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 الاوجه (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 لاوي، 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 هول، المعادن، العوازل، اشباه الموصلات.

6- العيوب البلورية

العيوب النفطية – الثغرات – عيوب شوتكي – عيوب فرنكل – العيوب الخطية – الانخلاعات – الانخلاع الحافي – 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 إضافية:

- 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.

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 الاوجه (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
- الواد 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:

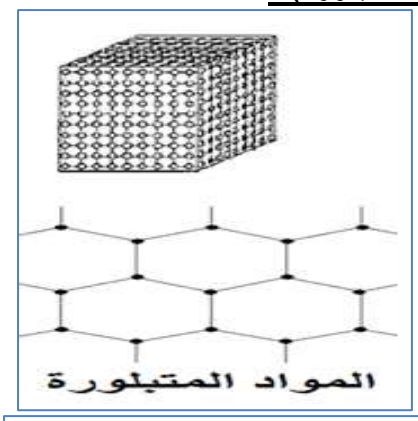
- المواد البارامغناطيسية
- المواد الدايامغناطيسية
- المواد الفيرومغناطيسية

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

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

د. رضا حزام رسن

الحالة البلورية والحالة غير البلورية (المواد الصلبة المتبلورة وغير المتبلورة) :

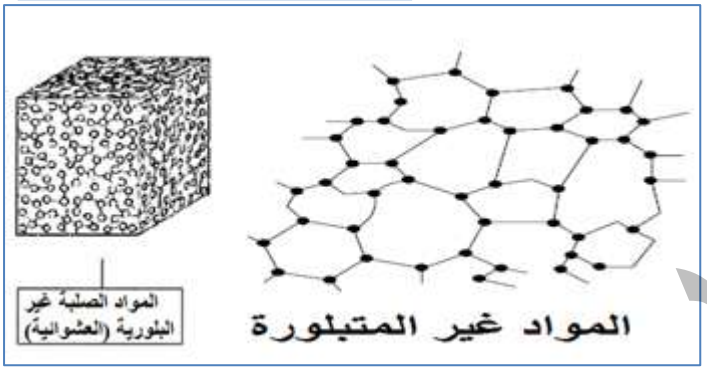


المواد البلورية (المتبلورة) Crystalline : تحوي صفوفا من الذرات المتجمعة والمرتبة بشكل دوري مكونة تشكيلة pattern ثلاثية الابعاد (وتشكل نمطاً هندسياً دورياً). ويمكن اعتبار تركيبها تكرار لنموذج او خلية الوحدة unit cell الثلاثية الابعاد. ومن هذه المواد هي الحديد والذهب وكلوريد الصوديوم وغيرها.

فالمواد الصلبة البلورية 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 .

المواد غير المتبلورة:

non–Crystalline : 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).

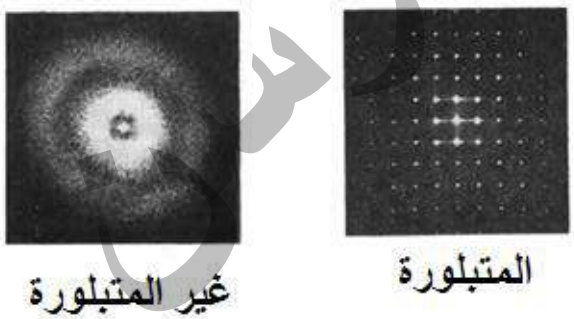


-بعض العناصر والمركبات يمكن ان توجد بصيغة المواد الصلبة المتبلورة والمواد الصلبة غير المتبلورة مثل الجرمانيوم والسيليكون. تبعاً لطريقة تحضير هذه المواد او كيفية تكونها.

- 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.



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.

مصطلحات اساسية :

علم البلورات Crystallography: هو العلم الذي يهتم بدراسة المواد الصلبة بجميع اشكالها وظواهرها.

البلورة : 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 **الدورية** وفي الابعاد الثلاثة والى ما لانهاية 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.

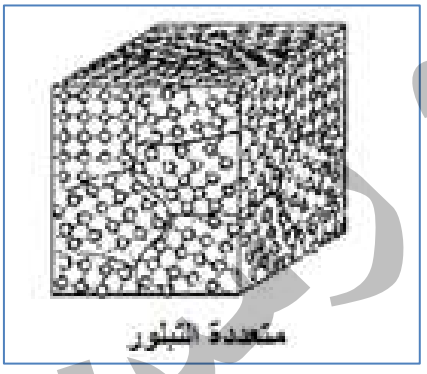
ان اساس البناء البلوري هو التكرار وهناك بلورات على انواع:

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

2- البلورات المثالية Perfect crystal 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- **البلورة الاحادية Single crystal**: حيث تمتد دورية التشكيلية او النموذج البلوري الثلاثي الابعاد خلال البلورة باكملها.



ب- **البلورة متعددة التبلور Polycrystalline:** حيث لا تمتد دورية النموذج البلوري خلال البلورة باكملها بل تنتهي عند حدود داخل البلورة تدعى **بحدود الحبيبات grain 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 التوزيع العشوائي لها. وعموماً إذا لم تتح لذرات المادة فرصة ترتيب نفسها كما ينبغي، كأن تكبح حركتها فإنه يمكن أن تتكون مادة غير بلورية.

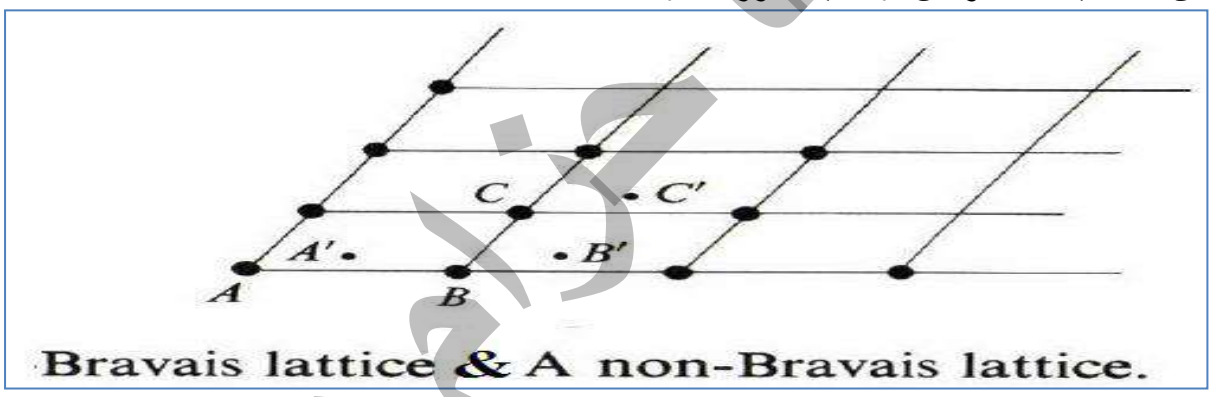
في حالات أخرى لا تتاح الفرصة لنمو بلورات من سوائل عالية اللزوجة عند تبريدها بسرعة، حيث يؤدي التبريد الفائق Supercooling الى تجميد السائل بنفس النمط غير الدوري لترتيب جزيئاته. لكن مثل هذه المواد الزجاجي يمكنها اكتساب الحالة البلورية بصورة كلية أو جزئية، عن طريق معالجتها حرارياً وهي عملية تسخين، تسمى التلدين أو التخميرAnnealing 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'A،B'B، & C'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.

د. رضا حزام رسن

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 $\vec{a_1}$ ، $\vec{a_2}$ ، $\vec{a_3}$)

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_3 ، n_2 ، n_1 اعداد صحيحة اختيارية.

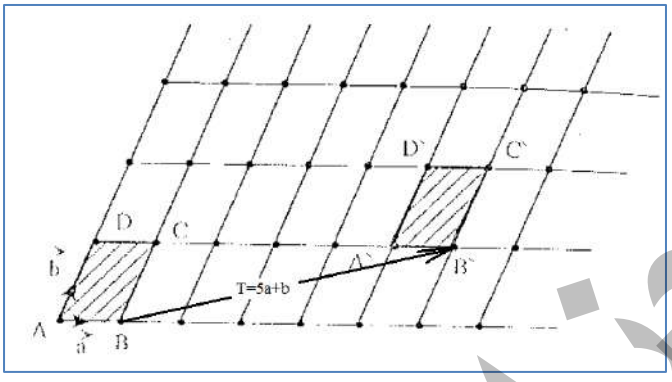
والمؤثر الانتقالي $\vec{T}$ يربط اي موقعين داخل البلورة بحيث تبدو الذرات المحيطة بهذين الموقعين متماثلة ولهذا يسمى بالمؤثر الانتقالي او المؤثر الزحفي.

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

$$\vec{r'} = \vec{r} + \vec{T} \quad .....(2)$$

بتعويض (1) في (2) ينتج :

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



اي ان الترتيب يبقى نفسه بالنسبة الى النقطة المعبر عنها بالمتجه $\vec{r'}$ عند مشاهدتها من نقطة اخرى 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 $\grave{A}\grave{B}\grave{C}\grave{D}$

- ✓ 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 تُكون اشكالاً لمتوازيات السطوح تسمى خلية وحدة اولية primitive unit cell.
- ✓ اما المحاور غير الاولية للشبيكة فتُكون ايضا اشكالاً لمتوازيات السطوح تسمى خلية وحدة غير اولية non-primitive unit cell
- ✓

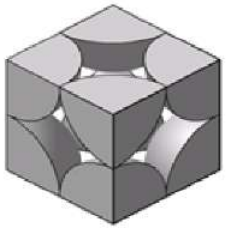
وحدة الخلية Unit Cell: هي اصغر وحدة في الشبيكة تملأ الفضاء بتأثير المؤثر $\vec{T}$ ويُكون شبيكة كاملة. (وهي أصغر وحدة في الشبيكة الفراغية وهي الوحدة التي بتكرارها في الاتجاهات الثلاثة ينتج عنها البلورة). وحجم وحدة الخلية يعطى:

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

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

وتوجد طرق عديدة لاختيار المحاور الاولية اي عدة طرق لاختيار خلية الوحدة الاولية لشبيكة ما.

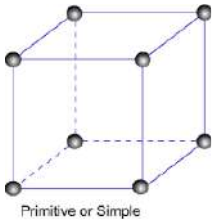
والمهم هنا اجراء عملية الضرب الاتجاهي (cross) اولا ثم الضرب النقطي dot.



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

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

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.

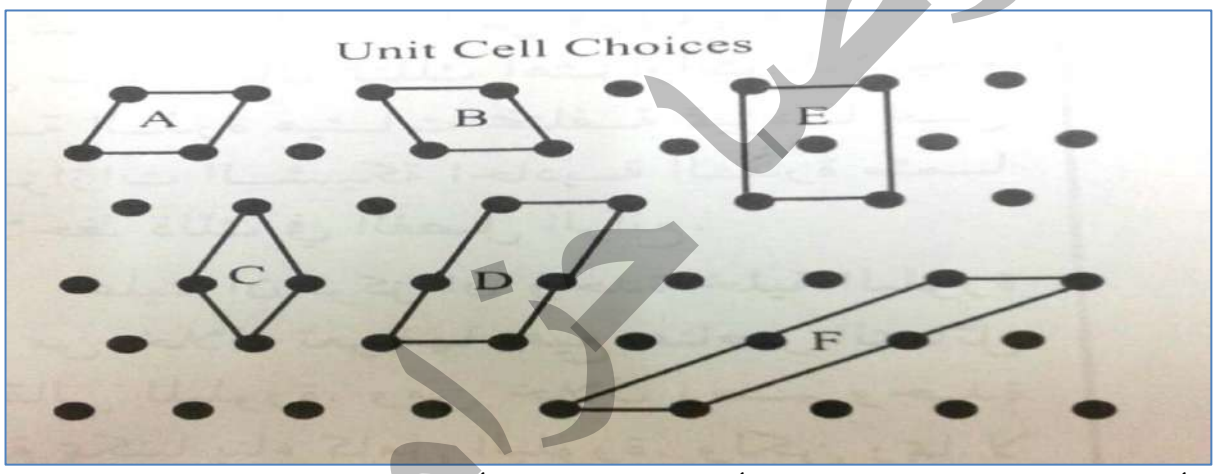


أي ان الذرات الثمانية ستساهم كل ذرة منها بثمن $\left(\frac{1}{8}\right)$ وبذلك ستحتوي الخلية البدائية على نقطة شبيكة واحدة او ذرة واحدة. $8 \times \frac{1}{8} = 1$

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.

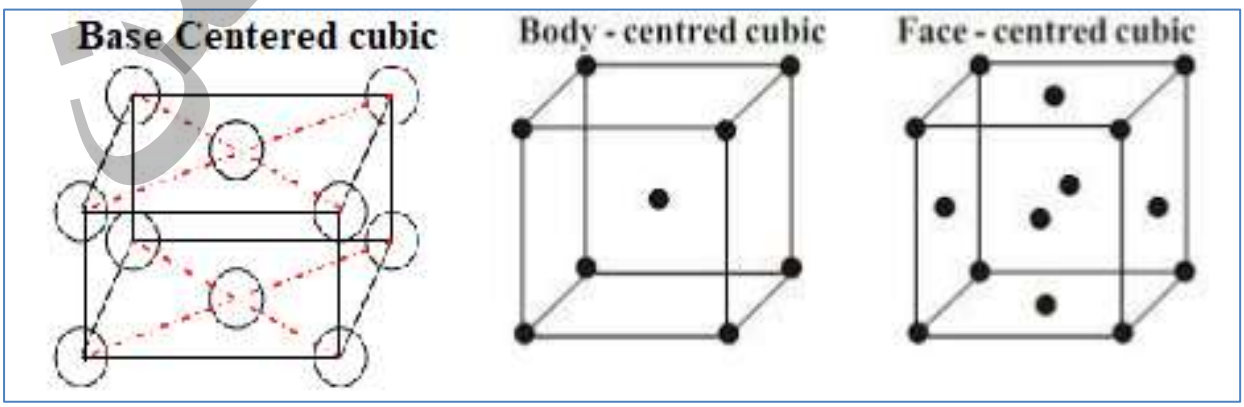
وحدة الخلية أولية كما في الخلايا A، B و C.

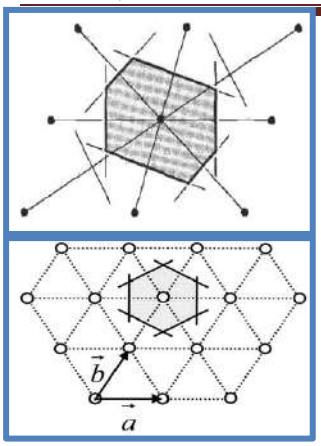
وحدة الخلية غير أولية كما في E، D، F.



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 الشبيكة 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 $\vec{T}$ هي ليست العملية الوحيدة التي تتميز بها البلورة بل هناك **عمليات** اخرى ومنها :

العناصر الاساسية للتماثل هي :

عملية الدوران Rotation — **1- محور تماثل دوراني مناسب**
عملية الانعكاس Reflection — **2- محور تماثل دوراني غير مناسب**
عملية الانقلاب Inversion — **3- مستوى التماثل**
4- مركز التماثل

1- محور التماثل الدورانى 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) $\text{Ø} = 90^0$.

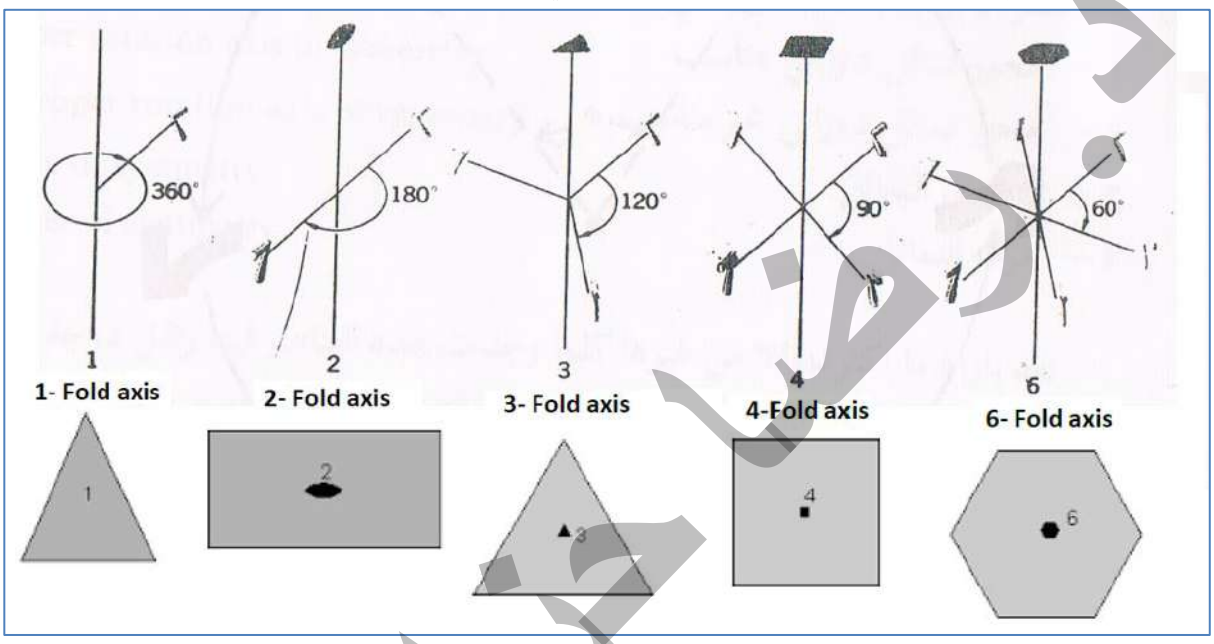
- حيث يعرف المحور الدوراني الثنائي الثنية بانه محور ثنائي التماثل (Diad) حيث تتكرر الاشكال المتشابهة فيه مرتين خلال الدورة الكاملة بعد كل تدوير بزاوية $180°$

- 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.

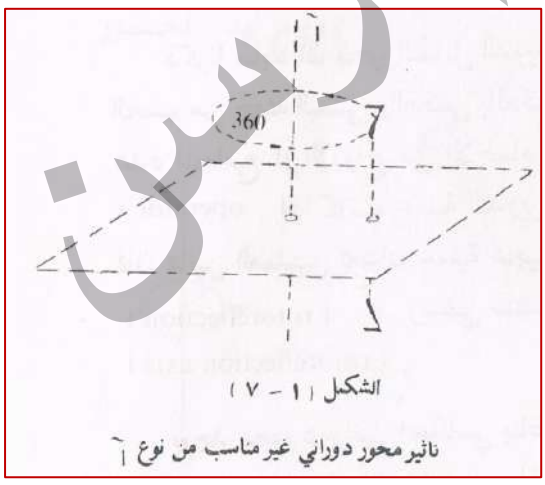


2- محور التماثل الدوراني غير المناسب (المحور الدوراني الانعكاسي)(العملية الدورانية الانعكاسية):

وهو حدوث عملية تدوير تعقبها او تليها عملية انعكاس لكي يكرر الجسم نفسه اي انها عملية هجينة واحدة (دوران + انعكاس) وتسمى بالعملية الدورانية الانعكاسية ويسمى 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 (١ - ٧)



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

المحور الدوراني الانعكاسي $(\bar{1})$

المحور الدوراني الانعكاسي 1 يُدور أي جسم خلال زاوية صفر او 360 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.

د. رضا حزام رسن

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

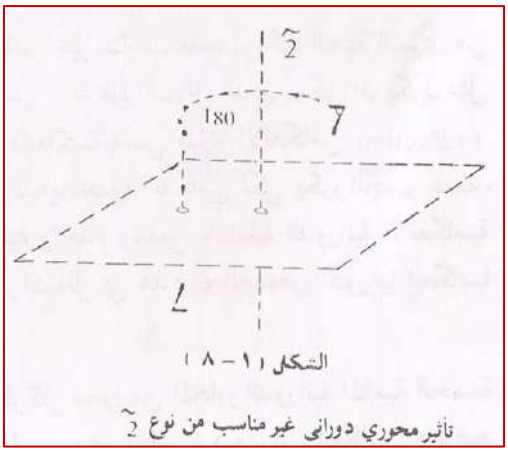
اذا كان الجسم يَدور بزاوية 180 درجة حول محور وهمي عمودي على سطح وهمي افقي

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

$$n = 2$$

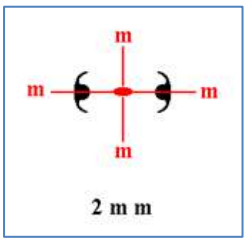
يَعقب ذلك انعكاس من خلال السطح الوهمي.

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



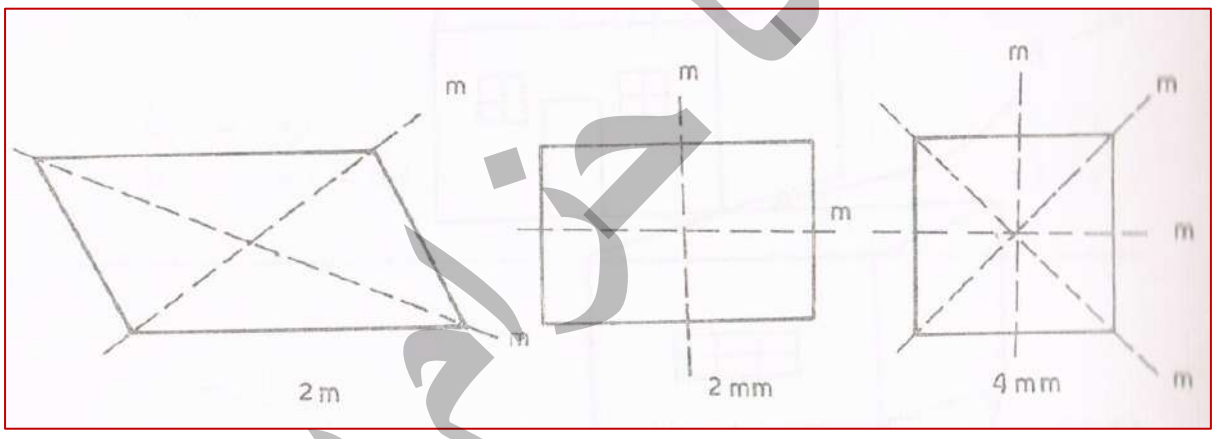
الشكل (١-٨)
تأثير محوري دوراني غير مناسب من نوع $\tilde{2}$

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

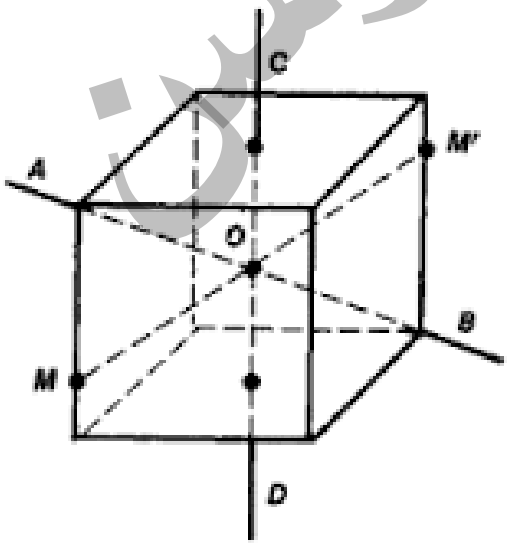


وهو مستوى وهمي يقسم الجسم او البلورة الى نصفين متشابهين بحيث يكون احد النصفين صورة مرآة للنصف الاخر مثل جسم الانسان لو قسم الى نصفين متساوين بصورة طولية. ويرمز لهذه العملية (mirror)(m).

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



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 فأنه 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.

محور التماثل الانقلابي (Inversion axis of Symmetry)
(المحور الدوراني الانقلابي) (rotoinversion axis):

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 (six – bar) (four – bar) (one – 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 اخذين بنظر الاعتبار الإشارة السالبة. والمحور الدوراني الانقلابي هو عملية واحدة ذات مرحلتين متعاقبتين تبدأ بمرحلة التدوير (ولا يعود الجسم لوضعه الأصلي) ولكن يَعقب ذلك مرحلة الانقلاب وعند الانتهاء نحصل على التماثل او التكرار أي عودة الجسم الى وضعه الأصلي.

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

مجاميع نقط التماثل Point groupe symmetry : 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 .

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 :

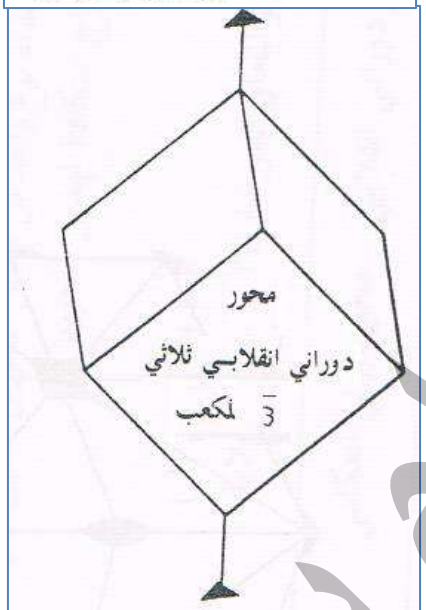
ثلاثة محاور دورانية رباعية

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.

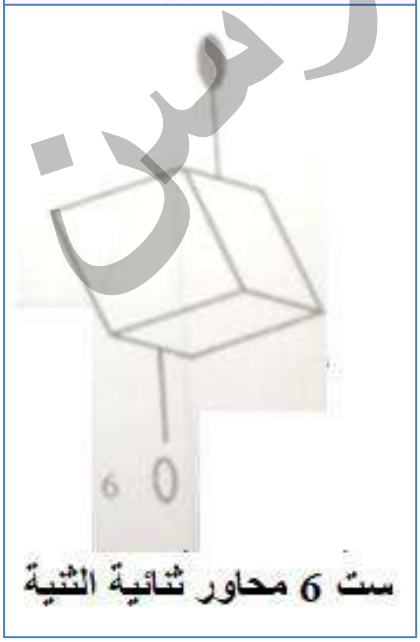
3- **تماثل دوراني ثنائي 2** حول محاور قطرية موازية لاقطار أوجه المكعب ومارة في مركز المكعب، أي محاور تصل بين منتصفات اضلاع المكعب المتقابلة والبعيدة وينصف كل محور الزاوية بين محورين بلوريين. ان عدد هذه المحاور ستة محاور.

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.

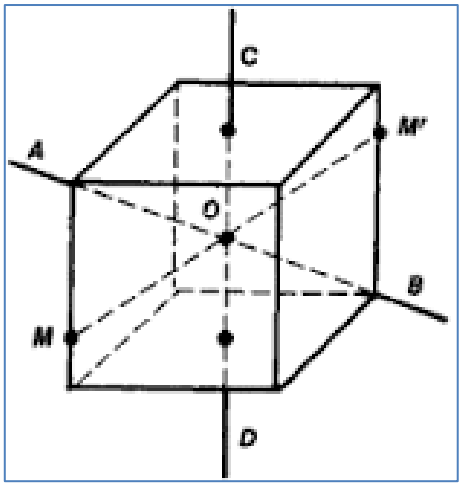
5- للمكعب مركز تماثل او انقلاب $\bar{1}$ هو مركز المكعب نفسه.
ان عناصر التماثل في المكعب تمثل اعلى درجة ممكنة من التماثل بالنسبة لبقية أصناف الأنظمة البلورية.

