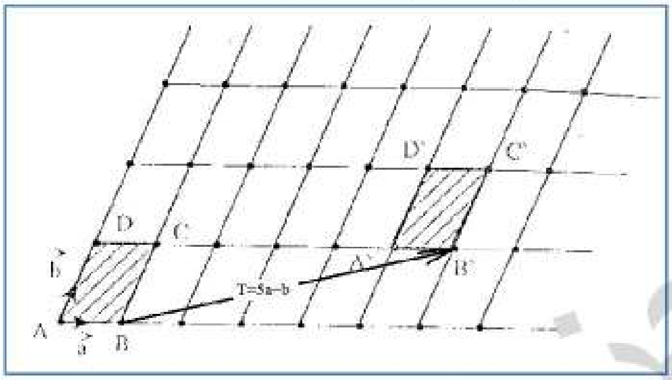
والمؤثر الانتقالي $\vec{T}$ يربط اي موقعين داخل البلورة بحيث تبدو الذرات المحيطة بهذين الموقعين متماثلة ولهذا يسمى بالمؤثر الانتقالي او المؤثر الزحفي.

حيث ان $\vec{r}$ و $\vec{\acute{r}}$ موقعين داخل البلورة

$$\vec{\acute{r}} = \vec{r} + \vec{T} \quad ....(2)$$

بتعويض (1) في (2) ينتج :

$$\vec{\acute{r}} = \vec{r} + n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c} \quad ....(3)$$



اي ان الترتيب يبقى نفسه بالنسبة الى النقطة المعبر عنها بالمتجه $\vec{\acute{r}}$ عند مشاهدتها من نقطة اخرى $\vec{r}$ كما في الشكل.
حيث نلاحظ ان المتجه الانتقالي T=5a+b يربط بين اي نقطة شبيكة في خلية الوحدة ABCD والنقطة المكافئة لها في خلية الوحدة $\acute{A}\acute{B}\acute{C}\acute{D}$

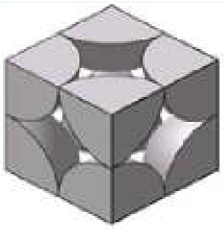
- ✓ وتعرف الشبيكة ومحاورها الانتقالية بانها اولية (بدائية) primitive اذا كانت اي نقطتين في الشبيكة تخضع للعلاقة (3).
- ✓ اما اذا كانت نقاط الشبيكة لا تخضع للعلاقة (3) فالشبيكة والمحاور التي تحددها غير اولية (غير بدائية) non-primitive .
- ✓ المحاور الاولية للشبيكة تكون اشكالاً لمتوازيات السطوح تسمى خلية وحدة اولية primitive unit cell.
- ✓ اما المحاور غير الاولية للشبيكة فتكون ايضا اشكالاً لمتوازيات السطوح تسمى خلية وحدة غير اولية non-primitive unit cell
- ✓

وحدة الخلية Unit Cell: هي اصغر وحدة في الشبيكة تملأ الفضاء بتأثير المؤثر $\vec{T}$ ويكون شبيكة كاملة. (وهي أصغر وحدة في الشبيكة الفراغية وهي الوحدة التي بتكرارها في الاتجاهات الثلاثة ينتج عنها البلورة). وحجم وحدة الخلية يعطى:

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

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

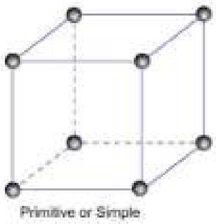
وتوجد طرق عديدة لاختيار المحاور الاولية اي عدة طرق لاختيار خلية الوحدة الاولية لشبيكة ما.
والمهم هنا اجراء عملية الضرب الاتجاهي (cross) اولا ثم الضرب النقطي dot.



الخلية الاولية Primitive: هي الخلية التي تحتوي على النقاط في اركانها فقط وتكون محاورها باقصر طول ممكن وتخضع للمعادلة (3).

$$\vec{r}' = \vec{r} + n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c} \qquad \dots (3)$$

حيث تكون وحدة الخلية البدائية هي التي تمتلك نقاط شبيكة عند زواياها الثمانية فقط وكل زاوية تشترك مع ثمان خلايا وبذلك يكون فقط ثمن $\left(\frac{1}{8}\right)$ الذرة او نقطة الشبيكة يخص كل وحدة الخلية البدائية.

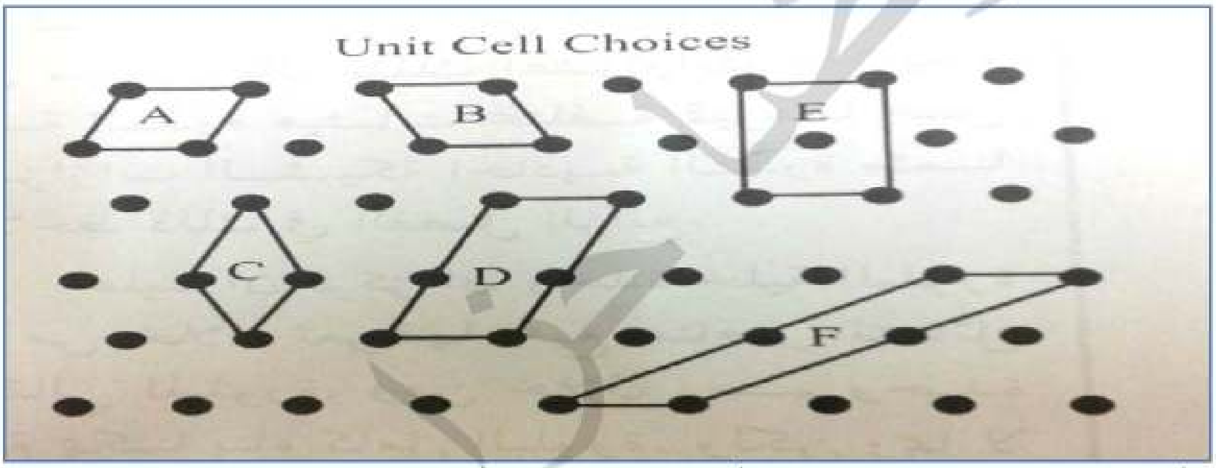


أي ان الذرات الثمانية ستساهم كل ذرة منها بثمن $\left(\frac{1}{8}\right)$ وبذلك ستحتوي الخلية البدائية على نقطة شبيكة واحدة او ذرة واحدة. $8 \times \frac{1}{8} = 1$

الخلية غير الاولية Non- Primitive: هي الخلية التي تحتوي على نقاط شبيكة اخرى بالإضافة الى الاركان. واطوال محاورها لا تكون أقصر طول. ولا تنطبق عليها المعادلة (3). في فضاء ثنائي الابعاد تكون خلية الوحدة الاولية ذات مساحة ثابتة بغض النظر عن طرق اختيار محاورها.

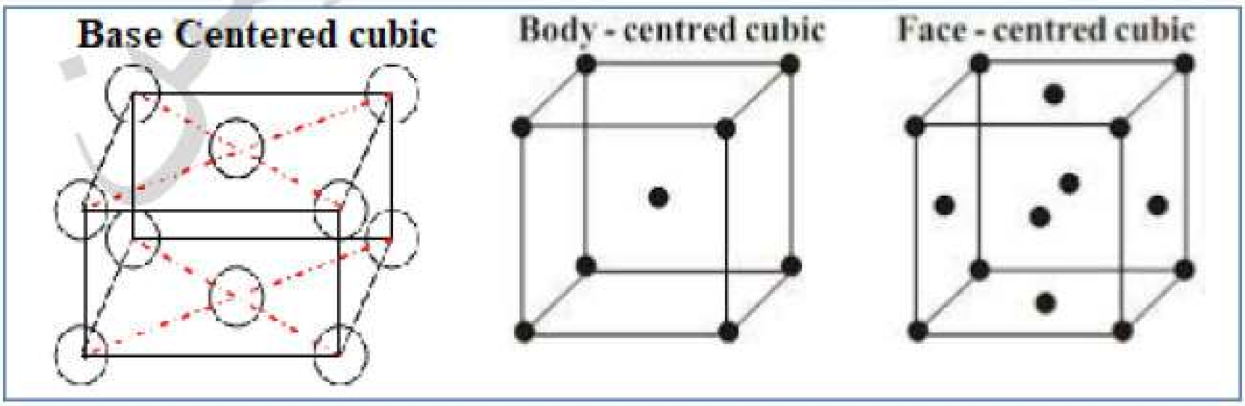
وحدة الخلية أولية كما في الخلايا A، B و C.

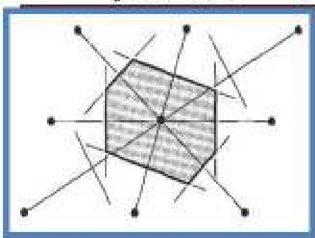
وحدة الخلية غير أولية كما في E، D، F.

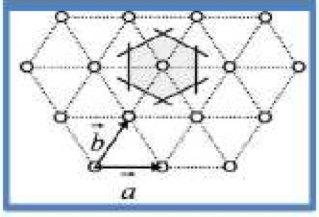


أي ان الخلية غير الاولية تحتوي على أكثر من نقطة شبيكة أو ذرة واحدة و يطلق عليها ايضا الخلية المركبة لتداخل شبيكتين أو أكثر لتكوين شكل مركب آخر مثل:

- خلية متمركزة الجسم (B.C.C. Body-Centered)
- خلية متمركزة الأوجه (F.C.C. Face-Centered)
- خلية متمركزة القاعدة (B.C.C. Base Centered)







خلية ويكنر – سيتز Wegner – Seitz Cell: هي طريقة اخرى لاختيار الخلية الاولية (البدائية) وتلخص بما يلي:

- ❖ نمد خطوط مستقيمة من نقطة شبيكة ما الى جميع نقاط البيكة القريبة منها.
- ❖ ننصف هذه الخطوط بمستويات متعامدة.
- ❖ الحجم المحصور بين المستويات المتعامدة هو خلية اولية(بدائية) وتحتوي على نقطة شبيكة واحدة.

التماثل البلوري Crystal Symmetry :

التماثل او التناظر Symmetry: هو تكرار او تطابق اجزاء شكل ما حول مستو او مستقيم او نقطة، للتماثل. فالدائرة متماثلة حول اي قطر لها (تكرر أي تُعيد نفسها) والكرة متماثلة حول اكبر مستو دائري لها. والمكعب له حالات تماثل عديدة فهو متماثل قطريا وطوليا وعرضيا وحول مركزه.

اما عدم التماثل Asymmetry: فهو الشكل الذي لا يملك صفة التكرار ولا يملك تطابق في اجزاءه مثل اليد اليمنى واليد اليسرى للإنسان.

ان التماثل في البلورة هو عبارة عن عمليات او مؤثرات يمكن تخيل حدوثها على البلورة وبعد الانتهاء منها تبدو البلورة كأصلها اي تكرر او تعيد اجزاءها الى المواقع التي كانت تشغلها قبل حدوث تلك العمليات.

عناصر التماثل: هي المحور او المستوي او المركز (النقطة) الذي تجري حوله عملية التماثل

عمليات التماثل (مؤثرات التماثل): وهي العمليات التي نتخيل حدوثها على البلورة وتعيدها الى نفسها

عملية الانتقال Translation تحت تأثير المؤثر $\vec{\mathbf{T}}$ هي ليست العملية الوحيدة التي تتميز بها البلورة بل هناك **عمليات** اخرى ومنها :

عملية الدوران Rotation

عملية الانعكاس Reflection

عملية الانقلاب Inversion

العناصر الاساسية للتماثل هي :

1. **محور تماثل دوراني مناسب**
2. **محور تماثل دوراني غير مناسب**
3. **مستوى التماثل**
4. **مركز التماثل**

1- محور التماثل الدوراني المناسب (عملية الدوران – محور التماثل):

محور التماثل Axis symmetry هو مستقيم وهمي يمر بمركز البلورة بحيث لو دارت دورة كاملة (360°) دون اية ازاحة لتكررت خلال تلك الدورة وضعيات البلورة عددا من المرات بحيث لا يمكن التمييز بين وضعها الاصلي قبل التدوير وبين الاوضاع الجديدة التي امتلكتها خلال دورة كاملة.

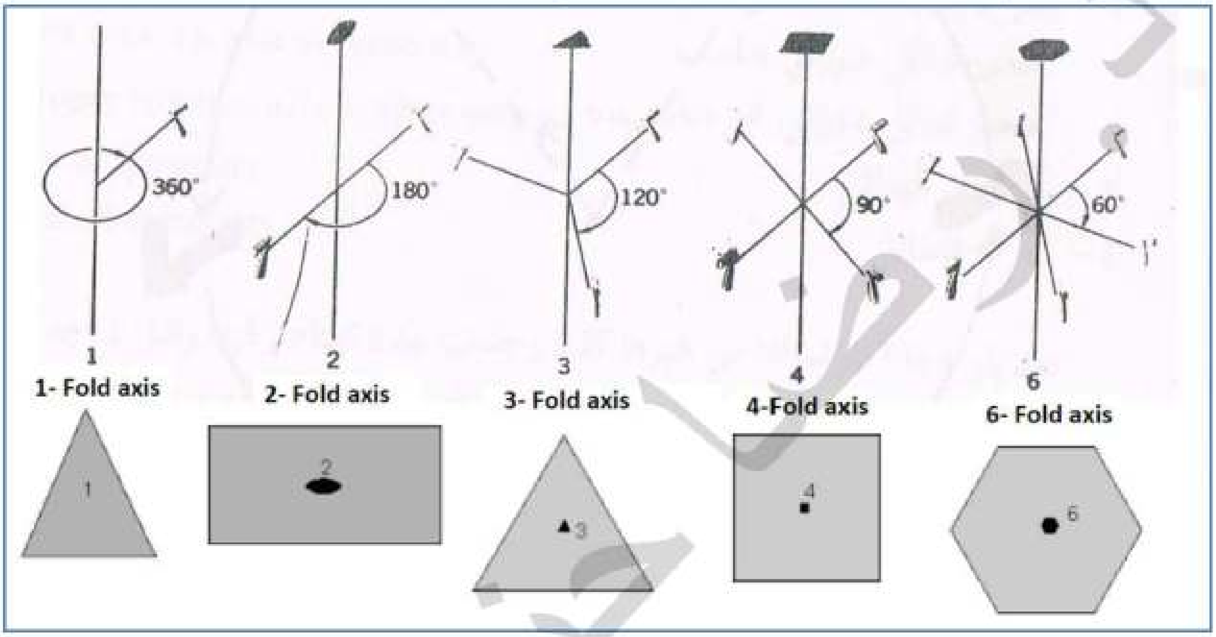
ويجب ان تكون زاوية الدوران Ø احد الاجزاء المتساوية الحاصلة من قسمة الدورة الكاملة على اعداد صحيحة n تسمى الطية الثنيات fold. حيث تمثل هذه الارقام درجات التماثل المسموح بها

$$\emptyset = \frac{360}{n} \qquad n = 1, 2, 3, 4, 6$$

يسمى n بدرجة محور الدوران. حيث ان 8......، 7 ،5 غير مسموح بها لانها اما ان تترك فراغ او تتراكب خلايا الوحدة.

وابسط مثال على المحور الدوراني المناسب هو دوران المروحة ذات ثلاث ريش (3 طيات) بزاوية $\text{Ø} = 120^0$ وذات اربعة ريش (4 طيات) $\text{Ø} = 90^0$.

- حيث يعرف المحور الدوراني الثنائي الثنية بانه محور ثنائي التماثل (Diad) حيث تتكرر الاشكال المتشابهة فيه مرتين خلال الدورة الكاملة بعد كل تدوير بزاوية $180°$
- المحور الدوراني ثلاثي التماثل (Triad) يرمز له بالعدد 3 اذا تكررت البلورة ثلاث مرات كل $120°$.
- محور رباعي التماثل (Tetrad) ويرمز له بالعدد 4 اذا تكررت هيئة البلورة اربع مرات كل $90°$.
- المحور السداسي التماثل (Hexad) يكرر البلورة ست مرات كل $60°$ ويرمز له بالعدد 6 .
- وتسمى الأرقام 6 ,4 ,3 ,2 ,1 درجات التماثل الدوراني للبلورة.

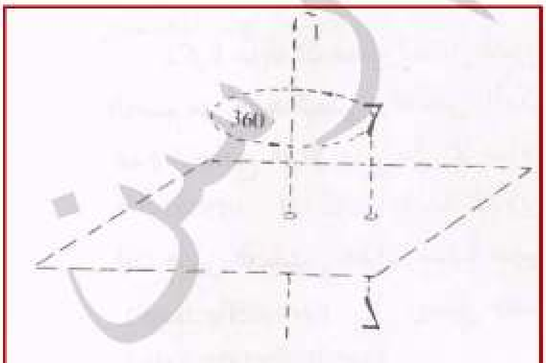


2- محور التماثل الدوراني غير المناسب (المحور الدوراني الانعكاسي)(العملية الدورانية الانعكاسية):

وهو حدوث عملية تدوير تعقبها او تليها عملية انعكاس لكي يكرر الجسم نفسه اي انها عملية هجينة واحدة (دوران + انعكاس) وتسمى بالعملية الدورانية الانعكاسية ويسى عنصر التماثل في هذه الحالة محوراً دورانياً انعكاسياً. وتوجد خمسة محاور دورانية انعكاسية $\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$

فمثلاً العملية او المؤثر $(\bar{1})$ يلفظ one tilde

وللتوضيح:



الشكل (1 - 7)

تأثير محور دوراني غير مناسب من نوع $\bar{1}$

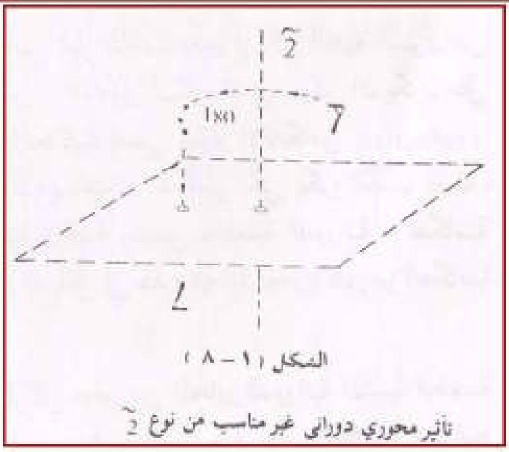
المحور الدوراني الانعكاسي $(\bar{1})$

المحور الدوراني 1 يُدور أي جسم خلال زاوية صفر او 369 درجة.

$$\text{Ø} = \frac{360}{1} = 360$$

$$n = 1$$

المحور الدوراني الانعكاسي $(\bar{1})$ يُدور أي جسم خلال زاوية صفر او 360 درجة يَعقب ذلك عملية انعكاس. كما في الشكل.



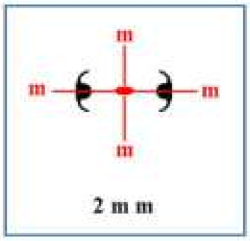
المحور الدوراني الانعكاسي ($\tilde{2}$)

اذا كان الجسم يَدور بزاوية 180 درجة حول محور وهمي عمودي على سطح وهمي افقي

$$\emptyset = \frac{360}{2} = 180$$
$$n = 2$$

يَعقب ذلك انعكاس من خلال السطح الوهمي.

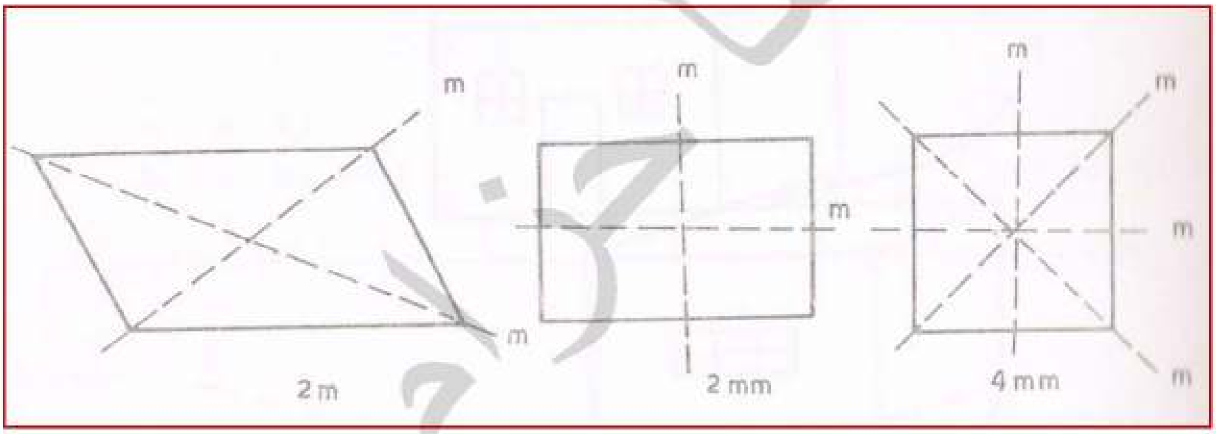
المحور الدوراني الانعكاسي ($\tilde{2}$) يُدور أي جسم خلال زاوية صفر او 180 درجة يَعقب ذلك عملية انعكاس. كما في الشكل.