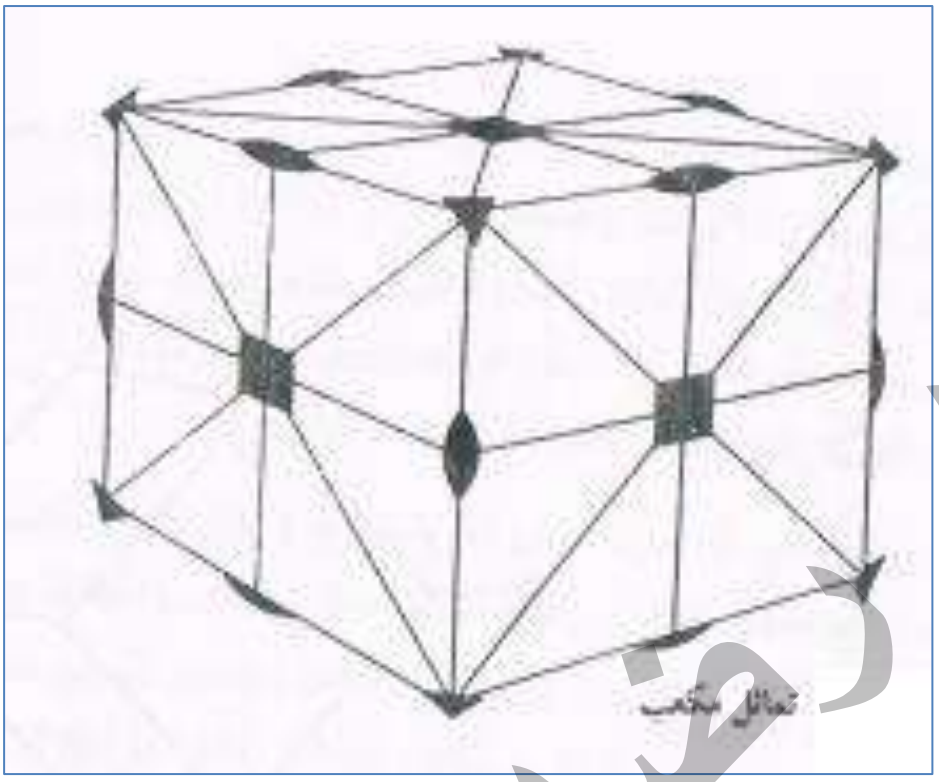


ست 6 محاور ثنائية الثنية

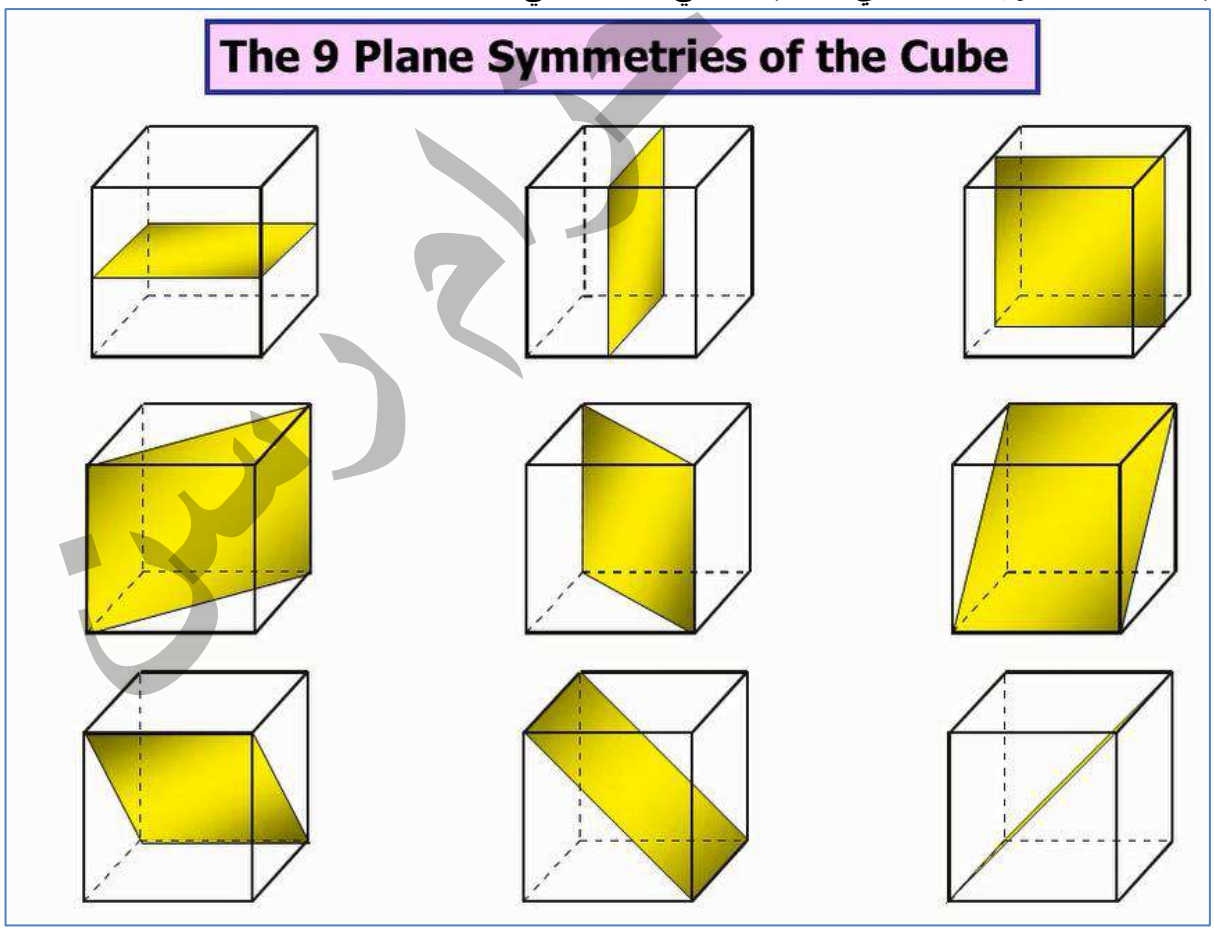
ملاحظة: لمزيد من التوضيح الاطلاع:

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



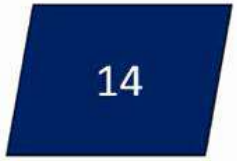


في البلورة المكعبة هناك ثلاث مستويات تماثل كل منها يوازي وجهيين متقابلين من المكعب. والمكعب يملك **تسعة مستويات تماثل في المكعب** كما في الشكل التالي:



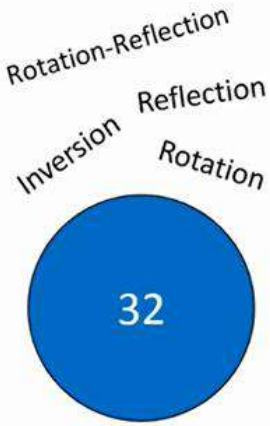
Space groups

Combination of



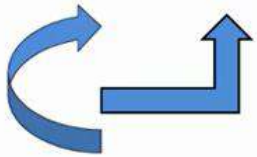
Bravais lattices

with



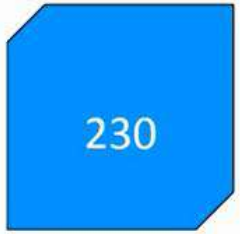
Point groups

and



screw and glide symmetry

gives



Space groups

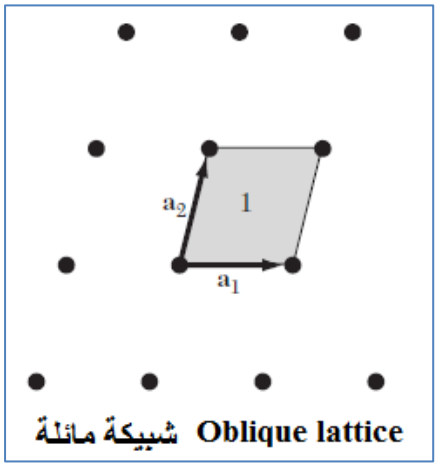
dimensions	1	2	3	4	5	6
no. of 'space' groups	2	17	230	4894	~220 k	~29 mill

د. رضا حزام رسن

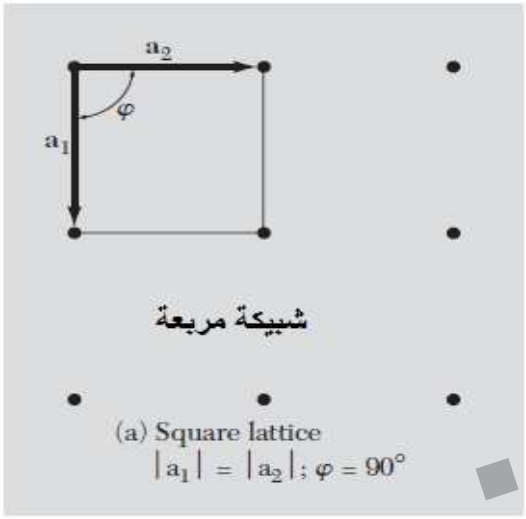
الشبائك المستوية :

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 : $\vec{a} \neq \vec{b}$ ، $\emptyset \neq 90^{\circ}$

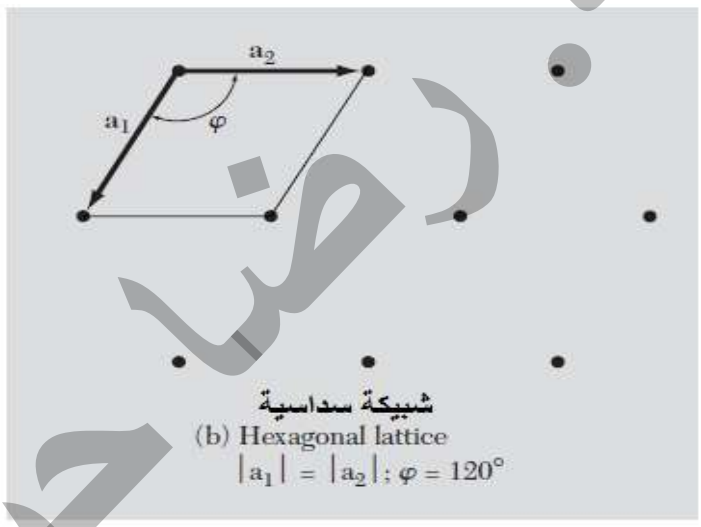


شبيكة مائلة Oblique lattice



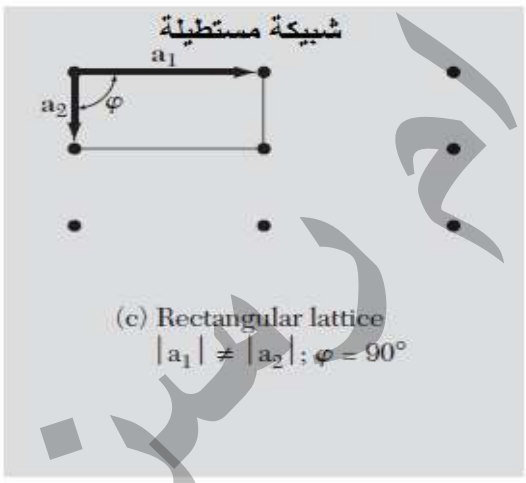
شبيكة مربعة

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

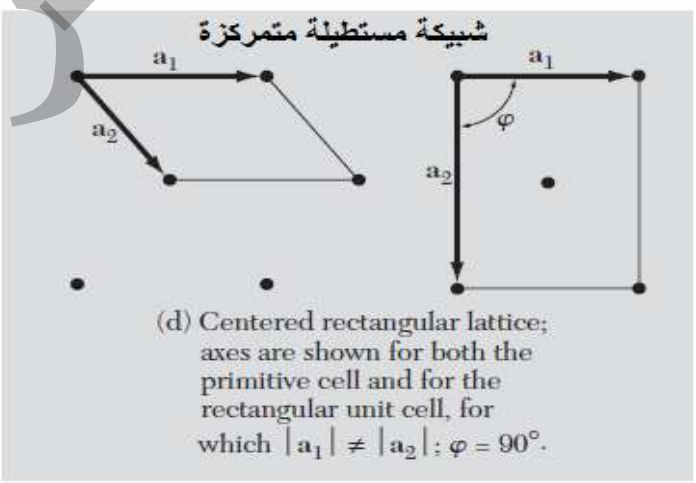


شبيكة سداسية

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

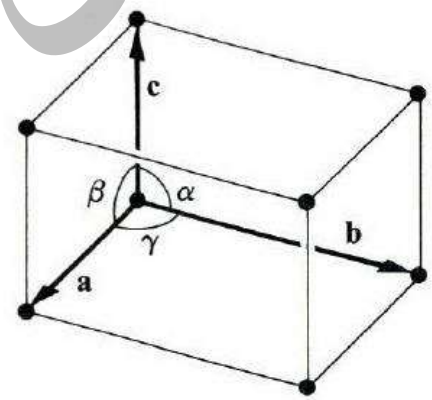


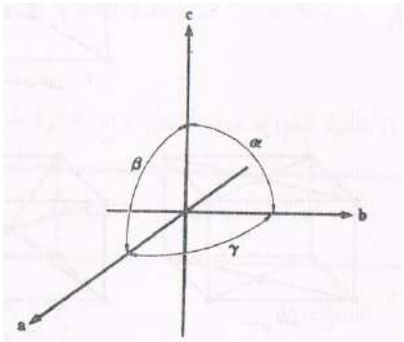
(c) Rectangular lattice
$|a_1| \neq |a_2|; \varphi = 90^{\circ}$



(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$)$.

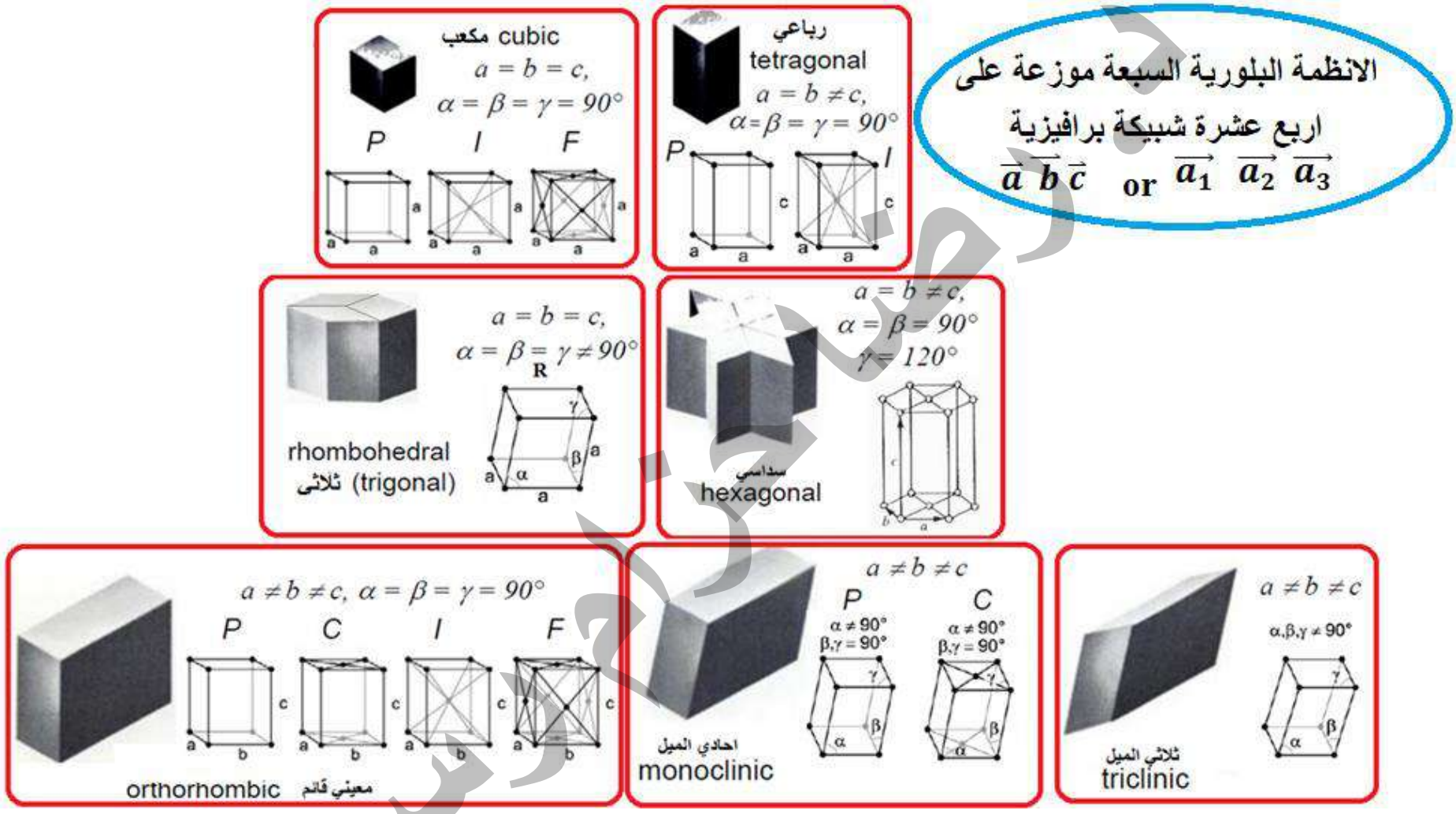
رابعاً: شبائك متمركزة الجانب او القاعدة Base or Side Centered Lattice : يمتاز هذا النوع باحتوائه على $\frac{1}{8}$ نقطة شبيكة في اركانه الثمانية بالاضافة الى $\frac{1}{2}$ نقطة شبيكة في وجهين متقابلين من وجوهه الستة وبالتالي فان مجموع ما يحتويه من نقاط هو نقطتين $(8 * \frac{1}{8} + 2 * \frac{1}{2} = 2$ 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:

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

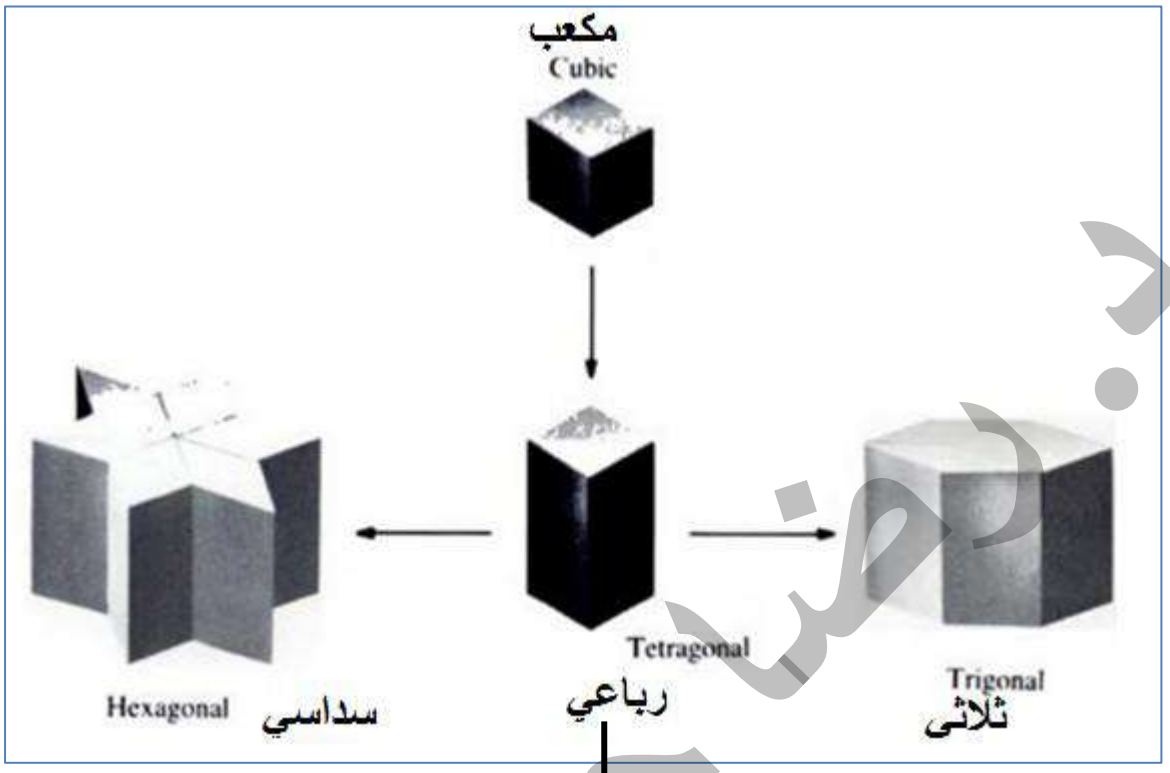
د. رضا حزام رسن

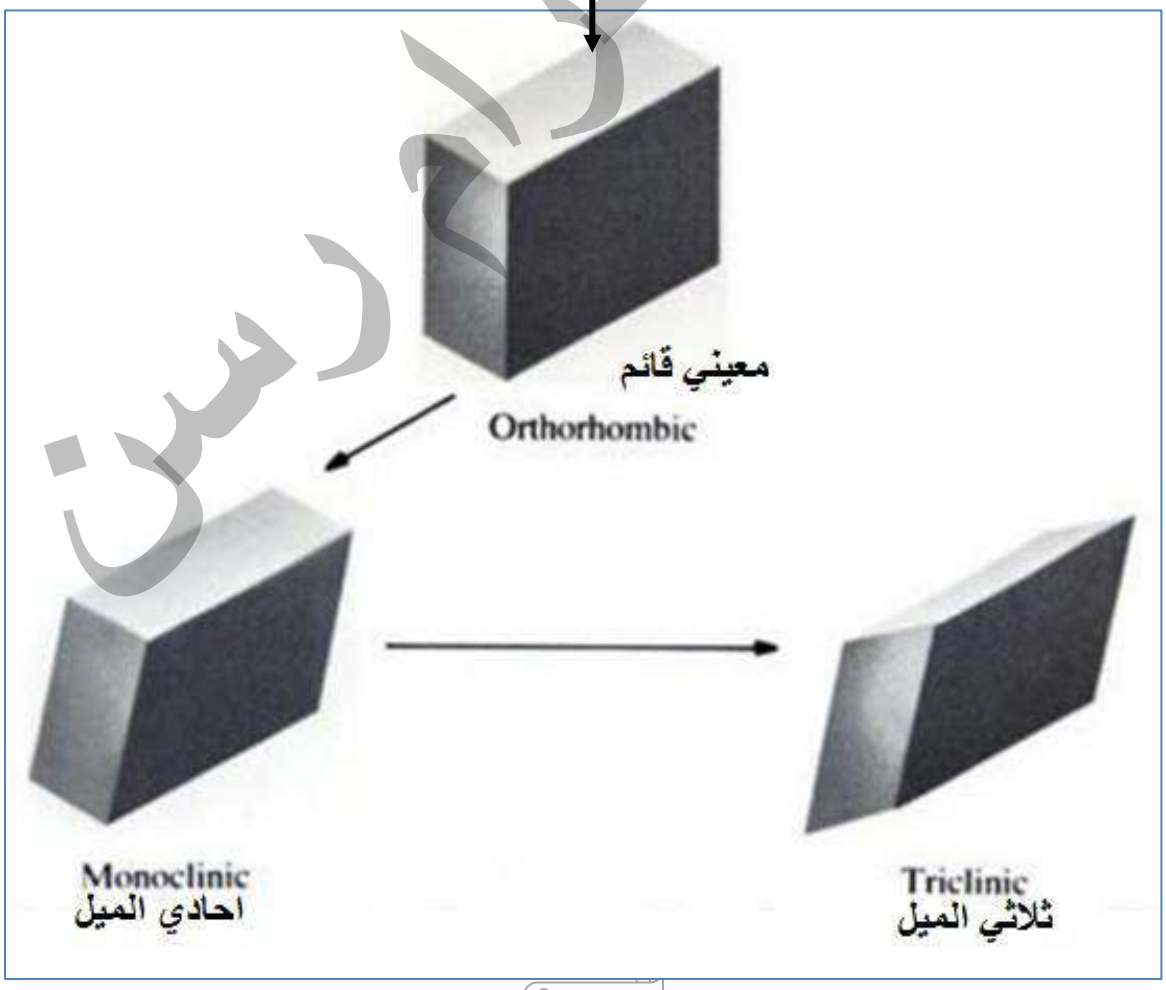

الانظمة البلورية السبعة موزعة على
اربع عشرة شبيكة برافيزية
$\vec{a}\ \vec{b}\ \vec{c}$ or $\vec{a_1}\ \vec{a_2}\ \vec{a_3}$
مكعب cubic
$a = b = c,$
$\alpha = \beta = \gamma = 90°$
P I F
رباعي
tetragonal
$a = b \neq c,$
$\alpha = \beta = \gamma = 90°$
P I
$a = b = c,$
$\alpha = \beta = \gamma \neq 90°$
R
rhombohedral
ثلاثي (trigonal)
$a = b \neq c,$
$\alpha = \beta = 90°$
$\gamma = 120°$
سداسي
hexagonal
$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90°$
P C I F
orthorhombic
معيني قائم
$a \neq b \neq c$
P C
$\alpha \neq 90°$
$\beta,\gamma = 90°$
احادي الميل
monoclinic
$a \neq b \neq c$
$\alpha,\beta,\gamma \neq 90°$
ثلاثي الميل
triclinic

	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

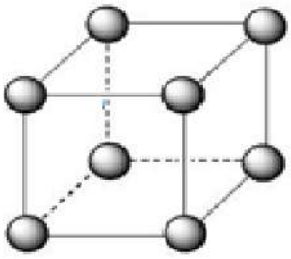


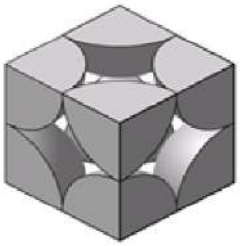


د. رضا حزام رسن

ميزات الشبائك المكعبة : يتضمن نظام المكعب ثلاثة انواع من الشبائك هي :

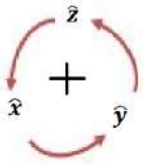
1- مكعب بسيط Simple Cubic (P) (sc أو SC) :





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

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



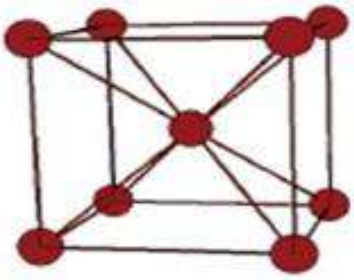
س) اثبت ان حجم خلية الوحدة الاولية لمكعب بسيط sc يساوي a^3 ؟

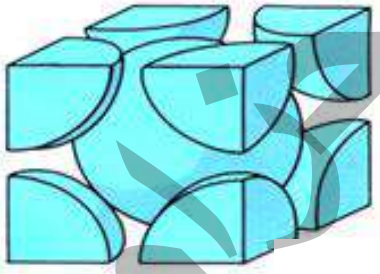
$$\vec{a} = a\hat{x} \quad \vec{b} = a\hat{y} \quad \vec{c} = a\hat{z}$$

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

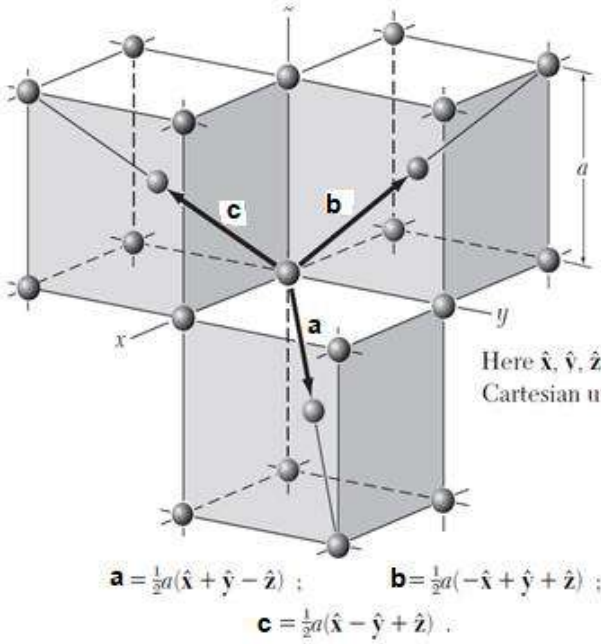
$$V = a^3$$

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



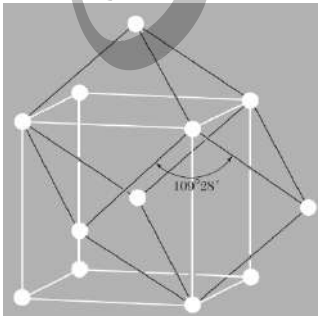


وهو يحتوي على نقطتين واحدة في الاركان وواحدة في مركز الخلية وهي من الشبائك غير الاولية لانه خلية الوحدة له غير اولية.



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 $\vec{a}$ ، $\vec{c}$ ، $\vec{b}$ وتحدث مع بعضها زاوية مقدارها (109^o) تقريبا.

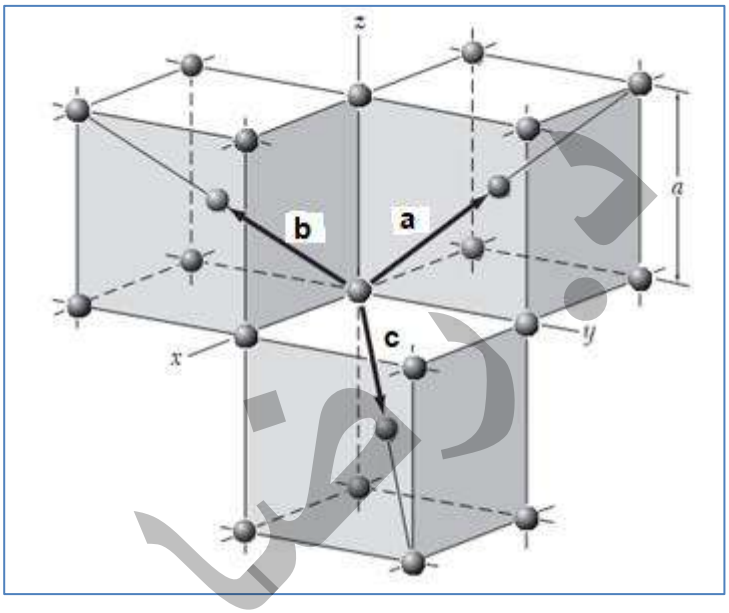


س/ اثبت ان حجم الخلية الاولية لشبيكة مكعب متمركز الجسم bcc يساوي $\left(\frac{1}{2}\right)$ حجم خلية الوحدة الاعتيادية لنفس الشبيكة.

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

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

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



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

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

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

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

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

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

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

$\because$

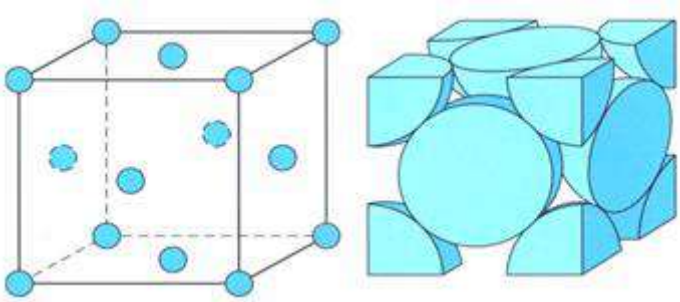
$$\hat{x} \cdot \hat{x} = |\hat{x}||\hat{x}|cos0 = 1$$

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

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

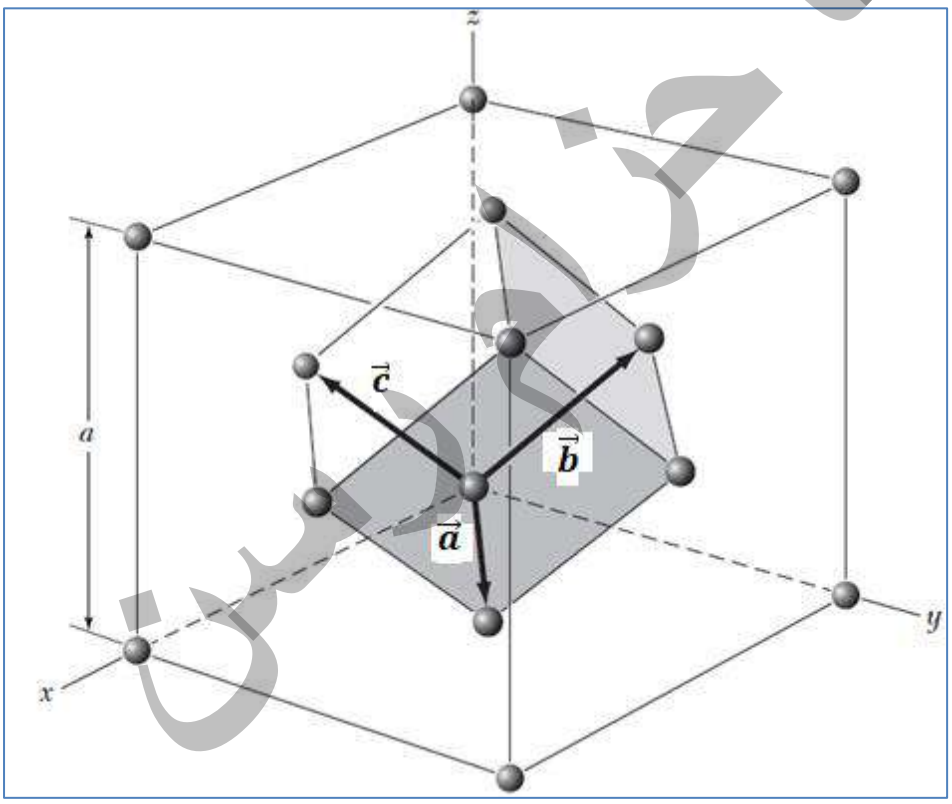
$$\therefore V = |\vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c}| = \left(\frac{a^3}{4}\right) + \left(\frac{a^3}{4}\right) = \frac{2a^3}{4} = \frac{a^3}{2} = \frac{1}{2}a^3$$

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

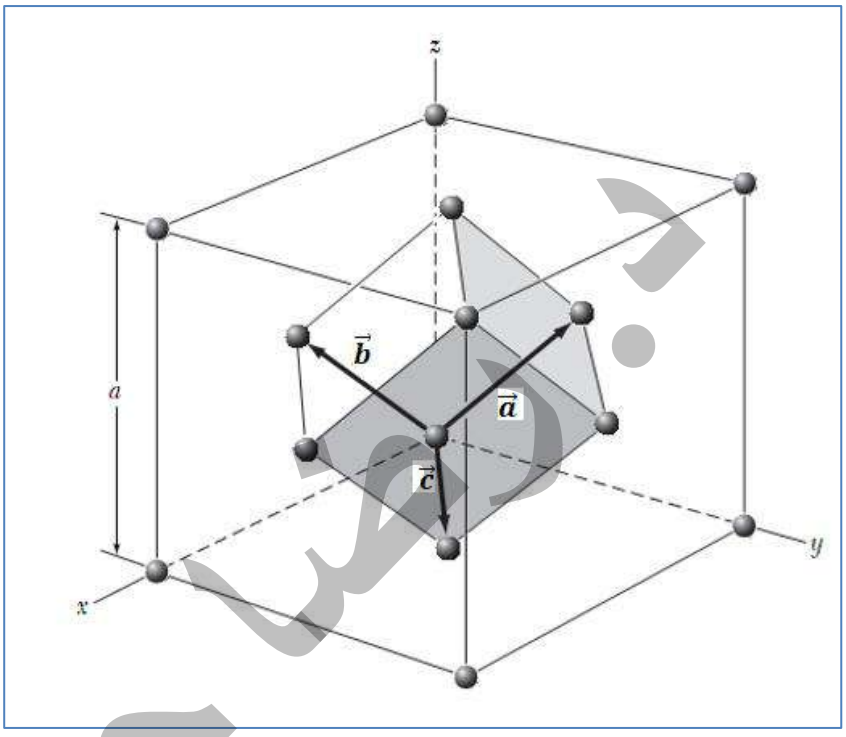


$$\vec{a} = \frac{1}{2}\mathbf{a}(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}})$$