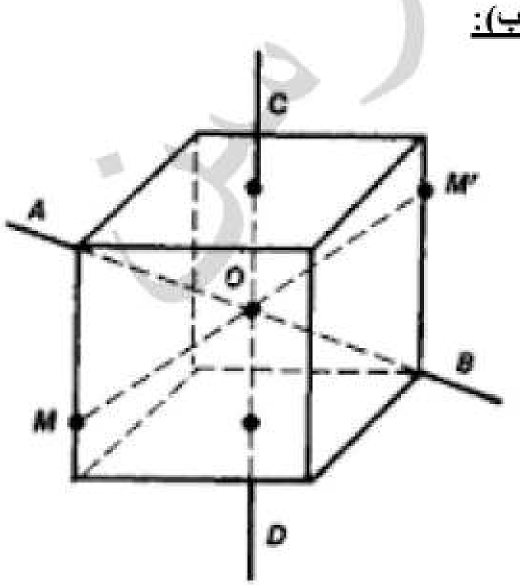
3- مستوى التماثل (Plane of Symmetry)(عملية الانعكاس):

وهو مستوى وهمي يقسم الجسم او البلورة الى نصفين متشابهين بحيث يكون احد النصفين صورة مرآة للنصف الاخر مثل جسم الانسان لو قسم الى نصفين متساوين بصورة طولية. ويرمز لهذه العملية (m)(mirror).

في بعض الاحيان نرى بان الجسم يمتلك مستويين للتماثل متقاطعين بزاوية قائمة في هذه الحالة يقل عنها مرآة مزدوجة (mm) (double mirror).



4- مركز التماثل (Center of Symmetry) (عملية الانقلاب):



ان مركز التماثل هو **مركز انقلاب** لان لهذا المركز خاصية قلب جميع الفضاء من خلال نقطة.

او هي تلك النقطة في البلورة التي ان رسم خط مستقيم من أي نقطة ذرة على البلورة خلال المركز فانه سيقابل نقطة مشابهة تماما من الجانب الآخر الجزء المقابل وعلى مسافة متساوية و يرمز لمركز التماثل بالرمز C. تحليليا بالنسبة لنقطة (x، y، z) هنالك نقطة مماثلة عند $\bar{x}$، $\bar{y}$، $\bar{z}$

وخلاصة ذلك ان مؤثر الانقلاب مركب من تدوير بزاوية 180 درجة يَعقب ذلك انعكاس عبر سطح عمودي على محور الدوران.

<u>محور التماثل الانقلابي (Inversion axis of Symmetry)</u>
<u>(المحور الدوراني الانقلابي) (rotoinversion axis):</u>

وهو على غرار المحور الدوراني (المحور الدوراني غير المناسب) ويميز المحور الدوراني الانقلابي بوضع علامة (-) فوق رمز محور الدوران.

فمثلاً :

- (محور دوراني انقلابي من النوع الثالث) او (محور التماثل الانقلابي من النوع الثالث) يعبر عنه بشكل $(\bar{3})$ ويلفظ (three - bar) .
- (محور دوراني انقلابي من النوع الثاني) او (محور التماثل الانقلابي من النوع الثاني) يعبر عنه بشكل $(\bar{2})$ ويلفظ (two - bar)
- وهكذا (one – bar) (four – bar) (six – bar)

علما انه لا يوجد(محور دوراني انقلابي من النوع الخامس) او (محور التماثل الانقلابي من النوع الخامس) . أي عدم وجود محور انقلابي خماسي

وكما بينا سابقاً ان درجة محور التماثل تعرف بعدد المرات التي يحل الشكل محل نفسه عند دورانه حول محور التماثل بزاوية360 درجة. فهذا ينطبق على المحور الدوراني الانقلابي اخين بنظر الاعتبار الإشارة السالبة. والمحور الدوراني الانقلابي هو عملية واحدة ذات مرحلتين متعاقبتين <u>تبدأ بمرحلة التدوير</u> (ولا يعود الجسم لوضعه الأصلي) ولكن <u>يَعقب ذلك مرحلة الانقلاب</u> وعند الانتهاء نحصل على التماثل او التكرار أي عودة الجسم الى وضعه الأصلي.

<u>ملاحظة:</u> نلاحظ ان $(\bar{2})$ لها النتيجة او التأثير لعملية انعكاس خلال مستوي m او عملية محور دوراني انعكاسي من نوع $(\bar{1})$.

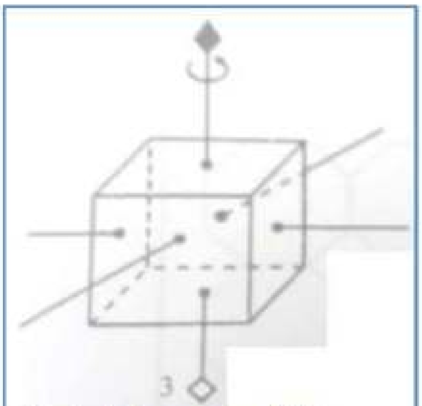
<u>مجاميع نقط التماثل Point groupe symmetry :</u> تعرف مجاميع نقطة التماثل على انها عبارة عن مجموعة من العمليات التماثلية التي يمكن اجراءها على البلورة التي تعود الى احدى مجاميع التماثل.

يمكن جمع عناصر التماثل المختلفة بطرق مختلفة وتدعى المجاميع الحاصلة بمجاميع نقط التماثل او للسهولة مجاميع نقطية او مجاميع نقطة Point groups .

الانواع الخمسة المسموحة لمحاور التماثل الدوراني المناسب $(n = 1,2,3,4,6)$

تماثل المكعب:

من المفيد ان نستفيد من عناصر التماثل في البلورات الحقيقية. الشكل التالي يوضح التماثل للمكعب. وفيما يلي أنواع التماثل لبلورة المكعب وهي بلورة ذات درجة عالية من التماثل :



ثلاثة محاور دورانية رباعية

1- **تماثل دوراني رباعي 4** حول أي محور يمر خلال مركزي وجهين متقابلين للمكعب، أي ان للمكعب **ثلاثة محاور دورانية رباعية** وتسمى هذه المحاور الثلاثة عادة المحاور البلورية.

2- **تماثل دوراني انقلابي ثلاثي** $(\bar{3})$ حول أي محور من المحاور الأربعة باتجاه اقطار المكعب الأربعة.

3- **تماثل دوراني ثنائي 2** حول محاور قطرية موازية لاقطار أوجه المكعب ومارة في مركز المكعب، أي محاور تصل بين منتصفات اضلاع المكعب المتقابلة والبعيدة وينصف كل محور الزاوية بين محورين بلوريين. ان عدد هذه المحاور ستة محاور.

هنالك **ست محاور ثنائية الثنية** عندما يتم تدوير المكعب حول الخط الذي يربط نقاط وسط زوج الاضلاع المتعاكسة المتوازية لبعضها الآخر.

4- **تماثل انعكاسي m خلال تسعة مستويات للتماثل** يطلق على ثلاثة منها المستويات المحورية لان كل مستو يتضمن محورين بلوريين ويكون عمودياً على المحور البلوري الثالث أي ان كلا منها يوازي وجهين متقابلين في المكعب.

ويطلق على المستويات الستة الأخرى المستويات القطرية لان كل مستو يتضمن قطرين لوجهين متقابلين أي يتضمن احد محاور التماثل الدوراني الثنائي.

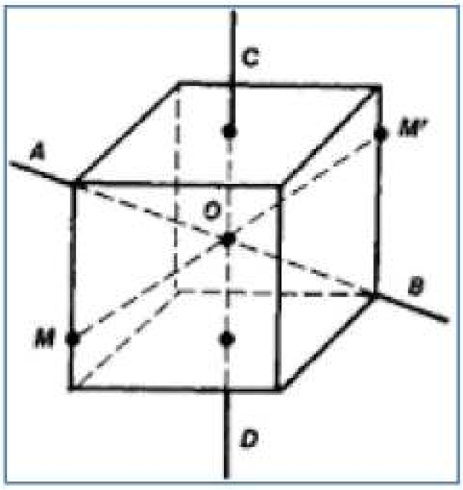
5- للمكعب مركز تماثل او انقلاب $\bar{1}$ هو مركز المكعب نفسه.

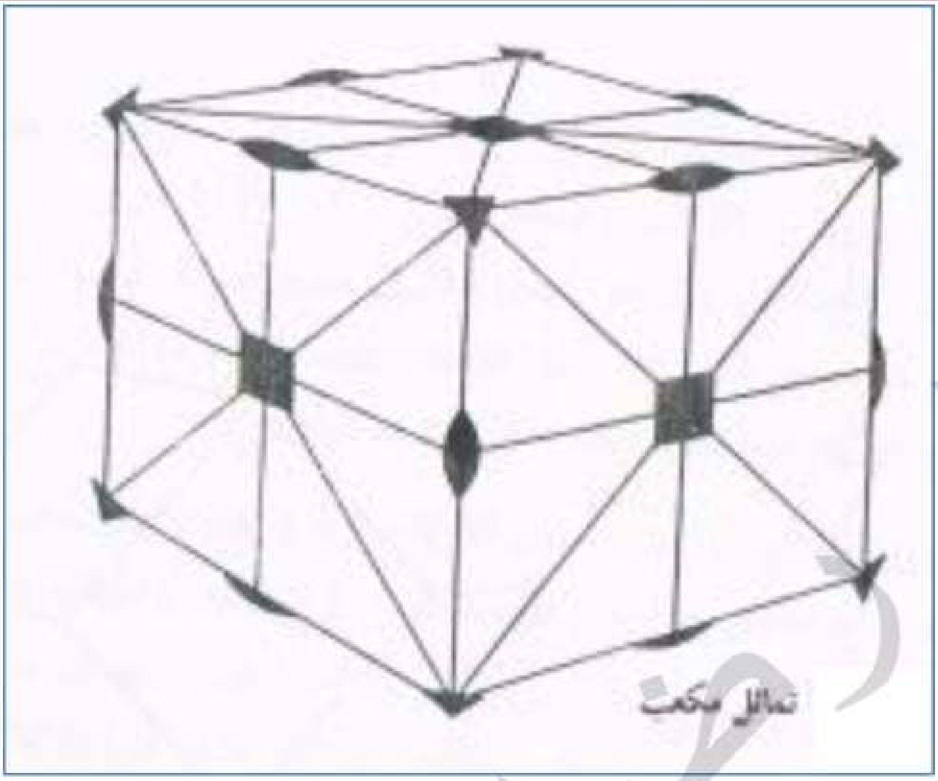
ان عناصر التماثل في المكعب تمثل اعلى درجة ممكنة من التماثل بالنسبة لبقية أصناف الأنظمة البلورية.

ملاحظة: لمزيد من التوضيح الاطلاع:

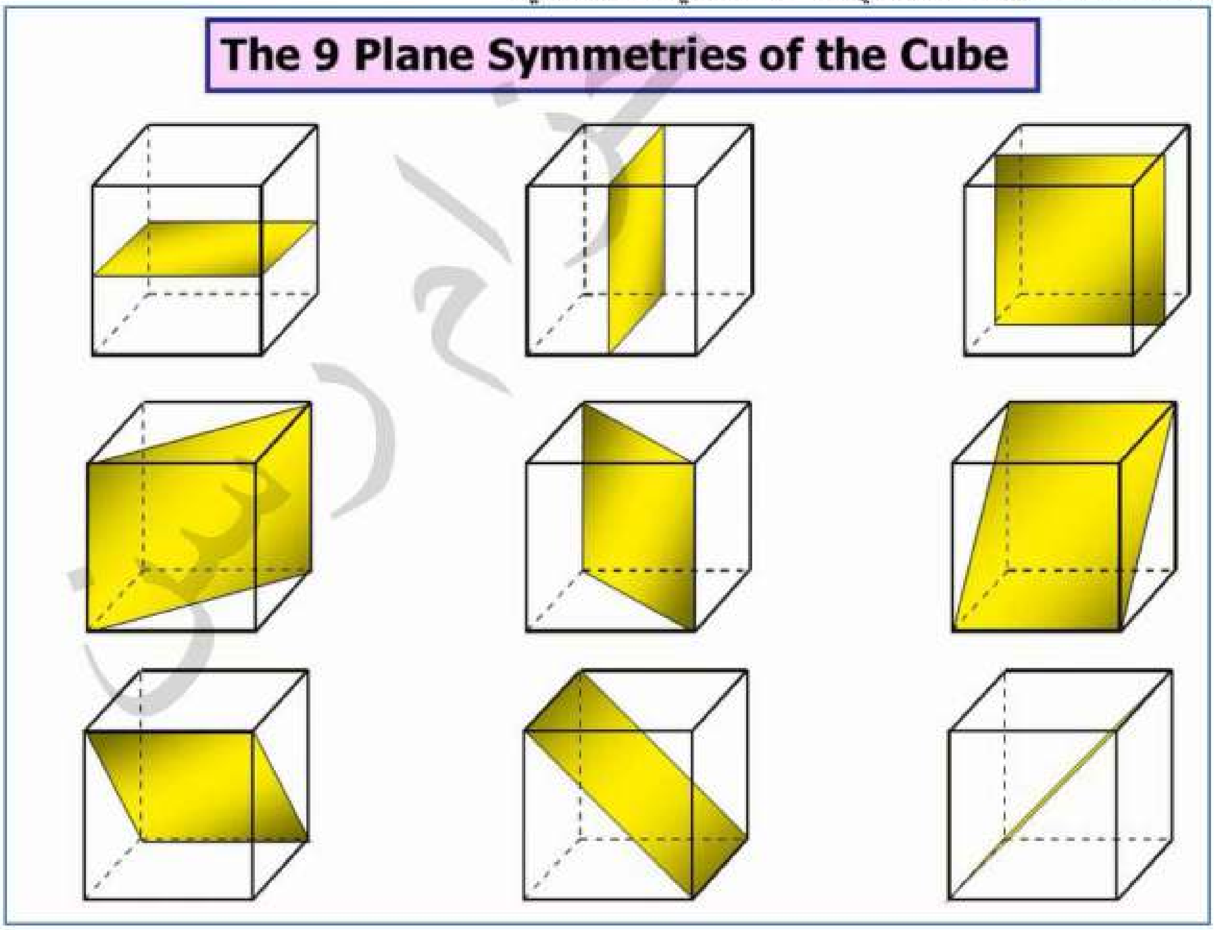
Rotational Symmetry of a Cube (Physics)
https://www.youtube.com/watch?v=Ch95sES5D9A

ست 6 محاور ثنائية الثنية





في البلورة المكعبة هناك ثلاث مستويات تماثل كل منها يوازي وجهيين متقابلين من المكعب. والمكعب يملك **تسعة مستويات تماثل في المكعب** كما في الشكل التالي:



Space groups

Combination of

14

Bravais lattices

with

Rotation-Reflection

Inversion

Reflection

Rotation

32

Point groups

and

screw and glide symmetry

gives

230

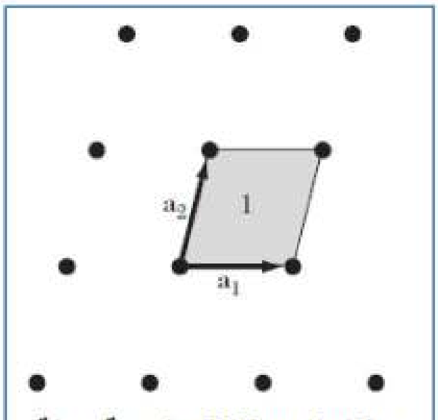
Space groups

dimensions	1	2	3	4	5	6
no. of 'space' groups	2	17	230	4894	~220 k	~29 mill

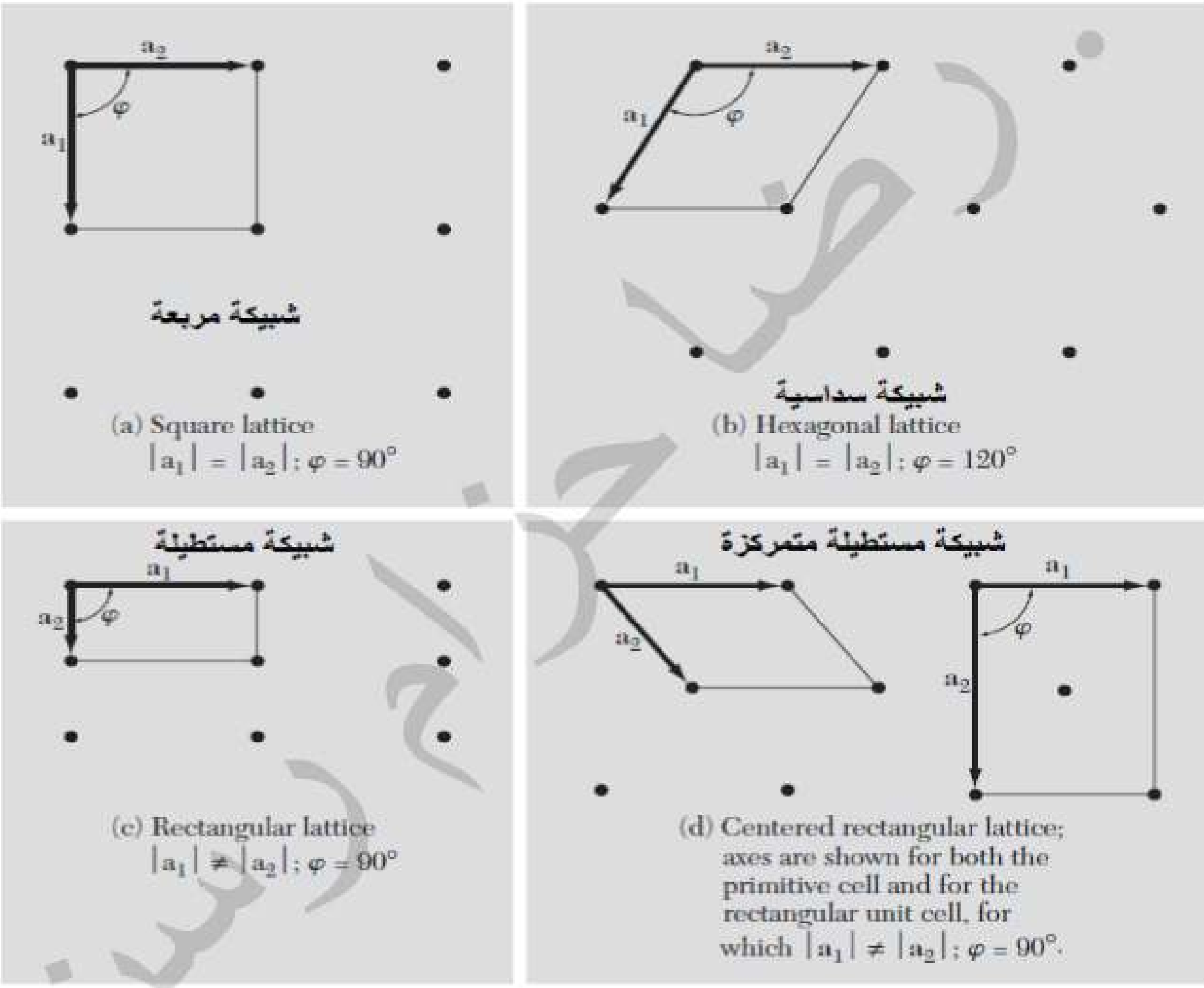
الشبائك المستوية :

الشبائك يمكن ان تجمع في خمسة انواع هي:

شبيكة مائلة : هي شبيكة عامة ولا توجد علاقة خاصة بين اطوال متجهاتها الاساسية وان الزاوية بين هذه المتجهات غير محدودة القيمة اي ان : $\vec{a} \neq \vec{b}$ ، $\emptyset \neq 90^{\circ}$



شبيكة مائلة **Oblique lattice**



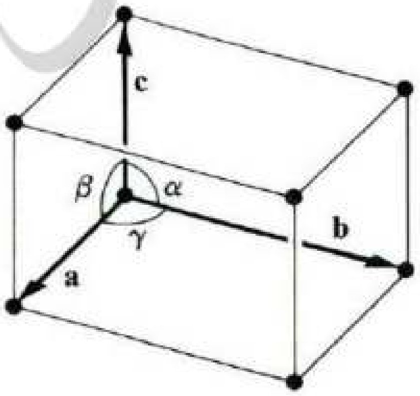
(a) Square lattice
$|a_1| = |a_2|$; $\varphi = 90^{\circ}$

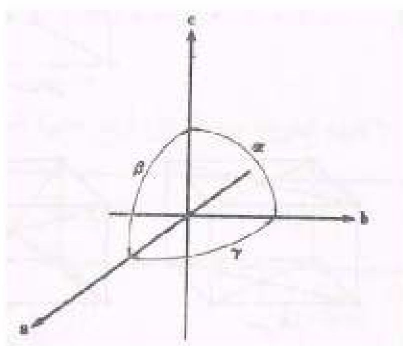
(b) Hexagonal lattice
$|a_1| = |a_2|$; $\varphi = 120^{\circ}$

(c) Rectangular lattice
$|a_1| \neq |a_2|$; $\varphi = 90^{\circ}$

(d) Centered rectangular lattice; axes are shown for both the primitive cell and for the rectangular unit cell, for which $|a_1| \neq |a_2|$; $\varphi = 90^{\circ}$.

المحاور والزوايا البلورية:





الشبائك الفضائية والانظمة البلورية :

الشبائك البرافيزية الاربع عشرة يمكن تقسيمها على خمسة انواع اساسية تبعاً لكيفية توزع نقاط الشبيكة على خلية الوحدة. والانواع الخمسة هي كالاتي:

اولاً: شبائك بدائية اولية Primitive Lattice يرمزلها (P) : حيث تحتوي كل خلية وحدة على $\frac{1}{8}$ نقطة في كل ركن من اركانها الثمانية وبذلك فان كل خلية وحدة اولية تحتوي على نقطة شبيكة واحدة $(8 * \frac{1}{8} = 1)$.

ثانياً:شبائك متمركزة الوجوه Face Centered Lattice يرمز لها بالرمز (F) : وهي تحتوي على $\frac{1}{8}$ نقطة شبيكة في اركانها الثمانية بالاضافة الى $\frac{1}{2}$ نقطة شبيكة في الوجوه الستة اي ان مجموع ما تحتويه هذه الشبائك هو 4 نقاط $(8 * \frac{1}{8} + 6 * \frac{1}{2} = 4)$.

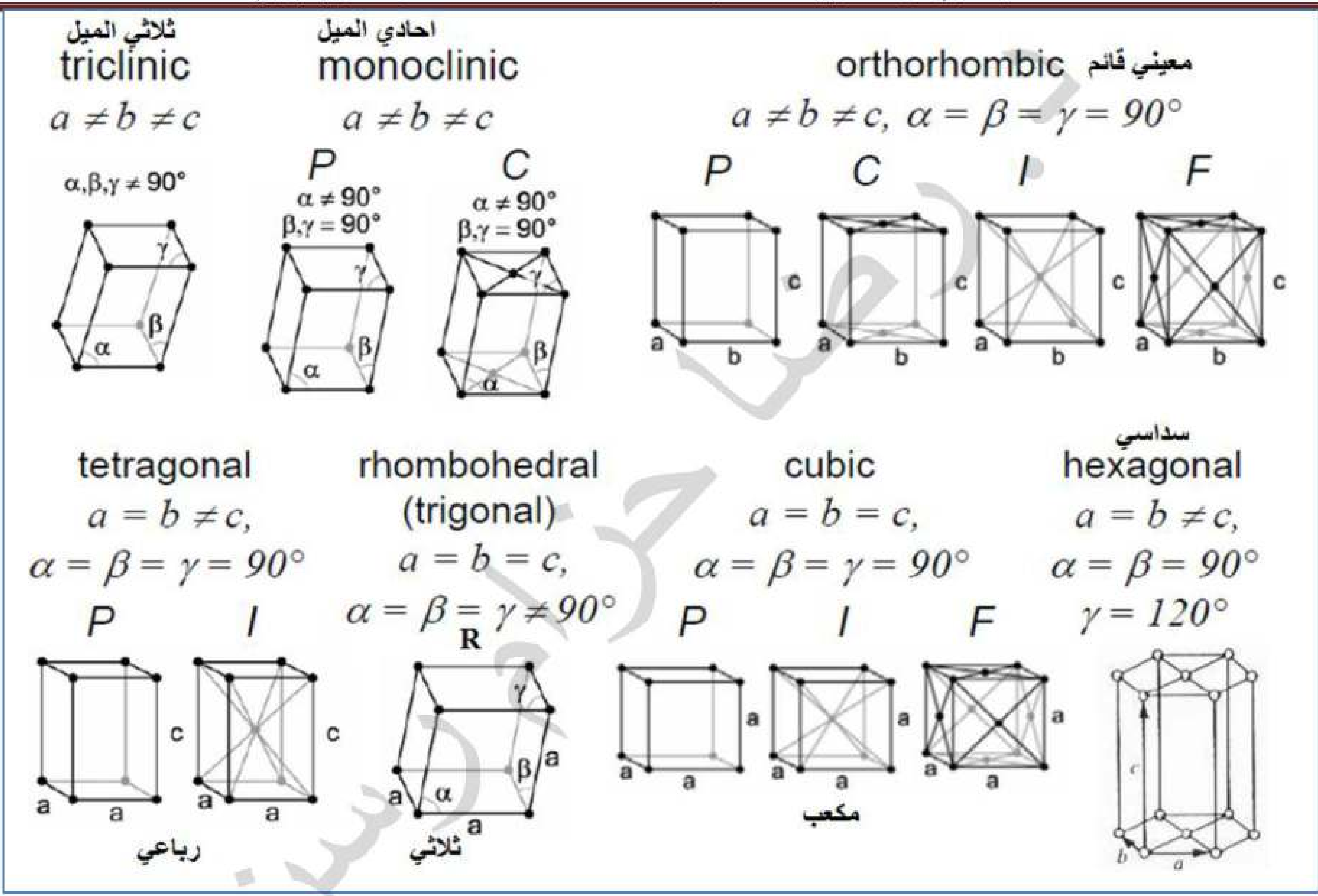
ثالثاً: شبائك متمركزة الجسم Body Centered Lattice يرمز لها بالرمز (I) : وتحتوي $\frac{1}{8}$ نقطة شبيكة في اركانها الثمانية بالاضافة الى نقطة شبيكة واحدة في مركز الجسم اي ان مجموع ما تحتويه هذه الشبائك هو نقطتين ($8 * \frac{1}{8} + 1 = 2$ نقطة).

رابعاً: شبائك متمركزة الجانب او القاعدة Base or Side Centered Lattice : يمتاز هذا النوع باحتوائه على $\frac{1}{8}$ نقطة شبيكة في اركانه الثمانية بالاضافة الى $\frac{1}{2}$ نقطة شبيكة في وجهين متقابلين من وجوهه الستة وبالتالي فان مجموع ما يحتويه من نقاط هو نقطتين ($8 * \frac{1}{8} + 2 * \frac{1}{2} = 2$ نقطة) ويرمز لهذه الشبائك بالرمز A او B او C حسب موقع النقطتين على اوجه الخلية. فاذا كان زوج الاوجه الذي يحوي نصف نقطة في كل وجه يمثل سطحي البداية والنهاية للمتجه الانتقالي الاساسي $\vec{\mathbf{c}}$ سميت الشبيكة **C-base - centered** . ونفس الشي تسمى A-base - centered نسبة الى المتجه $\vec{a}$ وايضاً B-base - centered نسبة الى المتجه $\vec{b}$.

خامساً:شبائك معينية الاوجه Rhombohedral Lattice ويرمز لها بالرمز R : وهي حالة خاصة من الشبائك الاولية. ويكون شكل الخلية معينية الوجوه لكن المحاور الثلاثة غير متعامدة اي ان $\vec{a} = \vec{b} = \vec{c}$ و $(\alpha = \beta = \gamma) \neq 90^\circ$.

توزع الانواع الخمسة من الشبائك الاساسية على سبعة (7) أنظمة بلورية تشكل 14 شبيكة برافيزية:

نظـــام البلـــورة		مواصفات الخلية الاعتيادية	رموز الشبيكة في النظام
١ – ثلاثي الميل	Triclinic	$a \neq b \neq c$ ... $\alpha \neq \beta \neq \gamma$	P
٢ – أحادي الميل	Monocliric	$a \neq b \neq \neq c$ $\alpha = \gamma = 90° \neq \beta$	P , C
٣ – معيني قائم	Orthorhombic	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90°$	P , C , I , F
٤ – رباعي	Tetragonal	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90°$	P , I
٥ – مكعب	Cubic	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90°$	P , I , F
٦ – ثلاثي	Trigonal	$a = b = c$ $120° > \alpha = \beta = \gamma \neq 90°$	R
٧ – سداسي	Hexagonal	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90° , \gamma = 120°$	P

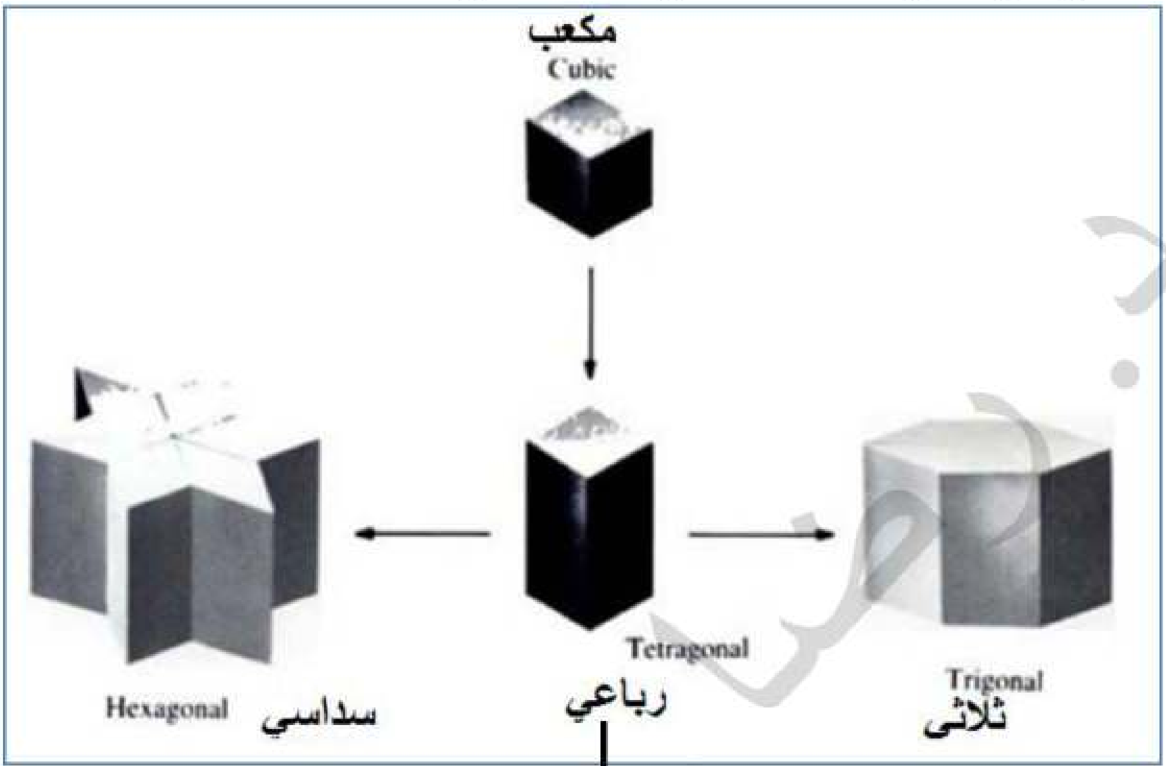


الانظمة البلورية السبعة موزعة على اربع عشرة شبيكة برافيزية ($\vec{b}$ $\vec{c}$ or $\vec{a_1}$ $\vec{a_2}$ $\vec{a_3}\vec{a}$)

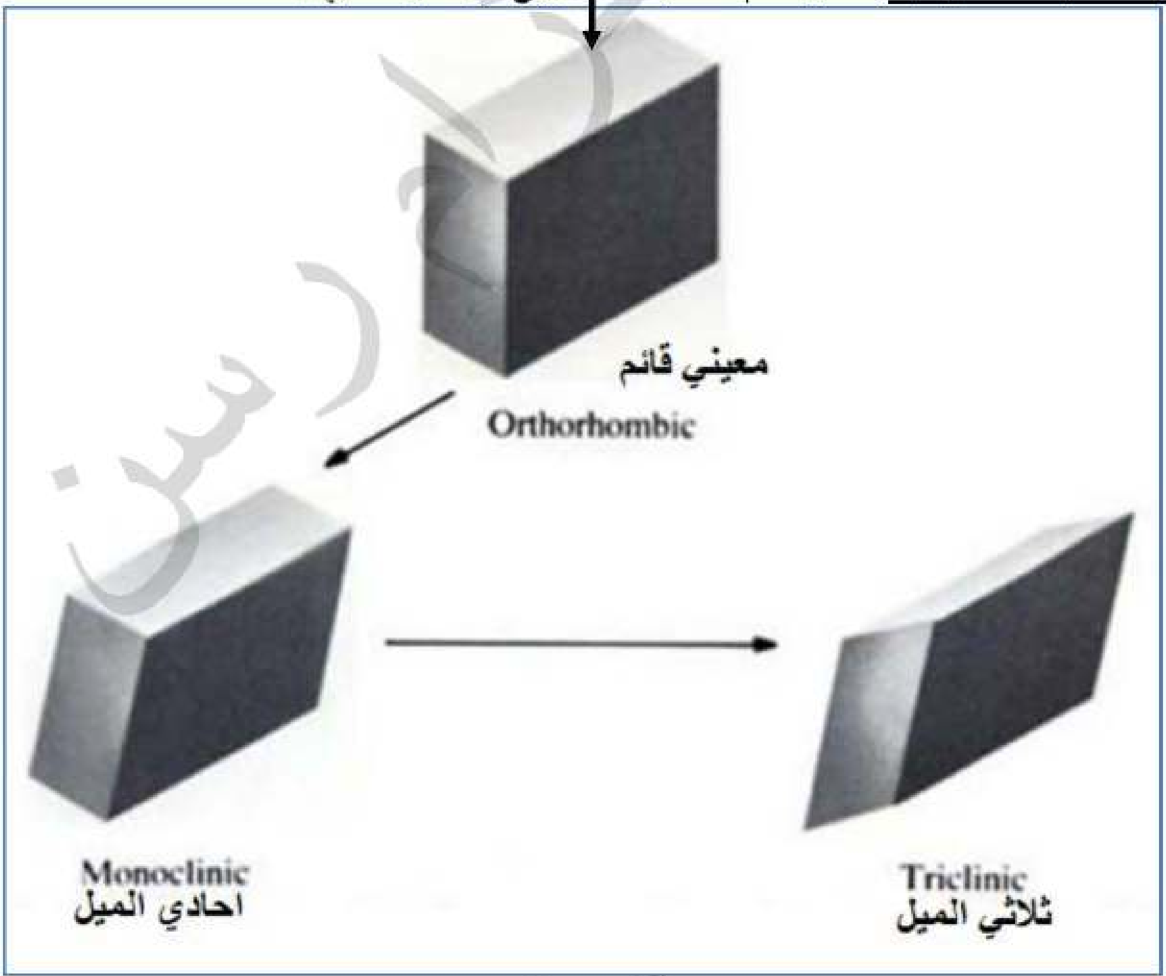
	مكعب بسيط SC	مكعب متمركز الجسم BCC	مكعب متمركز الاوجه FCC
حجم خلية الوحدة الاعتيادية	a^3	a^3	a^3
عدد نقاط الشبيكة لكل خلية اعتيادية	1	2	4
حجم خلية الوحدة الاولية	a^3	$\frac{1}{2}a^3$	$\frac{1}{4}a^3$
عدد نقاط الشبيكة لكل وحدة حجم	$1/a^3$	$2/a^3$	$4/a^3$
عدد الجوار الاول	6	8	12
مسافة الجوار الاول	a	$3^{1/2}\,a/2 = 0.866a$	$a/2^{1/2} = 0.707a$
عدد الجوار الثاني	12	6	6
مسافة الجوار الثاني	$2^{1/2}a$	a	a
نسبة الملء (نسبة الرص)	$\frac{1}{6}\pi$ $=0.524$	$\frac{1}{8}\pi\sqrt{3}$ $=0.680$	$\frac{1}{6}\pi\sqrt{2}$ $=0.740$

حيث **$(a=L)$**

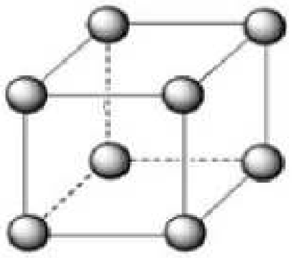
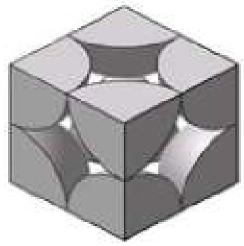
يمكن ترتيب الانظمة البلورية السبعة من اعلاها تناظرا (المكعب) الى اوطأها تناظرا (ثلاثي الميل). نلاحظ ان Hexagonal، Trigonal لهما نفس درجة التناظر



<u>ميزات الشبائك المكعبة :</u> <u>يتضمن نظام المكعب ثلاثة انواع من الشبائك هي :</u>



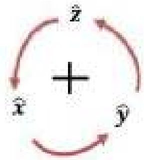
1- مكعب بسيط (SC أو sc) Simple Cubic (P) :

وهو يحتوي على نقطة شبيكة واحدة اي $\frac{1}{8}$ نقطة في كل ركن من الاركان الثمانية ومتجهاته $\vec{c}$ ، $\vec{b}$ ، $\vec{a}$ وهي متجهات اولية طول كل منها a.

$$\frac{1}{8} * 8 = 1$$

س) اثبت ان حجم خلية الوحدة الاولية لمكعب بسيط sc يساوي a^3 ؟

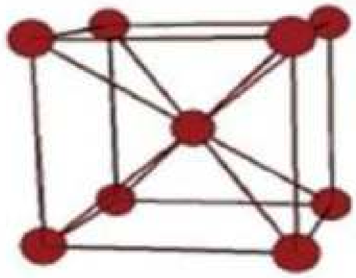
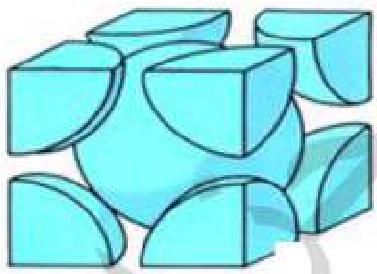


$$\vec{a} = a\hat{x} \quad \vec{b} = a\hat{y} \quad \vec{c} = a\hat{z}$$

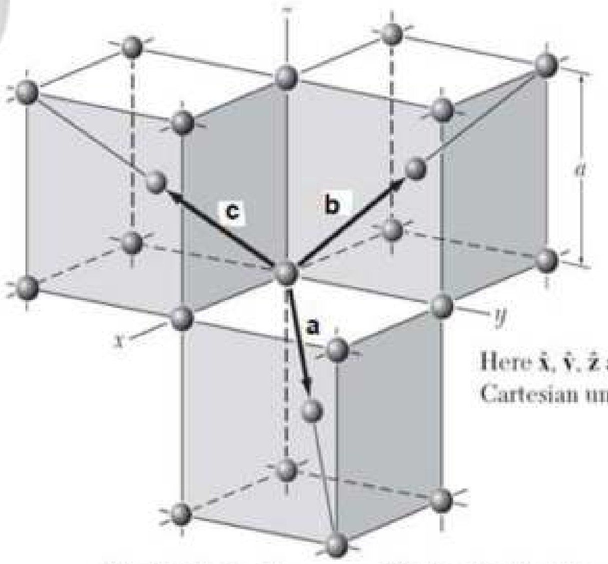
$$V = |\vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c}| = |a\hat{x} \times a\hat{y} \cdot a\hat{z}| = |a^2\hat{z} \cdot a\hat{z}| = |a^3|$$

$$V = a^3$$

مكعب متمركز الجسم (BCC أو bcc) Body Centered Cubic (I) :

وهو يحتوي على نقطتين واحدة في الاركان وواحدة في مركز الخلية وهي من الشبائك غير الاولية لانه خلية الوحدة له غير اولية.

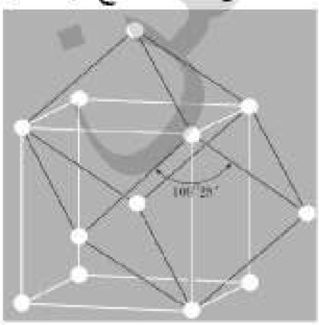


Here $\hat{x}$, $\hat{y}$, $\hat{z}$ are the Cartesian unit vectors.

$\mathbf{a} = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$; $\mathbf{b} = \frac{1}{2}a(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$; $\mathbf{c} = \frac{1}{2}a(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$.

وموقعي النقطتين : 000 ، $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$

في المكعب متركز الجسم تكون خلية الوحدة الاولية معينية الاوجه طول ضلعها $\left(\frac{\sqrt{3}}{2}a\right)$ ومحاورها $\vec{c`}$ ،$\vec{a`}$ ،$\vec{b`}$ وتحدث مع بعضها زاوية مقدارها (109^o) تقريبا.