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

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

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



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

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

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

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

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

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

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

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

$$\hat{x} \cdot \hat{x} = |\hat{x}||\hat{x}|cos0 = 1$$
$$\hat{x} \cdot \hat{y} = |\hat{x}||\hat{y}|cos90 = 0$$

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

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

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

د. رضا حزام رسن

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.

$$\text{نسبة الرص (الملء)} = \frac{\text{حجم الذرة الواحدة} * \text{عدد الذرات في خلية الوحدة}}{\text{حجم خلية الوحدة}} * 100\%$$

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

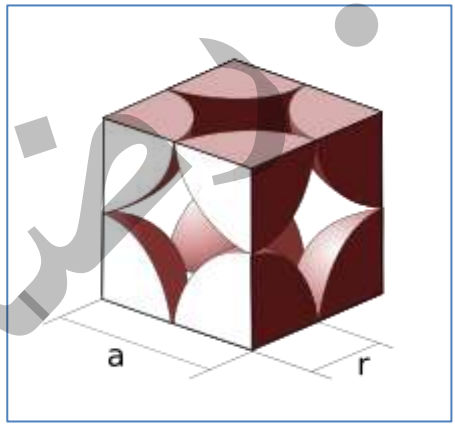
مثال1: احسب نسبة الملىء نسبة الرص (نسبة التنضيد) في تركيب مكعب بسيط SC ؟

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

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

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

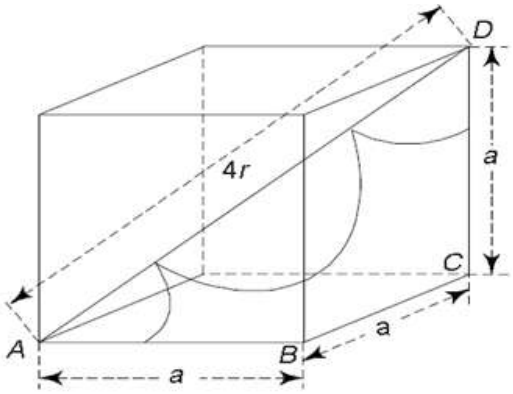
$$= \frac{\pi}{6} \approx 0.5236$$



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



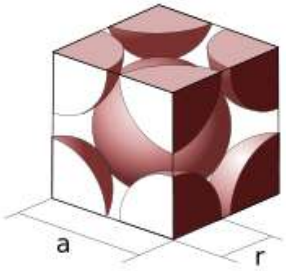
$$AC^2 = AB^2 + BC^2 = a^2 + a^2 = 2a^2$$
$$AD^2 = AC^2 + CD^2 = 2a^2 + a^2 = 3a^2$$
$$\therefore \quad (4r)^2 = 3a^2$$

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

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

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

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

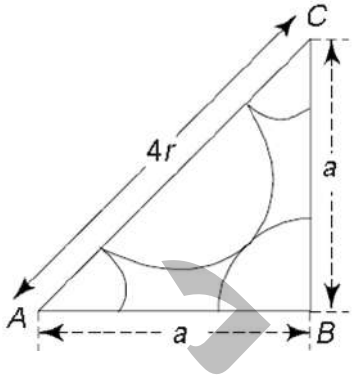


د. رضا حزام رسن

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

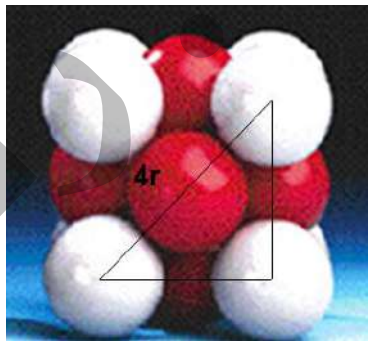
Solution: $V_{crystal} = a^3$

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



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

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

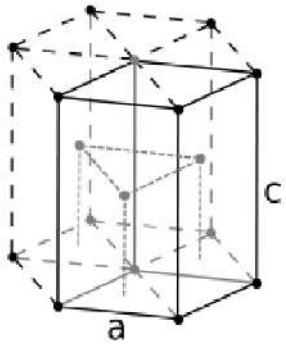


The packing fraction is

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

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

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

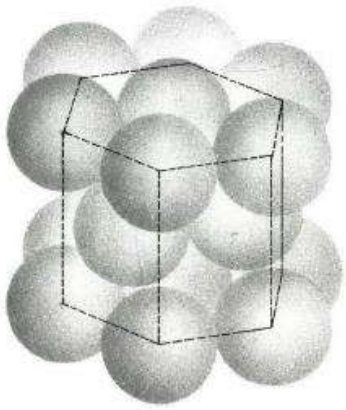


$$\boldsymbol{APF = \frac{N_{atoms}V_{atom}}{V_{crystal}} = \frac{6\cdot\frac{4}{3}\pi r^3}{\frac{3\sqrt{3}}{2}a^2c}}$$

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

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

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

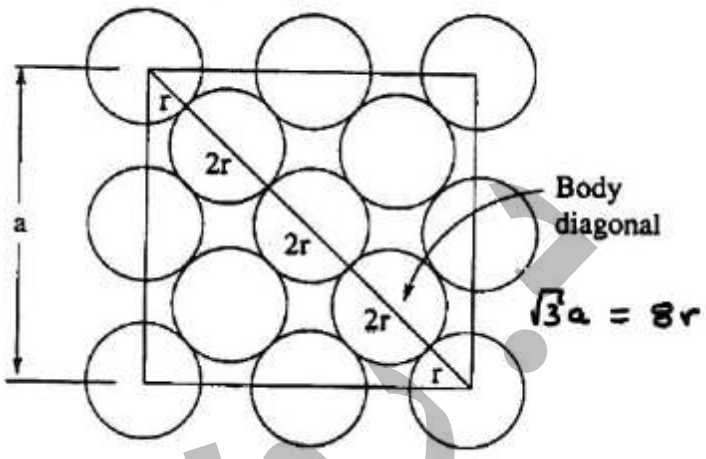


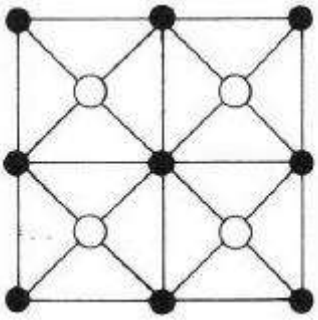
مثال5: احسب نسبة الملىء نسبة الرص (نسبة التنضيد) في الماس Diamond؟

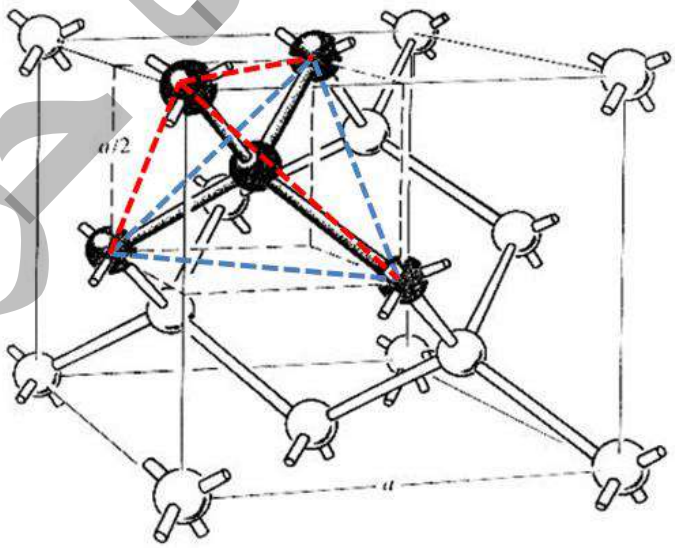
الشكل يوضح تركيب الماس كما يُنظر لها من الاعلى
عدد الذرات في تركيب الماس هو
$8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 + 4 = 8,$
من الاركان ومن الاوجه ومن الداخل على التوالي
طول نصف القطر هو $\sqrt{3}a/8$
لذا فان نسبة الرص تعطى

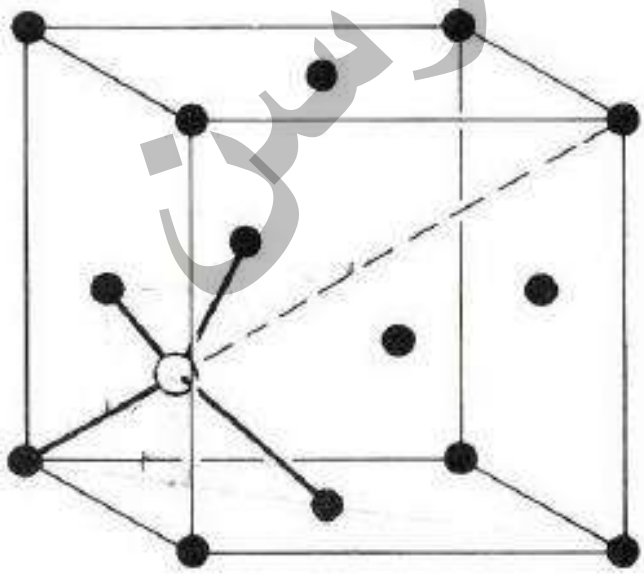
$$P.f_{\cdot diamond} = \frac{\cdot atoms}{V_{diamond}} = \frac{8 \times (4\pi/3)r^3}{a^3} = \frac{8 \times (4\pi/3) \times (\sqrt{3}a/8)^3}{a^3} = \frac{\sqrt{3}\pi}{16} \approx 0.34.$$

Diamond: الماس









معاملات الاوجه (الادلة) Indices of the face

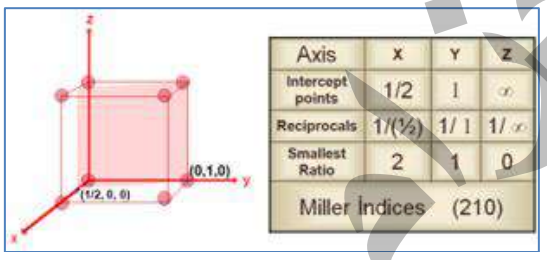
لدراسة التركيب البلوري يكون من الضروري ان نتخيل البلورة وكانها شبيكة من مجاميع من الاوجه او السطوح الذرية المتوازية وهذه السطوح توصف بدلالة معاملات او ادلة تدعى indices وهي عبارة عن رموز او قيم مختصرة مشتقة اساساً من الاحداثيات او التقاطعات البلورية parameters لذلك الوجه لتعبر عن وضعيته وعلاقته بالمحاور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

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

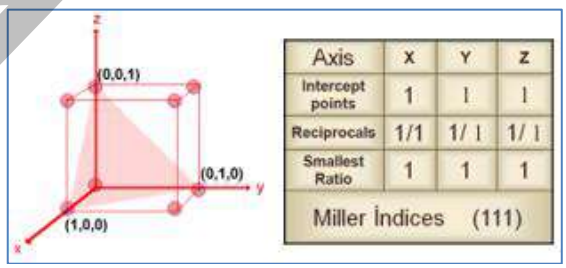
ولايجادها نتبع الخطوات الاتية :

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

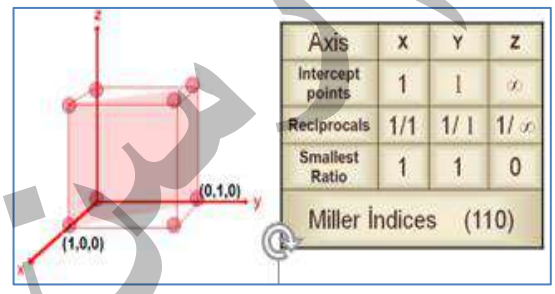
مثال (1): جد معاملات ميلر للسطوح الموضحة في الاشكال الاتية؟



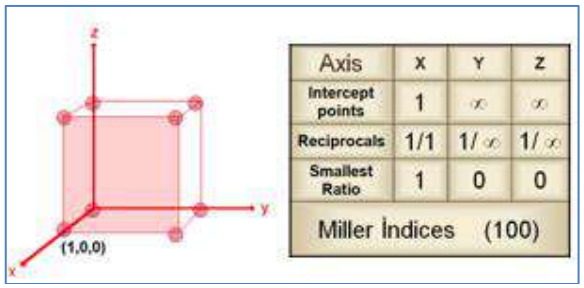
Axis	x	Y	z
Intercept points	1/2	1	∞
Reciprocals	1/(½)	1/ 1	1/ ∞
Smallest Ratio	2	1	0
Miller Indices	(210)		



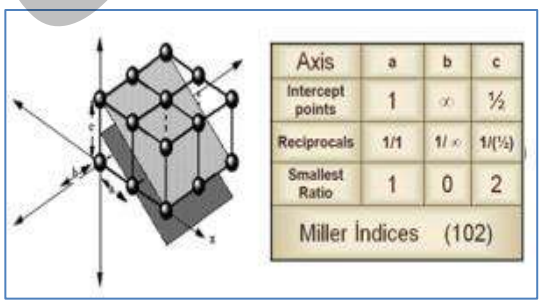
Axis	x	Y	z
Intercept points	1	1	1
Reciprocals	1/1	1/ 1	1/ 1
Smallest Ratio	1	1	1
Miller Indices	(111)		



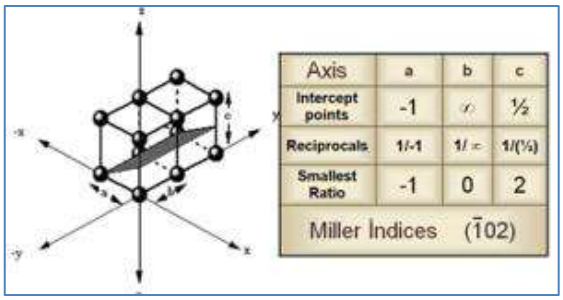
Axis	x	Y	z
Intercept points	1	1	∞
Reciprocals	1/1	1/ 1	1/ ∞
Smallest Ratio	1	1	0
Miller Indices	(110)		



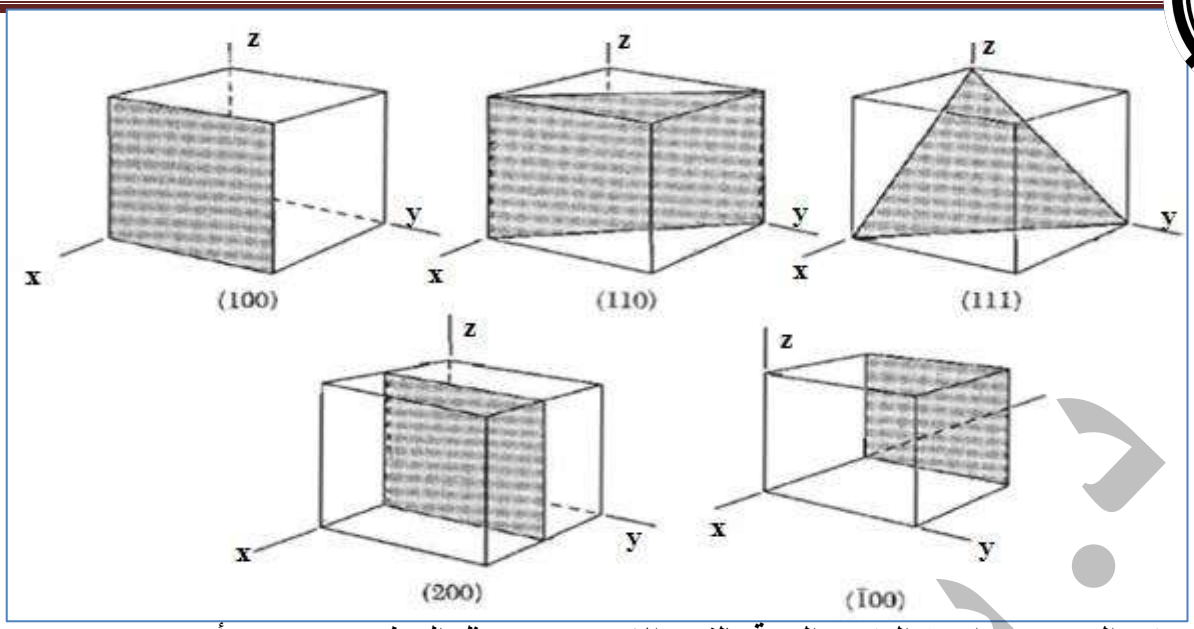
Axis	x	Y	z
Intercept points	1	∞	∞
Reciprocals	1/1	1/ ∞	1/ ∞
Smallest Ratio	1	0	0
Miller Indices	(100)		



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



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



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

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

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

لذلك المستوي فمثلا {333} تعني :

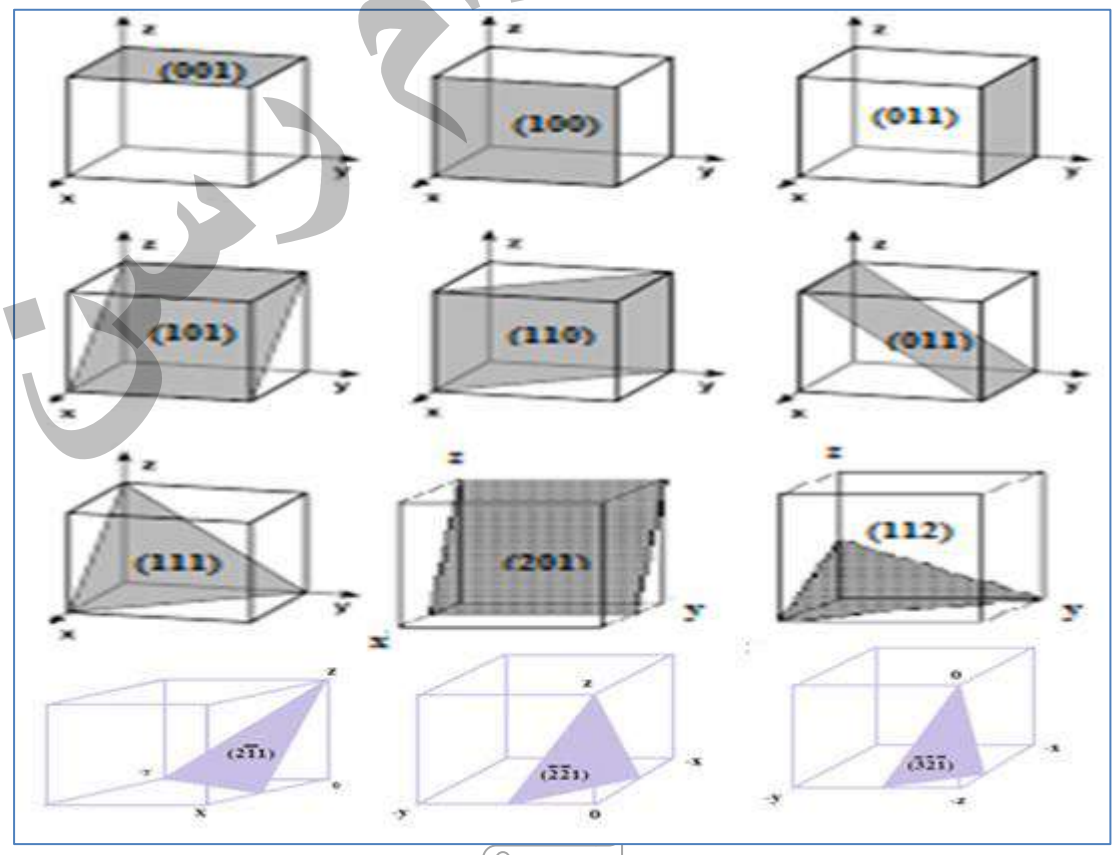
$(\bar{3}\bar{3}\bar{3})$،$(3\bar{3}\bar{3})$،$(\bar{3}3\bar{3})$،$(\bar{3}\bar{3}3)$،$(33\bar{3})$،$(3\bar{3}3)$،$(\bar{3}33)$،(333)

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 :

(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)



معاملات ميلر للشكل السداسي :

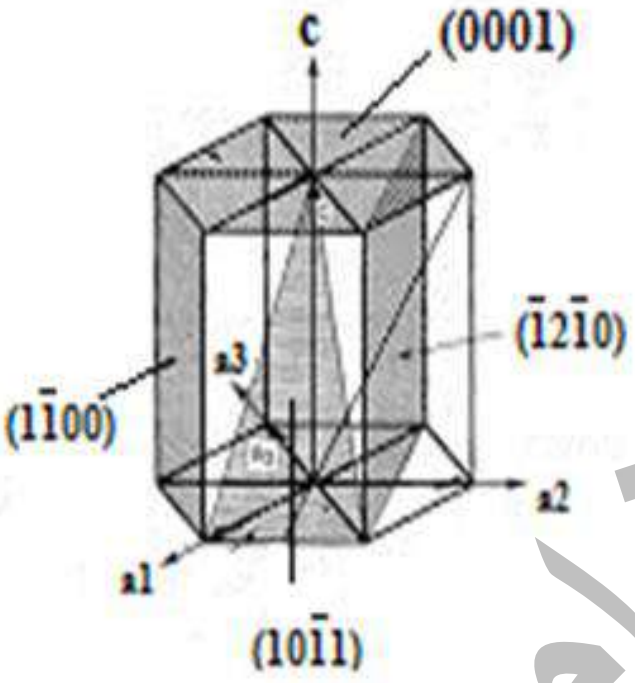
تمثل السطوح البلورية للشكل السداسي باربعة معاملات بدلا من ثلاثة وتكتب (h k i l)

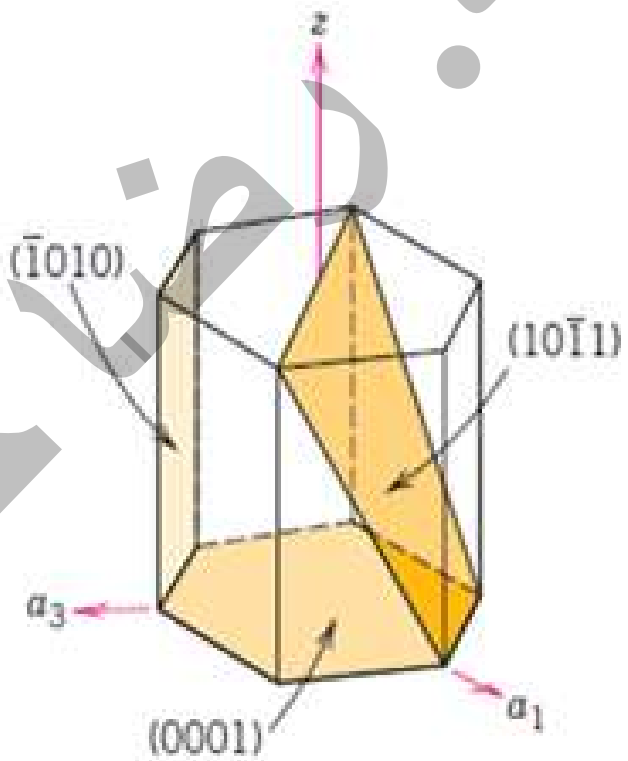
مثال : احسب معاملات ميلر لسطح في الشكل السداسي تقاطعاته

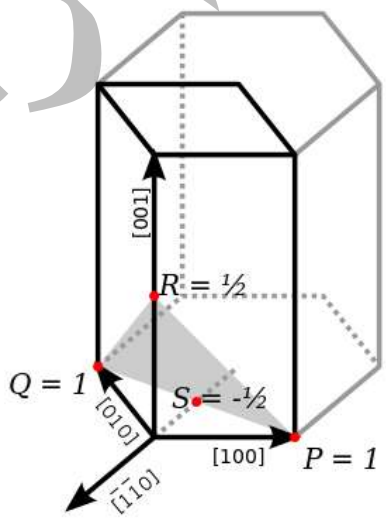
	a_1	a_2	a_3	c
التقاطعات :	1	-1	∞	∞
المقلوبات :	1	-1	0	0

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 : $\overrightarrow{a_1} + \overrightarrow{a_2} = -\overrightarrow{a_3}$





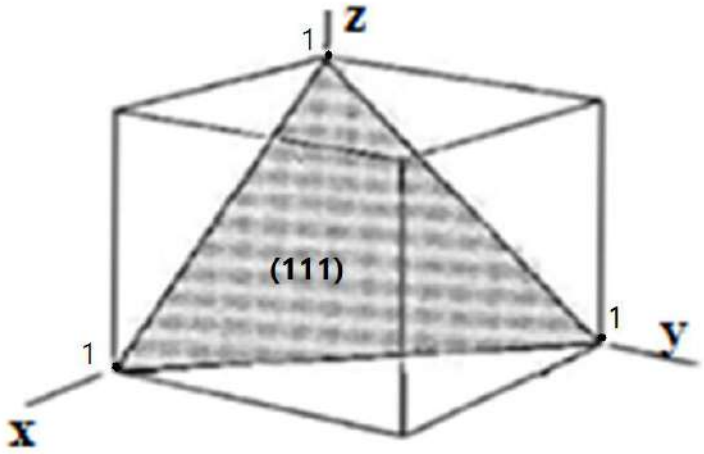


د. رضا حزام رسن

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:

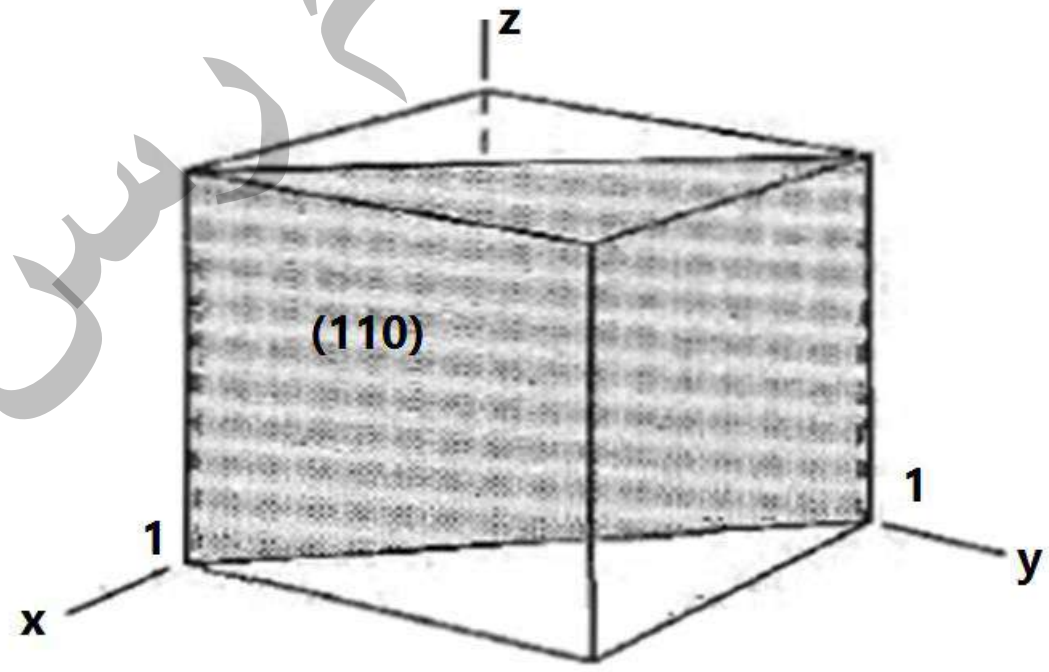
مثال: ارسم المستوي (110) في بلورة مكعبة؟

المقلوب:

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

$$(1،1،\infty)$$

$$x=1، y=1 ، Z=\infty$$

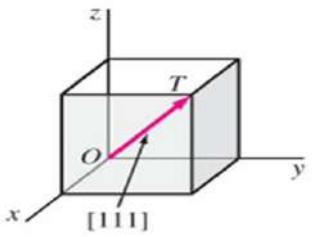


د. رضا حزام رسن

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.

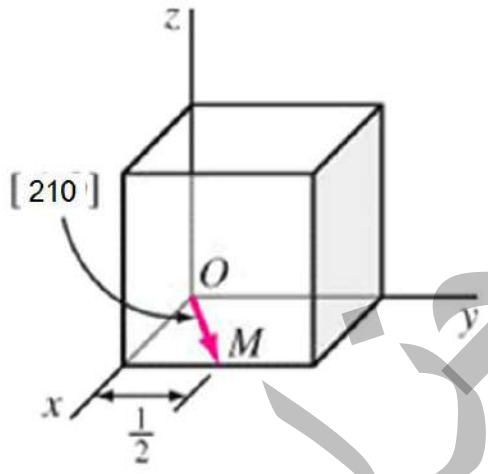
فاذا فرضنا متجهاً قيمة مركبته باتجاه المحور $\vec{a}$ هو ua وقيمة مركبته باتجاه المحور $\vec{b}$ هي vb وقيمة مركبته باتجاه $\vec{c}$ هي wc ، فان اتجاه هذا المتجه يعبر عنه بشكل [uvw].



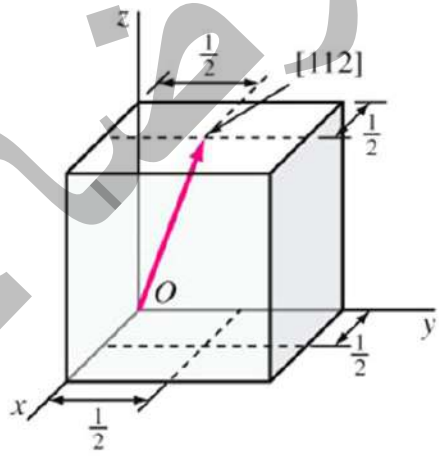
[111] direction

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

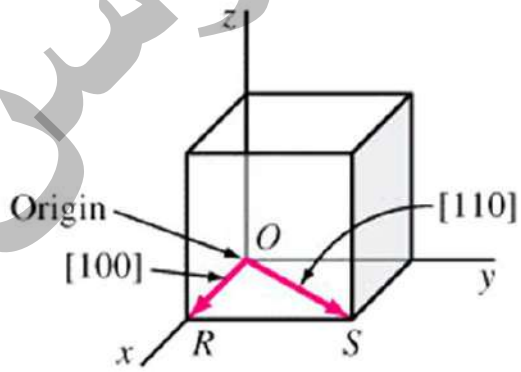
[011] ، [101] ، [110] ، [0$\bar{1}$1] ، [01$\bar{1}$] ، [$\bar{1}$01] ، [10$\bar{1}$] ... ...