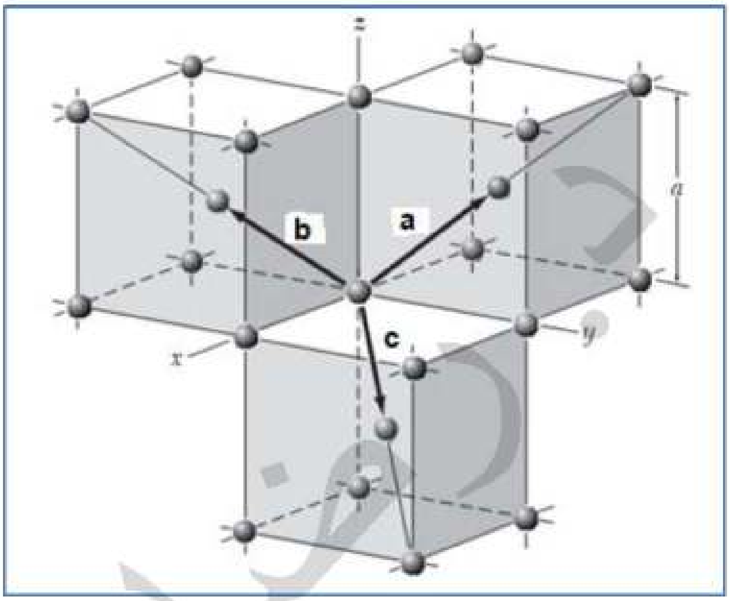


س/ اثبت ان حجم الخلية الاولية لشبيكة مكعب متمركز الجسم bcc يساوي $\left(\frac{1}{2}\right)$ حجم خلية الوحدة الاعتيادية لنفس الشبيكة.

$$\vec{a} = \frac{1}{2}a(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{b} = \frac{1}{2}a(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{c} = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$



$$V_c = \vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c}$$

$$(\vec{a} \times \vec{b}) = \left\{\frac{1}{2}a(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})\right\} \times \left\{\frac{1}{2}a(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})\right\}$$

$$(\vec{a} \times \vec{b}) = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} \end{vmatrix}$$

$$\vec{a} \times \vec{b} = \left|\begin{matrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} \end{matrix}\right| \begin{matrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & -\frac{a}{2} & \frac{a}{2} \end{matrix}$$

$$\vec{a} \times \vec{b} = \left(\frac{a^2}{4} + \frac{a^2}{4}\right)\hat{x} + \left(\frac{a^2}{4} - \frac{-a^2}{4}\right)\hat{y} + \left(\frac{a^2}{4} - \frac{a^2}{4}\right)\hat{z}$$

$$\vec{a} \times \vec{b} = \frac{a^2}{2}\hat{x} + \frac{a^2}{2}\hat{y}$$

$$V_c = \vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c} = \left(\frac{a^2}{2}\hat{x} + \frac{a^2}{2}\hat{y}\right).\left(\frac{\widehat{a}}{2}x + \frac{a}{2}\hat{y} - \frac{a}{2}\hat{z}\right)$$

$\because$

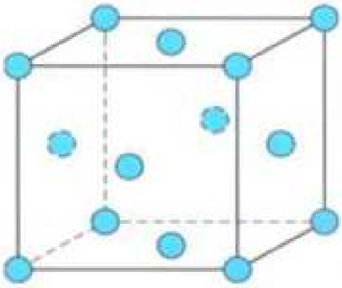
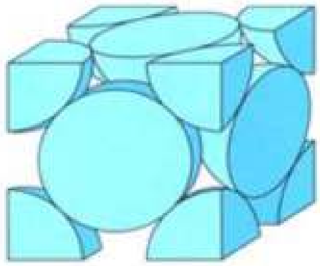
$$\hat{x} \cdot \hat{x} = |\hat{x}||\hat{x}|cos0 = 1$$

$$\hat{x} \cdot \hat{y} = |\hat{x}||\hat{y}|cos90 = 0$$

$$\vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c} = \left(\frac{a^2}{2}\right)\left(\frac{a}{2}\right) + \left(\frac{a^2}{2}\right)\left(\frac{a}{2}\right)$$

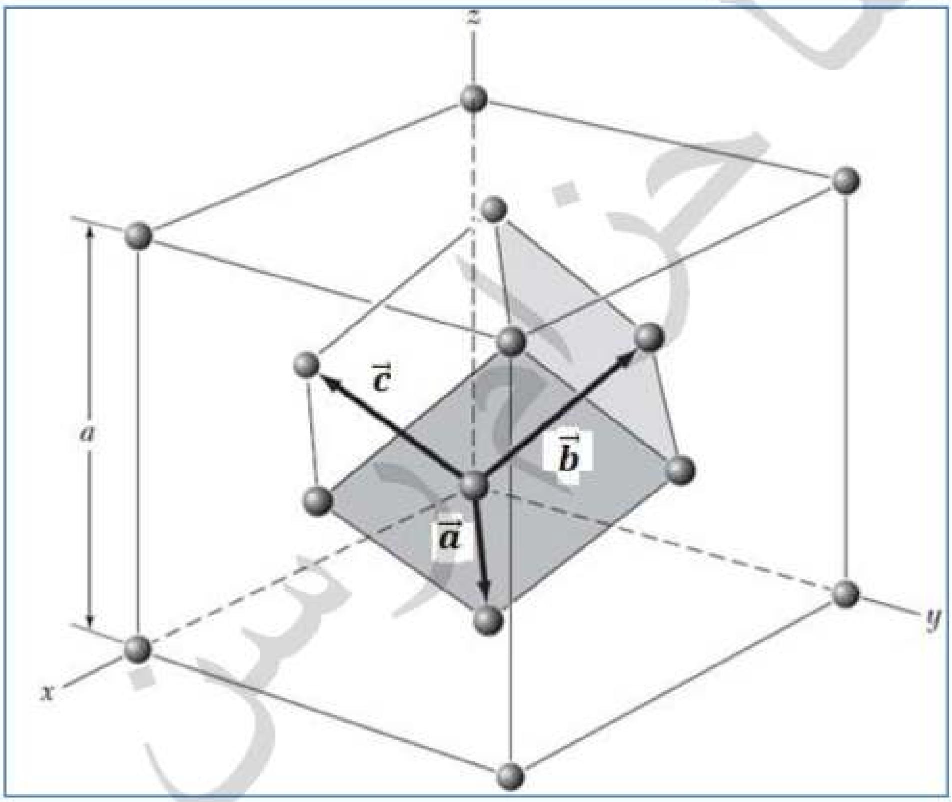
$$\therefore V = |\vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c}| = \left(\frac{a^3}{4}\right) + \left(\frac{a^3}{4}\right) = \frac{2a^3}{4} = \frac{a^3}{2} = \frac{1}{2}a^3$$

2- مكعب متمركز الاوجه Face Centered Cubic (F) (fcc أو FCC):

يحتوي على اربع نقاط شبيكة ، نقطة من الاركان ونصف نقطة في كل وجه من الوجوه الستة. وهي ليست شبيكة اولية لان خلية الوحدة له ليست اولية. وللحصول على المتجهات الاولية نرسم ثلاثة متجهات صادرة عن نقطة شبيكة في احد اركان المكعب ونعتبرها نقطة الاصل بحيث تنتهي بنقاط الشبيكة الواقعة في مراكز الاوجه القريبة من نقطة الاصل كما في الشكل المجاور. نكمل معيني الاوجه لنحصل على خلية الوحدة الاولية ذات المتجهات الاولية.

مواقع النقاط: 000 ، $0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ ، $\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$ ، $\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$

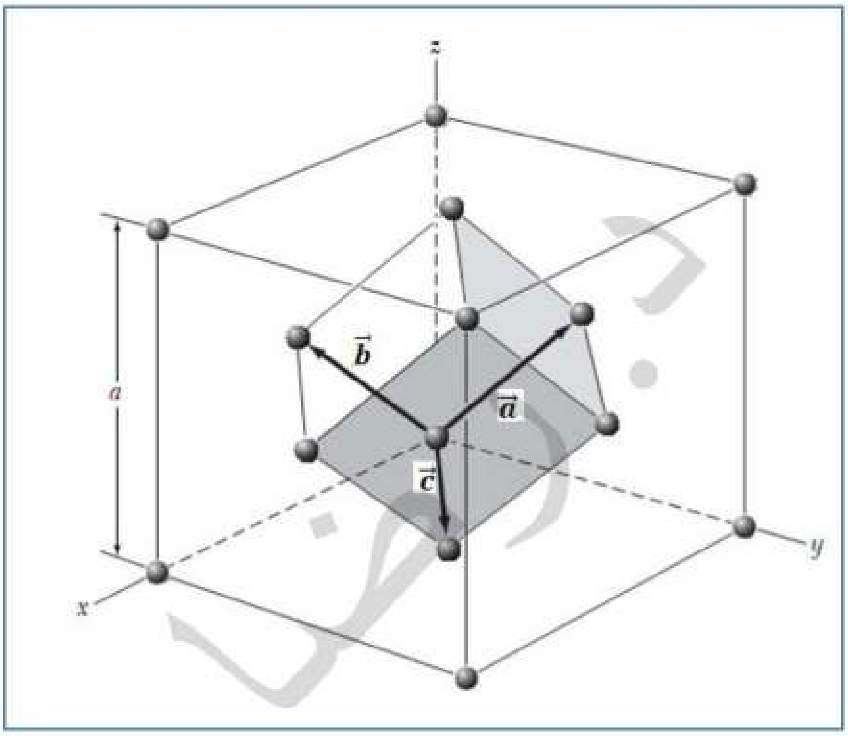


$$\vec{a} = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y})$$

$$\vec{b} = \frac{1}{2}a(\hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{c} = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{z})$$

س/ اثبت ان حجم الخلية الاولية لشبيكة مكعب متمركز الاوجه fcc هو $\frac{1}{4}$ حجم الخليـة الاعتياديـة لتلـك الشبيكة.



$\vec{a} \quad \vec{b} \quad \vec{c}$

$$\vec{a} = \frac{1}{2}a(\hat{y} + \hat{z})$$
$$\vec{b} = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{z})$$
$$\vec{c} = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y})$$

$$V = |\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}| = \frac{1}{4}a^3$$

$$V_c = \vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})$$

$$(\vec{b} \times \vec{c}) = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{a}{2} & 0 & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & 0 \end{vmatrix}$$

$$\vec{b} \times \vec{c} = \left|\begin{matrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{a}{2} & 0 & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & 0 \end{matrix}\right|\begin{matrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{a}{2} & 0 & \frac{a}{2} \\ \frac{a}{2} & \frac{a}{2} & 0 \end{matrix}$$

$$\vec{b} \times \vec{c} = \left(0 - \frac{a^2}{4}\right)\hat{x} + \left(\frac{a^2}{4} - 0\right)\hat{y} + \left(\frac{a^2}{4} - 0\right)\hat{z}$$

$$\vec{b} \times \vec{c} = -\frac{a^2}{4}\hat{x} + \frac{a^2}{4}\hat{y} + \frac{a^2}{4}\hat{z}$$

$$\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c}) = \left(\frac{a}{2}\hat{y} + \frac{a}{2}\hat{z}\right) \cdot \left(-\frac{a^2}{4}\hat{x} + \frac{a^2}{4}\hat{y} + \frac{a^2}{4}\hat{z}\right)$$

$$\hat{x} \cdot \hat{x} = |\hat{x}||\hat{x}|\cos 0 = 1$$
$$\hat{x} \cdot \hat{y} = |\hat{x}||\hat{y}|\cos 90 = 0$$

$$\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c}) = \left(\frac{a}{2}\right)\left(\frac{a^2}{4}\right) + \left(\frac{a}{2}\right)\left(\frac{a^2}{4}\right)$$

$$\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c}) = \frac{a^3}{8} + \frac{a^3}{8} = \frac{a^3}{4}$$

$$\therefore V = |\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}| = \frac{1}{4}a^3$$

نسبة الملء (Filling fraction) او نسبة الرص (نسبة التنضيد) (Packing Fraction) :

هي النسبة بين حجم الذرات الموجودة في خلية الى حجم تلك الخلية.
او هو اكبر نسبة من حجم الخلية يمكن ان تشغله حجم الذرات الموجودة في خلية الوحدة.

نسبة الرص (الملء) = (حجم الذرة الواحدة * عدد الذرات في خلية الوحدة) / (حجم خلية الوحدة) *100%

$$PF = \frac{N_{atoms}V_{atom}}{V_{crystal}}$$

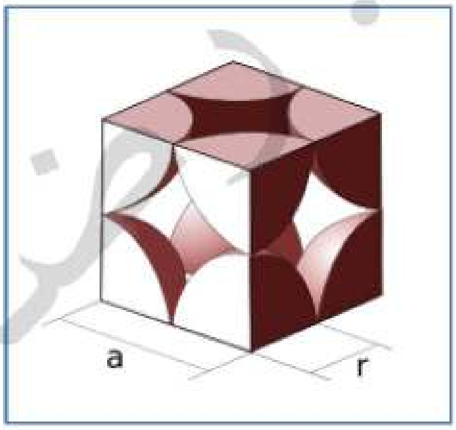
مثال1: احسب نسبة الملىء نسبة الرص (نسبة التنضيد) في تركيب مكعب بسيط SC ؟

$$N = The\ lattice\ points\ sc = \frac{1}{8}\times 8 = 1$$

$$a = 2r \qquad V_{crystal} = a^3$$

$$\text{PF} = \frac{N_{\text{atoms}}V_{\text{atom}}}{V_{\text{unit cell}}} = \frac{1\cdot\frac{4}{3}\pi r^3}{(2r)^3}$$

$$= \frac{\pi}{6} \approx 0.5236$$



مثال2: احسب نسبة الملىء نسبة الرص (نسبة التنضيد) في تركيب مكعب متمركز الجسم BCC ؟

Solution:

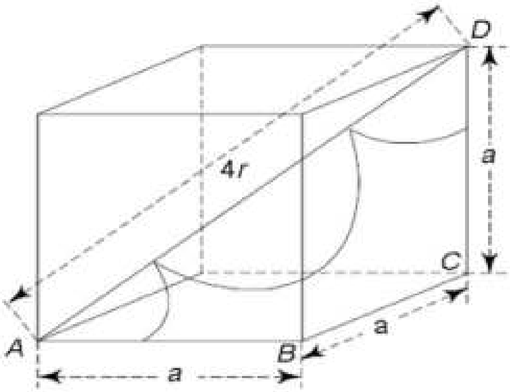
في تركيب BCC الذرات تلامس بعضها البعض على امتداد قطر المكعب كما موضح في الشكل. ولذا فان القطر سيساوي 4r

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

$$AD^2 = AC^2 + CD^2 = 2a^2 + a^2 = 3a^2$$

$$\therefore \quad (4r)^2 = 3a^2$$

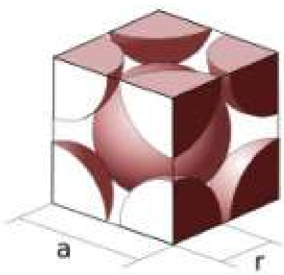
$$\text{or} \quad a = \frac{4r}{\sqrt{3}}$$



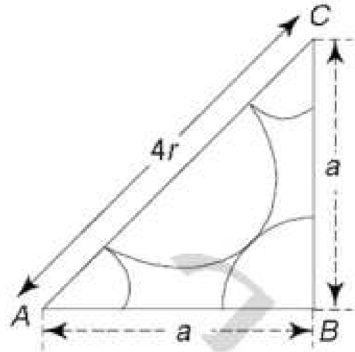
$$N = The\ lattice\ points\ bcc = \left(\frac{1}{8}\times 8\right) + 1 = 2$$

$$a = \frac{4r}{\sqrt{3}} \qquad V_{crystal} = a^3$$

$$APF = \frac{N_{atoms}V_{atom}}{V_{crystal}} = \frac{2\cdot\frac{4}{3}\pi r^3}{\left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^3} = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} \approx 0.68017476$$



مثال3: احسب نسبة الملىء نسبة الرص (نسبة التنضيد) في تركيب مكعب متمركز الاوجه FCC؟

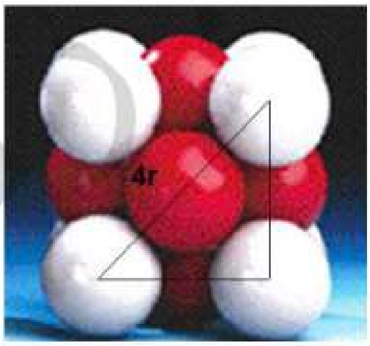


Solution: $\boldsymbol{V_{crystal}} = a^3$

$N = The\ lattice\ points\ fcc = \left(\frac{1}{8} \times 8\right) + (3 \times 1) = 4$

FCC Structure: Atoms within this structure touch along the diagonal of any face of the cube. The diagonal has a length of $4r$.

$$AC^2 = AB^2 + BC^2$$
$$(4r)^2 = a^2 + a^2$$
$$\therefore \quad r^2 = \frac{2a^2}{16}$$
$$\text{or} \quad r = \frac{\sqrt{2}a}{4} = \frac{a}{2\sqrt{2}}$$
$$\text{or} \quad a = 2\sqrt{2}\, r$$

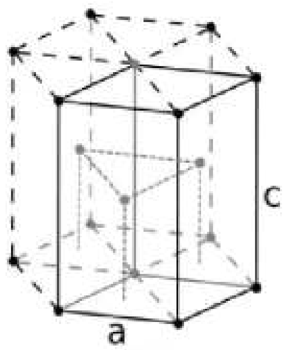


The packing fraction is

$$\boldsymbol{APF} = \frac{\boldsymbol{N_{atoms}V_{atom}}}{\boldsymbol{V_{crystal}}} = \frac{4 \cdot \frac{4}{3}\pi r^3}{(2\sqrt{2}r)^3} = \frac{4 \cdot \frac{4}{3}\pi r^3}{8 \times 2\sqrt{2}r^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = \mathbf{0.74}$$

مثال4: احسب نسبة الملىء نسبة الرص (نسبة التنضيد) في التركيب السداسي المقفل الملء او المتماسك (التركيب السداسي المتلاصق الرص) hcp؟

$$a = 2r \qquad\qquad c = 4\sqrt{\frac{2}{3}}\, r$$

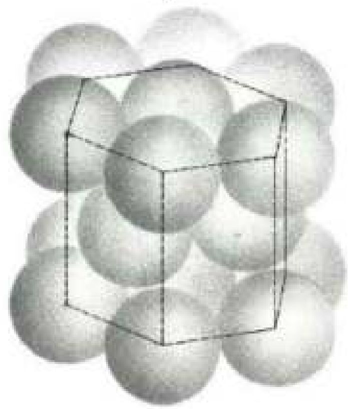


$$\boldsymbol{APF} = \frac{\boldsymbol{N_{atoms}V_{atom}}}{\boldsymbol{V_{crystal}}} = \frac{\mathbf{6 \cdot \frac{4}{3}\pi r^3}}{\mathbf{\frac{3\sqrt{3}}{2}a^2c}}$$

$$APF = \frac{6 \cdot \frac{4}{3}\pi r^3}{\frac{3\sqrt{3}}{2}(2r)^2\sqrt{\frac{2}{3}} \cdot 4r}$$

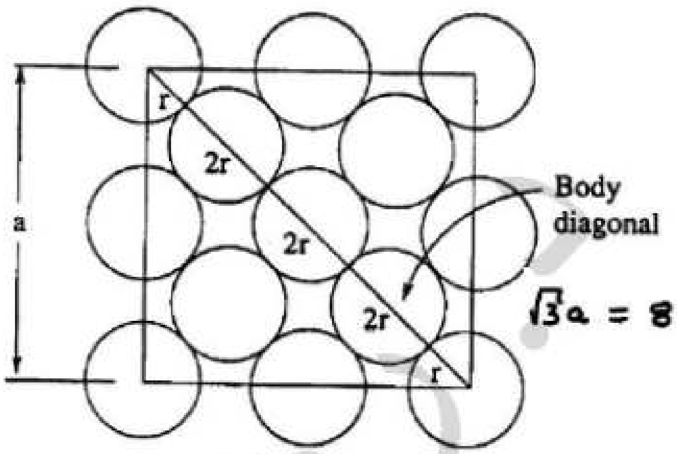
$$= \frac{6 \cdot \frac{4}{3}\pi r^3}{\frac{3\sqrt{3}}{2}\sqrt{\frac{2}{3}} \cdot 16r} = \frac{\boldsymbol{\pi}}{\sqrt{\mathbf{18}}}$$

$$= \frac{\boldsymbol{\pi}}{\mathbf{3\sqrt{2}}} \approx \mathbf{0.74048}$$

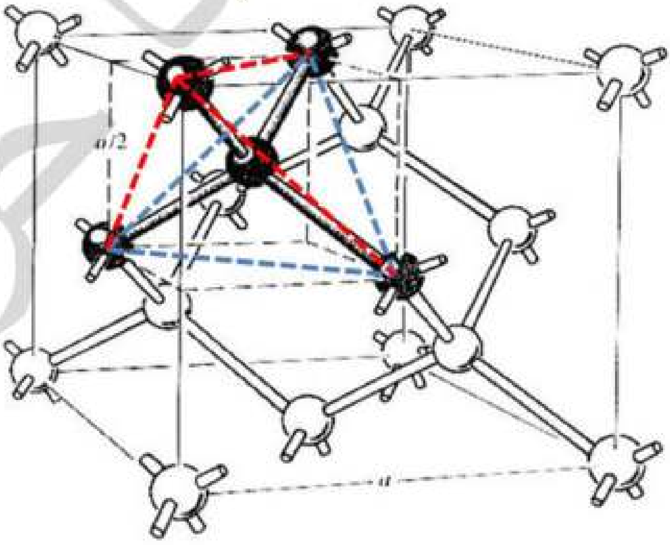


مثال5: احسب نسبة الملء نسبة الرص (نسبة التنضيد) في الماس Diamond؟

Diamond: الماس



$\sqrt{3}a = 8r$



الشكل يوضح تركيب الماس كما يُنظر لها من الاعلى

عدد الذرات في تركيب الماس هو

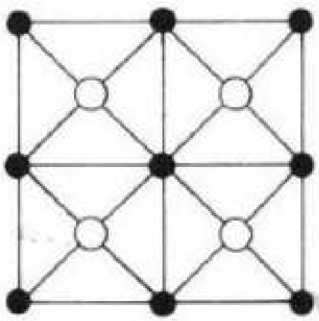
$8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 + 4 = 8,$

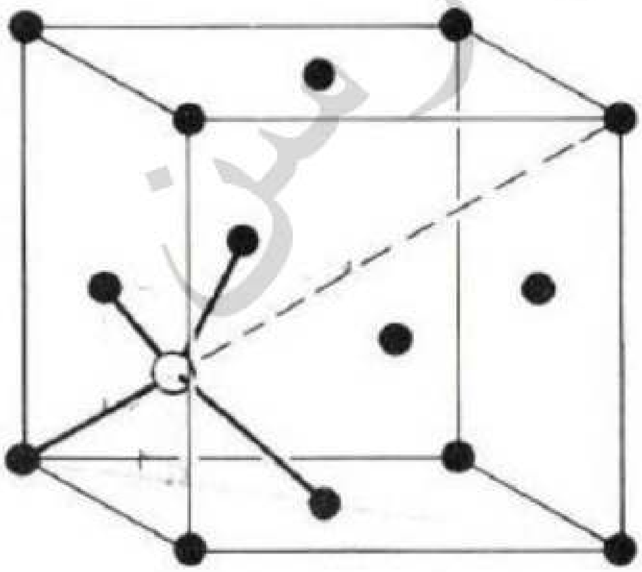
من الاركان ومن الاوجه ومن الداخل على التوالي

طول نصف القطر هو $\sqrt{3}a/8$

لذا فان نسبة الرص تعطى

$$
\begin{aligned}
P.f._{diamond} &= \frac{V_{atoms}}{V_{diamond}} \\
&= \frac{8 \times (4\pi/3)r^3}{a^3} \\
&= \frac{8 \times (4\pi/3) \times (\sqrt{3}a/8)^3}{a^3} \\
&= \frac{\sqrt{3}\pi}{16} \approx 0.34.
\end{aligned}
$$





معاملات الاوجه (الادلة) Indices of the face

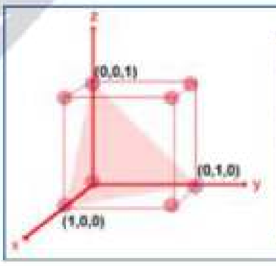
لدراسة التركيب البلوري يكون من الضروري ان تتخيل البلورة وكانها شبيكة من مجاميع من الاوجه او السطوح الذرية المتوازية وهذه السطوح توصف بدلالة معاملات او ادلة تدعى indices وهي عبارة عن رموز او قيم مختصرة مشتقة اساساً من الاحداثيات او التقاطعات البلورية parameters لذلك الوجه لتعبر عن وضعيته وعلاقته بالمحاور البلورية.

وهناك عدة طرق مختلفة لحساب الادلة لوجه ولكن اكثرها استخداما هي معاملات ميلر Miller indices ويرمز لها (hkl).

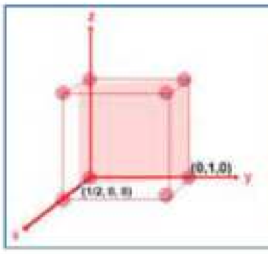
ولايجادها نتبع الخطوات الاتية :

1) نختار نقطة اصل (0) وثلاثة محاور مرجعية (x، y، z) .
2) نحدد تقاطع السطح مع كل محور من المحاور الثلاثة بالقيم (p، q، r) .
3) نقوم بقلب قيم التقاطعات p، q، r فاذا كانت جميعها اعداد صحيحة تمثل hkl واذا كان بعض منها او جميعها اعداد كسرية فيضرب كل مقلوب **بأصغر عدد صحيح (اصغر قاسم مشترك)** لتحويلها الى اعداد صحيحة للحصول على (hkl).
4) عند وضع معاملات ميلر بين قوسين (hkl) فهذا يعني مجموعة واحدة من السطوح المتوازية المتساوية الفسح. وليست معاملات ميلر لسطح معين واحد.
5) قد تكون معاملات ميلر جميعها موجبة او سالبة او اعداد مختلطة ولكنها دائما اعداد صحيحة. فعندما يقطع السطح المحور بالاتجاه السالب تكون قيمته سالبة.
6) عندما يكون هناك سطحا موازيا لاحد المحاور البلورية مثل المحور $\overrightarrow{x}$ فان معاملات هذا السطح تكتب بالصيغة (0kl) لان هذا السطح يقطع المحور $\overrightarrow{x}$ في اللانهاية (∞) ومقلوب ∞ هو 0

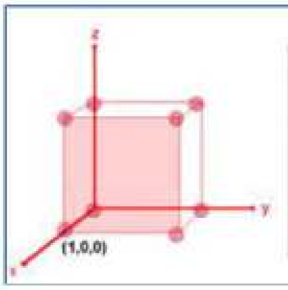
مثال (1): جد معاملات ميلر للسطوح الموضحة في الاشكال الاتية؟



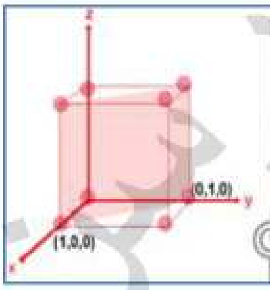
Axis	X	Y	Z
Intercept points	1	1	1
Reciprocals	1/1	1/1	1/1
Smallest Ratio	1	1	1
Miller Indices	(111)		



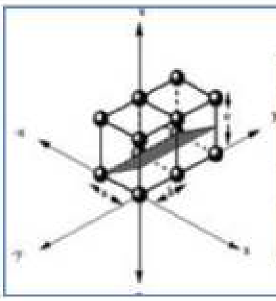
Axis	X	Y	Z
Intercept points	1/2	1	∞
Reciprocals	1/(½)	1/1	1/∞
Smallest Ratio	2	1	0
Miller Indices	(210)		



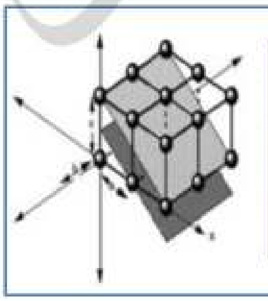
Axis	X	Y	Z
Intercept points	1	∞	∞
Reciprocals	1/1	1/∞	1/∞
Smallest Ratio	1	0	0
Miller Indices	(100)		



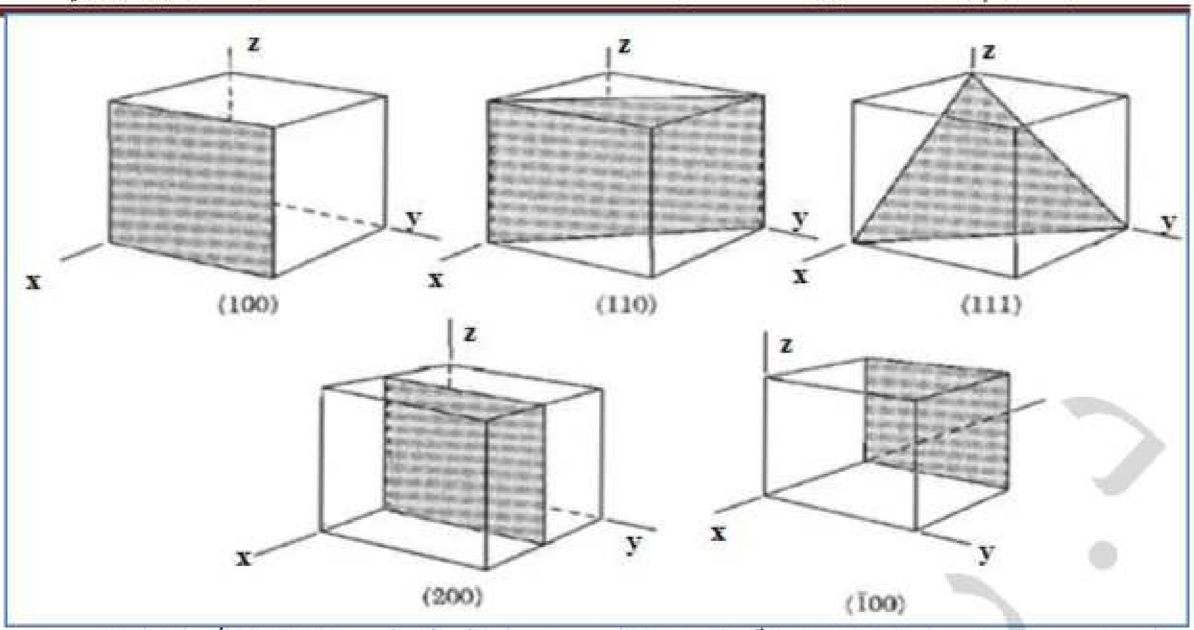
Axis	X	Y	Z
Intercept points	1	1	∞
Reciprocals	1/1	1/1	1/∞
Smallest Ratio	1	1	0
Miller Indices	(110)		



Axis	a	b	c
Intercept points	-1	∞	½
Reciprocals	1/-1	1/∞	1/(½)
Smallest Ratio	-1	0	2
Miller Indices	($\bar{1}$02)		



Axis	a	b	c
Intercept points	1	∞	½
Reciprocals	1/1	1/∞	1/(½)
Smallest Ratio	1	0	2
Miller Indices	(102)		



يمكن التعبير عن اوجه المكعب الستة بالنحو الاتي : وهي تمثل السطوح ((001)) أو {001}

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

والعلاقة { } او (( )) تعني جميع السطوح المكافئة

لذلك السطح فمثلا {333} تعني :

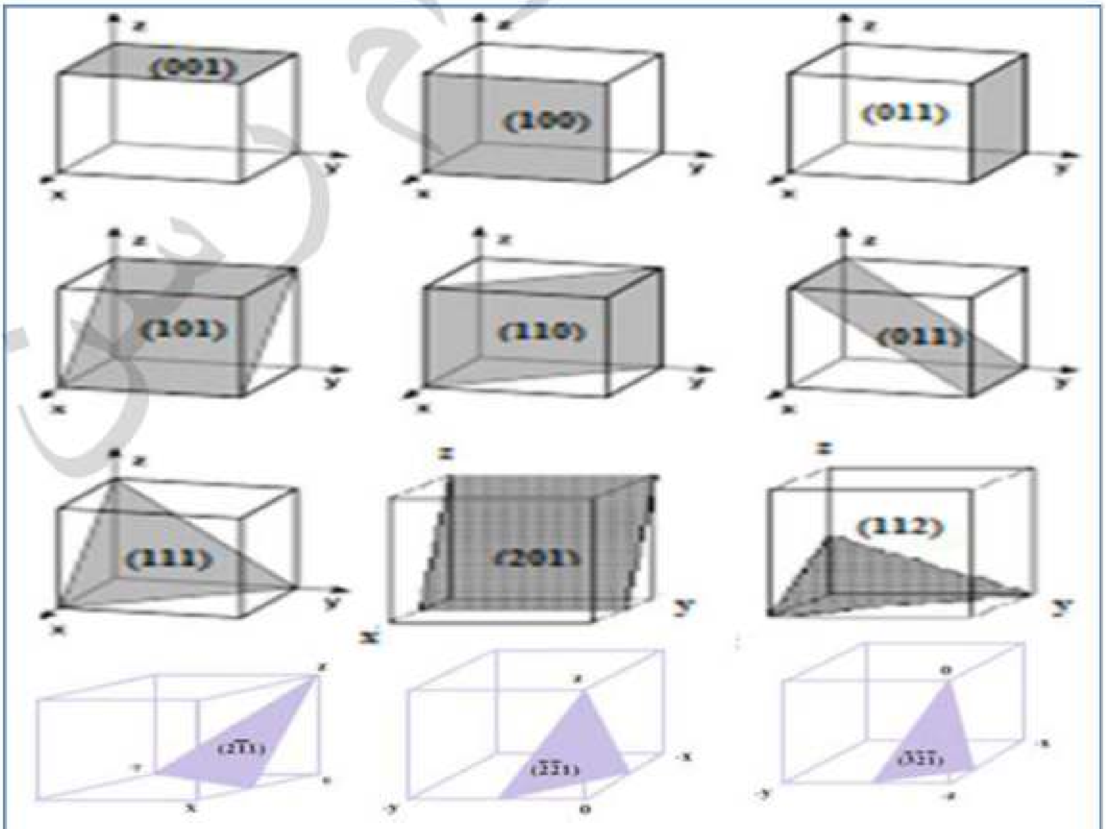
$(333)،(\bar{3}33)،(3\bar{3}3)،(33\bar{3})،(\bar{3}\bar{3}3)،(\bar{3}3\bar{3})،(3\bar{3}\bar{3})،(\bar{3}\bar{3}\bar{3})$

واذا كانت جميع قيم السطوح مختلفة ل {h k l} نحصل على 48 سطحاً مختلفاً متكافئاً مثل {423}، {253}،{134} وغيرها }.

اما اذا كانت قيمتين متشابهتين من قيم {h k l} امكن الحصول على 24 سطحا متكافئا مثل : {115}، {224}،{133} حاول ايجاد السطوح ال 24 المكافئة.

س/ ارسم السطوح البلورية الاتية لنظام المكعب :

$\mathbf{(200)،(004)،(023)،(120)،(0\bar{1}0)،(001)،(010)،(222)،(011)،}$
$\mathbf{(331)،(420)،(2\bar{1}1)،(\bar{1}31)،(110)،(\bar{1}10)،(111)،(020)}$



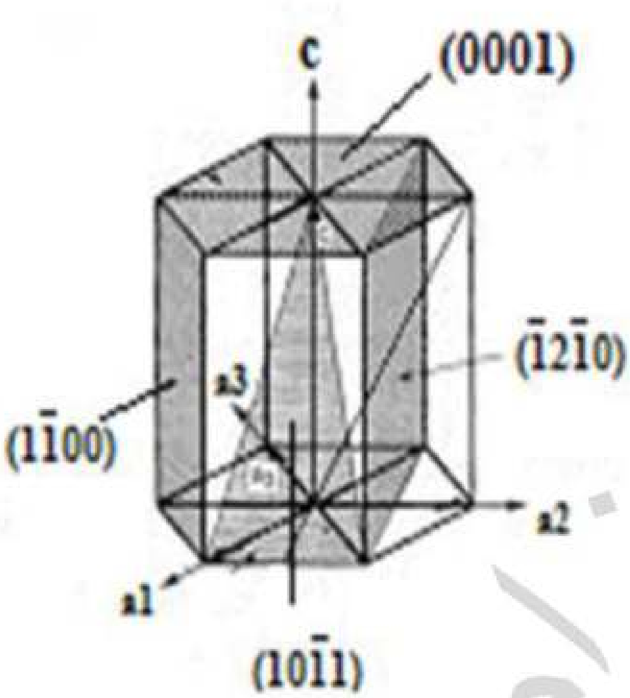
معاملات ميلر للشكل السداسي :

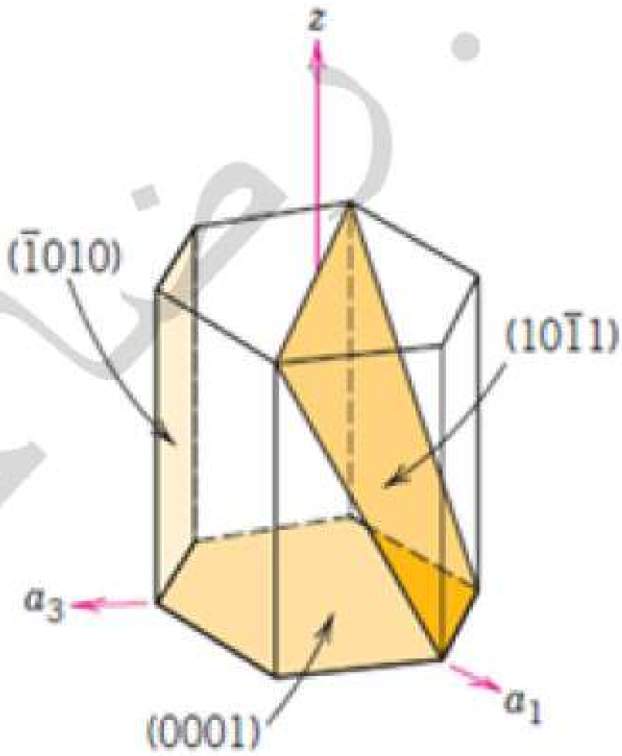
تمثل السطوح البلورية للشكل السداسي باربعة معاملات بدلا من ثلاثة وتكتب (h k i l)

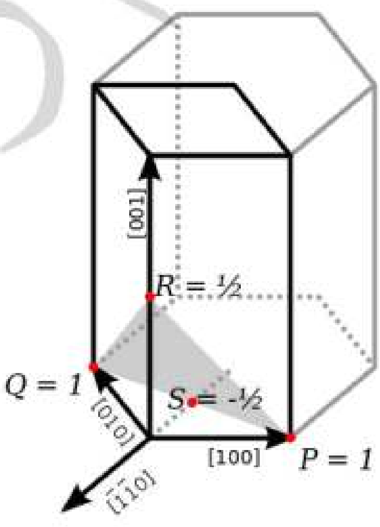
مثال : احسب معاملات ميلر لسطح في الشكل السداسي تقاطعاته

	$a_1 = 1$	$a_2 = -1$	$a_3 = \infty$	$c = \infty$
التقاطعات :	1	-1	∞	∞
المقلوبات :	1	-1	0	0
معلومات ميلر:	$(1\,\bar{1}\,0\,0)$			

القاعدة العليا فمعاملات ميلر لها (0001) والقاعدة السفلى $(000\bar{1})$ ان محاور هذه الشبيكة تدعى بمحاور برافيز وهي تخضع للعلاقة الاتجاهية : $\overrightarrow{a_1} + \overrightarrow{a_2} = -\overrightarrow{a_3}$



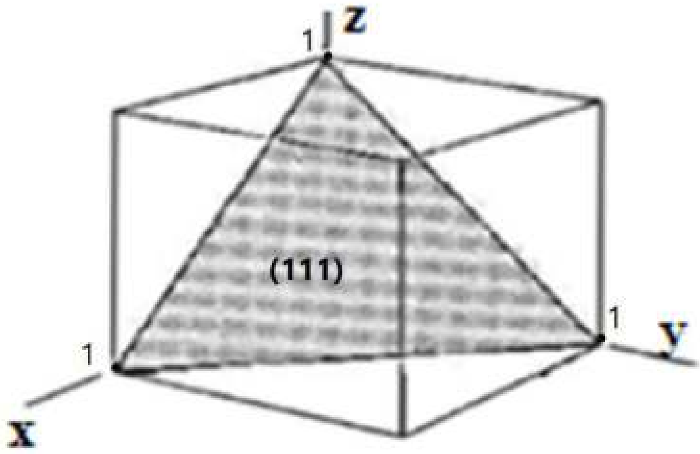




مثال: ارسم المستوي (111) في بلورة مكعبة الشكل؟

نرسم مكعب ونعين المحاور الكارتيزية ونعين نقطة الاصل.