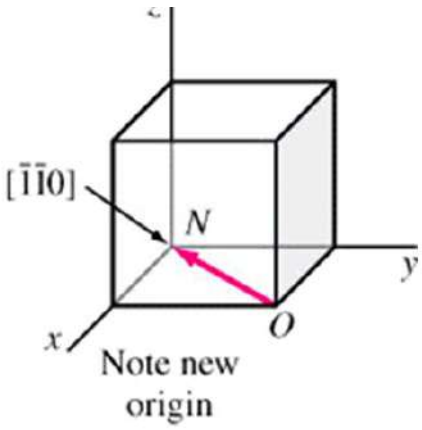
X = 1 , Y = ½ , Z = 0
[1 ½ 0] ⟹ [2 1 0]



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 تحدد 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: $(00\bar{1})$ 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 :

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

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 :

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

د. رضا حزام رسن

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 (او بين اتجاهين):

يمكن حساب الزاوية θ 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:

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

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

H.W : جد الزاوية θ المحصورة بين السطحين (312) و $(4\bar{2}1)$ ثم جد θ 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) ؟

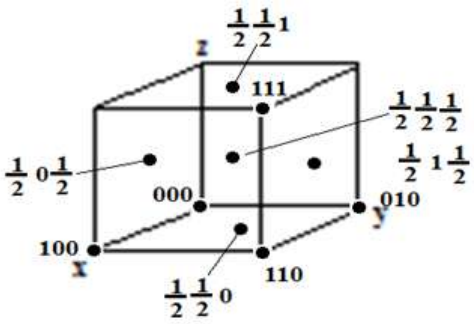
Solution:

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

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

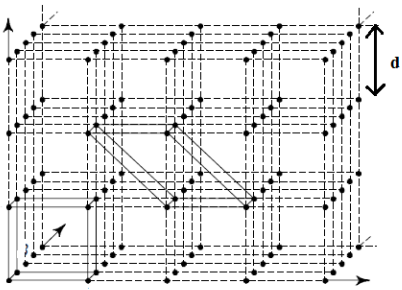
$$\theta = 19.47° \quad or \quad 19°\ 2\acute{8}$$

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 a) :



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 :

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

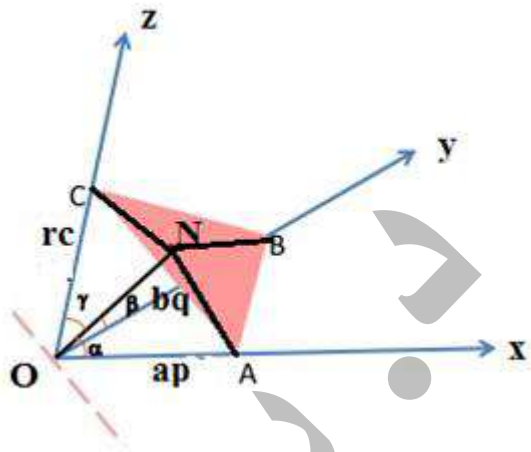
ونلاحظ من العلاقة ان d_{hkl} تعتمد على القيمة العددية لمعاملات ميلر ولا تعتمد على اشارات تلك المعاملات وهناك مجاميع مختلفة من السطوح المتوازية ذات معاملات ميلر مختلفة ولكنها متساوية الفسح d_{hkl} مثل : (333) ، (511) والسطوح (600) ، (422).

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

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

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

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

في المكعب   a = b = c

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

د رضا حزام رسن

كثافة المستويات (The density of plane)

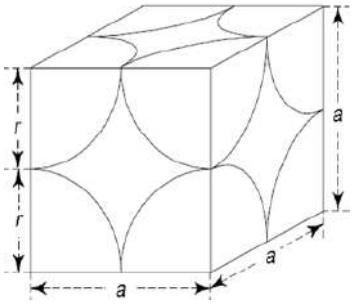
كثافة المستويات الذرية Planar Atomic Density:

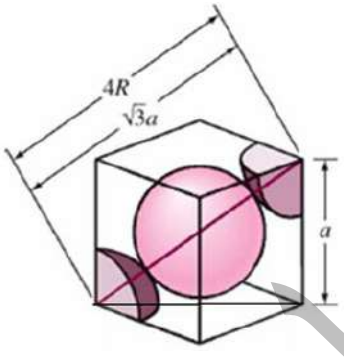
عدد الذرات في وحدة المساحات في المستويات المختلفة في العديد من الشبائك البلورية.

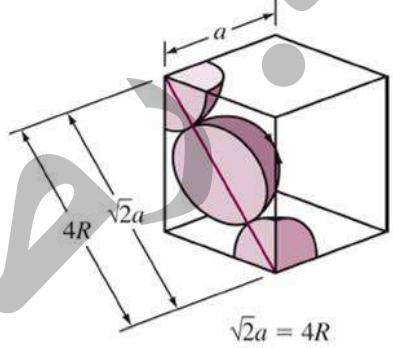
ويعرف بانه عدد الذرات مقسومة على وحدة المساحة الموجودة في المستوي. وتعطى بالعلاقة التالية:

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

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



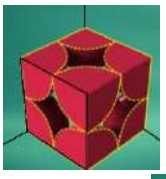




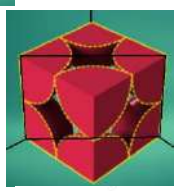
(sc): a=2r **(BCC):** $4r = \sqrt{3}\,a$ $a = \frac{4r}{\sqrt{3}}$ **(FCC):** $4r = \sqrt{2}a$ $a = 2\sqrt{2}\,r$

(SC)

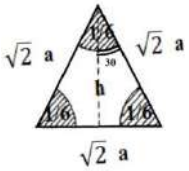
1- For planes (100) $\rho_p = \frac{\frac{1}{4}\times 4}{a^2} = \frac{1}{a^2}$

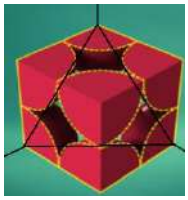


2- For planes {110} $\rho_p = \frac{\frac{1}{4}\times 4}{\sqrt{2}a\times a} = \frac{1}{\sqrt{2}a^2}$



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

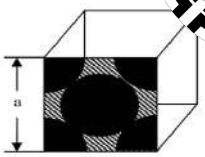




$$\cos 30 = \frac{\sqrt{3}}{2} = \frac{\text{المجاور}}{\text{الوتر}} = \frac{h}{\sqrt{2}a} \quad ----- \quad h = \sqrt{\frac{3}{2}}a$$

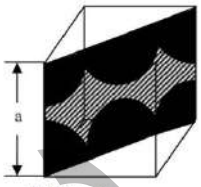
$$Area = \left(\frac{1}{2}\times \text{القاعدة} \times \text{الارتفاع}\right) = \frac{1}{2}(\sqrt{2}a)(h) = \frac{1}{2}(\sqrt{2}a)\left(\sqrt{\frac{3}{2}}a\right) = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2$$

(FCC)



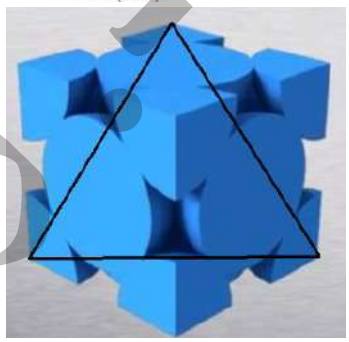
FCC (100)

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



FCC(110)

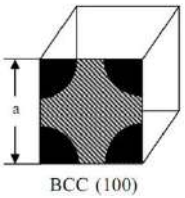
2- For planes {110} $\rho_p = \frac{\left(\frac{1}{4}\times 4\right)+\left(\frac{1}{2}\times 2\right)}{\sqrt{2}a\times a} = \frac{2}{\sqrt{2}a^2} = \frac{\sqrt{2}}{a^2}$



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

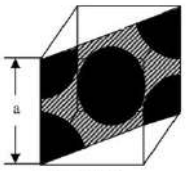
$$\rho_p = \frac{\left(\frac{1}{6}\times 3\right)+\left(\frac{1}{2}\times 3\right)}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2} = \frac{\frac{1}{2}+\frac{3}{2}}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2} = \frac{2}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2} = \frac{4}{\sqrt{3}a^2}$$

(BCC)



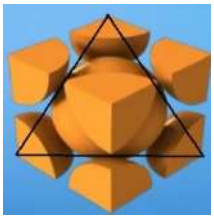
BCC (100)

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



BCC (110)

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



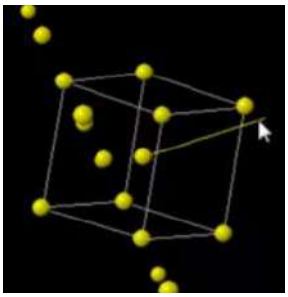
3- For planes {111} $Area = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2$

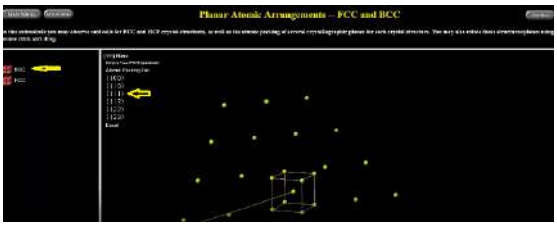
$$\rho_p = \frac{\left(\frac{1}{6}\times 3\right)}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2} = \frac{\frac{1}{2}}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2} = \frac{1}{\sqrt{3}a^2}$$

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



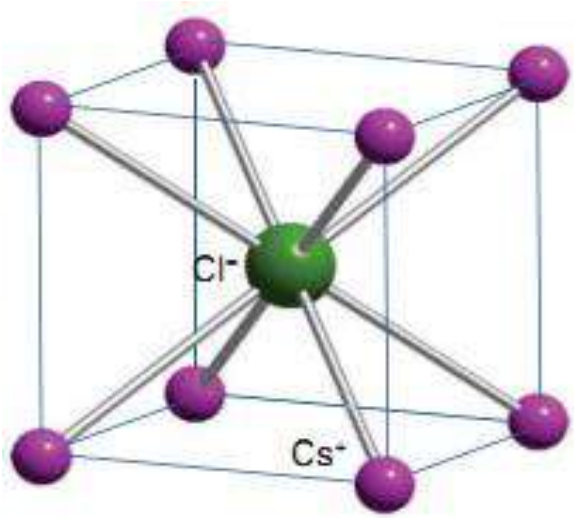


تراكيب بلورية بسيطة Simple Crystal Structure

1 - تركيب كلوريد السيزيوم Cesium Chlorid Structure (CsCl)

يمتلك كلوريد السيزيوم شبيكة برافيزية مكعبة بسيطة Sc طول ضلعها 4.11A والاساس مكون من ايونين هما Cl^-،Cs^+ .

واذا افترض 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

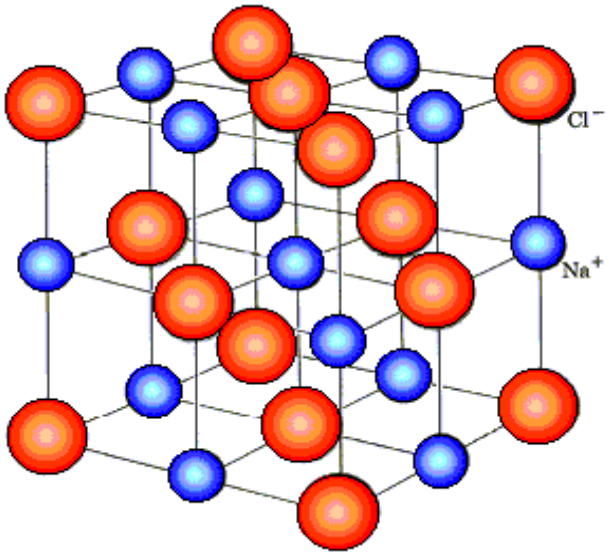
يمتلك شبيكة برافيزية من نوع مكعب متمركز الوجوه fcc طول ضلعها 5.63Å. الخلية الواحدة الاعتيادية تحوي اربع نقاط شبيكة يرافق كل منها اساس مكون من ايونين احداهما Na^+ والاخر Cl^- تفصلهما مسافة قدرها نصف قطر خلية الوحدة المكعبة ولذلك تضم خلية الوحدة الاعتيادية اربعة ايونات صوديوم واربعة ايونات كلور اي اربعة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

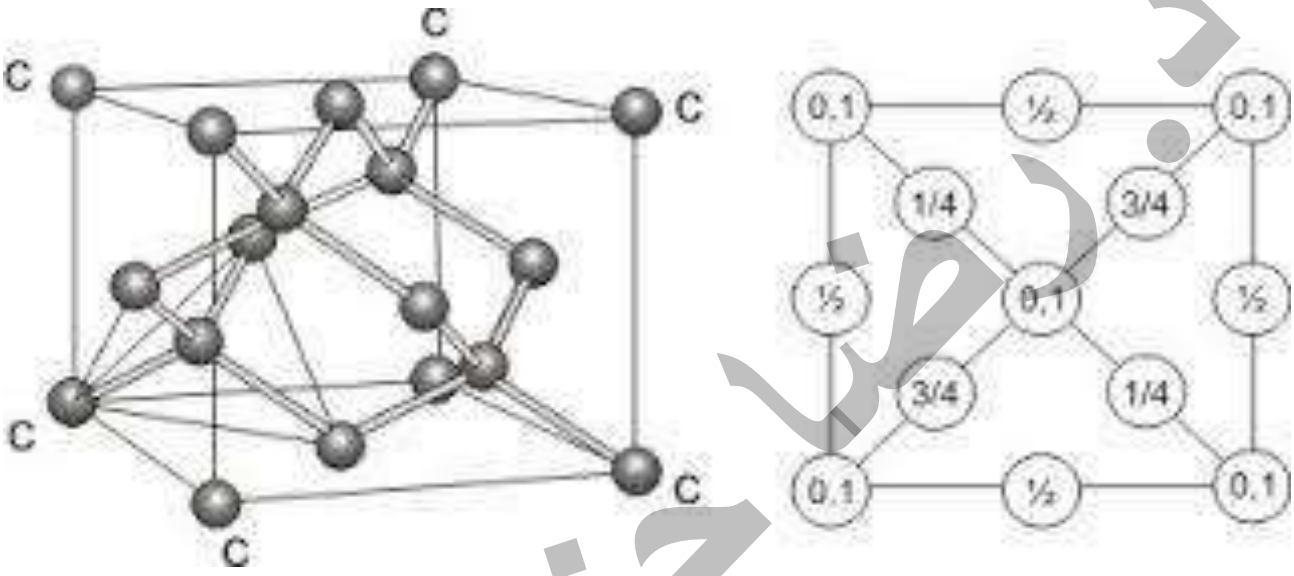


د. رضا حزام رسن

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 :

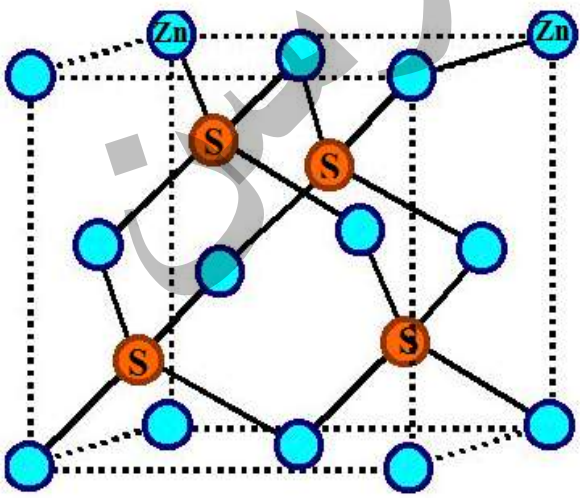
ذرة واحدة في احد اركان الخلية 000 وثلاث في مراكز اوجه الخلية $0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ ، $\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$ ، $\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$ واربع ذرات داخل الخلية ، اثنتان قريبتان من قاعدتها السفلى عند المواقع $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ ، $\frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}$ واثنتان قريبتان 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 باثنتي 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 :

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

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

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 الجزئية 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:

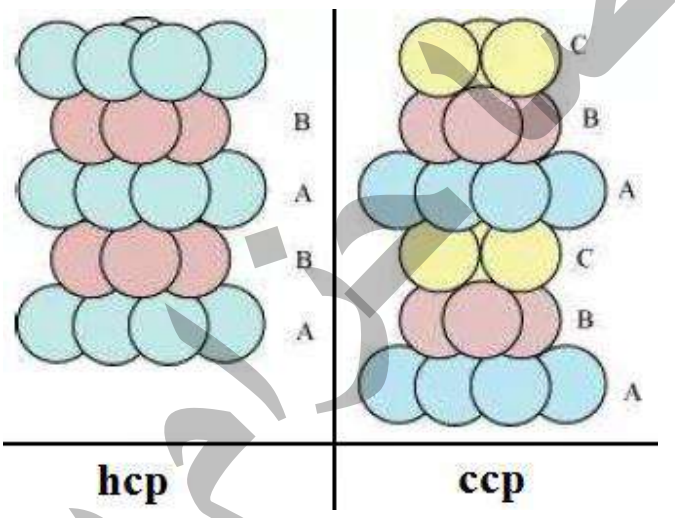
مكعب متماسك Cubic – closed packed (ccp) هو عبارة عن مكعب متمركز الوجه

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

او سداسي متماسك Hexagonal closed packed (hcp)

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.



د. رضا حزام رسن

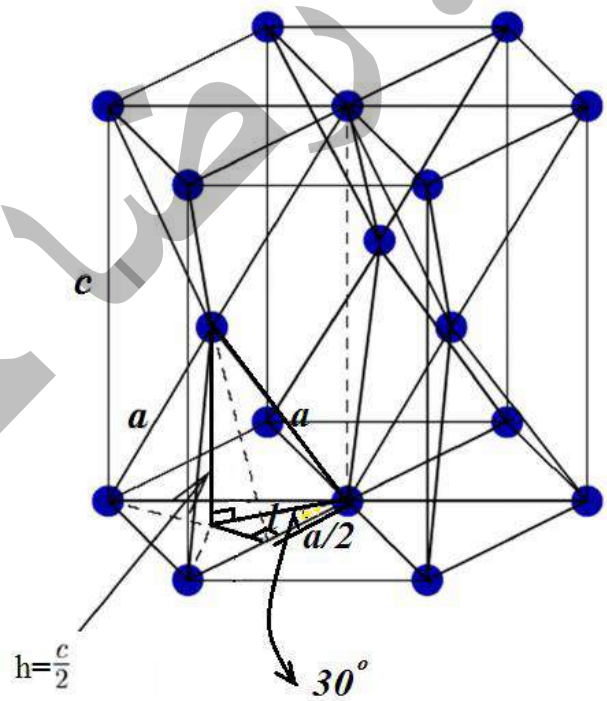
اسئلة ومسائل اضافية

س1: برهن ان في التركيب السداسي المتلاصق الرص hcp حيث تتماسك الكرات الذرية مع بعضها، ان نسبة c/a هي :

$$\frac{c}{a} = \left(\frac{8}{3}\right)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1.633$$

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

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



Looking at the tip of the tetrahedron، we have:

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

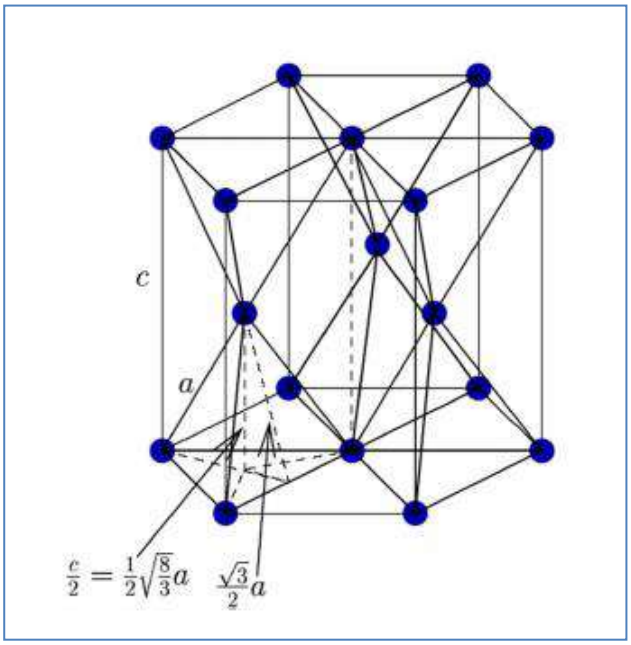
$$\rightarrow \quad h^2 = \frac{2}{3}a^2$$

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

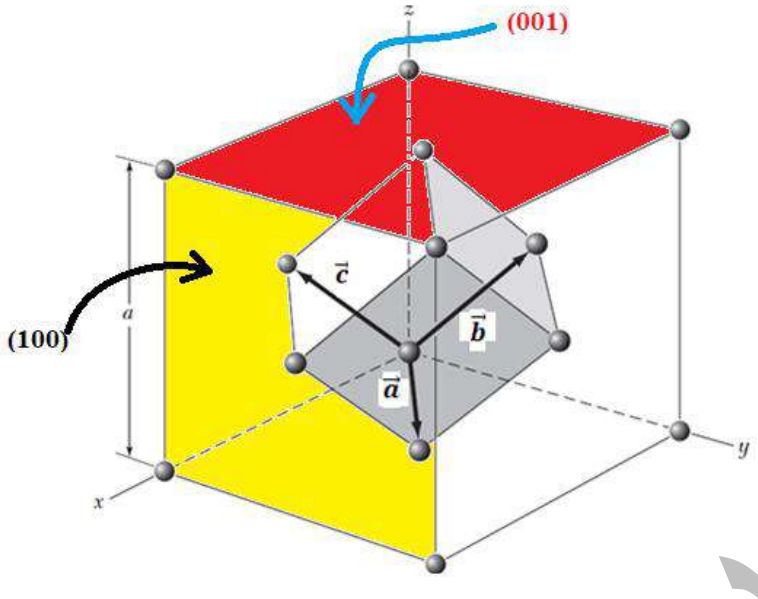
$$\frac{c^2}{4} = \frac{2}{3}a^2 \quad \longrightarrow \quad c^2 = \frac{8}{3}a^2$$

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

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



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 يعود الى المستوي x=a .

التقاطعات لهذا المستوي مع المحاور

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

تعطى بـ :

$$\left.\begin{array}{l} 2\vec{a} = (a, a, 0) \\ 2\vec{c} = (a, 0, a) \\ \text{لايتقاطع } \vec{b} \end{array}\right\} \quad \textbf{التقاطعات } 2\ 0\ 2$$

ادلة (معاملات) ميلر تعطى باخذ مقلوبات هذه التقاطعات:

$$\textbf{المقلوبات } \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$$

وبايجاد أصغر عدد صحيح (اصغر قاسم مشترك)

(1 0 1) أصغر عدد صحيح

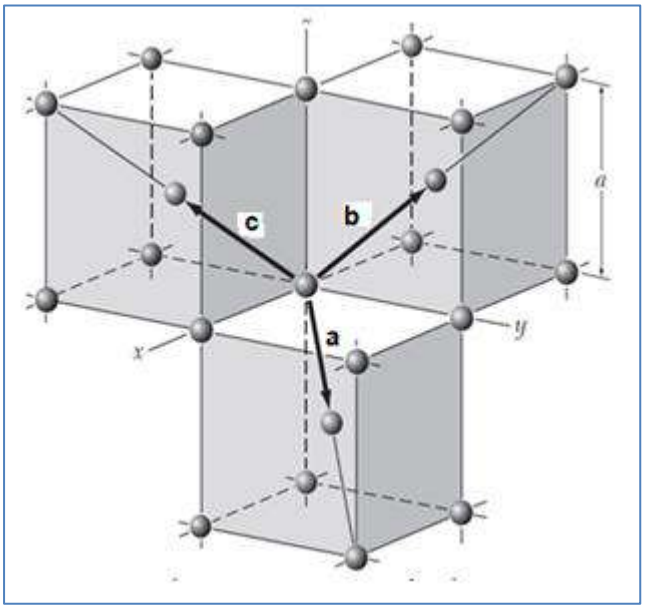
بعبارة اخرى المستوي (100) في مكعب بسيط هو (101) في مكعب متمركز الاوجه.

نفس الشيء (001) في مكعب بسيط (011) في مكعب متمركز الاوجه.

د. رضا حزام رسن

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:

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

$$\vec{a}\cdot\vec{b}=a_xb_x+a_yb_y+a_zb_z=\left(\frac{a}{2}\right)\left(\frac{-a}{2}\right)+\left(\frac{a}{2}\right)\left(\frac{a}{2}\right)+\left(\frac{-a}{2}\right)\left(\frac{a}{2}\right)=\left(\frac{-a^2}{4}\right)$$

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

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

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

$$\cos\theta=\frac{\vec{a}\cdot\vec{b}}{|\vec{a}|\,|\vec{b}|}=\frac{a_xb_x+a_yb_y+a_zb_z}{|\vec{a}|\,|\vec{b}|}=\frac{\left(\frac{-a^2}{4}\right)}{\left(\frac{a}{2}\sqrt{3}\right)\left(\frac{a}{2}\sqrt{3}\right)}=\frac{-1}{3}$$

$$\theta=\cos^{-1}\left(\frac{-1}{3}\right)=109.4712206^\circ=109^\circ\ 28'\ 16.3''$$

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

==

اختر الاجابة الصحيحة

س). عدد نقاط الشبيكة في خلية FCC هي:

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

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

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

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

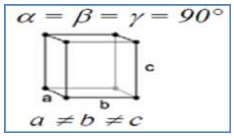
(a) 0.74 (b) 0.52 (c) 0.34 (d) 0.68

د رضا حزام رسن

س). معاملات (دلائل) ميلر لمستوي يوازي المحورين Y و Z هي:
(a) (001) (b) (1 1 1) (c) (0 1 0) (d) (1 0 0)

س) عدد الذرات لوحدة المساحة للسطح (100) في بلورة ذات تركيب مكعب بسيط SC هو:
(a) $1/a^2$ (b) $2/a^2$ (c) $1/2a^2$ (d) $4/a^2$

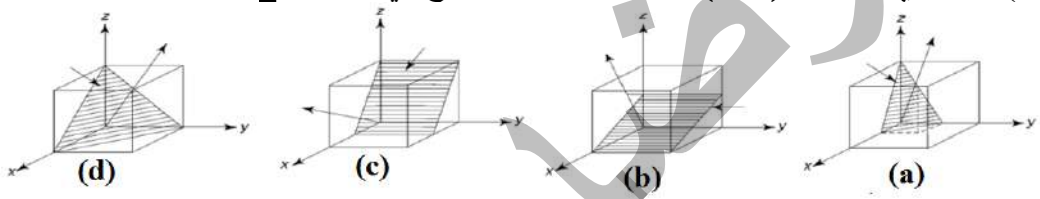
س). اذا كان ثابت الشبيكة 4.2) فأن فسحة السطوح (d) لمجموعة المستويات (200) تكون:
(a) 8.4 Å (b) 2.4 Å (c) 4.2 Å (d) 2.1 Å



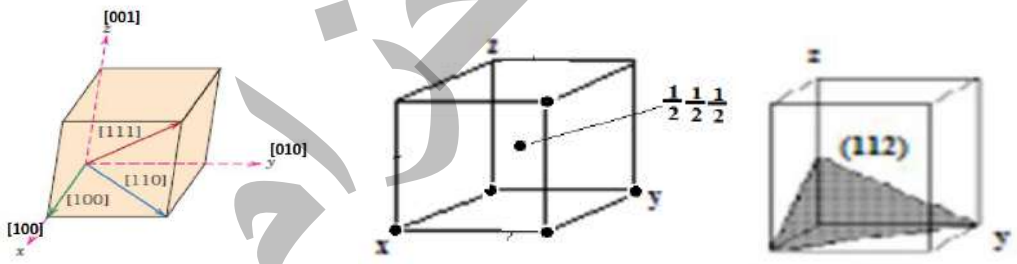
س) خلية الوحدة للتركيب الموضح في الشكل يعود إلى النظام البلوري من نوع .....
(a) مكعب cubic (b) معيني قائم orthorhombic
(c) رباعي tetragonal (d) ثلاثي trigonal

س)- ثابت الشبيكة لخلية وحدة نوع BCC بنصف قطر ذري 1.24 Å)) هو:
(a) 1.432 Å (b) 2.864 Å (c) 1.754 Å (d) 0.62 Å

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.

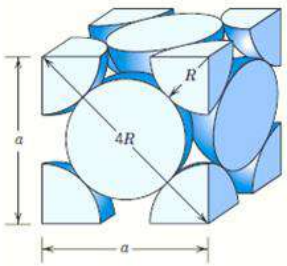
$$a^2 + a^2 = (4R)^2$$

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؟

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

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

$$= \frac{(4 \text{ atoms/unit cell})(63.5 \text{ g/mol})}{[16\sqrt{2}(1.28 \times 10^{-8} \text{ cm})^3/\text{unit cell}](6.023 \times 10^{23} \text{ atoms/mol})}$$

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

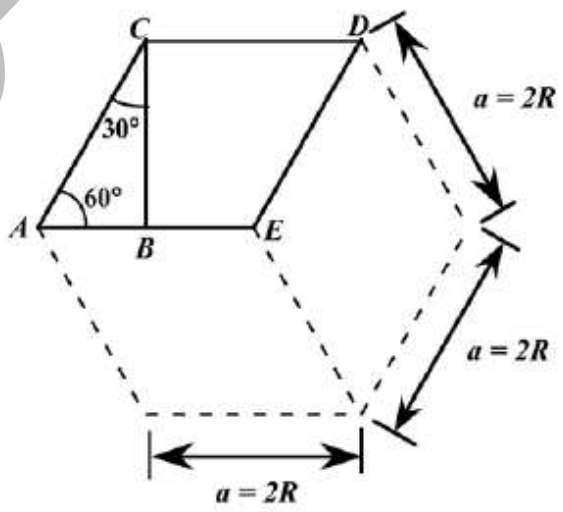
The literature value for the density of copper is 8.94 g/cm^3, which is in very close agreement with the foregoing result.

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

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

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

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

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:

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

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

$$4.51 = \frac{6\times47.87}{6.023\times10^{23}\times6\times\left(\frac{1}{2}a\times\frac{\sqrt{3}}{2}a\right)\times c} = \frac{6\times47.87}{6.023\times10^{23}\times6\times\left(\frac{1}{2}a\times\frac{\sqrt{3}}{2}a\right)\times1.58a}$$

$$a = \left(\frac{2\times6\times47.87}{4.51\times6.023\times10^{23}\times3\times\sqrt{3}\times1.58}\right)^{\frac{1}{3}}\times10^8$$

$$\therefore\ a = 2.953\ \overset{o}{A} \quad \text{Then } c = 1.58\times2.953 \quad \therefore c = 4.666\ \overset{o}{A}$$

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

$$= \left[\frac{1}{2}\times2.953\times10^{-10}\times\frac{\sqrt{3}}{2}\times2.953\times10^{-10}\right]\times4.666\times10^{-10}$$

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 $a = 2R\sqrt{2}$. The 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؟

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

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

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

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

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

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

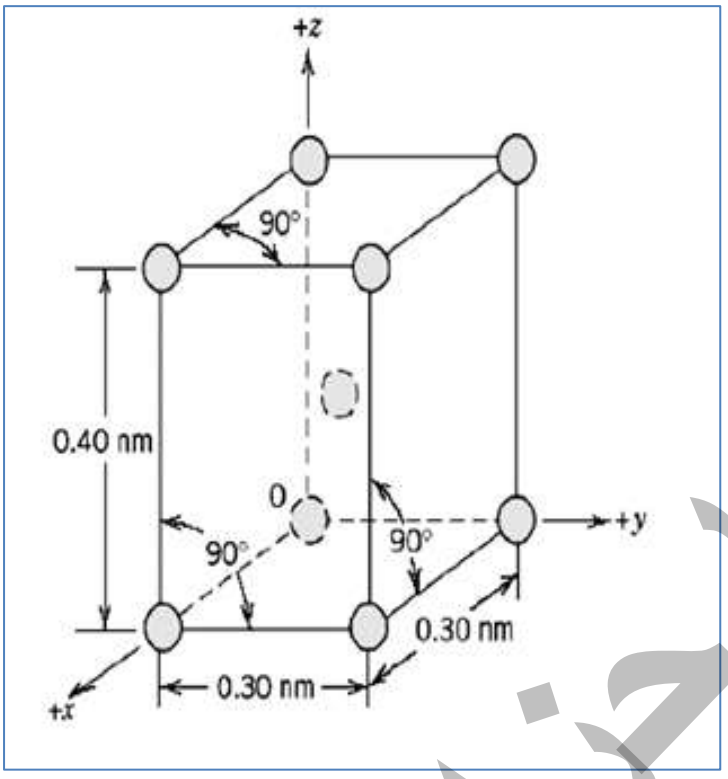
Now, solving for a $\quad a = \left[\frac{(2)(1.396 \times 10^{-22}\ \text{cm}^3)}{(3)(\sqrt{3})(1.593)}\right]^{1/3}$

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

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

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)

$$V_C = (3 \times 10^{-8})^2 (4 \times 10^{-8}) = 3.6 \times 10^{-23}\ \ cm^3/unitcell$$

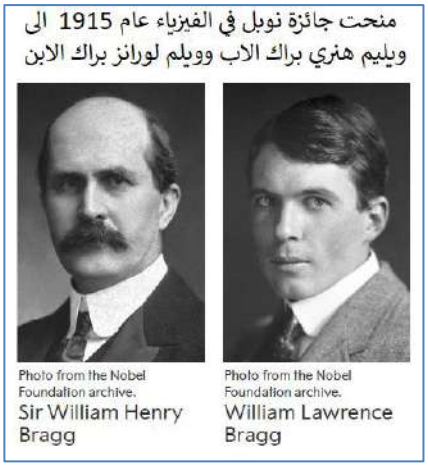
$$\rho = \frac{2 \times 141}{3.6 \times 10^{-23} \times 6.023 \times 10^{-23}} = 13\ \ g/cm^3$$

د. رضا حزام رسن

بسم الله الرحمن الرحيم

الفصل الثاني: الحيود في البلورات Crystal diffraction

قانون براك
الحزم الساقطة: (الاشعة السينية ، النيوترنات ، الالكترونات)
الطرق التجريبية للحيود: (طريقة لاوي، طريقة البلورة الدوارة، طريقة المسحوق)
الشبيكة المقلوبة
عامل تركيب الشبيكة

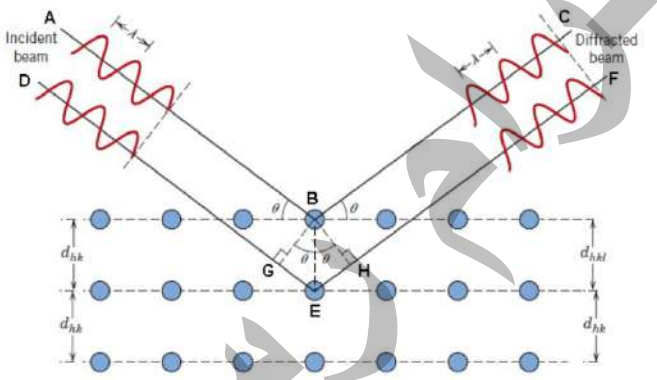


قانون براك:

تمكن العالم ويليم لورنس براك (الابن) عام 1913 عندما كان طالب بحث في جامعة كامبريج من ايجاد علاقة رياضية لتعيين المسافة بين المستويات البلورية باستخدام الاشعة السينية. اعتمد براك على حقيقة ان الذرات في داخل البلورة تصطف في مجاميع متميزة من المستويات المتوازية ذات الاحداثيات (hkl) والتي تنفصل عن بعضها بمسافة d_{hkl} .

عند سقوط حزمة من الاشعة السينية بزاوية θ على هذه المستويات فأنها تستطير في جميع الاتجاهات داخل البلورة. كما في الشكل.

يبين الشكل ان الاشعة المنعكسة عن تلك المستويات وبنفس زاوية السقوط θ .والاشعة الساقطة والمنعكسة لها نفس الطور in phase .



ان مسار الموجة في اتجاه DEF الذي ينعكس في E هو اطول من مسار الموجة في اتجاه ABC الذي ينعكس في B .

فاذا كانت هاتين المجموعتين من الموجات في نفس الطور فان الفرق بين المسارين يجب ان يكون عددا صحيحاً من الاطوال الموجية $n\lambda$ حيث n يساوي عدداً صحيحاً $n = 1, 2, 3, \dots$ ويسمى **مرتبة الحيود**.

لإيجاد الفرق بين المسارين نرسم BG عمودي على DE ونرسم BH عمودي على EF.

AB=DG
BC=HF

$GE + EH = n\lambda$ ------------ الفرق بين المسارين (1)

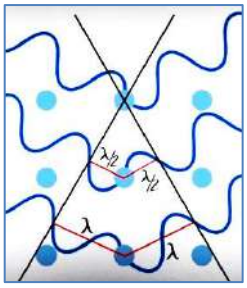
بما ان الذرات في داخل البلورة تصطف في مجاميع متميزة من المستويات المتوازية ذات الاحداثيات (hkl)والتي تنفصل عن بعضها بمسافة d_{hkl}, لذلك: $BE = d_{hkl}$

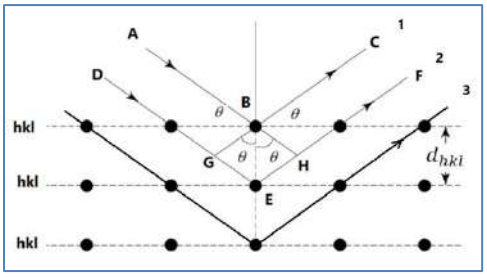
$GE = d_{hkl} \sin\theta$ ------------ من المثلث BGE (2)

$EH = d_{hkl} \sin\theta$ ------------ ايضاً من المثلث BHE (3)

$d_{hkl} \sin\theta + d_{hkl} \sin\theta = n\lambda$ نعوض 3&2 في 1

$\therefore \; \mathbf{2d_{hkl} \sin\theta = n\lambda}$ ------------------------ **قانون براك**





❖ مرتبة الحيود (n=1,2,3,.....) تعني انه لطول موجة معين ولقيمة معينة من d هنالك قيم متعددة لزوايا السقوط θ_1وθ_2 و θ_3 تحقق الحيود .

❖ فرق المسار بين 1و 2 هو λ و فرق المسار بين 1 و 3هو 2λ وهكذا لبقية المسارات.

❖ ان انعكاس براك يمكن ان يحدث فقط عندما يكون الطول الموجي λ في معادلة براك (قانون براك) المستخدم للحصول على انعكاس من مستوي ما (hkl) اصغر او مساوي لضعف المسافة البينية بين مستويين d_{hkl} متعاقبين في البلورة , اي ان:

الشرط اللازم للانعكاس (شرط الحيود) ---------- $\lambda \leq 2d_{hkl}$

$2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda$ ..... $\frac{n\lambda}{2d_{hkl}} = \sin\theta \leq 1$ ..... $n\lambda \leq 2d_{hkl}$

حيث ان قيمة $(\sin\theta)$ لا يمكن ان تزيد عن الواحد في اي حال من الاحوال.

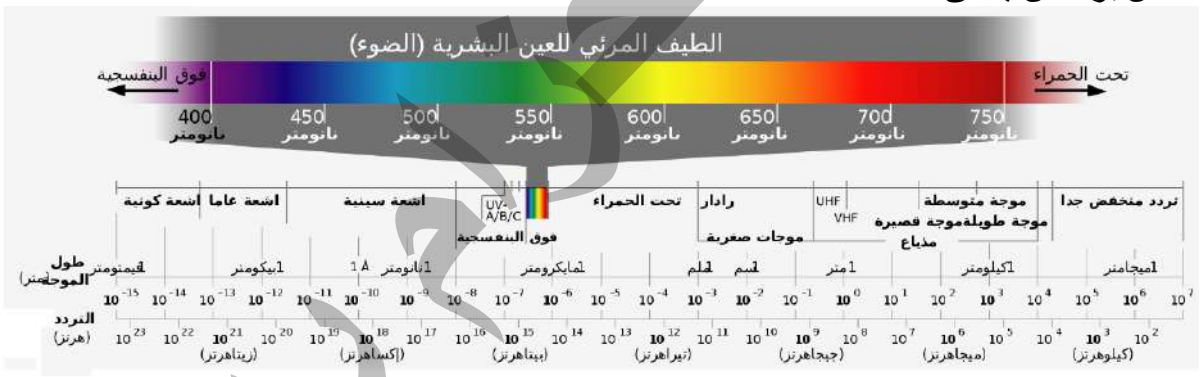
وفي حالة الحيود من الرتبة الاولى n=1 سوف يكون $\lambda \leq 2d_{hkl}$

اما n=0 فهو للحزمة غير المُحادة.

س) لا يمكن استعمال الضوء المرئي او الاشعة فوق البنفسجية لدراسة الحيود في البلورات؟

الجواب:

بما ان شرط الحيود في قانون براك لأية زاوية $\lambda \leq 2d_{hkl}$. وبما ان قيمة d للكثير من البلورات بحدود (3) أنجستروم وعليه فان 2d=6 Å لذلك لا يمكن استعمال الضوء المرئي او الاشعة فوق البنفسجية لان انعاس براك لن يتحقق.



❖ الاشعة الساقطة D&A تسقط بزاوية θ اما الاشعة المنعكسة (الاشعة المُستطيرة او الاشعة المُحادة) مثل C&F فتنعكس (تستطيراو تعاني من الحيود) بزاوية θ (الشرط اللازم تحقيقه).

س) لماذا يمكن استعمال الاشعة السينية لدراسة الحيود في المعادن؟

الجواب:

المسافات البينية للمستويات الذرية في البناء البلوري d لمعظم المعادن تساوي طول الموجة للأشعة السينية λ من حيث المقدار. وبما ان شرط الحيود في قانون براك لأية زاوية $\lambda \leq 2d_{hkl}$. وحيث ان قيمة $(\sin\theta)$ لا يمكن ان تزيد عن الواحد في اي حال من الاحوال

$2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda$ ..... $\frac{n\lambda}{2d_{hkl}} = \sin\theta \leq 1$ ..... $n\lambda \leq 2d_{hkl}$

وفي حالة الحيود من الرتبة الاولى n=1 سوف يكون $\lambda \leq 2d_{hkl}$

اي ان شرط الحيود سيكون متحقق لذلك يمكن استعمال الاشعة السينية لدراسة الحيود في المعادن.

الحزم الساقطة: (الاشعة السينية ، النيوترنات ، الالكترونات)

هنالك التباس حاصل لدى البعض عند استعمال مصطلحات الحيود والاستطارة او التشتت. تتطلب دراسة التركيب البلوري استعمال اشعاع ذي طول موجي مساوٍ او اقصر من المسافات البينية بين الذرات $(\lambda \leq 2d_{hkl})$ ويتم ذلك من خلال الحيود diffraction وفي بعض الاحيان تدعى العملية بالتشتت او الاستطارة scattering .

الاستطارة: هي انحراف اي شعاع عن مساره نتيجة تفاعله مع المادة، (اي تغير اتجاه جسيم او فوتون عند تفاعله مع النواة او الالكترون).

- **الاستطارة غير المرنة (التشتت غير المرن) :** اذا فقد الجسيم او الفوتون المتشتت (المنحرف عن مساره) قسماً من طاقته.
- **الاستطارة المرنة (التشتت المرن) :** اذا لم يحدث تغير في الطاقة للجسيم او الفوتون المتشتت.

ان مرور شعاع ضوئي في وسط مادي يسبب استطارة ذلك الشعاع ويتم ذلك بعمليتين منفردتين ومختلفتين الاولى (**انعكاس عشوائي**) والعملية الثانية هي **الحيود** او الانعطاف.

- **الانعكاس العشوائي:** يحدث عند مرور الشعاع في وسط مادي، حيث ان جسيمات صغيرة معلقة في الوسط المادي تتصرف بصفة مرايا وتولد انعكاسا عشوائياً بسبب توجيهها العشوائي بالنسبة لاتجاه الشعاع الساقط عليها وان الانعكاس العشوائي يحدث عندما تكون ابعاد الجسيم العاكس كبيرة مقارنة بالطول الموجي للضوء.
- **الحيود:** ويحدث عند مرور الشعاع في وسط مادي, عند وجود جسيمات في الوسط المادي اصغر من الطول الموجي للضوء الساقط. وبسبب ظاهرة الحيود تتصرف هذه الجسيمات في الوسط بصفتها مراكز للاشعاع, وكل منها تُشتت الضوء في جميع الاتجاهات.

ان ظاهرة الحيود هي حالة خاصة للتداخل تحصل بسبب الطبيعة الموجية للضوء ولكل الجسيمات التي ترافق حركتها موجات مثل الالكترونات والنيوترونات. يمكن القول ان الحيود هو حالة خاصة للأستطارة وهو يمثل استطارة متشاكهة او متآلفة coherent scattering بغض النظر عن كونها مصحوبة بتغير طاقة الشعاع (انتقال الطاقة بين الشعاع والوسط المادي) او عدم تغيرها.

الحزم المستعملة في الحيود:

توجد ثلاث انواع اساسية من الجسيمات الموجية المتباينة الطاقة (او الاطوال الموجية) الي يمكن استعمالها في تجارب الحيود. وهي:

- فوتونات الاشعة السينية
- النيوترونات
- الالكترونات

1. فوتونات الاشعة السينية

حسب علاقة انشتاين

$$E = h\upsilon = \frac{hc}{\lambda}$$

υ يمثل تردد الفوتون

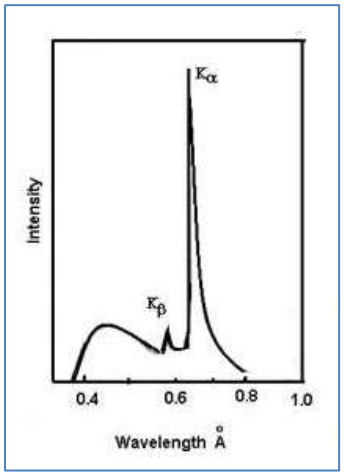
h ثابت بلانك $h=6.626\times10^{-34}$ J.sec

c سرعة الضوء $c=3\times10^{8}\ \frac{m}{sec}$

$$\lambda(\text{Å}) \approx \frac{12.4}{E(kev)}$$

وهذا يعني ان فوتوناً ذا طول موجي 1 انكستروم له طاقة حوالي (12400 ev) . ان الاشعة السينية هي موجات كهرومغناطيسية ذات اطوال موجية محددة تقع بين الاشعة فوق البنفسجية واشعاعات كاما حيث لا تزيد اطوالها الموجية عن بضعة انكستروات ولهذا يفضل استخدامها في معظم تجارب الحيود البلوري.

- يتم انتاج الاشعة السينية من خلال اصطدام الكترونات سريعة جدا بهدف معدني مثل النحاس cu والكوبلت co أو المولدينيوم Mo او الفضة. اي اننا بحاجة الى
  1- هدف معدني مثل النحاس او الكوبلت
  2- فرق جهد معجل للالكترونات
  3- مصدر لتوليد الالكترونات



- عند اصطدام الالكترونات السريعة بهدف معدني يحصل آنياً عمليتان متباينتان:
  1- العملية الاولى تباطؤ الالكترونات وانحرافها بسبب الشحنات النووية في الهدف التي تسبب انبعاث اشعاع عبارة عن فوتونات ذات اطوال موجية مختلفة ويدعى بالطيف المستمر.
  2- والعملية الثانية يتم من خلالها تفاعل او اصطدام غير مرن بين الالكترونات الساقطة والكترونات لباب ذرات الهدف المعدني (الكترونات القشرة الداخلية لذرات الهدف المعدني اي الالكترونات الموجودة في ذرات الهدف المعدني القريبة من النواة). حيث تتولد خطوط طيف حادة ذات شدة عالية تسمى بالطيف الخطي ويكون مركباً فوق الطيف المستمر.

- الطول الموجي للاشعة السينية : الخطوط الحادة البراقة (الطيف الخطي) هي تمثل فوتونات ذات طول موجي لكل خط منها حيث يتولد من انتقال الكترون من قشرة shell بعيدة عن النواة الى قشرة قريبة منها. فعند انتقال الكترون من القشرة L الى القشرة K سمي الخط الحاد K_α . عند انتقال الكترون من القشرة M الى القشرة K سمي الخط الحاد K_β .
اي ان هناك احتمالاً لانتقال الكترونين مختلفين من القشرة L الى القشرة K ويحصل من ذلك ظهور خطين مختلفين يمثلان فوتونين مختلفين للطاقة (او الطول الموجي) يسميان $K_{\alpha1}$ و $K_{\alpha2}$

- اذا كان الهدف نحاس Cu

$K_{\alpha1}$ = 1.5405 Å , $K_{\alpha2}$ = 1.5443 Å

- اذا كان الهدف مولبيدنيوم Mo

$K_{\alpha1}$ = 0.7093 Å , $K_{\alpha1}$ = 0.7135 Å

- يمكن حساب اقصر طول موجي λ_{swl} في الطيف المستمر باستخدام علاقة انشتاين حيث تكون طاقة فوتونات الاشعة السينية المنبعثة من الهدف المعدني اكبر ما يمكن ولا تزيد عن اقصى طاقة تمتلكها الاشعة الكاثودية (الالكترونات) المصطدمة بالهدف، ولما كانت طاقة الاشعة الكاثودية تحدد بالجهد الكهربائي (V_{max}) المسلطة عبر انبوبة الاشعة السينية (بين الكاثود ، وهو مصدر توليد الالكترونات والهدف المعدني)

$$E_{max}=eV_{max}= h\upsilon_{swl}=\frac{hc}{\lambda_{swl}}$$

$$\lambda_{swl} = \frac{hc}{eV_{max}} = \frac{12400}{V_{max}\ (volt)}\ Å$$

عندما يتعرض الكترون في بلورة الى اشعة سينية احادية الموجة او احادية الطاقة monochromatic اي الى أحد الخطوط الحادة للاشعة السينية. يجبر متجه المجال الكهربائي لهذه الاشعة الالكترون على الاهتزاز بتردد مساوٍ لتردد الفوتونات المؤثرة فيه. ونتيجة لتعجيل الالكترون يطلق اشعاعاً في جميع الاتجاهات بتردد واحد ويسمى اشعاع الحيود وتسمى العملية بالحيود المرنة لتساوي تردد الفوتون المؤثر في الالكترون مع تردد الفوتون المنبعث من الالكترون.

2. الالكترونات :

يتصرف الالكترون بوصفه جسيماً له كتلة ترافقه موجة طولها λ والعلاقة بين طاقة الالكترون والطول الموجي المرافق له:

$$\lambda\,(\text{Å}) \approx \frac{12}{\sqrt{E(eV)}}$$

ان ظاهرة الحيود الالكتروني هي في الاســـاس اثبات لوجود موجات ترافق الالكترونات بموجب نظرية ديبرولي ولكن مـا يميز الالكترون عن الفوتون او النيوترون امتلاكه للشـــحنة ويتفاعل بقوة مع المواد ويخترقها الى مسافات صغيرة نسبياً قد تصل الى بضع مئات من الانكسترومات قبل ان يعاني من تشتت مرن او غير مرن ولذلك لا يقوم الالكترون بدور مشـابه للاشـعة السـينية في دراسـة التركيب البلوري بل **ينحصر استخدامه في هدفين اساسيين هما :**

1- دراسة سطوح البلورات.
2- دراسة الاغشية الرقيقة

3.النيوترونات :

ترافق النيوترون موجه كما هو حال الالكترون. والعلاقة بين طاقة النيوترون وطول موجته λ المرافق له :

$$\lambda\,(\text{Å}) \approx \frac{0.28}{\sqrt{E(eV)}}$$

ان شـحنة النيوترون متعادلة ولكنه يمتلك عزما مغناطيسـياً بسـبب عدم تطابق مركزي الشـحنة الموجبة والسالبة التي يحملها.

ولذلك يستخدم:

1- في دراســـة التركيب البلوري للبلورات المغناطيســـية حيث يتفاعل النيوترون بســـبب عزمه المغناطيســـي هو والكترونات هذه البلورات ((ويكون ذروات peaks اضـــافية تســـمى الذروات المغناطيســـية ومنها يمكن دراســـة طريقة توزيع العزوم المغناطيســـية للالكترونات)) فضـــلاً عن تفاعله هو ونوى الذرات.
اما في البلورات غير المغناطيسـية, حيث تصـبح محصـلة العزم المغناطيسـي لجميع الكترونات الذرة صفراً, فان النيوترون يتفاعل ونوى الذرات فقط.
2- كذلك يستعمل في اكتشاف تراكيب بعض العناصر الخفيفة كالهيدروجين.
3- كما يمكن استعماله للتمييز بين العناصر المتجاورة في الجدول الدوري.
4- كما يمكن استعماله للتمييز بين نظائر العنصر الواحد .

د. رضا حزام رسن

امثلة على قانون براك

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \quad \&\&\&\& \quad 2d_{hkl}\sin\theta_{hkl} = n\lambda$$

مثال: حدد المسافة البينية d (فسحة السطوح) عند سقوط حزمة من الأشعة السينية ذات الطول الموجي 1.54 Å باتجاه البلورة بزاوية 20.3° مع المستوى الذري.

$2d \sin\theta = n\lambda$ $\lambda = 1.54$ Å

$2d \sin 20.3° = 1 * 1.54$ $\theta = 20.3°$

$$d = \frac{1.54}{2\sin 20.3°} = \frac{1.54}{2 \times 0.3469} = 2.22 \text{ Å}$$

مثال: اشعة سينية بطول موجي 0.58 Å استخدمت لحساب d_{200} في بلورة نيكل. زاوية الانعكاس كانت 9.5°. ما هو حجم خلية الوحدة؟

$$\boldsymbol{d = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}}$$

$\lambda = 0.58$ Å & $\theta = 9.5°$

$$d_{200} = \frac{a}{\sqrt{2^2+0^2+0^2}} = \frac{a}{2} = 0.5a$$

$2d_{hkl} \sin\theta = n\lambda$

$$2 \times d_{200} \times \sin 9.5° = 1 \times 0.58$$

$$2 \times 0.5a \times 0.165 = 1 \times 0.58$$

$$a = \frac{0.58}{1.165} = 0.52 \text{ Å}$$

V= $a^3 = 0.52^3$

مثال: احسب زاوية براك للمستويات (111) لبلورة مكعب ثابت الشبيكة لها a=3.57 Å تم اسقاط اشعة سينية عليها بطول موجي 0.54 Å .

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

$$d_{111} = \frac{3.57}{\sqrt{(1)^2+(1)^2+(1)^2}} = 2.06 \text{ Å}$$

$$2d_{111}\sin\theta = n\lambda$$

$$2 \times 2.06 \times \sin\theta = 1 \times 0.54$$

$$\sin\theta = \frac{1 \times 0.54}{2 \times 2.06} = 0.131$$

$$\theta = 7°\ 32'$$

مثال: يتبلور الرصاص بشكل مكعب متمركز الأوجه FCC، ثابت الشبيكة له a=4.93 Å . احسب زاوية براك للمستويات (111) و (110) اذا سقطت على البلورة اشعة سينية بطول موجي 0.152 nm .

$2d_{hkl} \sin\theta_{hkl} = n\lambda$

$$\sin\theta_{hkl} = \frac{n\lambda}{2d_{hkl}} \qquad \theta_{hkl} = \sin^{-1}\left(\frac{n\lambda}{2d_{hkl}}\right)$$

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

$$\theta_{hkl} = \sin^{-1}\left(\frac{n\lambda}{2a}\sqrt{h^2+k^2+l^2}\right)$$

$$\theta_{111} = \sin^{-1}\left(\frac{0.152*10^{-9}}{2*4.93*10^{-10}}\sqrt{1^2+1^2+1^2}\right) = 15.29°$$

$$\theta_{110} = \sin^{-1}\left(\frac{0.152*10^{-9}}{2*4.93*10^{-10}}\sqrt{1^2+1^2+0^2}\right) = 12.59°$$

مثال: اوجد قيمة ثابت الشبيكة a لبلورة مكعبة اذا كان الطول الموجي للاشعة السينية المستخدمة يساوي 1.54 Å وزاوية براك 11.1° للرتبة الأولى للمستوي (110) .

$2d_{hkl} \sin\theta_{hkl} = n\lambda$

$$d_{hkl} = \frac{n\lambda}{2\sin(\theta_{hkl})}$$

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

$$\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} = \frac{n\lambda}{2\sin(\theta_{hkl})}$$

$$a = \frac{n\lambda}{2\sin(\theta_{hkl})}\sqrt{h^2+k^2+l^2}$$ n=1 للرتبة الأولى

$$a = \frac{\mathbf{1.54}\ \text{Å}}{2\sin(11.1)}\sqrt{1^2+1^2+0^2}$$ (110) للمستوي

$$a = \frac{\mathbf{1.54}\ \text{Å}}{2\sin(11.1)}\sqrt{2} = 5.656\ \text{Å}$$

د. رضا حزام رسن

مثال: لبلورة مكعب BCC فسحة السطوح (المسافة البينية) (d) للمستويات (110) هي 1.181 Å . اذا كان الطول الموجي للاشعة السينية المستخدمة يساوي 1.54 Å . اثبت ان اقصى رتبة لانعكاس براك يمكن ان نجدها هي n=1 .

الجواب:

$2d \sin\theta = n\lambda$ | $d = 1.181$ Å, $\lambda = 1.540$ Å

$$n = \frac{2d\sin\theta}{\lambda}$$

$$= \frac{2 \times 1.181 \sin 90^\circ}{1.540} = 1.53$$

ومن الجدير بالذكر ان n يجب ان تكون عدد صحيح integer وهنا نلاحظ بان اقصى قيمة ممكنة n في هذه الحالة هو 1 .

مثال: اوجد زاوية الحيود المتوقعة (2θ) للانعكاس من الرتبة الأولى من مجموعة مستويات (310) للكروم الذي يمتلك شبيكة BCC . عند استخدم إشعاع أحادي اللون (احادي الطول الموجي) 0.0711 نانومتر. علماً ان نصف القطر الذري (r) = 0.1249 نانومتر.

$$a = \frac{4r}{\sqrt{3}} = \frac{(4)(0.1249\ nm)}{\sqrt{3}} = 0.2884\ nm$$

$$d_{310} = \frac{a}{\sqrt{(3)^2 + (1)^2 + (0)^2}} = \frac{0.2884\ nm}{\sqrt{10}} = 0.0912\ nm$$

$$2d_{310}\sin\theta = n\lambda$$

$$\sin\theta = \frac{n\lambda}{2d_{310}} = \frac{(1)(0.0711\ nm)}{(2)(0.0912\ nm)} = 0.390$$

$\theta = \sin^{-1} 0.390 = 22.94^\circ$ زاوية براك

$\boldsymbol{\theta = Bragg\ angle}$ زاوية براك

$\boldsymbol{2\theta = Diffraction\ angle}$ زاوية الحيود

$$2\theta = (2)(22.94^\circ) = 45.88^\circ$$

مثال: باستخدام البيانات نجد ان الحديد – BCC – نصف القطر الذري له يساوي 0.1241 nm ، احسب المسافة البينية d (فسحة السطوح) لمجموعة المستويات (111) و (211) .

$$a = \frac{4r}{\sqrt{3}} = \frac{(4)(0.1241\ nm)}{\sqrt{3}} = 0.2866\ nm$$

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

$$d_{111} = \frac{a}{\sqrt{(1)^2 + (1)^2 + (1)^2}} = \frac{0.2866\ nm}{\sqrt{3}} = 0.1655\ nm$$

$$d_{211} = \frac{a}{\sqrt{(2)^2 + (1)^2 + (1)^2}} = \frac{0.2866\ nm}{\sqrt{6}} = 0.1170\ nm$$

مثال: يحتوي الروديوم المعدني على تركيب بلوري FCC . إذا كانت زاوية الحيود لمجموعة المستويات (311) تحدث عند $2\theta = 36.12^{\circ}$ (انعكاس من الرتبة الأولى) عند استخدام إشعاع أحادي اللون بطول موجي $\lambda = 0.0711$ نانومتر ، احسب (أ) المسافة البينية d (فسحة السطوح) لهذه المجموعة من المستويات، و (ب) نصف القطر الذري لذرة الروديوم.

(a) $2\theta = \text{Diffraction angle} = 36.12^{\circ}$ $\theta = \text{Bragg angle} = \frac{36.12}{2} = 18.06^{\circ}$

$$d_{311} = \frac{n\lambda}{2\sin\theta} = \frac{(1)(0.0711\ nm)}{(2)(\sin 18.06^{\circ})} = 0.1147\ nm$$

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

$$a = d_{311}\sqrt{(3)^2+(1)^2+(1)^2} = (0.1147\ nm)(\sqrt{11}) = 0.3804\ nm$$

For FCC : $a = 2\sqrt{2}\,r$ $r = \frac{a}{2\sqrt{2}} = \frac{0.3804\ nm}{2\sqrt{2}} = 0.1345\ nm$

واجب بيتي:

يتبلور الكاربون بتركيبين هما الماس، للماس تركيب fcc وثابت الشبكية له a=3.57 Å . اذا علمت ان كثافة الماس $3510\ Kg/m^3$ ، فاحسب عدد ذرات الكاربون في خلية الوحدة للماس، علماً بأن الوزن الجزئي للكاربون هو (12.01).

الجواب: خلية الماس تحوي 8 ذرات

1- يتبلور النحاس بتركيب fcc فاذا كانت الكتلة الذرية تساوي 63.54 وحدة كتلة ذرية وكثافتها $8960\ Kg/m^3$ احسب اقصر مسافة بين ذرتي نحاس .

س) اوجد المسافة بين ذرتين a في بلورة مكعبة اذا كانت زاوية براك $\theta = 30°$ لرتبة الانعكاس الأولى n=1 للمستوي (111) . اذا كان الطول الموجي للاشعة السينية المستخدمة يساوي 2 Å .

الطرق التجريبية للحيود: (طريقة لاوي ، طريقة البلورة الدوارة ، طريقة المسحوق)

توجد اكثر من عشر طرائق تجريبية مختلفة في دراسة التماثل والتركيب البلوري وغيرها من الامور المتعلقة بعلم البلورات من حيود الاشعة السينية وان معظم هذه الطرائق يمكن استخدامها في تجارب الحيود النيوتروني .

ومن هذه الطرق :

طريقة لاوي

طريقة البلورة الدوارة (تدوير البلورة)

طريقة المسحوق (ديباي – شيرر)

طريقة تذبذب البلورة وطريقة وايزينبرك

ولكن هناك ثلاث طرق رئيسية متميزة عن بعضها البعض ومصممة أساساً بموجب الكميات الرئيسية وهيλ θ , اي انه في كل طريقة للحيود يجب ان يكون هناك ربط مناسب بين هذه الكميات للحصول على تداخل تقوية للاشعة المنعكسة ، حيث ان سقوط اشعة سينية ذات أطوال موجية معينة عل بلورة بزاوية سقوط ما لا يعني بالضرورة حصول حيود من تلك البلورة. ان اية طريقة لحيود الاشعة السينية تتضمن متغيراً واحداً فقط.

في تجارب الحيود هنالك ثلاث طرق شائعة جداً هي :-

الطريقة	λ	θ
طريقة لاوي	متغير	ثابتة
طريقة تدوير البلورة	ثابت	متغير جزئياً
طريقة المسحوق	ثابت	متغيرة

1- طريقة لاوي : Laue method

تعد طريقة لاوي من اقدم الطرق المستخدمة في حيود الاشعة السينية حيث تثبت بلورة احادية في مسار حزمة من الاشعة السينية ذات أطوال موجية مختلفة كما موضح في الشكل أدناه .

ان كل مجموعة من مجاميع السطوح في البلورة لها فسحة d خاصة بها وتحدث زاوية خاصة مع اتجاه الاشعة السينية الساقطة على البلورة ولذلك تختار كل مجموعة متوازية من السطوح أحد الاطوال الموجية المناسبة لها, اي التي تحقق قانون براك ويحدث الحيود وتنبعث أشعة الحيود من البلورة لتسقط على اللوح الفوتوغرافي مكونة نقاط على ذلك اللوح (spots).