ثم نأخذ مقلوب معاملات ميلر ونضع بينها فارزة للدلالة على انهم تحولوا الى اعداد للمحاور الكارتيزية:



$$\frac{1}{1} ، \frac{1}{1} ، \frac{1}{1}$$

$$(1،1،1)$$

$$Z=1 ، y=1 ، x=1$$

نعين النقاط على المحاور المرسومة داخل المكعب ثم نوصل النقاط الثلاثة لنحصل على المستوى:

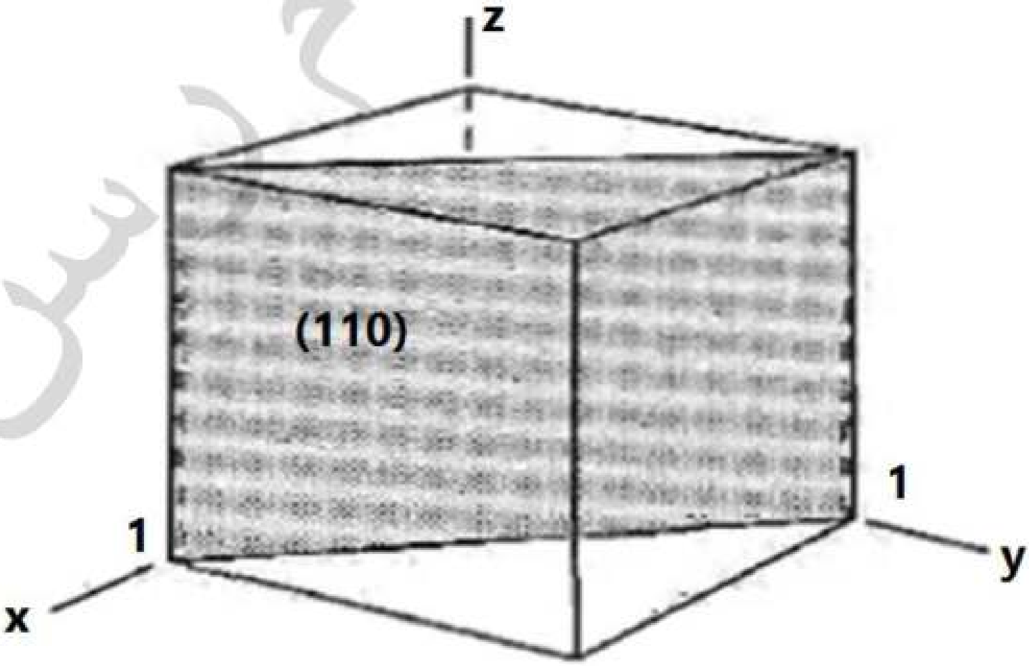
مثال: ارسم المستوي (110) في بلورة مكعبة؟

المقلوب:

$$\frac{1}{1} ، \frac{1}{1} ، \frac{1}{0}$$

$$(1،1،\infty)$$

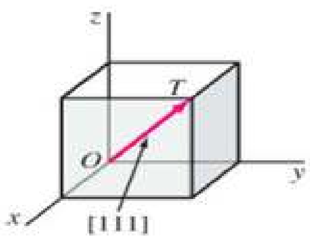
$$x=1 ، y=1 \;\; ، Z=\infty$$



الاتجاهات البلورية : Crystal Direction

لتعيين اي اتجاه في البلورة نستخدم ثلاثة معاملات هي u v w وتكتب بالصيغة [uvw] وهي اعداد صحيحة ليس لها عامل مشترك اكبر من الواحد لان النسب بين هذه المعاملات هي كالنسب بين مركبات المتجه في الاتجاه المطلوب.

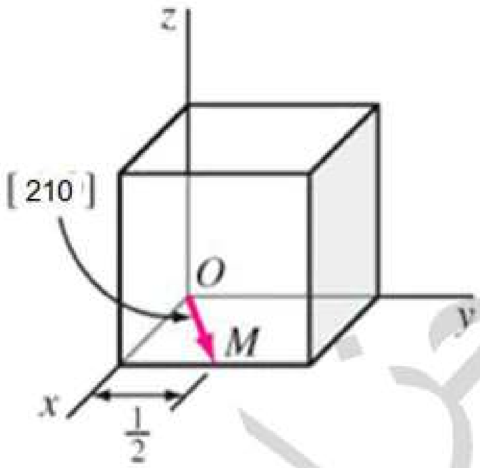
فاذا فرضنا متجهاً قيمة مركبته باتجاه المحور $\vec{a}$ هو ua وقيمة مركبته باتجاه المحور $\vec{b}$ هي vb وقيمة مركبته باتجاه $\vec{c}$ هي wc ، فان اتجاه هذا المتجه يعبر عنه بشكل [uvw].



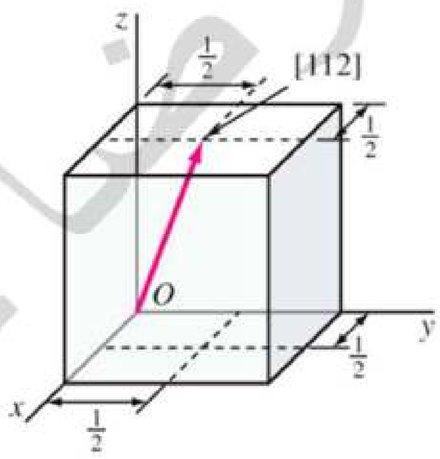
[111] direction

وهناك اتجاهات متكافئة في البلورة وللدلالة عليها تكتب بالصيغة < uvw > او [[uvw]] فعند كتابة < 110 > يقصد بها جميع الاتجاهات المتكافئة من نوع :

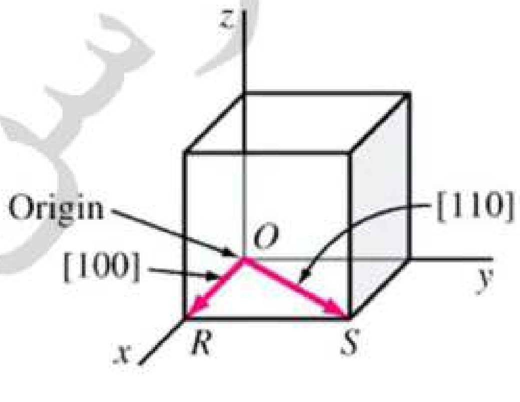
$[011]$ ، $[101]$ ، $[110]$ ، $[0\bar{1}1]$ ، $[01\bar{1}]$ ، $[\bar{1}01]$ ، $[10\bar{1}]$ ......



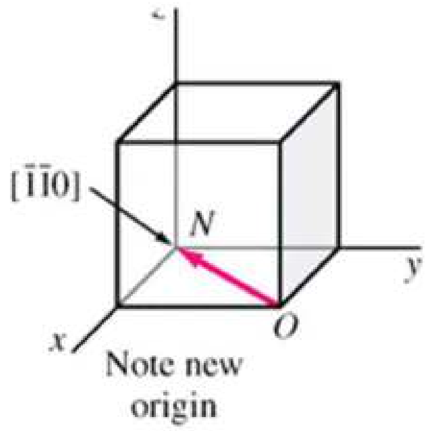
X = 1 , Y = ½ , Z = 0
[1 ½ 0] ⇨ [2 1 0]



X = ½ , Y = ½ , Z = 1
[½ ½ 1] ⇨ [1 1 2]



X = 1 , Y = 0 , Z = 0 ⇨ [1 0 0]



X = -1 , Y = -1 , Z = 0 ⇨ [$\bar{1}\bar{1}$0]

يسمى اتجاه ما في بلورة **بمحور المنطقة او النطاق او القطاع او محور النطاق** ويقال للسطوح المتقاطعة بان لها اتجاه مشترك واحد او محور نطاق واحد، وانها تنتمي الى النطاق نفسه. يمثل اتجاها مشتركا على طوله تتقاطع مجموعة من السطوح و ويقال للسطوح المتقاطعة بان لها اتجاه مشترك واحد او محور نطاق واحد وانها تنتمي الى النطاق نفسه.

ويعبر عن محور النطاق بشكل [uvw] حيث ان u، v، w تحح متجهاً $\vec{t}$ مقاساً من نقطة الاصل في البلورة وفق المعادلة الاتجاهية:

$$\vec{t} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

ان معاملات ميلر (h k l) للسطح المنتمي الى نطاق معاملات ميلر محوره [uvw] يجب ان تخضع للعلاقة الجبرية

$$hu + kv + lw = 0 \ldots . (1)$$

مثلاً: $(\bar{1}00)$ مع [110] او $(0\bar{1}0)$ مع [101]

وهذا يعني ان اي سطح (h k l) يحوي الاتجاه [uvw] اذا تحققت المعادلة (1) ويمكن حساب معاملات محور النطاق [uvw] لسطحين متقاطعين مثل $(h_1 k_1 l_1)$ و $(h_2 k_2 l_2)$ كالاتي :

$$\left.\begin{aligned} u &= k_1 l_2 - k_2 l_1 \\ v &= l_1 h_2 - l_2 h_1 \\ w &= h_1 k_2 - h_2 k_1 \end{aligned}\right\} \ldots\ldots (2)$$

ان جميع السطوح التي تكون معاملات ميلر بشكل (h k 0) تنتمي الى نطاق واحد محوره مثل [001].

ويمكن استخدام المعادلات (2) لايجاد معاملات ميلر (h k l) للسطح الذي يحوي الاتجاهين المختلفين $[u_1 v_1 w_1]$ و $[u_2 v_2 w_2]$ كما يأتي :

$$\left.\begin{aligned} h &= v_1 w_2 - v_2 w_1 \\ k &= w_1 u_2 - w_2 u_1 \\ l &= u_1 v_2 - u_2 v_1 \end{aligned}\right\} \ldots\ldots (3)$$

H.W : جد السطح (h k l) الذي يحوي الاتجاهين [110] و [211] باستخدام المعادلات (3)

الجواب: $(1\bar{1}\bar{1})$.

H. W : ثم جد الاتجاه الذي يتمثل ب [uvw] والذي ينتمي له السطحان (011) و (111) باستخدام المعادلات (2).

حساب الزاوية المحصورة بين مستويين (وبين اتجاهين):

يمكن حساب الزاوية Ø بين المستويين $(h_1\ k_1\ l_1)$ و $(h_2\ k_2\ l_2)$ في بلورة مكعبة وهي تمثل الزاوية المحصورة بين العمودين على هذين السطحين كالاتي :

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

$$\left\{\left(\frac{(h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2)}{\left[(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_3^2)\right]^{\frac{1}{2}}}\right)\right\}\emptyset = cos^{-1}$$

H.W : جد الزاوية Ø المحصورة بين السطحين (312) و $(4\bar{2}1)$ ثم جد Ø بين $[12\bar{3}]$ و $[\bar{2}01]$ في بلورة مكعبة.

مثال: في خلية وحدة مكعبة ، اوجد الزاوية بين العموديين على المستويين (121) and (111) ؟

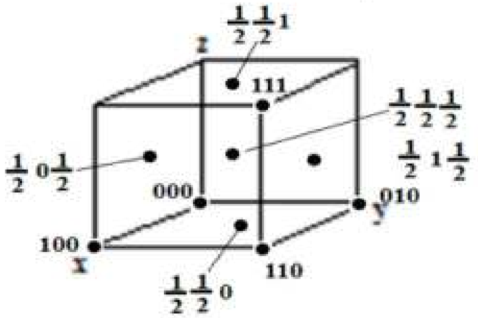
Solution:

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

$$\cos\theta = \frac{1\times1 + 1\times2 + 1\times1}{(1^2 + 1^2 + 1^2)^{\frac{1}{2}}\ (1^2 + 2^2 + 1^2)^{\frac{1}{2}}} = 0.9428$$

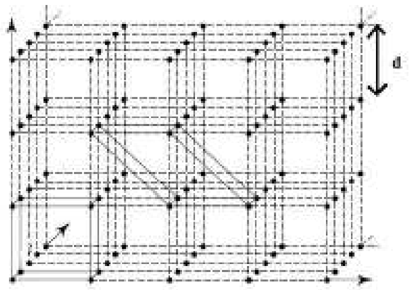
$$\theta = 19.47^\circ \quad or \quad 19^\circ\ 28'$$

مواقع الذرات في خلية الوحدة in unit cell: Positoin of atoms



يمثل موقع نقطة في خلية الوحدة بثلاثة احداثيات ذرية uvw حيث يمثل كل احداثي المسافة ما نقطة الاصل بوحدات محاور الخلية a، b، c وتكتب بالصيغة uvw بدون اقواس وبدون فواصل وتمثل مواقع الذرات داخل خلية الوحدة بوحدات كسرية اقل من الواحد ودائما لا تزيد قيمة uvw عن الواحد مطلقاً.

فسحة السطوح d_{hkl} Planes Spcing (ثابت الشبيكة lattice constant) :



وهي تمثل المسافة العمودية بين اي سطحين متتاليين من مجموعة سطوح متوازية.

بعبارة اخرى، اقصر مسافة عمودية بين مستويات الشبيكة. حيث يمثل d ثابت الشبيكة .

وتعطى d_{hkl} لاية مجموعة من السطوح المتوازية في بلورة مكعب طول ضلع خليتها الاعتيادية L (او a) بالعلاقة الاتية :

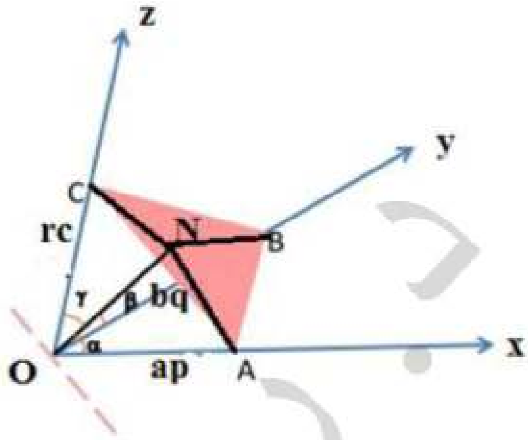
$$d_{hkl}=\frac{L}{\left(h^2+k^2+l^2\right)^{\frac{1}{2}}}\equiv\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

ونلاحظ من العلاقة ان d_{hkl} تعتمد على القيمة العددية لمعاملات ميلر ولا تعتمد على اشارات تلك المعاملات وهناك مجاميع مختلفة من السطوح المتوازية ذات معاملات ميلر مختلفة ولكنها متساوية الفسح d_{hkl} مثل : (333) ، (511) والسطوح (600) ، (422).

وفيما يلي جدولاً لقيم $\frac{1}{d^2}$ لبعض الانظمة البلورية

$\frac{1}{d^2}$	حجم خلية الوحدة الاعتيادية	نظام البلورة
$\frac{h^2+k^2+l^2}{a^2}$	a^3 أو L^3	مكعب
$\frac{h^2+k^2}{a^2}+\frac{l^2}{c^2}$	a^2c	رباعي
$\frac{h^2}{a^2}+\frac{k^2}{b^2}+\frac{l^2}{c^2}$	abc	معين قائم
$\frac{4}{3}\left(\frac{h^2+hk+k^2}{a^2}\right)\frac{l^2}{c^2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}a^2c$	سداسي

س / اثبت ان $\mathbf{d_{hkl}} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$ لنظام المكعب ؟



في Δ ONA. $\cos\propto = \frac{ON}{OA}$

ON تمثل المسافة العمودية بين السطح ABC ونقطة الاصل O وهي تمثل d_{hkl}

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

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

ملاحظة : $OA = ap = a * \frac{1}{h} = \frac{a}{h}$

$$\Delta ONB : \cos B = \frac{ON}{OB} = \frac{d_{hkl}}{\frac{b}{k}} = \frac{k}{b} d_{hkl} \qquad \therefore \cos^2\beta = \left(\frac{k}{b}\right)^2 d^2{}_{hkl}.........(2)$$

$$\Delta ONC = \cos\gamma = \frac{ON}{OC} = \frac{d_{hkl}}{\frac{c}{l}} = \frac{l}{c} d_{hkl} \qquad \therefore \cos^2\gamma = \left(\frac{l}{c}\right)^2 d^2{}_{hkl}.........(3)$$

لدينا من المثلثات المتطابقة $\cos^2\alpha + \cos^2\beta + \cos^2\gamma = 1 \ldots\ldots\ldots(4)$

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

في المكعب $a = b = c$

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

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

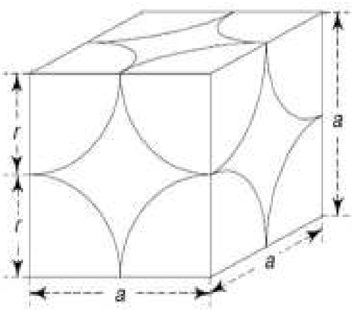
كثافة المستويات (The density of plane)

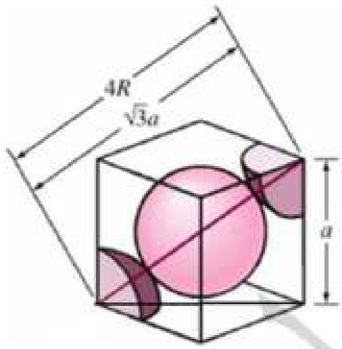
كثافة المستويات الذرية Planar Atomic Density:

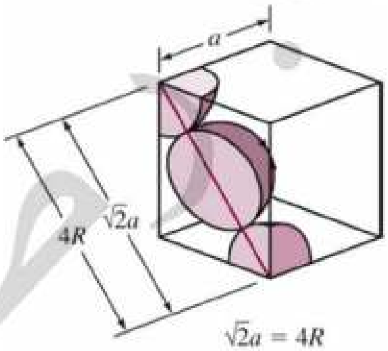
عدد الذرات في وحدة المساحات في المستويات المختلفة في العديد من الشبائك البلورية.
ويعرف بانه عدد الذرات مقسومة على وحدة المساحة الموجودة في المستوي. وتعطى بالعلاقة التالية:

$$\rho = \frac{\text{No. of atoms}}{\text{Area}}$$

$$Planar\ atomic\ density = \rho_p = \frac{\text{No. of atoms centered on the plane}}{\text{Area of the plane}}$$



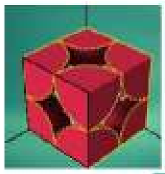


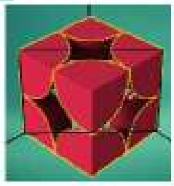


(sc): a=2r　　**(BCC):** $4r = \sqrt{3}\,a$, $a = \frac{4r}{\sqrt{3}}$　　**(FCC):** $4r = \sqrt{2}a$, $a = 2\sqrt{2}\,r$

(SC)

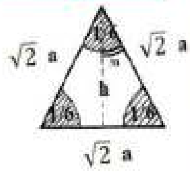
1- For planes {100}　$\rho_p = \frac{\frac{1}{4}\times 4}{a^2} = \frac{1}{a^2}$

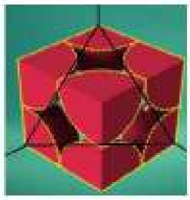




2- For planes {110}　$\rho_p = \frac{\frac{1}{4}\times 4}{\sqrt{2}a\times a} = \frac{1}{\sqrt{2}a^2}$

3- For planes {111}　$\rho_p = \frac{\frac{1}{6}\times 3}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2} = \frac{\frac{1}{2}}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2} = \frac{1}{\sqrt{3}a^2}$



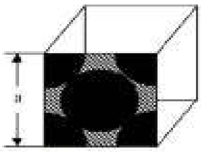


$$\cos 30 = \frac{\sqrt{3}}{2} = \frac{\text{المجاور}}{\text{الوتر}} = \frac{h}{\sqrt{2}a} \quad ------ \quad h = \sqrt{\frac{3}{2}}a$$

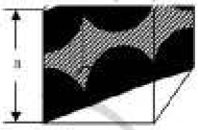
$$Area = \left(\frac{1}{2}\times \text{القاعدة} \times \text{الارتفاع}\right) = \frac{1}{2}(\sqrt{2}a)(h) = \frac{1}{2}(\sqrt{2}a)\left(\sqrt{\frac{3}{2}}a\right) = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2$$

(FCC)

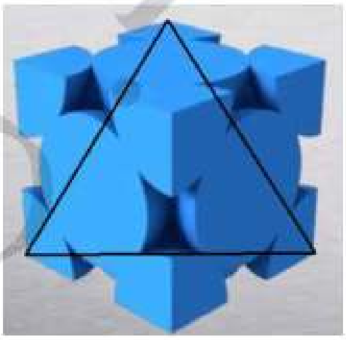
1- For planes $\{100\}$ $\quad \rho_p = \dfrac{\left(\frac{1}{4}\times4\right)+1}{a^2} = \dfrac{2}{a^2}$


FCC (100)

2- For planes $\{110\}$ $\quad \rho_p = \dfrac{\left(\frac{1}{4}\times4\right)+\left(\frac{1}{2}\times2\right)}{\sqrt{2}a\times a} = \dfrac{2}{\sqrt{2}a^2} = \dfrac{\sqrt{2}}{a^2}$


FCC(110)

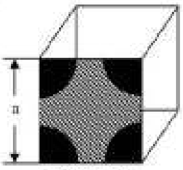
3- For planes $\{111\}$ $\quad Area = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2$



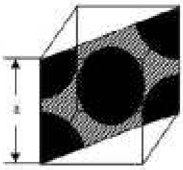
$$\rho_p = \frac{\left(\frac{1}{6}\times3\right)+\left(\frac{1}{2}\times3\right)}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2} = \frac{\frac{1}{2}+\frac{3}{2}}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2} = \frac{2}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2} = \frac{4}{\sqrt{3}a^2}$$

(BCC)

1- For planes $\{100\}$ $\quad \rho_p = \dfrac{\left(\frac{1}{4}\times4\right)}{a^2} = \dfrac{1}{a^2}$


BCC (100)

2- For planes $\{110\}$ $\quad \rho_p = \dfrac{\left(\frac{1}{4}\times4\right)+1}{\sqrt{2}a\times a} = \dfrac{2}{\sqrt{2}a^2} = \dfrac{\sqrt{2}}{a^2}$


BCC (110)

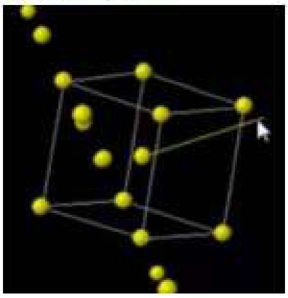
3- For planes $\{111\}$ $\quad Area = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2$

$$\rho_p = \frac{\left(\frac{1}{6}\times3\right)}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2} = \frac{\frac{1}{2}}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2} = \frac{1}{\sqrt{3}a^2}$$

ملاحظة: بعض الاحيان يتم ذكر بان عدد الذرات للسطوح {111} في شبيكة مكعب (bcc) يساوي 2 $\left(\frac{1}{6}*3+1=2\right)$ وهذا خطأ، ويمكن الاستعانة بالبرنامج الاتي من (wiley) لحساب ذلك:

https://www.wiley.com/college/callister/CL_EWSTU01031_S/vmse/xtalfb.htm

https://www.youtube.com/watch?v=VAP_SozPa8M

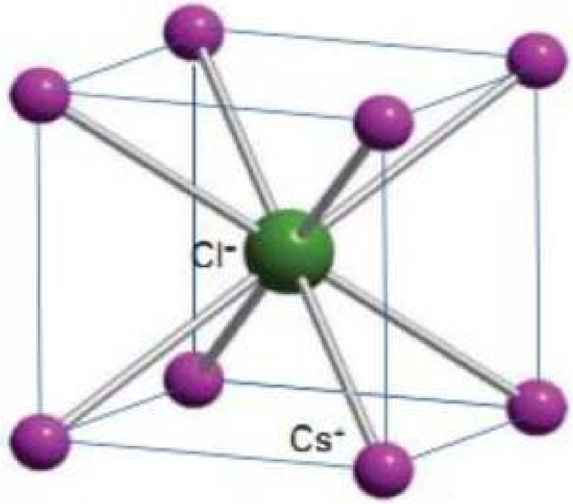


تراكيب بلورية بسيطة Simple Crystal Structure

1 - تركيب كلوريد السيزيوم Cesium Chlorid Structure (CsCl)

يمتلك كلوريد السيزيوم شبيكة برافيز مكعبة بسيطة Sc طول ضلعها 4.IIA والاساس مكون من ايونين هما Cl^-،Cs^+ .

واذا اقترض ان ايون السيزيوم يحتل احد مواقع نقاط الشبيكة ولتكن نقطة الاصل للمكعب اي Cs^+ 0 0 0 فان ايون الكلور يحتل مركز المكعب اي الموقع $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ Cl^-.



Cs^+: 000

Cl^- : $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$

2- تركيب كلوريد الصوديوم Sodium Chloride NaCl

يمتلك شبيكة برافيزية من نوع مكعب متمركز الوجوه fcc طول ضلعها 5.63Å. الخلية الواحدة الاعتيادية تحوي اربع نقاط شبيكة يرافق كل منها اساس مكون من ايونين احداهما Na^+والاخر Cl^- تفصلهما مسافة قدرها نصف قطر خلية الوحدة المكعبة ولذلك تضم خلية الوحدة الاعتيادية اربعة ايونات صوديوم واربعة ايونات كلور اي اربعة جزيئات من كلوريد الصوديوم وتتوزع ايونات الكلور والصوديوم على المواقع الاتية :

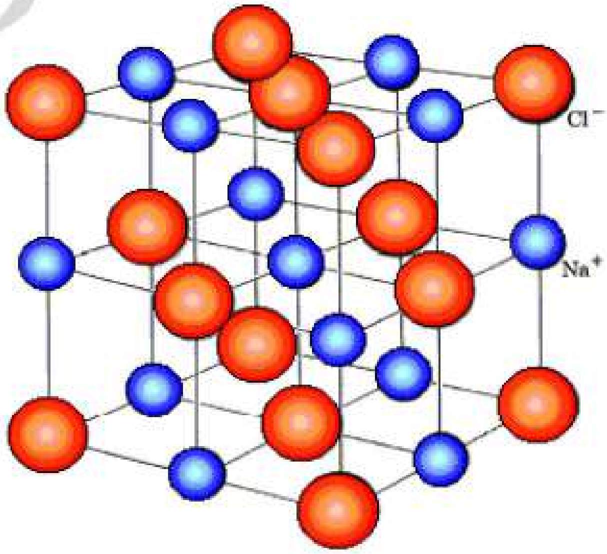
تحفظ مهمة جدا

Na^+ : 000 ، $\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$ ، $\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$ ، $0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$

Cl^- : $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ ، $00\frac{1}{2}$ ، $0\frac{1}{2}0$ ، $\frac{1}{2}00$

وهناك تراكيب مشابهة لتركيب كلوريد الصوديوم مثل :

كلوريد البوتاسيوم وبروميد البوتاسيوم وبروميد الفضة.... الخ

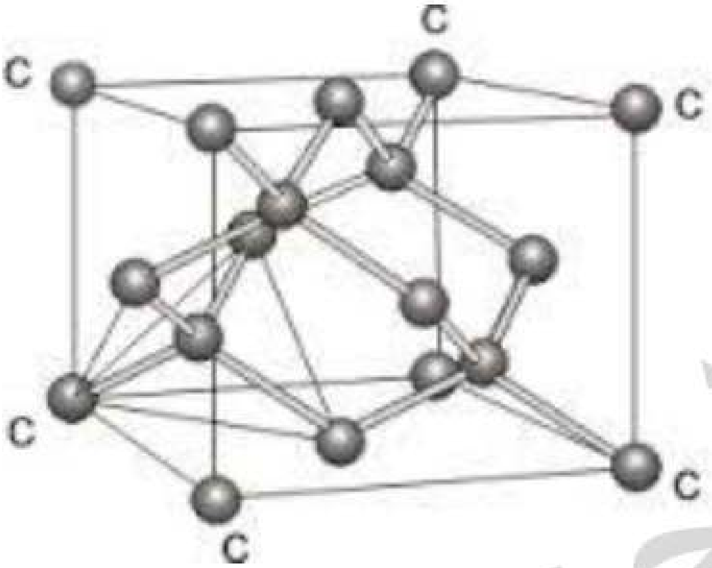


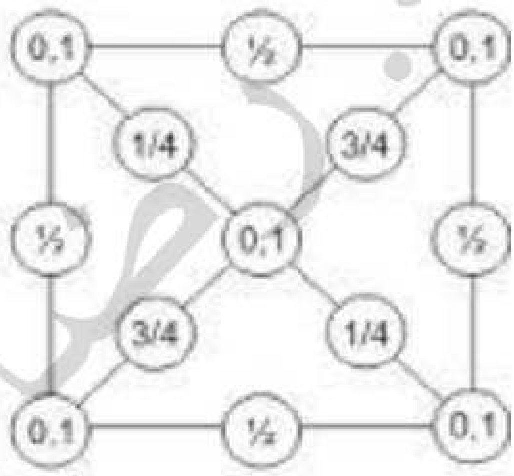
3- تراكيب الماس Diamond Structure

تركيب له شبيكة برافيزية من نوع مكعبة متمركزة الوجوه fcc طول ضلعها 3.56Å والاساس يكون من ذرتين متشابهتين من الكاربون C والمسافة بينهما تقدر بربع قطر خلية الوحدة المكعبة وان خلية الوحدة المكعبة الاعتيادية تحوي 8 ذرات كاربون موزعة على المواقع الاتية :

ذرة واحدة في احد اركان الخلية 000 وثلاث في مراكز اوجه الخلية $0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ ، $\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$ ، $\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$

واربع ذرات داخل الخلية ، اثنتان قريبتان من قاعدتها السفلى عند المواقع $\frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}$ ، $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ واثنتان قريبتان من قاعدتها العليا اي عند المواقع $\frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4}$ ، $\frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4}$ كما في الشكل :





ان كل ذرة كاربون مرتبطة باربع ذرات مجاورة (جوار اول) ارتباطا تساهميا وتكون محاطة بأثنتي عشرة ذرة كجوار ثان وعلى الرغم من صلابة الماس العالية تكون نسبة الملء له لا تتجاوز 34%.

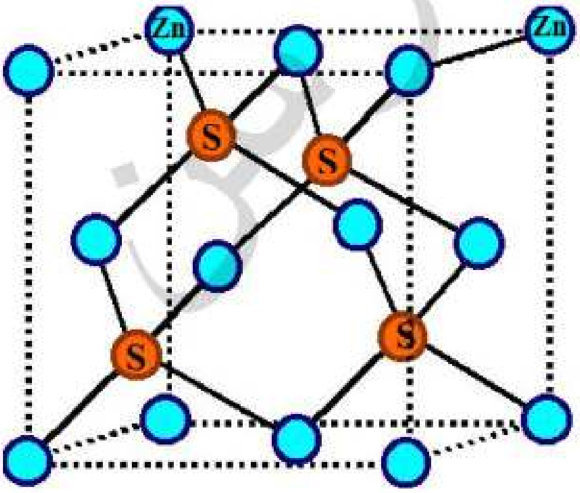
H.W : احسب نسبة الملء للماس. مساعدة : خذ السطح (110)

4- التركيب المكعبي لكبريتيد الزنك Cubic Zinc Structure ZnS

يدعى التركيب المكعبي لكبريتيد الزنك والمركبات *المشابهة له* (zinc – blend structure) *وهو تركيب مشابه لتركيب الماس* والاختلاف الوحيد هو ان الاساس في حالة ZnS مكون من ذرتين هما Zn و S بدلاً من ذرتي الكاربون المتشابهتين في الماس وترتب ذرات Zn و S بحيث تحتل المواقع الذرية الاتية :

$$Zn : 000 \text{ ، } 0\frac{1}{2}\frac{1}{2} \text{ ، } \frac{1}{2}0\frac{1}{2} \text{ ، } \frac{1}{2}\frac{1}{2}0$$

$$S : \frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} \text{ ، } \frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4} \text{ ، } \frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4} \text{ ، } \frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}$$



ان حجم خلية الوحدة لكبريتيد الزنك حوالي ثلاث مرات ونصف بقدر حجم خلية الماس حيث ان طول ضلع خلية الوحدة لكبريتيد الزنك هو 5.41Å مما يجعل نسبة الملء كمية صغيرة.

5- التركيب السداسي المقفل الملء المتماسك (السداسي المتلاصق الرص) (hcp) والمكعب المقفل الملء ((ccp

ان الطريقة التي تحشر بها الجزيئات في البلورات الجزيئية تعتمد على اشكال الجزيئات ومواقع عزوم ذات القطبين الكهربائيين (ان وجدت) فيها.

وابسط حالة لها هي عندما تكون الجزيئات ذات شكل كروي او مقارب لذلك والعزوم ذات القطبين تساوي صفراً او تكون صغيرة جداً وعند ذلك يكون التركيب البلوري:

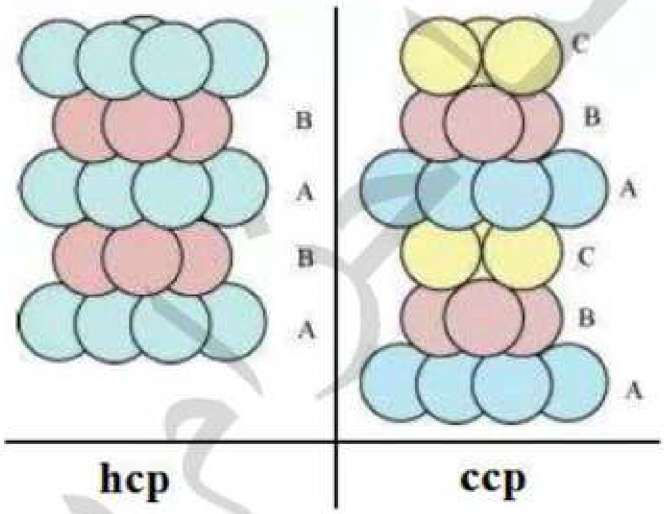
5- **مكعب متماسك Cubic – closed packed (ccp) هو عبارة عن مكعب متمركز الوجه**

6- ومن الامثلة على تركيب مكعب متماسك بلورات : Ar ، HBr ، HCl ، CH_3 ، NH_3 ، Cu ، Ag ، Al

7- **او سداسي متماسك Hexagonal closed packed (hcp)**

8- في حين ان التركيب سداسي متماسك بلورات H_2 ، O_2 ، N_2 ، SiO_2 ، Be ، Mg ، Zn ، Cl ،

ان نسبة الملء لكل من (ccp) و (hcp) تساوي 0.74 وهي اكبر قيمة لنسبة ملء يمكن الحصول عليها لاي تركيب بلوري.



اسئلة ومسائل اضافية

س1: برهن ان في التركيب السداسي المتلاصق الرص **hcp** حيث تتماسك الكرات الذرية مع بعضها، ان نسبة **c/a** هي : $\frac{c}{a} = \left(\frac{8}{3}\right)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{8}{3}} = \mathbf{1.633}$

$$\cos 30 = \frac{\frac{a}{2}}{l} \quad and \quad \cos 30 = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

$$\rightarrow \quad l = \frac{a}{\sqrt{3}}$$

Looking at the tip of the tetrahedron، we have:

$$h^2 + l^2 = a^2 \quad \rightarrow \quad h^2 + \frac{a^2}{3}$$

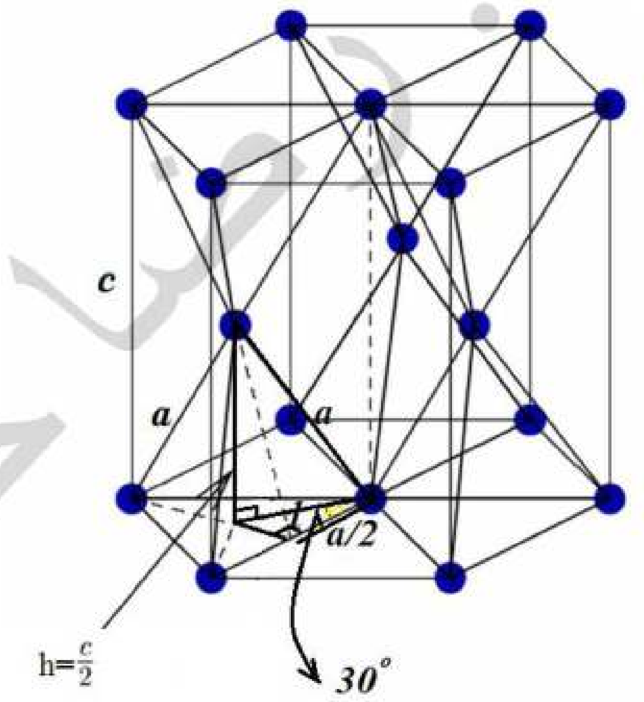
$$= a^2 \quad \rightarrow \quad h^2 = \frac{2}{3}a^2$$

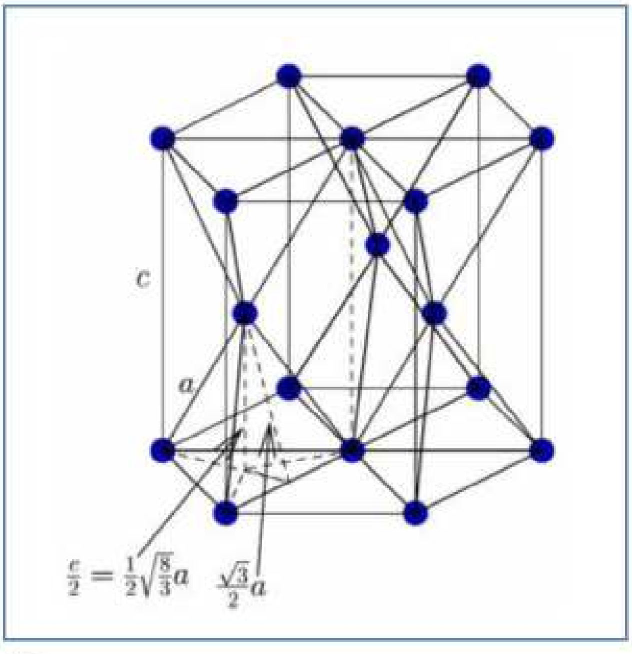
Since $c = 2h \quad \rightarrow \quad h = \frac{c}{2} \quad \rightrightarrows$

$$\frac{c^2}{4} = \frac{2}{3}a^2 \quad \longrightarrow \quad c^2 = \frac{8}{3}a^2$$

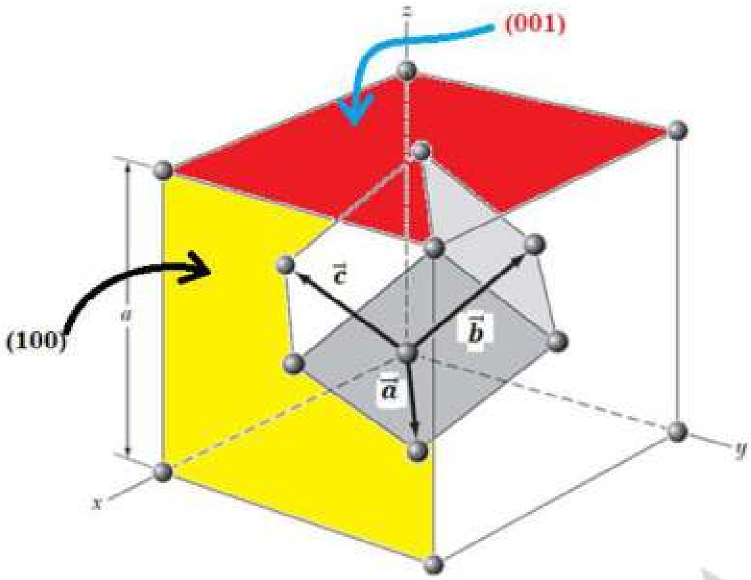
$$c^2 = \frac{8}{3}a^2$$

$$\longrightarrow \quad \frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1.633$$





س2: المستويات التي تملك الادلة (indices) (001) & (100) ، لشبيكة مكعب متمركز الاوجه fcc والادلة تعود لخلية مكعب تقليدية. ما هي الادلة لهذه المستويات عندما تعود لمحاور اولية (محاور بدائية) للشكل التالي؟



الحل:

سندرس تركيب مكعب متمركز الاوجه

$$\vec{a} = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y})$$

$$\vec{b} = \frac{1}{2}a(\hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{c} = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{z})$$

في مكعب بسيط اساساً (100)المستوي
. x=aيعود الى المستوي

التقاطعات لهذا المستوي مع المحاور

$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$

تعطى بـ :

$$\left.\begin{matrix} 2\vec{a} = (a، a، 0) \\ 2\vec{c} = (a، 0، a) \\ \text{مع لايتقاطع } \vec{a}_2 \end{matrix}\right\} \quad \textbf{2 0 2} \text{ التقاطعات}$$

ادلة (معاملات) ميلر تعطى باخذ مقلوبات هذه التقاطعات:

$$\frac{1}{2} ، 0 ، \frac{1}{2} \quad \textbf{المقلوبات}$$

وبايجاد أصغر عدد صحيح (اصغر قاسم مشترك)

(1 0 1) أصغر عدد صحيح

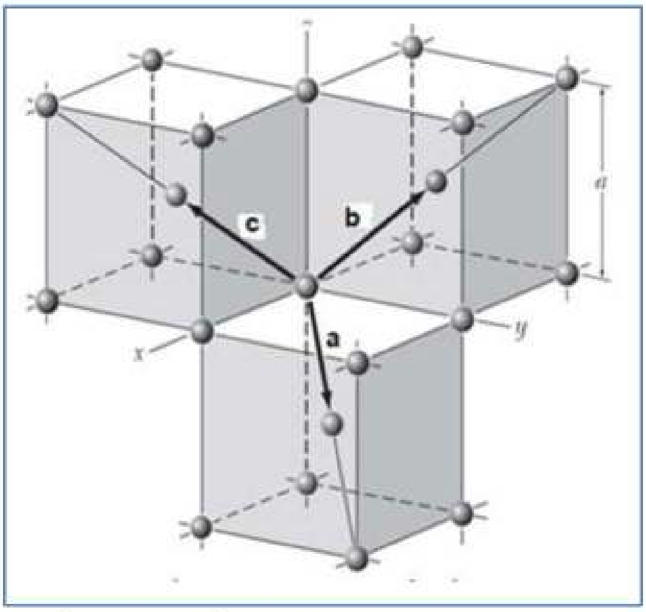
بعبارة اخرى المستوي (100) في مكعب بسيط هو (101) في مكعب متمركز الاوجه.