- يمكن وضع اللوح الفوتوغرافي بين مصدر الاشعة السينية والبلورة وتدعى هذه الحالة الحيود الخلفي (الانعكاس الخلفي). أو يوضع في جهة نفوذ الاشعة السينية وتدعى هذه الحالة بالحيود الامامي.
- الكونيوميتر هو حامل البلورة المنظم للزوايا يتضمن قوسين متعامدين بعضهما على بعض لغرض امالة البلورة قليلاً لتوجيه البلورة باتجاه الاشعة السينية الساقطة وتنجز هذه العملية قبل تعريض البلورة للاشعة.
- تستخدم طريقة لاوي للحالات التالية:

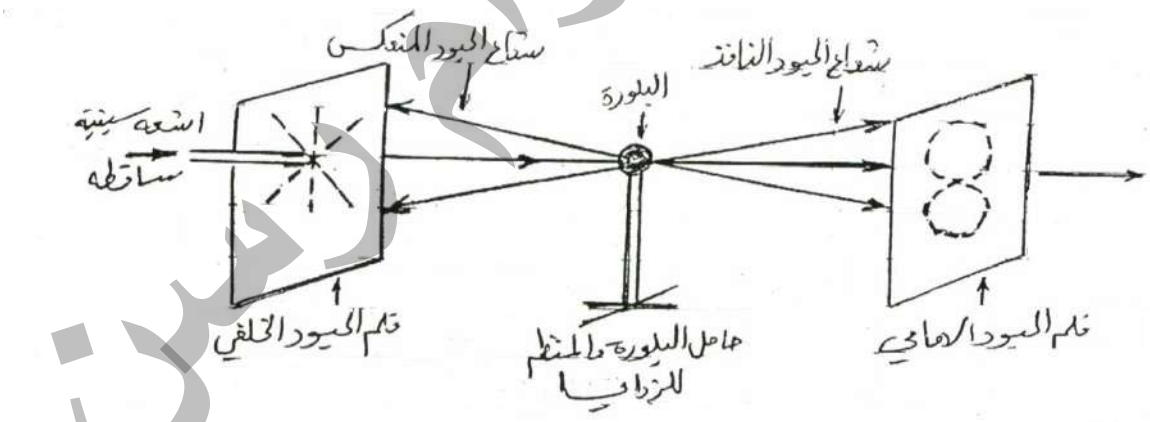
✓ اما البقع المتكونة عل اللوح الفوتوغرافي لبلورة معروف تركيبها البلوري فيمكن الاستدلال منها على تماثل البلورة والاتجاهات البلورية الموازية والعمودية على اتجاه سقوط الاشعة.

✓ وكذلك الاستدلال على عيوب البلورة الحاصلة نتيجة التأثيرات الحرارية والميكانيكية على البلورة .

✓ اذا كان اتجاه الشعاع الساقط على البلورة هو محور تماثل ما فان تشكيلة بقع الحيود المتكونة على اللوح الفوتوغرافي سوف تُظهر ذلك التماثل.

✓ وعلى الرغم من عدم امكانية تحديد القيمة العددية لحجم وحدة الخلية (خلية الوحدة) في طريقة لاوي الا انه يمكن تحديد شكل تلك الخلية .

ان الاشعة السينية المستخدمة في هذه الطريقة يجب ان تكون ذات طيف مستمر ومن ناحية أخر يفضل ان تكون المسافة بين اللوح الفوتوغرافي والبلورة (3-5cm) حيث ان ذلك يقلل من الفترة



الزمنية اللازمة للتجربة ويزيد من عدد البقع المرئية على اللوح .

س1/ هل يمكن استخدام طريقة لاوي لتعيين احداثيات شبيكة او تركيب بلوري لبلورة غير معروفة التركيب؟

الجواب:

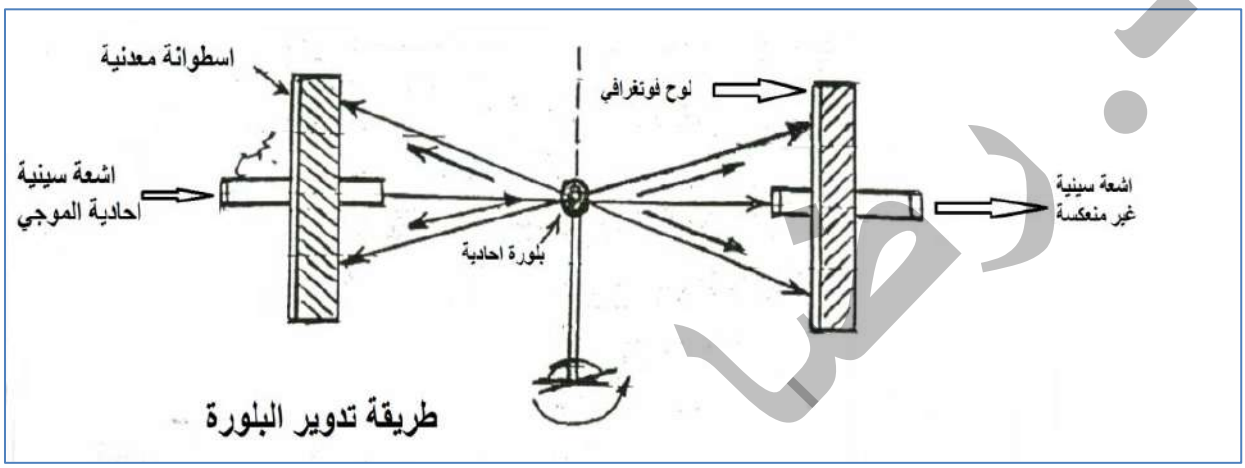
لا يمكن استخدام طريقة لاوي لتعيين احداثيات شبيكة او تركيب بلوري لبلورة غير معروفة التركيب بسبب المدى الواسع لقيم λ حيث ان البقعة الواحدة تمثل عدة انعكاسات اي يمكن لمجاميع من السطوح المتوازية ذات فسح متباينة ان تعكس آنياً عدة اطوال موجية لعدة قيم للرتبة. وبذلك يتعذر اعتبار شدة بقعة ما على الفلم ممثلة لشدة انعكاس لسطح معين (hkl) ذات فسحة معينة.

2- طريقة البلورة الدوارة Rotating Crystal Method(طريقة تدوير البلورة):

في هذه الطريقة يسمح لبلورة احادية بالدوران المستمر حول محور ثابت عمودي على اتجاه سقوط الاشعة السينية ذات طول موجي أحادي monochromatic وبذلك تتغير زاوية براك (θ) بوصفها دالة على الزمن والشكل ادناه يوضح جهاز التصوير المستخدم في هذه الطريقة .

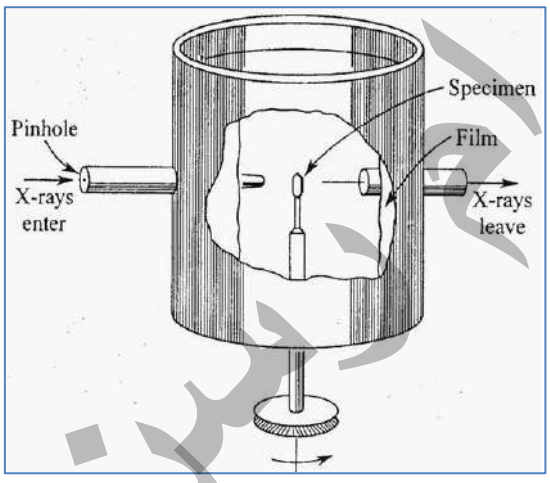
تستخدم طريقة تدوير البلورة للحالات التالية:

- يستفاد من طريقة تدوير البلورة لتعيين التركيب البلوري.
- تنحصر فائدتها في تعيين اطوال محاور شبيكة بلورة معروفة التماثل.
- واذا كان التركيب البلوري معلوم فيمكن استخدام هذه الطريقة لمعرفة كون البلورة أحادية ام لا.
- يمكن بهذه الطريقة تحديد شكل وحجم وحدة الخلية وترتيب الذرات داخل الخلية .



طريقة تدوير البلورة

ان مبدا عمل هذه الطريقة يمكن ان يوضح من خلال ما يلي :-



- ❖ الشكل التخطيطي يوضح الاجزاء الرئيسية حيث توضع البلورة المطلوب دراستها عادة على محور قابل للدوران ويكون حجمها ($1mm^3$) ويلصق الفلم على السطح الداخلي للاسطوانة المتحدة المركز مع محور الدوران .
- ❖ توجه حزمة احادية التردد في خطوط متوازية وتسقط على البلورة التي يمكنها الدوران اذا تطلب ذلك حيث يتم الحصول عل شرط الحيود وfذلك فان (ɵ,λ) يحققان قانون براك

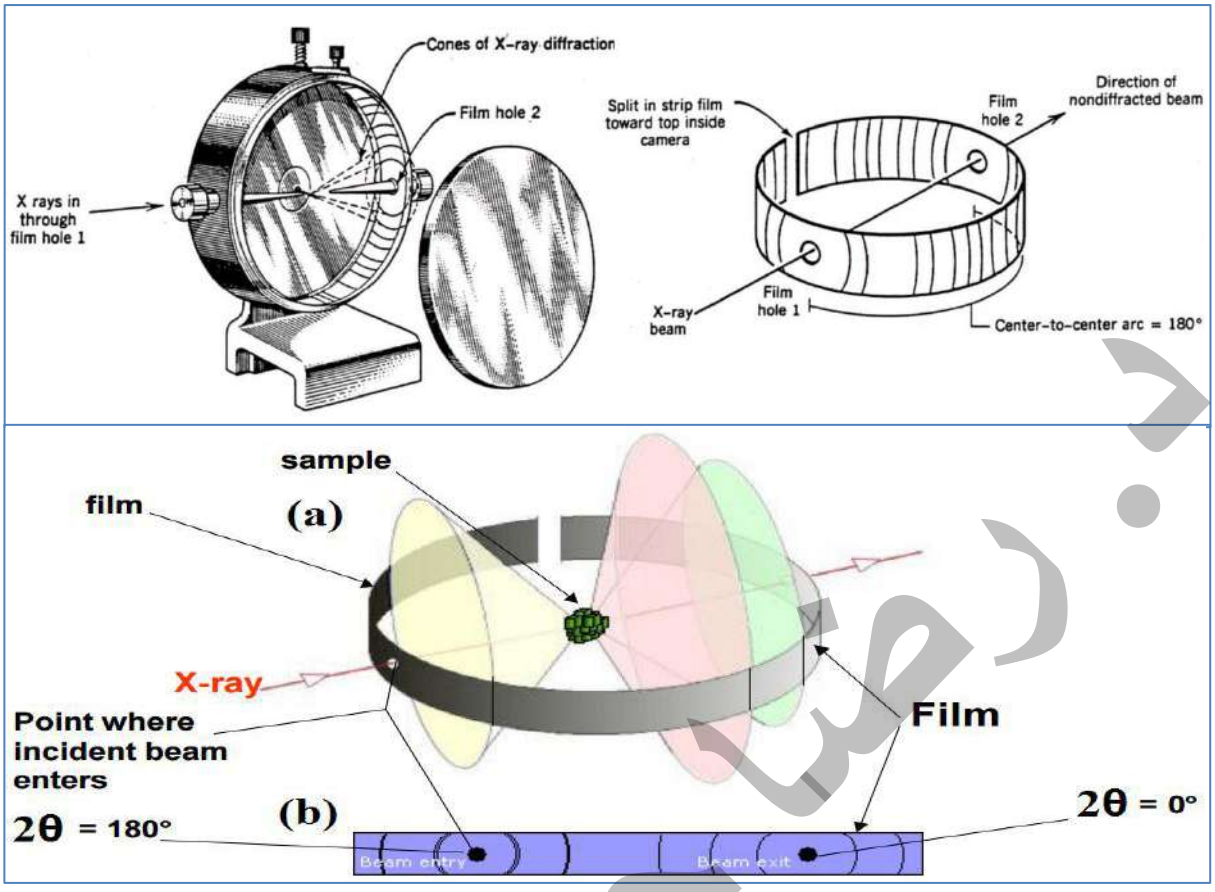
,وعند تحقيق قانون براك فان الحزمة الحايدة تنفذ من البلورة وهكذا تظهر البقع على الفلم لتسجيل نمط الحيود للاتجاهات المختلفة .

طريقة المسحوق (ديباي – شيرر) Powder method

في هذه الطريقة نستخدم مسحوق البلورة الذي يجب ان يكون متجانساً من ناحية خلط المسحوق وحجم الحبيبات المكونة له ، ان هذا المسحوق المتجانس من الحبيبات او البلورات الصغيرة له القابلية عند تعرضه للاشعة السينية الاحادية الموجة ان يعكس بعدة قيم لزاوية براك (ɵ) .

ولغرض توضيح هذه الطريقة نبين ما يلي :-

- ❖ تسحق البلورة بشكل جيد الى ان تصبح على هيئة حبيبات دقيقة جداً اي على شكل مسحوق يوضع على مسار الاشعة السينية ذات التردد الأحادي.



❖ كل حبة من حبيبات المسحوق يمكن اعتبارها بلورة صغيرة جداً ذات اتجاه عشوائي بالنسبة للاشعة الساقطة.

❖ بما ان هناك عدداً كبيراً من هذه الحبيبات في مسار الاشعة الساقطة فيكون هناك احتمال كبير من توافق وضع أحد الحبيبات أو عدد منها مع زاوية سقوط الاشعة بحيث يتحقق قانون براك وبذلك تحدث ظاهرة الحيود.

❖ ان نمط الحيود الذي يتم الحصول عليه بهذه الطريقة مطابقاً للحيود الذي نحصل عليه من البلورة الدوارة حول جميع المحاور الممكنة وليس حول محور واحد.

❖ وبما ان اتجاه الانعكاسات متساو في جميع الاتجاهات تقريبا لذا فان الحزمة المحادة تكون مخروطا محوره باتجاه الشعاع الساقط.

❖ يبين الشكل مخاريط من الشعاع المحاد. يبين الشكل نمط الحيود على غشاء تصويري مسطح. ان خط الحيود ذا الزاوية الصغيرة 2Θ يعود الى مستويات متوازية ذات أكبر مسافة بينية d_{hkl} وتكون لها أكبر قيمة عندما تكون قيمة $h^2 + k^2 + l^2$ اصغر ما يمكن.

تستخدم طريقة المسحوق للحالات التالية:

✓ تستعمل بشكل واسع في حقل فحص المعادن، في دراسة مكونات السبائك ونسب تلك المكونات.

✓ وتستخدم عند عدم إمكانية الحصول على بلورة أحادية كبيرة نسبيا (الحجم 1 mm^3) من بعض المواد.

✓ هذه الطريقة مفيدة جدا في الحالات تعين ثوابت البلورة مثل ايجاد قيم (d) للسطوح المختلفة للمسحوق

✓ تستخدم في دراسة تغيير الطور للمواد

الشبيكة المقلوبة (Reciprocal lattice):

أن نظرية الشبيكة المقلوبة تعد من المفاهيم الأساسية في علم البلورات وفي فيزياء الحالة الصلبة بحيث يمكن استخدامها للتعبير عن كل الظواهر التي تنتج من تفاعل الموجات في المواد الصلبة مثل الحيود والاستطاره وكذلك يمكن استعمال مفهوم الشبيكه المقلوبة في تفسير نظرية الحزم Band theory .

أن حيود الاشعه السينيه تنتج من أستطارتها من الذرات الواقعة ضمن اي مجموعة من المستويات المتوازية في البلوره ، فعليه من الصعب عمليا تعقب معرفة مصدر كل استطاره وذلك بسبب التداخل بين المستويات في البلوره ولمعرفة مصدر كل استطاره يمكن استخدام الشبيكة المقلوبة واظهار كل مجموعة من المستويات في البلوره بدلالة نقطة يطلق عليها بنقطة الشبيكة المقلوبة.

ان ظهور البقع السوداء على الفلم الفوتوغرافي ينتج في الحقيقة عن استطارة الاشعة السينية من الذرات الواقعة في مجموعة من المستويات المتوازية. ولتشخيص هذه البقع السوداء ومصدرها من المستويات يجب علينا مقارنة نموذج البقع السوداء على الفلم مع النموذج النظري للشبيكة المقلوبة والذي يعد مكافئاً لشكل وصورة نموذج الحيود (البقع السوداء) التي تظهر على الفلم الفوتوغرافي.

تعد الشبيكة المقلوبة من الناحية الرياضية عبارة عن تحويلات فورير (Fourier Tansformation) للشبيكة الحقيقية. تعتمد تحويلات فورير على نقاط أو موجات تعيد نفسها بشكل دوري. وبما أن المستويات البلورية في اي مجموعة من المستويات المتوازية تعيد نفسها بشكل دوري بمسافة d فعليه يمكن تطبيق نظرية تحويلات فورير هنا وكذلك يمكن كتابة دالة فورير بالشكل:

$$F(r+d) = F(r)$$

وقد أستطاع فورير أن يجزء هذه الداله الى مركبتين الاولى تدعى بالمركبه الجيبية $\sin(\alpha r)$ والثانية تدعى بمركبه جيبي تمام $\cos(\alpha r)$ ويمكن كتابة الداله بالصيغة $\exp[i(\alpha r)]$. حيث $\alpha = \frac{2\pi n}{d}$ وتمثل n عددا صحيحا و d يمثل المسافة البينية بين المستويات؟

أن الداله النهائية والتي لها علاقة بالشبيكة المقلوبه هي:

$$F(r) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(n) \exp\left(\frac{2\pi n i r}{d}\right) dr$$

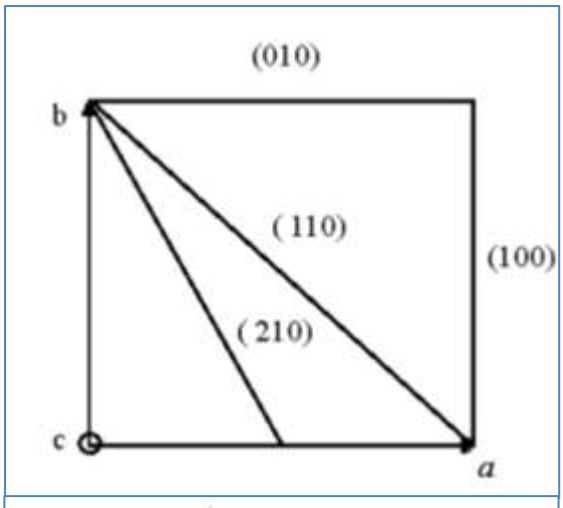
في الحقيقة جاءت تسمية الشبيكة المقلوبة من خلال المعادلة اعلاه حيث نرى ان المسافة d بين المستويات تظهر في المعادلة بصورة مقلوبة.

ان مقلوب المسافة هو الذي يعين موقع نقطة في الشبكة المقلوبة. وعليه يعد من الناحية الرياضية متجهاً. يطلق عليه متجه الشبيكة المقلوبة$(\vec{G})$ ويكتب رياضياً بالصيغة التالية: $|\vec{G}| = \frac{A}{d_{hkl}}$ حيث A يمثل عامل مقياس الرسم وقيمته اما 1 او 2π. في فيزياء الحالة الصلبة سوف نستخدم $A = 2\pi$.

طريقة بناء الشبيكة المقلوبة:

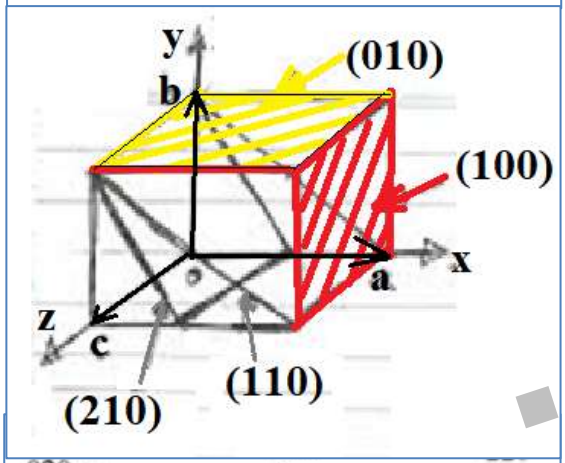
كل مجموعة من المستويات المتوازية في بلورة تُمثل بمتجهات من نقطة الأصل لشبيكة مقلوبة، وكل متجه عمودي على تلك المجموعة من المستويات التي يمثلها وان طولها يتناسب عكسياً مع المسافة البينية d لتلك المجموعة من المستويات. وبعبارة أخرى ان النقاط الواقعة عند نهايات تلك المتجهات العمودية تشكل نقاط الشبيكة المقلوبة لبلورة.

الشكل التالي يبين مجموعة الخطوط المستقيمة التي تمثل مستويات ذات احداثيات (010) و (100) و (110) و (210) مرسومة في بعدين. وتعود هذه المستويات لخلية مكعبة.

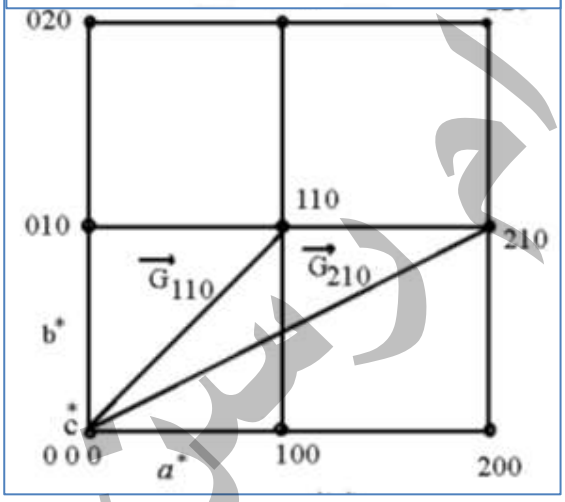


فلكي يتم تعيين مواقع نقاط الشبيكة المقلوبة التي تناظر هذه المستويات نتبع الخطوات التالية:

- أرسم من نقط الاصل المشتركة 0 إحداثيات البلورة.
- جد قيمة $\frac{1}{d_{hkl}}$ لكل مجموعة من المستويات المتوازية.
- أرسم من نقطة الاصل عمودي على المستوي ثم ضع نقطة على العمود تبعد عن نقطة الأصل $\frac{1}{d_{hkl}}$.



ويبين الشكل مجموعة من النقاط التي تمثل المستويات والتي يطلق عليها بمقلوب الشبيكة .



ان اتجاه وطول المتجه الذي يربط نقطة الأصل باية نقطة يميز توجيه وفسحة تلك المجموعة من السطوح التي تمثلها النقطة. ان مثل هذا المتجه يسمى بمتجه الشبيكة المقلوبة $|\vec{G}| = A\frac{1}{d_{hkl}}$ ، حيث A هو عامل مقياس الرسم وقيمته اما 1 او 2π .

وسوف نستخدم في فيزياء الحالة الصلبة $A = 2\pi$

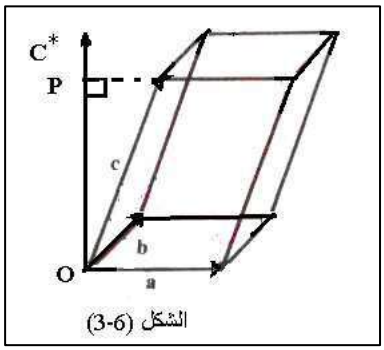
أي ان متجه الشبيكة المقلوبة هو $|\vec{G}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$

الشبيكة المقلوبة: هي عدد غير محدود من نقاط مرتبه بنظام وبشكل دوري في فضاء ثلاثي الابعاد. بحيث ان طول المتجه بين نقطة الأصل واي نقطة في الشبيكة المقلوبة تتناسب عكسياً مع المسافة البينية d في مجموعة من المستويات المتوازية في شبيكة حقيقية. تقاس أطوال المتجهات في الشبيكة المقلوبة بمقلوب وحدات المتجهات في الشبيكة المباشره (الحقيقية) : (cm^{-1}) أو (m^{-1}) أو ($Å^{-1}$).

ملاحظة : الكمية المتجه تكتب بلون غامق او يوضع فوقها سهم.

متجهات الشبيكة المقلوبة Reciprocal lattice vectors

يمكن تحديد الشـــبيكة المباشـــرة (الحقيقية) في فضـــاء حقيقي بالمحاور الاســـاســـية $\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$ ، وبنفس الطريقة يمكن تحديد الشـبيكة المقلوبة بمحاور أسـاسـية أخرى. تعرف المتجهات الاسـاسـية للشبيكة المقلوبة بدلالة المتجهات الاساسية للشبيكة $\vec{a^*}$ $\vec{b^*}$ $\vec{c^*}$ وتقرأ a- star b- star c- star بدلالة المتجهات الاساسية للشبيكة $\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$.



الشكل (3-6)

لاشـتقاق العلاقة بين [المتجهات الأسـاسـية للشـبيكة الحقيقية (المباشـرة) $\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$] وبين [متجهات الشـبيكة المقلوبة $\vec{a^*}$ $\vec{c^*}$ $\vec{b^*}$ (الشـبيكة في الفضـاء المقلوب -الفضـاء المعكوس- فضاء فورير)]، نفرض لدينا خلية من نظام ثلاثي الميل Triclinic ذات محاور أساسية $\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$ كما في الشكل:

ان حجم الخلية يسـاوي مسـاحة القاعدة في الارتفاع. وان ارتفاع الخلية يسـاوي op ويعادل d_{hkl} والعلاقة بين المساحة والحجم تعطى بالصيغة: $\frac{Area\ \text{المساحة}}{Volume\ \text{الحجم}} = \frac{1}{d_{hkl}}$

حجم خلية الوحدة في الشبيكة البلورية العادية (الحقيقية – المباشرة) $\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}$

يمكن إعادة كتابة المعادلة السابقة $\left(|\vec{G}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}}\right)$ بدلالة متجه الشبيكة المقلوبة :

البسط يمثل $\vec{a}$ .... $\vec{b}$ ...×.. $\vec{c}$ ...× .... $\vec{a}$ ...×.. $\vec{b}$

$\vec{a^*}$ $\vec{b^*}$ $\vec{c^*}$

$$\overrightarrow{G_{100}} = 2\pi\frac{\vec{b}\times\vec{c}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}} \quad \ldots\ldots \quad \vec{a^*} = 2\pi\frac{\vec{b}\times\vec{c}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}} \quad \text{---------} \quad \vec{a^*} \perp \boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c}$$

$$\overrightarrow{G_{010}} = 2\pi\frac{\vec{c}\times\vec{a}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}} \quad \ldots\ldots \quad \vec{b^*} = 2\pi\frac{\vec{c}\times\vec{a}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}} \quad \text{---------} \quad \vec{b^*} \perp \boldsymbol{c}\times\boldsymbol{a}$$

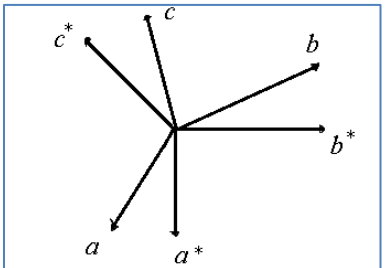
$$\overrightarrow{G_{001}} = 2\pi\frac{\vec{a}\times\vec{b}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}} \quad \ldots\ldots \quad \vec{c^*} = 2\pi\frac{\vec{a}\times\vec{b}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}} \quad \text{---------} \quad \vec{c^*} \perp \boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}$$

$$\vec{a^*}\cdot\vec{a} = \vec{b^*}\cdot\vec{b} = \vec{c^*}\cdot\vec{c} = 2\pi$$

$$\vec{a^*}\cdot\vec{a} = 2\pi \qquad \vec{b^*}\cdot\vec{a} = 0 \qquad \vec{c^*}\cdot\vec{a} = 0$$

$$\vec{a^*}\cdot\vec{b} = 0 \qquad \vec{b^*}\cdot\vec{b} = 2\pi \qquad \vec{c^*}\cdot\vec{b} = 0$$

$$\vec{a^*}\cdot\vec{c} = 0 \qquad \vec{b^*}\cdot\vec{c} = 0 \qquad \vec{c^*}\cdot\vec{c} = 2\pi$$



العلاقة بين المحاور الاساسية للشبيكة الحقيقية والمحاور الاساسية للشبيكة المقلوبة

ان تحديد مواقع نقاط الشـــبيكة الحقيقية بواســـطة المتجهات الانتقالية البدائية $\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$ وبهذا يكون المتجه الانتقالي الشـــبيكي **T** لاي نقطة يعرف :

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

وبنفس الطريقة يمكن تعريف موقع أي نقطة في الشـــبيكة المقلوبة بمتجه الشـــبيكة المقلوبة $\overrightarrow{G_{hkl}}$ بدلالة اعداد صحيحة hkl لمحاور الشبيكة المقلوبة $\vec{a^*}$ $\vec{c^*}$ $\vec{b^*}$

$$\vec{G}_{hkl} = h\vec{a^*} + k\vec{b^*} + l\vec{c^*}$$

كما نلاحظ ان حجم خلية الوحدة المقلوبة V^* يتناسب عكسياً مع حجم خلية الوحدة العادية V

$$V^* = \vec{a}^*.\vec{b}^* \times \vec{c}^* \quad \& \quad V = \vec{a}.\vec{b} \times \vec{c} \quad \& \quad V^* \propto \frac{1}{V} \quad \& \quad \vec{a}^*.\vec{b}^* \times \vec{c}^* \propto \frac{1}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}}$$

أي ان لكل بلورة شبيكتين ترافقانها وهما الشبيكة البلورية (الحقيقية- المباشرة) والشبيكة المقلوبة. وعندما نستقبل الاشعة السينية بعد حيودها عَبر البلورة فاننا نحصل على صورة تعتبر مسحاً للشبيكة المقلوبة وخصائصها.

أي اننا اذا تخيلنا اننا ننظر مباشـــرة الى البلورة لنبحث عن ترتيب الذرات فيها ، فان هذا يُعد تعاملا مع البنية البلورية الفعلية (الحقيقية - المباشرة) بينما نموذج الحيود يعتبر خريطة لمقلوب الشبيكة للبلورة.

أي ان الصـــورة التي نحصـــل عليها بالميكرســـكوب الالكتروني هي خريطة للتركيب البلوري الحقيقي. وبالمقابل صورة الفلم الفوتوغرافي للاشعة السينية بعد الحيود هي صورة للشبيكة المقلوبة.

شرط الحيود لأقصى شدة :-

لغرض الحصول على اقصى شدة للموجة المستطيرة من سطح في بلورة ما يجب ان تتحقق معـــــادلات لاوي الثلاثة والتي صـــيغتها بدلالة المتغير الاتجاهي لمتجه الموجة $\Delta\vec{K}$ وان q , r , s هي اعداد صحيحة .

$$\left.\begin{aligned} \vec{a}.\Delta\vec{K} &= 2\pi q \\ \vec{b}.\Delta\vec{K} &= 2\pi r \\ \vec{c}.\Delta\vec{K} &= 2\pi s \end{aligned}\right\} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad \text{معادلات لاوي}$$

وتتحقق هذه المعادلات الثلاثة آنياً اذا كان التغير الاتجاهي لمتجه جبهة الموجة $\Delta\vec{K}$ مســـاوياً لمتجه الشبكية المقلوبة $\mathbf{G_{hkl}}$ وبذلك لحصول على اقصى شدة .

$$\Delta\vec{K} = \vec{G}_{hkl}$$

$$\vec{k}' - \vec{k} = ha^* + kb^* + lc^*$$

ان المعادلة اعلاه تعني ان المتجهين متســاويين في القيمة والاتجاه (اطوالهما متســاوية واحداهما يوازي الآخر وان كليهما متعامدان على الســطح hkl في البلورة) . وللحصـــول على المعادلة اعلاه نعمل على تكافؤ شرط براك ولاوي يمكن اثبات ذلك كما يلي :

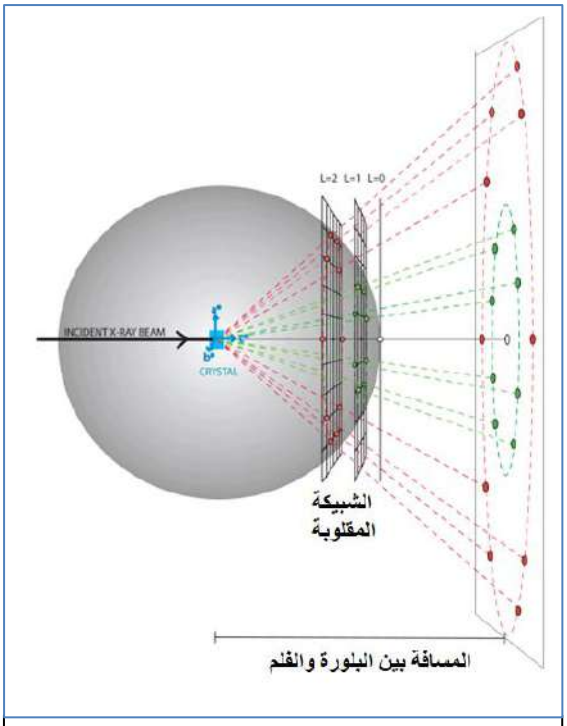
$\vec{k}'$= متجه الموجة المستطيرة $\vec{k}$ = متجه الموجة الساقطة

$$\left|\vec{k}' - \vec{k}\right| = \left|\Delta\vec{K}\right| = \left|\vec{G}_{hkl}\right|$$

قيمة مطلقة تساوي الاطوال .