نفس الشيء (101) في مكعب بسيط (101) في مكعب متمركز الاوجه.

س3: الزاوية بين الاواصر في الماس هي نفسها الزاوية بين المكعب قطري الجسم bcc كما في الشكل. باستخدام تحليل المتجهات الاولي اوجد قيمة هذه الزاوية؟

الحل:

سندرس شبيكة مكعب متمركز الجسم. نحن نريد الزاوية θ. وسنجد الزاوية بين اي متجهين من المتجهات الاتية



$$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$$

$$\vec{a} = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$

$$\vec{b} = \frac{1}{2}a(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{c} = \frac{1}{2}a(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$$

استخدم $\vec{a} \& \vec{b}$، اذا كانت θ بين المتجهين ، فان الضرب الاتجاهي يعطى:

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = |\vec{a}|\,|\vec{b}|\cos\theta$$

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z = \left(\frac{a}{2}\right)\left(\frac{-a}{2}\right) + \left(\frac{a}{2}\right)\left(\frac{a}{2}\right) + \left(\frac{-a}{2}\right)\left(\frac{a}{2}\right) = \left(\frac{-a^2}{4}\right)$$

$$|\vec{a}| = a = \sqrt{a_x^2 + a_y^2 + a_z^2} \quad ; \quad |\vec{b}| = b = \sqrt{b_x^2 + b_y^2 + b_z^2}$$

$$|\vec{a}| = a = \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2} \quad ; \quad |\vec{b}| = b = \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2}$$

$$|\vec{a}| = a = \sqrt{\frac{3a^2}{4}} = \frac{a}{2}\sqrt{3} \quad ; \quad |\vec{b}| = b = \sqrt{\frac{3a^2}{4}} = \frac{a}{2}\sqrt{3}$$

$$\cos\theta = \frac{\vec{a} \cdot \vec{b}}{|\vec{a}|\,|\vec{b}|} = \frac{a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z}{|\vec{a}|\,|\vec{b}|} = \frac{\left(\frac{-a^2}{4}\right)}{\left(\frac{a}{2}\sqrt{3}\right)\left(\frac{a}{2}\sqrt{3}\right)} = \frac{-1}{3}$$

$$\theta = \cos^{-1}\left(\frac{-1}{3}\right) = 109.4712206^\circ = 109^\circ\ 28'\ 16''.3$$

في الحاسبة استخدم المفتاح (°,,,) °,,, **للحصول degree min sec**

==

الاول: اختر الاجابة الصحيحة

س). عدد نقاط الشبيكة في خلية FCC هي:

4(d)   8 (c)   2 (b)   1 (a)

س). مسافة اقرب الجوار (مسافة الجوار الاول) في بنية BCC هي:

(d) $a\sqrt{3}/2$ (c) $2a/\sqrt{3}$ (b) $a/\sqrt{2}$ (a) $2a/\sqrt{3}$

س). عامل الرص (التعبئة) لتركيب الماس هو:

0.68 (d)   0.34 (c)   0.52 (b)   0.74 (a)

س). معاملات (دلائل) ميلر لمستوي يوازي المحورين Y و Z هي:

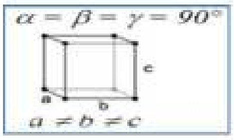
(001) (a)   (1 1 1) (b)   (0 1 0) (c)   (1 0 0) (d)

س) عدد الذرات لوحدة المساحة للسطح (100) في بلورة ذات تركيب مكعب بسيط SC هو:

$1/a^2$ (a) $2/a^2$ (b) $1/2a^2$ (c) $4/a^2$ (d)

س). اذا كان ثابت الشبيكة (4.2 Å) فأن فسحة السطوح (d) لمجموعة المستويات (200) تكون:

8.4 Å (a)   2.4 Å (b)   4.2 Å (c)   2.1 Å (d)



س) خلية الوحدة للتركيب الموضح في الشكل يعود إلى النظام البلوري من نوع ......

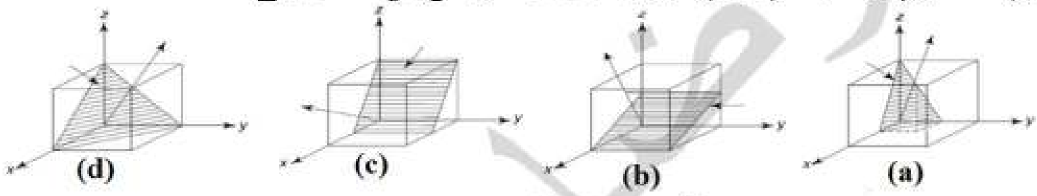
(a) مكعب cubic   (b) معيني قائم orthorhombic

(c) رباعي tetragonal   (d) ثلاثي trigonal

س)- ثابت الشبيكة لخلية وحدة نوع BCC بنصف قطر ذري (1.24 Å) هو:

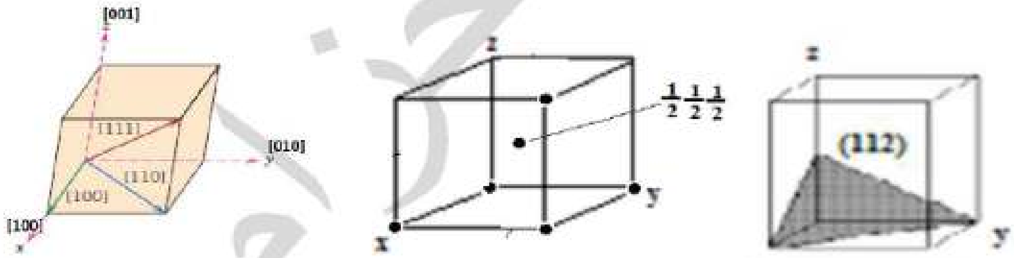
1.432 Å (a)   2.864 Å (b)   1.754 Å (c)   0.62 Å (d)

س) المستوي والاتجاه (201) لتركيب FCC موضح في الشكل : **c**



س) - ارسم ما ياتي داخل خلية وحدة مكعبة:

(112)، [110]، ½ ½ ½



س) اذا كان نصف القطر الذري للرصاص (FCC) هو 0.175 nm ، احسب حجم وحدة الخلية المكعبة بالمتر؟

$a = \sqrt{8} \cdot r = \sqrt{2} \cdot 2 \cdot r$

$V_{crystal} = a^3 = \sqrt{2} \cdot 16 \cdot r^3$

$= 16\sqrt{2} \cdot (0.175 * 10^{-9}\ m)^3 = 1.213\ 10^{-28}\ m^3$

س) احسب حجم خلية وحدة من نوع fcc نصف قطرها R ؟

الذرات تكون على تماس على طول الخط القطري للأوجه الستة للمكعب وطوله سيساوي 4R.

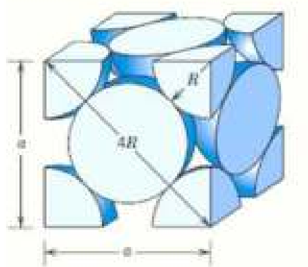
$$a^2 + a^2 = (4R)^2$$

or, solving for *a*,

$$a = 2R\sqrt{2}$$

The FCC unit cell volume V_C may be computed from

$$V_C = a^3 = (2R\sqrt{2})^3 = 16R^3\sqrt{2}$$



س) نصف القطر الذري للنحاس هو 0.128 nm وهو ذو تركيب FCC والوزن الذري هو 63.5 g/mol. احسب الكثافة النظرية وقارن الاجابة مع الكثافة المحسوبة؟

$$V_C = \left(2R\sqrt{2}\right)^3 = 16\sqrt{2}R^3$$

$$\rho = \frac{nA_{Cu}}{V_C N_A} = \frac{nA_{Cu}}{(16R^3\sqrt{2})N_A}$$

$$= \frac{(4\text{ atoms/unit cell})(63.5\text{ g/mol})}{[16\sqrt{2}(1.28\times10^{-8}\text{cm})^3/\text{unit cell}](6.023\times10^{23}\text{ atoms/mol})}$$

$$= 8.89\text{ g/cm}^3$$

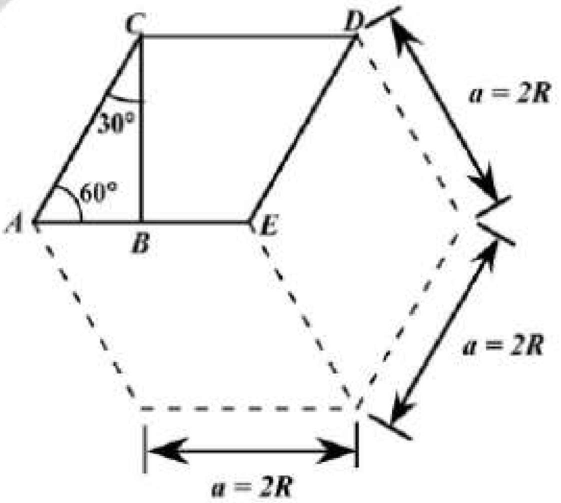
The literature value for the density of copper is 8.94 g/cm^3, which is in very close agreement with the foregoing result.

س) اثبت ان نسبة الملىء نسبة الرص (نسبة التنضيد) في التركيب السداسي المقفل الملء او المتماسك (التركيب السداسي المتلاصق الرص) hcp هو 0.74.

The APF is just the total sphere volume-unit cell volume ratio.
For HCP, there are the equivalent of six spheres per unit cell, and thus

$$V_S = 6\left(\frac{4\pi R^3}{3}\right) = 8\pi R^3$$

Now, the unit cell volume is just the product of the base area times the cell height, c. This base area is just three times the area of the parallelepiped $ACDE$ shown below.



The area of $ACDE$ is just the length of $\overline{CD}$ times the height $\overline{BC}$.
But $\overline{CD}$ is just a or $2R$, and

$$\overline{BC} = 2R\cos(30°) = \frac{2R\sqrt{3}}{2}$$

Thus, the base area is just

$$\text{AREA} = (3)(\overline{CD})(\overline{BC}) = (3)(2R)\left(\frac{2R\sqrt{3}}{2}\right) = 6R^2\sqrt{3}$$

and since $c = 1.633a = 2R(1.633)$

$$V_C = (\text{AREA})(c) = 6R^2c\sqrt{3}$$

$$= \left(6R^2\sqrt{3}\right)(2)(1.633)R = 12\sqrt{3}\,(1.633)\,R^3$$

$$= \left(6R^2\sqrt{3}\right)(2)(1.633)R = 12\sqrt{3}\,(1.633)\,R^3$$

Thus,

$$\text{APF} = \frac{V_S}{V_C} = \frac{8\pi R^3}{12\sqrt{3}\,(1.633)\,R^3} = 0.74$$

س) التيتانيوم Ti يملك تركيب بلوري HCP وكثافته 4.51 g/cm3
أ) ما هو الحجم لهذه الخلية بوحدة متر مكعب؟
ب) اذا كانت النسبة c/a هي 1.58 ، احسب قيمة c و a ؟
علماً ان الوزن الذري للتيتانيوم A_{Ti} يساوي 47.87 gram/mol

(a) The volume of the unit cell may be computed using

$V_C = \frac{nA}{\rho N_A}$ Now, for HCP, $n = 6$ atoms/unit cell, and for , A = g/mol. Thus,

$$V_C = \frac{(6 \text{ atoms/unit cell})(\quad \text{g/mol})}{(\quad \text{g/cm}^3)(6.022 \times 10^{23} \text{ atoms/mol})} = \quad 10 \quad \text{cm}^3\text{/unit cell} = \quad \times 10 \quad \text{m}^3\text{/unit cell}$$

(b) From Equation 3.S1 of the solution to Problem 3.6, for HCP

$$V_C = 6R^2c\sqrt{3}$$

But, since $a = 2R$, (i.e., $R = a/2$) then $V_C = 6\left(\frac{a}{2}\right)^2 c\sqrt{3} = \frac{3\sqrt{3}a^2c}{2}$

but, since $c = \quad a$ $V_C = \frac{3\sqrt{3}(\quad)a^3}{2} = \quad \times 10 \quad \text{cm}^3\text{/unit cell}$

Now, solving for a $a = \left[\frac{(2)(\quad \times 10 \quad \text{cm}^3)}{(3)(\sqrt{3})(\quad)}\right]^{1/3}$

$= \quad \times 10 \quad \text{cm} = \quad \text{nm}$

And finally

$c = \quad a = (\quad)(\quad \text{nm}) = \quad \text{nm}$

حل اخر:

- Given HCP Ti atom $\rho_{Ti} = 4.51 \text{ gram/cm}^3$ and $\frac{c}{a} = 1.58$ and $A_{Ti} = 47.87$ gram/mol

- Required to calcuate c and a values

For HCP crystal structure:

$$n = 6 \text{ atoms}, a = 2r \;, V = 6 \times \left(\frac{1}{2}a \times \frac{\sqrt{3}}{2}a\right) \times c$$

$$\rho = \frac{n \times A}{N_A \times V}$$

$$4.51 = \frac{6 \times 47.87}{6.023 \times 10^{23} \times 6 \times \left(\frac{1}{2}a \times \frac{\sqrt{3}}{2}a\right) \times c} = \frac{6 \times 47.87}{6.023 \times 10^{23} \times 6 \times \left(\frac{1}{2}a \times \frac{\sqrt{3}}{2}a\right) \times 1.58a}$$

$$a = \left(\frac{2 \times 6 \times 47.87}{4.51 \times 6.023 \times 10^{23} \times 3 \times \sqrt{3} \times 1.58}\right)^{\frac{1}{3}} \times 10^8$$

$$\therefore \; a = 2.953 \overset{o}{A} \quad \text{Then } c = 1.58 \times 2.953 \quad \therefore c = 4.666 \overset{o}{A}$$

c) $V = 6\left[\frac{1}{2}a \times \frac{\sqrt{3}}{2}a\right] \times c =$

$$= \left[\frac{1}{2} \times 2.953 \times 10^{-10} \times \frac{\sqrt{3}}{2} \times 2.953 \times 10^{-10}\right] \times 4.666 \times 10^{-10}$$

س) النيوبيوم Niobium يملك نصف قطر ذري 0.1430 nm وكثافته $8.57\ g/cm^3$. حدد هل تركيبه هو FCC ام BCC ؟

For FCC, $n = 4$, and $a = 2R\sqrt{2}$.
atomic weight is 92.91 g/mol. Thus, for FCC

$$\rho = \frac{nA_{Nb}}{(2R\sqrt{2})^3 N_A}$$

$$= \frac{(4\ \text{atoms/unit cell})(92.91\ \text{g/mol})}{\left\{\left[(2)(1.43\times 10^{-8}\ \text{cm})(\sqrt{2})\right]^3/(\text{unit cell})\right\}(6.023\times 10^{23}\ \text{atoms/mol})}$$

$$= 9.33\ \text{g/cm}^3$$

For BCC, $n = 2$, and $a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$, thus

$$= \frac{(2\ \text{atoms/unit cell})(92.91\ \text{g/mol})}{\left\{\left[\frac{(4)(1.43\times 10^{-8}\ \text{cm})}{\sqrt{3}}\right]^3/(\text{unit cell})\right\}(6.023\times 10^{23}\ \text{atoms/mol})}$$

$$= 8.57\ \text{g/cm}^3$$

which is the value provided in the problem statement. Therefore, Nb has a BCC crystal structure.

س) تركيب بلوري يملك تركيب مكعب بسيط لـه وزن ذري 74.5 g/mol ونصف قطر ذري 0.145 nm. احسب كثافته؟

$$\rho = \frac{nA}{V_C N_A} = \frac{nA}{(2R)^3 N_A}$$

$$\rho = \frac{(1\ \text{atom/unit cell})(\quad \text{g/mol})}{\left\{\left[(2)(\quad\times 10\quad \text{cm})\right]^3/(\text{unit cell})\right\}(6.022\times 10^{23}\ \text{atoms/mol})} = \qquad \text{g/cm}^3$$

س) زركونيوم *Zirconium* يملك تركيب بلوري *HCP* وكثافة $6.51\ g/cm^3$.
أ- ما هو حجم خلية الوحدة بوحدة m^3 ؟
ت- اذا كانت النسبة c/a هي 1.593 ، احسب قيمة a & c ؟

(a) The volume of the Zr unit cell may be computed using Equation 3.5 as

$V_C = \frac{nA_{Zr}}{\rho N_A}$ Now, for HCP, $n = 6$ atoms/unit cell, and for Zr, $A_{Zr} = 91.22$ g/mol. Thus,

$$V_C = \frac{(6\ \text{atoms/unit cell})(91.22\ \text{g/mol})}{(6.51\ \text{g/cm}^3)(6.022\times 10^{23}\ \text{atoms/mol})} = 1.396\times 10^{-22}\ \text{cm}^3/\text{unit cell} = 1.396\times 10^{-28}\ \text{m}^3/\text{unit cell}$$

(b) From Equation 3.S1 of the solution to Problem 3.6, for HCP

$$V_C = 6R^2c\sqrt{3}$$

But, since $a = 2R$, (i.e., $R = a/2$) then $V_C = 6\left(\frac{a}{2}\right)^2 c\sqrt{3} = \frac{3\sqrt{3}\,a^2c}{2}$

but, since $c = 1.593a$ $V_C = \frac{3\sqrt{3}\,(1.593)\,a^3}{2} = 1.396\times 10^{-22}\ \text{cm}^3/\text{unit cell}$

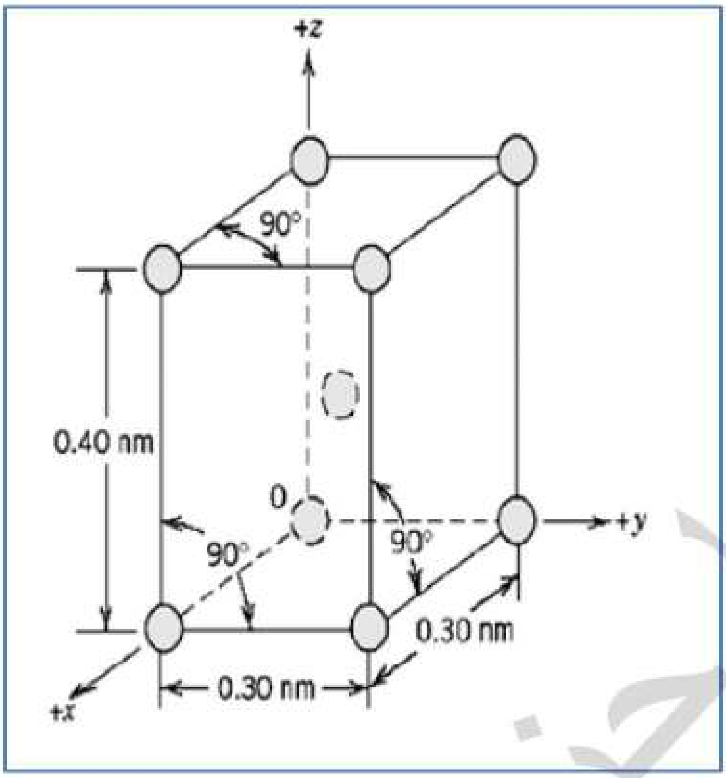
Now, solving for a $a = \left[\frac{(2)(1.396\times 10^{-22}\ \text{cm}^3)}{(3)(\sqrt{3})(1.593)}\right]^{1/3}$

$$= 3.23\times 10^{-8}\ \text{cm} = 0.323\ \text{nm}$$

$$c = 1.593a = (1.593)(0.323\ \text{nm}) = 0.515\ \text{nm}$$

س) في التركيب البلوري الموضح في الشكل
أ) الى أي نظام بلوري ينتمي هذا التركيب؟
ب) ماذا يدعى التركيب البلوري لخلية الوحدة هذه؟
جـ) احسب كثافة المادة، اذا كان الوزن الذري يساوي 141 g/mol .
الجواب:

أ) نظام رباعي Tetragonal



ب) تركيب بلوري رباعي متمركز الجسم
Body – centered Tetragonal

جـ)

$$\rho = \frac{n\,A}{V_C N_A}$$

Where:
N=2 ------ عدد الذرات في خلية الوحدة
A = 141 g/mol ------ الوزن الذري
V_C = حجم خلية الوحدة= مساحة القاعدة في الارتفاع
N_A= عدد افكادروا (6.023 * 10^{23} atoms/mol)

$$V_C = (3\times10^{-8})^2(4\times10^{-8}) = 3.6\times10^{-23}\ \ cm^3/\,unitcell$$

$$\rho = \frac{2\times141}{3.6\times10^{-23}\times6.023\ \times10^{-23}} = 13\ \ g\,/\,cm^3$$