د. رضا حزام رسن

البناء الهندسي لكرة ايوالد:

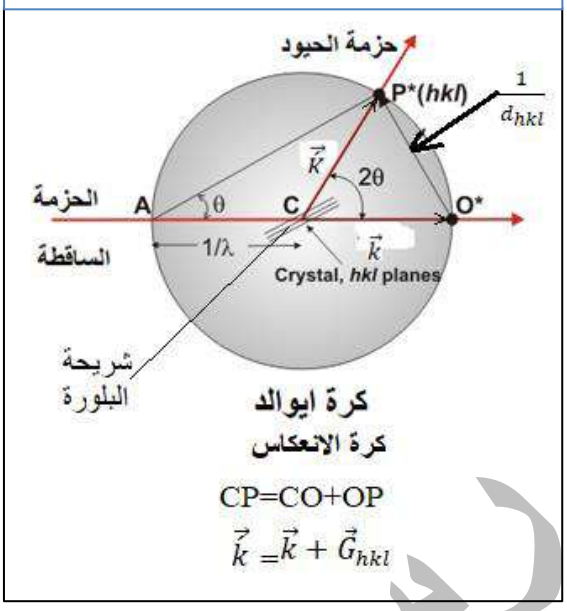


- استطاع العالم ايوالد ربط فكرة الشبيكة المقلوبة مع فكرة كرة الانعكاس التي أطلق عليها بكرة ايوالد لتفسير النتائج التجريبية لحيود الاشعة السينية.
- يمكن معرفة المستوي الذي يعمل على استطارة الاشعة السينية من معرفة اتجاه وقيمة الطول الموجي للأشعة الساقطة.
- نفرض ان النقاط المرسومة في الشكل تمثل نقاط في الشبيكة المقلوبة. نرسم متجه CO في اتجاه سقوط الاشعة السينية على ان يكون طوله يساوي $\left(\frac{1}{\lambda}\right)$ حيث λ تمثل الطول الموجي للأشعة السينية الساقطة ويمر بنقطة في الشبيكة المقلوبة مثل O.

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{d_{hkl}}\ \hat{n}$$

$$2d_{hkl} \sin \theta_{hkl} = n\lambda$$

$$\sin \theta_{hkl} = \frac{\lambda}{2d_{hkl}} = \frac{(1/d_{hkl})}{(2/\lambda)}$$



- الان إذا رسم مثلث قائم الزاوية في دائرة سيكون قطرها وتراً له والمثلث سيكون قائم الزاوية، فاذا كان قطر الدائرة $\frac{2}{\lambda}$ وأحد الساقين المتعامدين للمثلث $\frac{1}{d_{hkl}}$ كانت الزاوية التي تقابل هذا الساق هي θ كما في الشكل.

من التمثيل البياني لقانون براك نستطيع ان نحدد حيود الاشعة السينية فقط في نقطة معينة وكما يلي:

1- نضع شريحة بلورة في الموقع C

2- نسقط عليها اشعة سينية طولها الموجي λ . من نقطة A تنحرف الاشعة بزاوية θ الى النقطة P وبذلك يُكون PA زاوية θ مع الشعاع الساقط على البلورة. بحيث OP عمودي على سطح البلورة وكذلك على AP وان الزاوية PCO هي 2θ ولهذا يكون الشعاع CP باتجاه الحزمة المنعكسة، حيث ان الشكل اعلاه يمثل قانون براك بدلالة مفاهيم الشبيكة المقلوبة حيث يتحقق قانون براك.

$$G = OP = \frac{1}{d_{hkl}} = \frac{\vec{G}}{2\pi} \qquad k = CO = \frac{1}{\lambda} \qquad \acute{k} = CP$$

متجه الموجة $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ = متجه الموجة الساقطة $\vec{k}$ = متجه الموجة المستطيرة $\vec{\acute{k}}$

يحدث انعكاس براك إذا مرت كرة ايوالد (كرة الانعكاس) باي نقطة أخرى في الشبيكة المقلوبة، مثل النقطة P التي تتصل بالنقطة O بواسطة متجه الشبيكة المقلوبة $\vec{G}$ ويكون اتجاه الشعاع المنعكس (المستطير) هو $\vec{\acute{k}}$.

$$\vec{G}_{hkl} = \Delta\vec{k} \qquad \vec{\acute{k}} = \vec{k} + \vec{G}_{hkl}$$

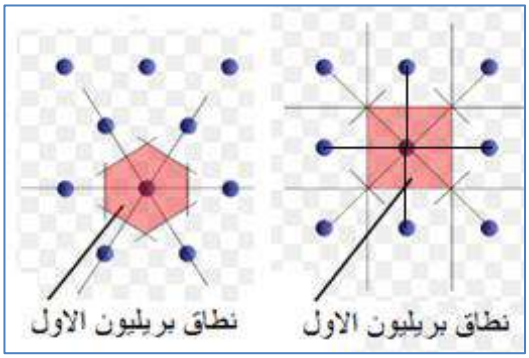
بتربيع طرفي المعادلة (1) وللحيود المرن $\vec{\acute{k}} = \vec{k}$ (لا تغير بالطاقة)

$$\vec{\acute{k}}^2 = (\vec{G}_{hkl} + \vec{k})^2 = G^2_{hke} + 2\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{k} + \vec{k}^2$$

$$G^2_{hkl} + 2\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{k} = 0$$ معادلة براك للشبيكة المقلوبة

والمعادلة الأخيرة تكافئ معادلة براك في الشبيكة الحقيقية $2d_{hkl} \sin \theta_{hkl} = n\lambda$

مناطق بريليون :Brillouin zones



المنطقة المحيطة بنقطة شبيكة مقلوبة (الشبيكة المعكوسة) في الفضاء المقلوب (فضاء فورير او فضاء متجه الموجة **k**) تسمى منطقة او نطاق بريليون الأول.

نطاق بريليون الأول: هو أصغر حجم للحيز المحيط او المتمركز حول احدى نقاط الشبكية المقلوبة والمحددة بمجموعة من السطوح التي تكون منصفة وعمودية على متجهات الشبيكة المقلوبة التي تربط تلك النقطة بالنقاط المجاورة بها كما في الشكل.

لتحديد نطاق بريليون الاول حول نقطة شبيكة مقلوبة:

1- نربط النقطة بجميع النقاط المجاورة لها بمتجهات.

2- نرسم خطوط مستقيمة (سطوح) بشكل عمودي على هذه المتجهات من نقاط المنتصف.

3- ان أصغر مساحة محصورة بالمستقيمات (السطوح) المرسومة تدعى بنطاق بريليون الأول

وحجم منطقة بريليون يعطى:

$$\mathrm{V}^* = \mathbf{V}_{BZ} = \vec{a}^* \cdot \vec{b}^* \times \vec{c}^* = \frac{(2\pi)^3}{\mathbf{V}}$$

حيث ان V هو حجم خلية الوحدة الاولية للشبيكة الحقيقية او المباشرة.

ويمكن تعريف منطقة بريليون بانها خلية ويكنر سيتز البدائية في الشبيكة المقلوبة.

منطقة بريليون تعطي تفسير هندسي لشروط الحيود متمثلة بالمعادلة $G^2{}_{hke} + 2\vec{G}_{hkl}.\,\vec{k} = 0$

للحصول على شرط الحيود $\mathbf{G^2{}_{hke}} = 2\vec{\boldsymbol{G}}_{\boldsymbol{hkl}}.\,\vec{\boldsymbol{k}}$

ملاحظة: تصحيح الخطأ في المصادر المعتمدة لمادة فيزياء الحالة الصلبة:

المصادر

- فيزياء الحالة الصلبة --- تأليف: د. يحيى نوري الجمال   صفحة 155 معادلة 4-59
- فيزياء الحالة الصلبة ------- تأليف: د. مؤيد جبرائيل يوسف   صفحة 136 معادلة 2-80

الخطأ: $\mathrm{V}_{\mathrm{BZ}} = \left(\frac{2\pi}{\mathrm{V}}\right)^3$ الصح: $\mathbf{V}_{\mathbf{BZ}} = \frac{(2\pi)^3}{\mathbf{V}}$ او $\mathbf{V}_{\mathbf{BZ}} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$

تاليف: د. يحيى نوري –فيزياء الحالة الصلبة

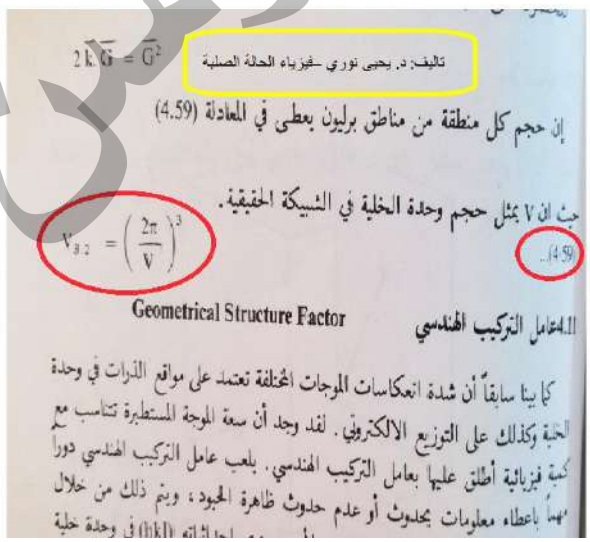
$2\vec{k}.\vec{G} = G^2$

إن حجم كل منطقة من مناطق برليون يعطى في المعادلة (4.59)

$V_{BZ} = \left(\frac{2\pi}{V}\right)^3$ (4.59)

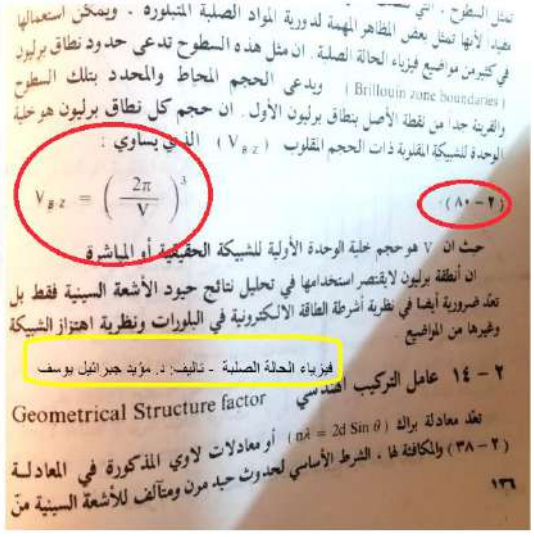
حيث ان V يمثل حجم وحدة الخلية في الشبكة الحقيقية.

العامل التركيب الهندسي Geometrical Structure Factor



كما بينا سابقاً أن شدة انعكاسات الموجات المختلفة تعتمد على مواقع الذرات في وحدة الخلية وكذلك على التوزيع الالكتروني. لقد وجد أن سعة الموجة المستطيرة تتناسب مع كمية فيزيائية أطلق عليها بعامل التركيب الهندسي. يلعب عامل التركيب الهندسي دوراً مهماً باعطاء معلومات بحدوث أو عدم حدوث ظاهرة الحيود؛ ويتم ذلك من خلال

تمثل السطوح ... الوحدة للشبكة المقلوبة ذات الحجم المقلوب (V_{BZ}) الذي يساوي:



$V_{BZ} = \left(\frac{2\pi}{V}\right)^3$ (٢-٨٠)

حيث ان V هو حجم خلية الوحدة الأولية للشبكة الحقيقية أو المباشرة

ان أنطقة برليون لايقتصر استخدامها في تحليل نتائج حيود الأشعة السينية فقط بل تعد ضرورية أيضا في نظرية أشرطة الطاقة الالكترونية في البلورات ونظرية اهتزاز الشبكة وغيرها من المواضيع

فيزياء الحالة الصلبة - تاليف: د. مؤيد جبرائيل يوسف

٢ – ١٤ عامل التركيب الهندسي Geometrical Structure factor

تعد معادلة براك ($n\lambda = 2d \sin\theta$) أو معادلات لاوي المذكورة في المعادلة (٢ – ٣٨) والمكافئة لها ، الشرط الأساسي لحدوث حيود مرن ومتآلف للأشعة السينية من

١٣٦

د. رضا حزام رسن

مثال: اوجد المتجهات الأساسية للشبيكة المقلوبة لشبيكة مكعب بسيط SC ؟

مثال: اثبت ان الشبيكة المقلوبة لشبيكة مكعب بسيط هي ايضاً شبيكة مكعب بسيط طول ضلعه $\frac{2\pi}{a}$

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

$$\overrightarrow{a^*} = 2\pi\frac{\vec{b}\times\vec{c}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}} \qquad \overrightarrow{b^*} = 2\pi\frac{\vec{c}\times\vec{a}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}} \qquad \overrightarrow{c^*} = 2\pi\frac{\vec{a}\times\vec{b}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}}$$

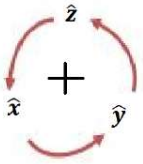
$$V = |\vec{a}\times\vec{b}\cdot\vec{c}| = |a\hat{x}\times a\hat{y}\cdot a\hat{z}| = |a^2\hat{z}\cdot a\hat{z}| = |a^3|$$

$$\overrightarrow{a^*} = 2\pi\frac{\vec{b}\times\vec{c}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}} = \frac{2\pi}{a^3}(\vec{b}\times\vec{c}) = \frac{2\pi}{a^3}(a\hat{y}\times a\hat{z}) = \frac{2\pi a^2}{a^3}(\hat{y}\times\hat{z}) = \frac{2\pi}{a}\hat{x}$$

$$\overrightarrow{a^*} = \frac{2\pi}{a}\hat{x}$$

$$\overrightarrow{b^*} = 2\pi\frac{\vec{c}\times\vec{a}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}} = \frac{2\pi}{a^3}(\vec{c}\times\vec{a}) = \frac{2\pi}{a^3}(a\hat{z}\times a\hat{x}) = \frac{2\pi a^2}{a^3}(\hat{z}\times\hat{x}) = \frac{2\pi}{a}\hat{y}$$

$$\overrightarrow{b^*} = \frac{2\pi}{a}\hat{y}$$



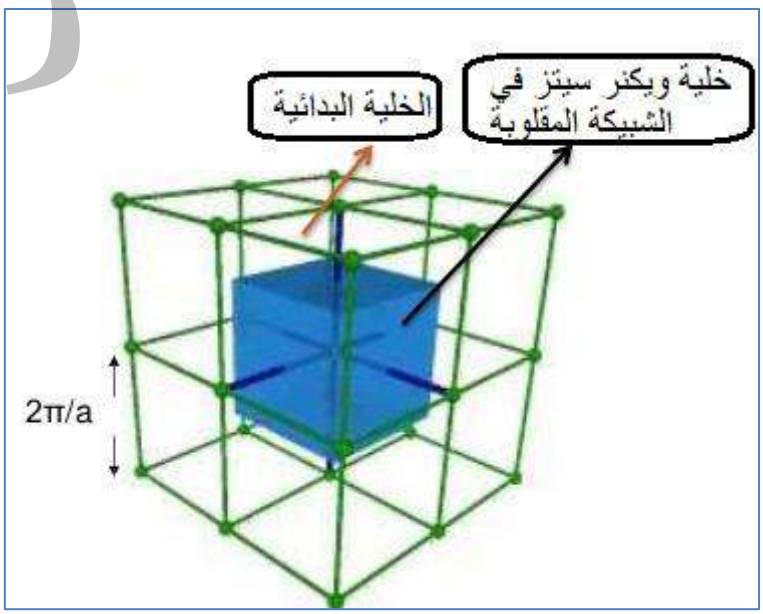
$$\overrightarrow{c^*} = 2\pi\frac{\vec{a}\times\vec{b}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}} = \frac{2\pi}{a^3}(\vec{a}\times\vec{b}) = \frac{2\pi}{a^3}(a\hat{x}\times a\hat{y}) = \frac{2\pi a^2}{a^3}(\hat{x}\times\hat{y}) = \frac{2\pi}{a}\hat{z}$$

$$\overrightarrow{c^*} = \frac{2\pi}{a}\hat{z}$$

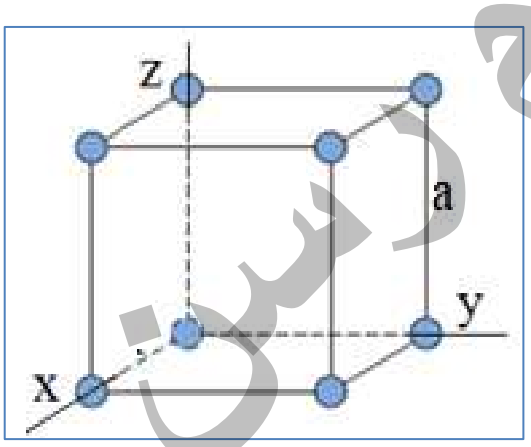
$$\vec{G}_{hkl} = h\overrightarrow{a^*} + k\overrightarrow{b^*} + l\overrightarrow{c^*}$$

$$\vec{G}_{hkl} = h\frac{2\pi}{a}\hat{x} + k\frac{2\pi}{a}\hat{y} + l\frac{2\pi}{a}\hat{z} \quad \ldots\ldots \quad \vec{G}_{hkl} = \frac{2\pi}{a}(h\hat{x} + k\hat{y} + l\hat{z})$$

$$V^* = V_{BZ} = \overrightarrow{a^*}\cdot\overrightarrow{b^*}\times\overrightarrow{c^*} = \frac{2\pi}{a}\hat{x}\cdot\frac{2\pi}{a}\hat{y}\times\frac{2\pi}{a}\hat{z} = \frac{2\pi}{a}\hat{x}\cdot\frac{4\pi^2}{a^2}\hat{x} = \frac{(2\pi)^3}{a^3} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 = \frac{(2\pi)^3}{V}$$



الشبيكة المقلوبة (الشبيكة المعكوسة)

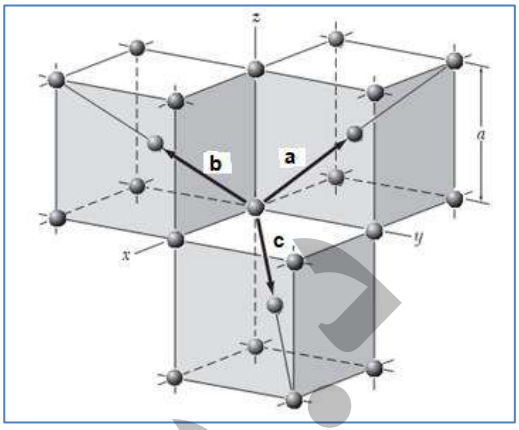


الشبيكة البلورية (الحقيقية او المباشرة)

د. رضا حزام رسن

مثال: اوجد المتجهات الأساسية للشبيكة المقلوبة لشبيكة مكعب متمركز الجسم BCC ؟

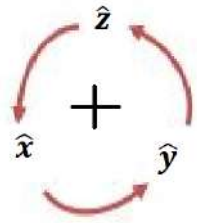
مثال: اثبت ان الشبيكة المقلوبة لمكعب BCC هي شبيكة مكعب FCC ؟



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

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

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



$V = |\vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c}| = \frac{1}{2}a^3$ تم اثباتها في الفصل الأول

$$\vec{a^*} = 2\pi \frac{\vec{b}\times\vec{c}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}} \quad \vec{b^*} = 2\pi \frac{\vec{c}\times\vec{a}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}} \quad \vec{c^*} = 2\pi \frac{\vec{a}\times\vec{b}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}}$$

$$\vec{a^*} = 2\pi \frac{\vec{b}\times\vec{c}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}} = \frac{2\pi}{\frac{1}{2}a^3}(\vec{b} \times \vec{c}) = \frac{4\pi}{a^3}(\vec{b} \times \vec{c})$$

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

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

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

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

$$\vec{a^*} = \frac{4\pi}{a^3}(\vec{b} \times \vec{c}) = \frac{4\pi}{a^3}\left(\frac{a^2}{2}(\hat{y} + \hat{z})\right) = \frac{2\pi}{a}(\hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{a^*} = \frac{2\pi}{a}(\hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{b^*} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{z}) \qquad \vec{c^*} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y})$$

وبنفس الطريقة يمكن اثبات

انتهى الجواب

$$\vec{G}_{hkl} = h\vec{a^*} + k\vec{b^*} + l\vec{c^*}$$
$$\vec{G}_{hkl} = h\frac{2\pi}{a}(\hat{y} + \hat{z}) + k\frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{z}) + l\frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y})$$
$$\vec{G}_{hkl} = \frac{2\pi}{a}\{h(\hat{y} + \hat{z}) + k(\hat{x} + \hat{z}) + l(\hat{x} + \hat{y})\}$$

المتجهات الانتقالية الأساسية للشبيكة المقلوبة $(\vec{a^*}\ \vec{b^*}\ \vec{c^*})$ هنا تمثل شبيكة مكعب *FCC*

المتجهات الانتقالية الأساسية لشبيكة مكعب BCC

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

حجم خلية الوحدة في الشبيكة الحقيقية $V = |\vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c}| = \frac{1}{2}a^3$

والمتجهات الانتقالية للشبيكة المقلوبة لها ستكون شبيكة مقلوبة لمكعب FCC

$$\vec{a^*} = \frac{2\pi}{a}(\hat{y} + \hat{z})\quad \vec{b^*} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{z})\quad \vec{c^*} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y})$$

سؤال : اثبت ان حجم خلية الوحدة المقلوبة V^* شبيكة مقلوبة FCC

$$V^* = \vec{a^*} \cdot \vec{b^*} \times \vec{c^*} = 2\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$$

طبعا يجب اجراء الضرب الاتجاهي اولاً وبعدها يتم اكمال الضرب العددي

$$\vec{a^*} = \frac{2\pi}{a}(\hat{y} + \hat{z})\quad \vec{b^*} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{z})\quad \vec{c^*} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y})$$
$$V^* = \vec{a^*} \cdot \vec{b^*} \times \vec{c^*} = \left(\frac{2\pi}{a}\hat{y} + \frac{2\pi}{a}\hat{z}\right) \cdot \left(\frac{2\pi}{a}\hat{x} + \frac{2\pi}{a}\hat{z}\right) \times \left(\frac{2\pi}{a}\hat{x} + \frac{2\pi}{a}\hat{y}\right)$$
$$(\vec{b^*} \times \vec{c^*}) = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{2\pi}{a} & 0 & \frac{2\pi}{a} \\ \frac{2\pi}{a} & \frac{2\pi}{a} & 0 \end{vmatrix}$$
$$(\vec{b} \times \vec{c}) = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{2\pi}{a} & 0 & \frac{2\pi}{a} \\ \frac{2\pi}{a} & \frac{2\pi}{a} & 0 \end{vmatrix} \begin{matrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \frac{2\pi}{a} & 0 & \frac{2\pi}{a} \\ \frac{2\pi}{a} & \frac{2\pi}{a} & 0 \end{matrix}$$
$$\vec{b} \times \vec{c} = \left(0 - \frac{4\pi^2}{a^2}\right)\hat{x} + \left(\frac{4\pi^2}{a^2} - 0\right)\hat{y} + \left(\frac{4\pi^2}{a^2} - 0\right)\hat{z}$$
$$= \frac{-4\pi^2}{a^2}\hat{x} + \frac{4\pi^2}{a^2}\hat{y} + \frac{4\pi^2}{a^2}\hat{z}$$
$$V^* = \vec{a^*} \cdot \vec{b^*} \times \vec{c^*} = \left(\frac{2\pi}{a}\hat{y} + \frac{2\pi}{a}\hat{z}\right) \cdot \left(\frac{-4\pi^2}{a^2}\hat{x} + \frac{4\pi^2}{a^2}\hat{y} + \frac{4\pi^2}{a^2}\hat{z}\right)$$
$$V^* = \frac{8\pi^3}{a^3} + \frac{8\pi^3}{a^3} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 + \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3 = 2\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$$

مثال: اوجد المتجهات الأساسية للشبيكة المقلوبة لشبيكة مكعب متمركز الاوجه FCC ؟

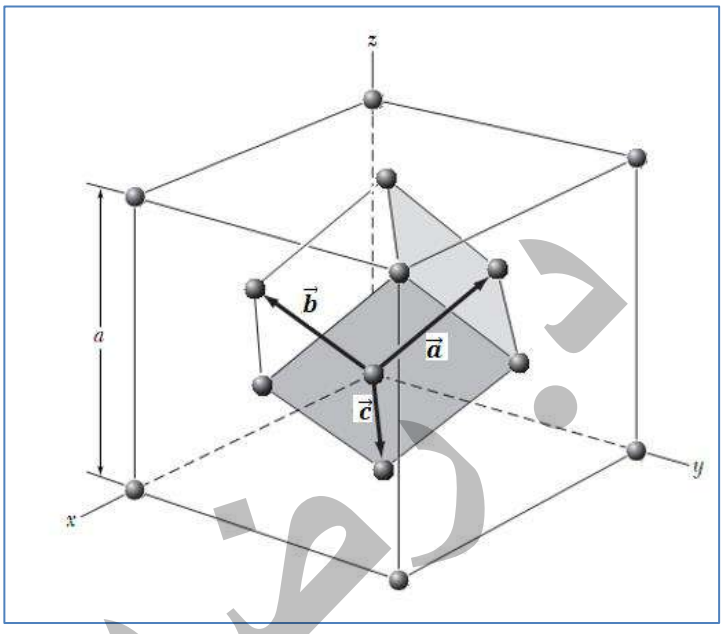
مثال: اثبت ان الشبيكة المقلوبة لمكعب FCC هي شبيكة مكعب BCC ؟

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

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

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

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



حجم الخلية الاولية لشبيكة مكعب متمركز الاوجه تم اثباتها في الفصل الاول

$$\vec{a^*} = 2\pi\frac{\vec{b}\times\vec{c}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}} \qquad \vec{b^*} = 2\pi\frac{\vec{c}\times\vec{a}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}}$$

$$\vec{c^*} = 2\pi\frac{\vec{a}\times\vec{b}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}}$$

$$\vec{a^*} = 2\pi\frac{\vec{b}\times\vec{c}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}} = \frac{2\pi}{\frac{1}{4}a^3}(\vec{b}\times\vec{c}) = \frac{8\pi}{a^3}(\vec{b}\times\vec{c})$$

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

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

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

$$= -\frac{a^2}{4}\hat{x} + \frac{a^2}{4}\hat{y} + \frac{a^2}{4}\hat{z} = \frac{a^2}{4}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{a^*} = \frac{8\pi}{a^3}(\vec{b}\times\vec{c}) = \frac{8\pi}{a^3}\left(\frac{a^2}{4}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})\right) = \frac{2\pi}{a}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$$

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

وبنفس الطريقة يمكن اثبات

$$\vec{b^*} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}) \qquad \vec{c^*} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$

انتهى الجواب

المتجهات الانتقالية الأساسية للشبيكة المقلوبة $(\overrightarrow{a^*}\ \overrightarrow{b^*}\ \overrightarrow{c^*})$ ***هنا تمثل شبيكة مكعب*** **BCC**

$$\vec{G}_{hkl} = h\overrightarrow{a^*} + k\overrightarrow{b^*} + l\overrightarrow{c^*}$$

$$\vec{G}_{hkl} = h\frac{2\pi}{a}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) + k\frac{2\pi}{a}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) + l\frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$

$$\vec{G}_{hkl} = \frac{2\pi}{a}\{h(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) + k(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) + l(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})\}$$

المتجهات الانتقالية الأساسية للشبيكة المقلوبة $(\overrightarrow{a^*}\ \overrightarrow{b^*}\ \overrightarrow{c^*})$ هنا تمثل شبيكة مكعب *BCC*

المتجهات الانتقالية الأساسية لشبيكة مكعب FCC

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

$V = |\vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c}| = \frac{1}{4}a^3$ حجم خلية الوحدة في الشبيكة الحقيقية

والمتجهات الانتقالية للشبيكة المقلوبة لها ستكون شبيكة مقلوبة لمكعب BCC

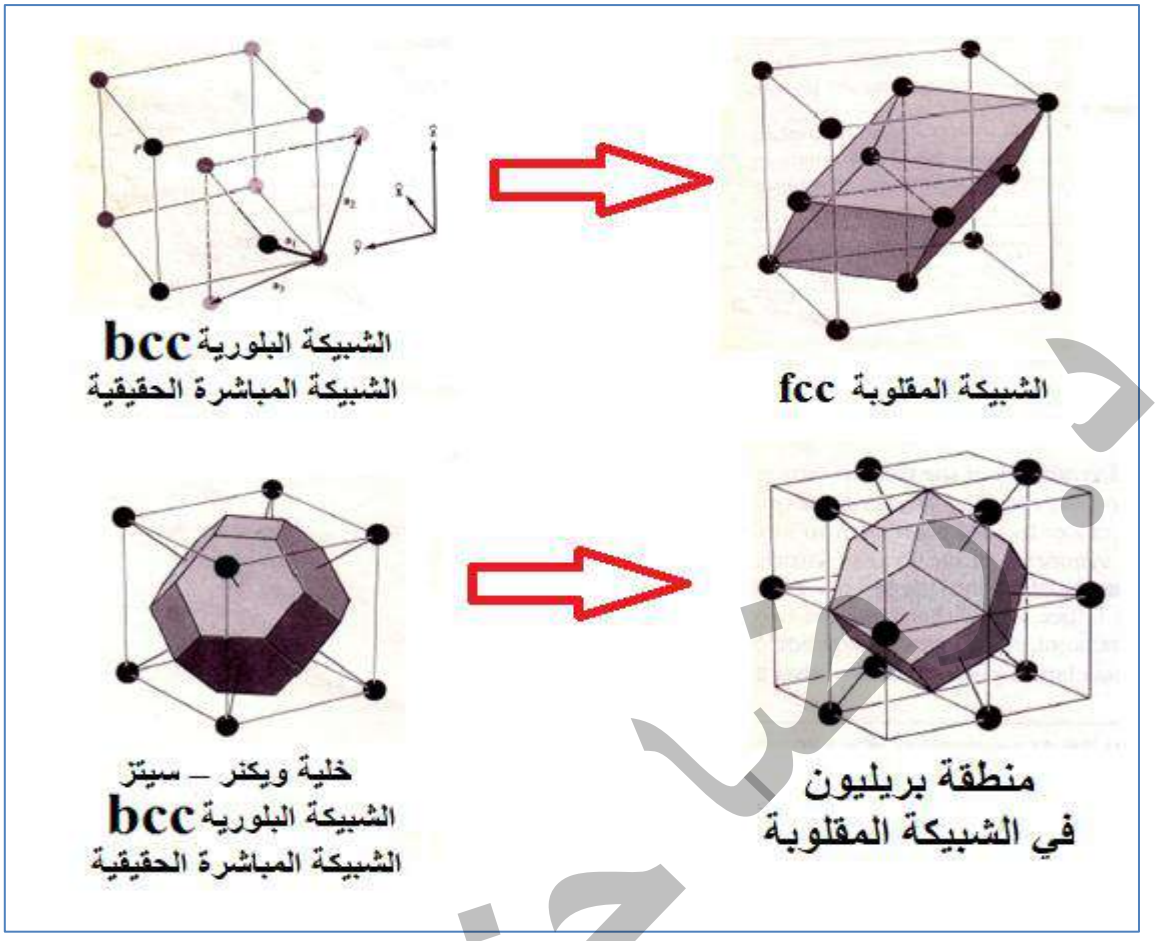
$$\overrightarrow{a^*} = \frac{2\pi}{a}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) \quad \overrightarrow{b^*} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}) \quad \overrightarrow{c^*} = \frac{2\pi}{a}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$

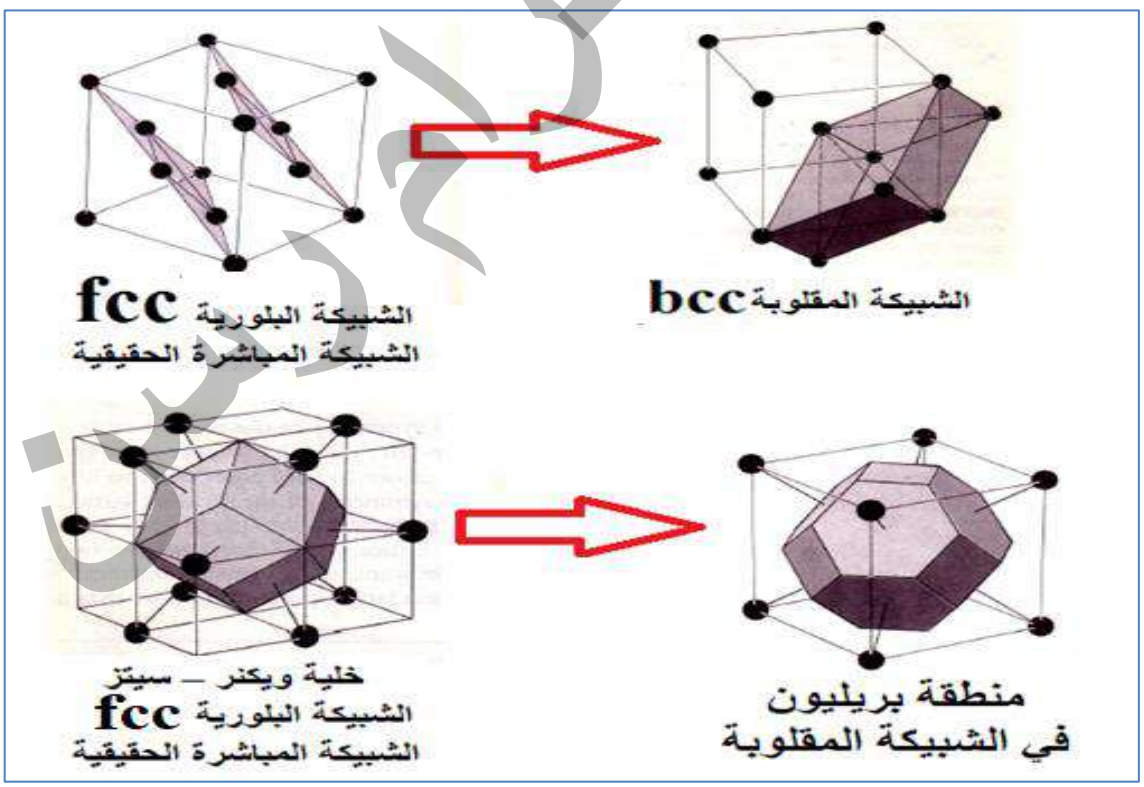
سؤال H.W : اثبت ان حجم خلية الوحدة المقلوبة V^* لشبيكة مقلوبة BCC

$$V^* = \overrightarrow{a^*} \cdot \overrightarrow{b^*} \times \overrightarrow{c^*} = 4\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$$

طبعا يجب اجراء الضرب الاتجاهي أولاً وبعدها يتم اكمال الضرب العددي

د. رضا حزام رسن


الشبيكة البلورية bcc
الشبيكة المباشرة الحقيقية
الشبيكة المقلوبة fcc
خلية ويكنر – سيتز
الشبيكة البلورية bcc
الشبيكة المباشرة الحقيقية
منطقة بريليون
في الشبيكة المقلوبة


fcc الشبيكة البلورية
الشبيكة المباشرة الحقيقية
الشبيكة المقلوبة bcc
خلية ويكنر – سيتز
الشبيكة البلورية fcc
الشبيكة المباشرة الحقيقية
منطقة بريليون
في الشبيكة المقلوبة

مثال: ايجاد فسحة السطوح d_{hkl} (الفسحة البينية) باستعمال افكار الشبيكة المقلوبة ؟

يمكن ايجاد (d_{hke}) باستخدام مفاهيم الشبيكة المقلوبة مثل المعادلات :

$$\vec{G}_{hkl}=\left(\frac{2\pi}{d_{hkl}}\right)\vec{n}\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots 1 \qquad \vec{G}_{hkl}= ha^* + kb^* + lc^*\ldots\ldots 2$$

تمثل المعادلة 2 اي متجه في الشبيكة المقلوبة من نقطة الاصل الشبيكة الى النقطة (hkl) حيث مثلنا المستوي (hkl) بنقطة. اما المعادلة 1 فتمثل متجه الشبيكة المقلوبة حيث n وحدة متجه او متجه الوحدة. وباستخدام الضرب العددي للمعادلة 2 اي المتجه G_{hkl} بنفسه .

$$\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{G}_{hkl} = (ha^* + kb^* + lc^*).(ha^* + kb^* + lc^*)$$
$$= hh\, a^*.a^* + hk\, a^*.b^* + hl\, a^*.c^* + \ldots$$
$$kh\, b^*.a^* + kk\, b^*.b^* + kl\, b^*.c^* +$$
$$lh\, c^*.a^* + lk\, c^*.b^* + ll\, c^*.c^*$$

نستخدم العلاقة

$$a^*.b^* = a^*b^* \cos\gamma^*$$
$$b^*.c^* = b^*c^* \cos\alpha^*$$
$$c^*.a^* = c^*a^* \cos\beta^*$$

نرتب المعادلة ونستخدم المعادلة لنحصل على:

$$\mathbf{G^2_{hke} = h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2} + 2hka^* b^* \cos\gamma^* + 2klb^* c^* \cos\alpha^* + 2lh\, c^* a^* \cos\beta^*}$$

ان المعادلة الاخيرة تمثل تعبيراً عاماً للنظام البلوري الثلاثي الميل والذي فيه لا تتساو الاضلاع ولا الزوايا. وايضاً **ينطبق على جميع الأنظمة البلورية الأخرى**.

$a^* = b^* = c^*$ والزوايا $\gamma^* = \alpha^* = \beta^* = 90^o$

$$G^2_{hkl} = h^2 a^{*2} + k^2 b^{*2} + l^2 c^{*2}$$

$$\& \; a^* = \frac{2\pi}{a} \;\; \& \; |\vec{G}| = G = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$$

$$G^2_{hke} = (h^2 + k^2 + l^2)a^{*2}$$

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

$$\frac{4\pi 2}{d^2_{hkl}} = (h^2 + k^2 + l^2)\frac{4\pi 2}{a^2}$$

$$d^2_{hkl} = \frac{a^2}{h^2+k^2+l^2}$$

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

مثال: برهن عل ان متجه الشبيكة المقلوبة $\overrightarrow{G_{hkl}}$ يكون عمودياً على المستوي (hkl)؟

الجواب:

لإثبات أن متجه الشبكة المقلوبة $\vec{G}_{hkl} = h\vec{a^*} + k\vec{b^*} + l\vec{c^*}$ عمودي على المستوي (hkl).

يكفي ان نثبت ان $\overrightarrow{G_{hkl}}$ عمودي على متجهين غير متوازيين في هذا المستوي. المستوي البلوري الذي معاملات ميلر له هي hkl هو مستوي يُعرف بالنقاط $\frac{a}{h}, \frac{b}{k}, \frac{c}{l}$.

يمكن ان ناخذ المتجهين $\left(\frac{\vec{a}}{h} - \frac{\vec{b}}{k}\right)$ and $\left(\frac{\vec{a}}{h} - \frac{\vec{c}}{l}\right)$ اللذان يقعان في هذا المستوي. فاذا كان حاصل الضرب العددي لهذيين المتجهين مع متجه الشبكة المقلوبة $\overrightarrow{G_{hkl}}$ يساوي صفر، فان متجه الشبكة المقلوبة $\overrightarrow{G_{hkl}}$ يكون عمودياً عل سطح البلورة (hkl)

$$\vec{\mathbf{G}} \cdot \left(\frac{\vec{a}}{h} - \frac{\vec{b}}{k}\right) = 0 \quad (\boldsymbol{\theta = 90}) \quad \rightarrow \quad \boldsymbol{cos\theta = 0} \quad \rightarrow \quad \vec{\mathbf{G}} \perp (\boldsymbol{hkl})$$

$$\vec{\mathbf{G}} \cdot \left(\frac{\vec{a}}{h} - \frac{\vec{b}}{k}\right) = \left(h\vec{a^*} + k\vec{b^*} + l\vec{c^*}\right) \cdot \left(\frac{\vec{a}}{h} - \frac{\vec{b}}{k}\right)$$

$$= \frac{h}{h}(\vec{a^*} \cdot \vec{a}) - \frac{h}{k}(\vec{a^*} \cdot \vec{b}) + \frac{k}{h}(\vec{b^*} \cdot \vec{a}) - \frac{k}{k}(\vec{b^*} \cdot \vec{b}) + \frac{l}{h}(\vec{c^*} \cdot \vec{a}) - \frac{l}{k}(\vec{c^*} \cdot \vec{b})$$

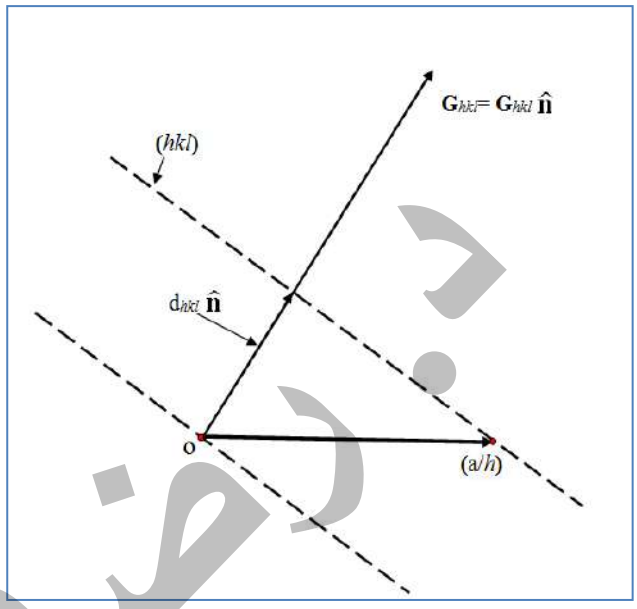
$\boldsymbol{\vec{a^*} \cdot \vec{a} = 2\pi}$	$\boldsymbol{\vec{b^*} \cdot \vec{a} = 0}$	$\boldsymbol{\vec{c^*} \cdot \vec{a} = 0}$
$\boldsymbol{\vec{a^*} \cdot \vec{b} = 0}$	$\boldsymbol{\vec{b^*} \cdot \vec{b} = 2\pi}$	$\boldsymbol{\vec{c^*} \cdot \vec{b} = 0}$
$\boldsymbol{\vec{a^*} \cdot \vec{c} = 0}$	$\boldsymbol{\vec{b^*} \cdot \vec{c} = 0}$	$\boldsymbol{\vec{c^*} \cdot \vec{c} = 2\pi}$

$$\therefore \ \vec{\mathbf{G}} \cdot \left(\frac{\vec{a}}{h} - \frac{\vec{b}}{k}\right) = 0$$

بنفس الطريقة $\vec{\mathbf{G}} \cdot \left(\frac{\vec{a}}{h} - \frac{\vec{c}}{l}\right) = 0$

أي ان متجه الشبكة المقلوبة $\overrightarrow{G_{hkl}}$ يكون عمودياً عل سطح البلورة (hkl)

مثال: اثبت أن فسحة السطوح (المسافة البينية) المسافة بين مستويين متوازيين متعاقبين في الشبيكة تساوي $d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G}_{hkl}|}$



اذا كان $\left(\hat{\mathbf{n}} = \frac{\vec{\mathbf{G}}}{|\vec{\mathbf{G}}|} = \frac{\overrightarrow{\mathbf{G}_{hkl}}}{|\overrightarrow{\mathbf{G}_{hkl}}|}\right)$ يمثل الوحدة العمودية على المستوي، الفسحة البينية $\left(\hat{\mathbf{n}} \cdot \frac{\vec{a}}{h}\right)$ كما في موضح في الشكل.

يمكن ان نلاحظ بان كلا من $\mathbf{G}_{hkl}$ والمتجه من نقطة الأصل باتجاه المستوي (hkl) يمكن ان نعبر عنها كمضاعفات لمتجه الوحدة $\hat{\mathbf{n}}$.

معادلة المستوي (hkl)

$$d_{hkl} = \vec{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{n}} = \frac{\vec{\mathbf{a}}}{h} \cdot \frac{\overrightarrow{\mathbf{G}_{hkl}}}{|\overrightarrow{\mathbf{G}_{hkl}}|} = \vec{\mathbf{r}} \cdot \frac{\overrightarrow{\mathbf{G}_{hkl}}}{|\overrightarrow{\mathbf{G}_{hkl}}|}$$

بالنسبة لاي متجه $\vec{r}$ مقداره اكبر من d_{hkl} والمتجه $(\vec{\boldsymbol{a}}/\mathrm{h})$ $\frac{a}{h}, \frac{b}{k}, \frac{c}{l}$

$$d_{\ hkl} = \frac{\vec{\mathbf{a}} \cdot \overrightarrow{\mathbf{G}_{hkl}}}{h|\overrightarrow{\mathbf{G}_{hkl}}|} = \frac{\vec{\mathbf{a}} \cdot \left(h\overrightarrow{a^*} + k\overrightarrow{b^*} + l\overrightarrow{c^*}\right)}{h|\overrightarrow{\mathbf{G}_{hkl}}|}$$

$$d_{\ hkl} = \frac{h(\vec{\boldsymbol{a}} \cdot \overrightarrow{a^*}) + k\left(\vec{\mathbf{a}} \cdot \overrightarrow{b^*}\right) + l(\vec{\mathbf{a}} \cdot \overrightarrow{c^*})}{h|\overrightarrow{\mathbf{G}_{hkl}}|} = \frac{h(\mathbf{2\pi}) + k(\mathbf{0}) + l(\mathbf{0})}{h|\overrightarrow{\mathbf{G}_{hkl}}|}$$

$\overrightarrow{\boldsymbol{a}^*} \cdot \vec{\boldsymbol{a}} = \mathbf{2\pi}$ $\quad \overrightarrow{\boldsymbol{b}^*} \cdot \vec{\boldsymbol{a}} = \mathbf{0}$ $\quad \overrightarrow{\boldsymbol{c}^*} \cdot \vec{\boldsymbol{a}} = \mathbf{0}$

$\overrightarrow{\boldsymbol{a}^*} \cdot \vec{\boldsymbol{b}} = \mathbf{0}$ $\quad \overrightarrow{\boldsymbol{b}^*} \cdot \vec{\boldsymbol{b}} = \mathbf{2\pi}$ $\quad \overrightarrow{\boldsymbol{c}^*} \cdot \vec{\boldsymbol{b}} = \mathbf{0}$

$\overrightarrow{\boldsymbol{a}^*} \cdot \vec{\boldsymbol{c}} = \mathbf{0}$ $\quad \overrightarrow{\boldsymbol{b}^*} \cdot \vec{\boldsymbol{c}} = \mathbf{0}$ $\quad \overrightarrow{\boldsymbol{c}^*} \cdot \vec{\boldsymbol{c}} = \mathbf{2\pi}$

$$d_{\ hkl} = \frac{\mathbf{2\pi}}{|\overrightarrow{\mathbf{G}_{hkl}}|}$$

د. رضا حزام رسن

مثال: اثبت انه لشبيكة مكعب بسيط $d^2 = \frac{a^2}{(h^2+k^2+l^2)}$ **باستعمال أفكار الشبيكة المقلوبة؟**

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

$$\vec{a^*} = \frac{2\pi}{a}\hat{x} \qquad \vec{b^*} = \frac{2\pi}{a}\hat{y} \qquad \vec{c^*} = \frac{2\pi}{a}\hat{z}$$

$$\vec{G}_{hkl} = h\vec{a^*} + k\vec{b^*} + l\vec{c^*} \qquad \vec{G}_{hkl} = h\frac{2\pi}{a}\hat{x} + k\frac{2\pi}{a}\hat{y} + l\frac{2\pi}{a}\hat{z}$$

$$|\vec{G}| = \sqrt{\left(\frac{2\pi h}{a}\right)^2 + \left(\frac{2\pi k}{a}\right)^2 + \left(\frac{2\pi l}{a}\right)^2} = \frac{2\pi}{a}\sqrt{h^2+k^2+l^2}$$

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{G_{hkl}}|} = \frac{2\pi}{\frac{2\pi}{a}\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \qquad d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

مثال: اثبت ان حجم منطقة بريليون الأولى $\left\{\frac{(2\pi)^3}{V_c}\right\}$ **حيث** V_c **يمثل حجم الخلية البدائية للبلورة.**

علماً ان حجم متوازي السطوح البدائي في فضاء فوريير Fourier space.

يمكن استعمال المتطابقة: $(\vec{c}\times\vec{a})\times(\vec{a}\times\vec{b}) = (\vec{c}\cdot\vec{a}\times\vec{b})\vec{a}$

$$\vec{a^*} = 2\pi\frac{\vec{b}\times\vec{c}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}} \qquad \vec{b^*} = 2\pi\frac{\vec{c}\times\vec{a}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}} \qquad \vec{c^*} = 2\pi\frac{\vec{a}\times\vec{b}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}}$$

$$V_{B.Z} = \vec{a^*}\cdot(\vec{b^*}\times\vec{c^*}) = \left(2\pi\frac{\vec{b}\times\vec{c}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}}\right)\cdot\left(2\pi\frac{\vec{c}\times\vec{a}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}}\right)\times\left(2\pi\frac{\vec{a}\times\vec{b}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}}\right)$$

$$V_{B.Z} = \left\{\frac{(2\pi)^3}{(\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c})^3}\right\}[(\vec{b}\times\vec{c})\cdot(\vec{c}\times\vec{a})\times(\vec{a}\times\vec{b})]$$

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

$$V_{B.Z} = \left\{\frac{(2\pi)^3}{(\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c})^3}\right\}[(\vec{b}\times\vec{c})\cdot(\vec{c}\cdot\vec{a}\times\vec{b})\vec{a}]$$

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

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

(حجم الخلية البدائية وهي كمية عددية)

$$V_{B.Z} = \left\{\frac{(2\pi)^3}{\{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}\}^3}\right\}[(\vec{b}\times\vec{c})\cdot\vec{a}\,(\vec{c}\cdot\vec{a}\times\vec{b})] \qquad \& \quad (\vec{b}\times\vec{c})\cdot\vec{a} = \vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})$$

$$V_{B.Z} = \left\{\frac{(2\pi)^3}{\{\vec{a}\cdot\vec{b}\times\vec{c}\}^3}\right\}[\vec{a}\cdot(\vec{b}\times\vec{c})\,(\vec{c}\cdot\vec{a}\times\vec{b})]$$

$$V_{B.Z} = \frac{(2\pi)^3}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}}$$

عامل تركيب الشبيكة

التشتت من الذرات:

عملية الحيود يمكن ان تقسم الى مرحلتين:

المرحلة الأولى: هي التشتت بالذرات
المرحلة الثانية هي مرحلة التداخل بين الاشعة المتشتتة.
ان المرحلتين تتميز بعضها من بعض. حين تحاط كل ذرة بالإلكترونات فالمجال الكهربائي الذي يصاحب حزمة الاشعة السينية سيؤثر في هذه الالكترونات ويسبب تعجيلها. الشحنات المعجلة تبعث الاشعاع وكذلك تفعل الكترونات الذرات وفي الواقع فأن هذه الالكترونات تمتص الطاقة من حزمة الاشعة وتشتتها في كل اتجاه، ولكن الالكترونات تُكون غيمة شحنة تحيط بالذرة وعليه عند التعامل مع تشتت الاشعة في هذه الالكترونات يجب اخذ فارق الطور بين الموجات المتشتتة من مختلف شحنات الغيمة بنظر الاعتبار.
ان شدة الحزمة المتشتتة تتناسب مع مربع قيمة المجال وعليه

$$I = |f|^2 = f_e^2 \left| \sum_j exp(i\vec{\mathbf{S}} \cdot \vec{r}) \right|^2 \quad -----\ 1$$

f_e هو عامل يعرف بـ (طول التشتت). $\vec{\mathbf{S}}$ يمثل متجه التشتت حيث $\{\vec{\mathbf{S}} = \vec{\boldsymbol{G}}\}$ S متجه الوحدة باتجاه الشعاع المتشتت. و $\vec{r}$ هي متجه نصف القطري للالكترون الثاني نسبة الى الالكترون الاول

ومن الظواهر المهمة المصاحبة لتشتت الاشعة هي صفة التشاكه وهذه الصفة تعني ان هنالك علاقة طور محددة بين مراكز التشتت وبذلك نستطيع ان نتكلم على التداخل بين الموجات الجزئية، وعلى النقيض من ذلك، لو تذبذبت مراكز التشتت عشوائياً او بصورة غير متشاكه، فان الموجات الجزئية لا تتداخل مع بعضها وتكون شدة الاشعة الواصلة الى جهاز قياس الاشعة هي مجموع الشدد (الشدات) الجزئية.

$$I = Nf_e^2 \quad ------2$$

حيث ان N هي عدد مراكز التشتت (الالكترون)

نلاحظ الفرق الواضح بين المعادلة 1 والمعادلة 2 التي تمثل التشتت المتشاكه، ان طول التشتت لالكترون يمثل بالمعادلة المعروفة التالية:

$$f_e = [(1 + cos^2 2\Theta)/2]^{\frac{1}{2}} r_e$$

حيث r_e هي نصف القطر الكلاسيكي للالكترون وقيمته حوالي (10^{-15} متر = 1 فيمتو متر).
وتمثل Θ نصف زاوية التشتت.
وعامل التشتت الذري f_a يعطى بالمعادلة

$$f_a = \int_0^R 4\pi r^2 \, \rho(r) \, \frac{\sin Sr}{Sr} \, dr \quad ----3$$

R هو نصف قطر الذرة. نرى من معادلة 3 ان عامل التشتت f_a يعتمد على زاوية التشتت من خلال وجود عامل التذبذب $\frac{\sin Sr}{Sr}$

التشتت من البلورة:

يعرف **عامل التشتت في البلورة** (f_{cr}) *كما يلي:*

$$f_{cr} = \sum_{j} exp(i\vec{S} \cdot \vec{r}) \qquad ----4$$

اذ يمتد الجمع الى الكترونات البلورة كافة ولأجل الاستفادة من عامل التشتت الذري تقسم الجمع من المعادلة الأخيرة 4 الى جزئين،

- ✓ الجزء الأول يشل الجمع على كل الكترونات الذرة
- ✓ والجزء الثاني يشمل الجمع على كل ذرات الشبيكة.

ان الجمع في الجزء الاول يؤدي الى معادلة عامل التشتت الذري وعليه إعادة كتابة المعادلة الأخيرة كما يلي:

$$f_{cr} = \sum_{l} f_{al} exp(i\vec{S} \cdot \overrightarrow{R_l}) \qquad ----5$$

R_l تمثل موقع الذرة المرقمة l و f_{al} هي العامل الذري للذرة l . نعيد كتابة المعادلة 5 بشكل حاصل ضرب عاملين، العامل الأول يشمل الجمع على وحدة الخلية والعامل الثاني الجمع على وحدات الخلية في البلورة كافة.

يعرف **عامل التركيب الهندسي** F كما يلي:

$$F = \sum_{j} f_{aj} exp(i\vec{S} \cdot \overrightarrow{\delta_j}) \qquad ----6$$

والجمع هنا شمل كل الذرات في وحدة الخلية و $\overrightarrow{\delta_j}$ يمثل الموقع النسبي للذرة المرقمة j . بطريقة مشابهة نعرف **عامل التشتت الشبيكي (عامل الشبيكة) S** كما يلي:

$$S = \sum_{l} exp(i\vec{S} \cdot \overrightarrow{R_l}(c)) \qquad ----7$$

ويمتد الجمع على كل وحدات الخلايا في البلورة $\overrightarrow{R_l}(c)$ يمثل موقع الخلية المرقمة l ،

يمكن إعادة كتابة المعادلة 5 بدلالة F و S حيث $\overrightarrow{R_l} = \overrightarrow{R_l}(c) + \delta_j$ وبالاستعانة بالمعادلة 6 & 7 نرى بان :

$$f_{cr} = FS$$

وتجدر الملاحظة هنا ان عامل التشتت الشبيكي (عامل الشبيكة) يعتمد على النظام البلوري تحت الدراسة فقط. في حين ان عامل التركيب الهندسي F تعتمد على الشكل الهندسي وعلى محتويات وحدة الخلية.

في حالة الشبيكة البسيطة ذات وحدة خلية تحوي ذرة واحدة فقط يصبح العامل F مساوياً للعامل f_a ويمكن اعتبار F وS عاملين غير معتمدين على بعضهما، ان F يتضمن الجمع على عوامل ذرية قليلة فقط، فيمكن حسابه تقريباً بدلالة هذه العوامل الذرية.

عامل التركيب الهندسي:

هو النسبة بين سعة الموجة المستطيرة من جميع الذرات الموجودة في خلية الوحدة من بلورة وسعة الموجة المستطيرة من الكترون حر طليق عند تعرض كل منهما الى حزمة من الاشعة السينية الساقطة نفسها.

اما سبب تسميته بعامل التركيب الهندسي F_{hkl} فيعود الى انه يمثل محصلة سعة الموجات المستطيرة من الذرات المختلفة، التي تكون عادة متباينة الاطوار بسبب اختلاف مواضع الذرات داخل خلية الوحدة الصادرة عنها تلك الموجات، وفضلاً عن ذلك، قد تكون السعات متباينة في القيمة ايضاً نتيجة اختلاف أنواع الذرات في خلية الوحدة وثم اختلاف العدد والتوزيع الالكتروني للانواع المختلفة من الذرات مما يسبب تبايناً في قدرتها على التشتيت. وان الذرات تكون مختلفة في عدد الالكترونات المكونة لكل منها ، يتسبب ذلك في قدرتها المختلفة على الاستطارة .

$$F_{(hkl)} = \sum_{n=1}^{n=N} f_n exp[2\pi i(u_n h + v_n k + w_n l)]$$

ونلاحظ بان عامل التركيب الهندسي F_{hkl} كمية مركبة تحتوي حد حقيقي وحد خيالي وهو يعتمد على:

1- العدد الكلي للذرات N في وحدة الخلية.
2- موقع كل ذرة من الذرات u_n v_n w_n في وحدة الخلية.
3- قدرة او قابلية الاستطارة لكل ذرة من الذرات f_n في وحدة الخلية وهذه القابلية تعتمد على التوزيع الالكتروني لكل ذرة وعوامل أخرى.

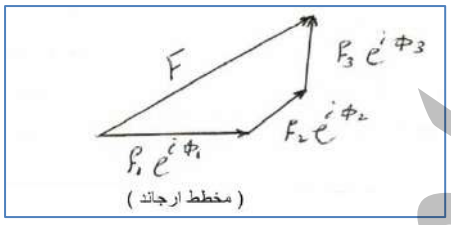
فرق الطور بين الحزمة المستطيرة من الذرة n وتلك الحزمة المستطيرة من الذرة الأولى الواقعة في نقطة أصل خلية الوحدة

$$\Phi_n = 2\pi i(u_n h + v_n k + w_n l)$$

حيث hkl دلائل ميلر و u_n, v_n, w_n احداثيات الذرات

$$F_{hkl} = \sum_{n=1}^{n=N} f_n \; e^{i\Phi_n}$$

$$F_{hkl} = f_1 + f_2 e^{i\Phi_2} + f_3 e^{i\Phi_3} + \ldots\ldots\ldots f_N \; e^{i\Phi_N}$$



(مخطط ارجاند)

f_n: قابلية الاستطارة حيث f_1 للذرة الاولى f_2 للذرة الثانية ..... وان f_n يتمثل بالجمع الاتجاهي لسعة المويجات المستطيرة من جميع الذرات في خلية الوحدة ، كما في المخطط (مخطط ارجاند) لثلاث ذرات.

وبما ان المعادلة تتضمن $e^{i\Phi}$ والذي يساوي

$$e^{i\Phi} = \cos\Phi + i\sin\Phi$$

اذن ستكون المعادلة (1)

$$F_{hkl} = \sum_{n=1}^{n=N} f_n \cos\Phi_n + \sum_{n=1}^{n=N} f_n \; i\sin\Phi$$

اذن الشدة تتناسب مع مربع السعة

$$I \propto F^2_{(hkl)}$$

ولحساب F نحتاج الى ما يلي :

1- عدد نقاط الشبيكة في خلية الوحدة
2- نوع ذرات الأساس ومواقعها بالنسبة لنقطة الاصل
3- دلائل او معاملات ميلر للمستوي المراد حساب عامل التركيب له
4- قدرة تشتت كل ذرة من ذرات الاساس (أي معرفة عامل التشتت لكل نوع من ذرات وحدة الخلية).

ملاحظة: تذكران:

$$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$$

$$e^{-i2\pi} = e^{i2\pi} = \cos 2\pi \mp i\sin 2\pi = 1 + 0 = 1 = e^{-i\pi(\text{عدد زوجي})} = e^{i\pi\,(\text{عدد زوجي})}$$

$$e^{-i\pi} = e^{i\pi} = \cos\pi \mp i\sin\pi = -1 + 0 = -1 = e^{-i\pi(\text{عدد فردي})} = e^{i\pi\,(\text{عدد فردي})}$$

مثال1: حساب عامل التركيب الهندسي لشبيكة مكعب بسيط (SC)

توجد نقطة شبيكة واحدة في خلية الوحدة لشبيكة مكعبة بسيطة (SC) وعندما يكون الاساس المرافق لهذه النقطة مكوناً من ذرة واحدة فقط، فان موقع هـــذه الذرة سيكـــون في u = v = w = 0

$$\left\{F_{(hkl)} = \sum_{n=1}^{n=N} f_n exp[2\pi i(\mathrm{u_n}h + \mathrm{v_n}k + \mathrm{w_n}l)]\right\}$$

$$F_{(hkl)} = fe^{2\pi i(\mathrm{u_n}h+\mathrm{v_n}k+\mathrm{w_n}l)} = fe^{2\pi i(0h+0k+0l)} = f \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots 1$$

$$I \propto |F_{hkl}|^2 = f^2$$

اي ان عامل التركيب لاي سطح (hkl) في شبيكة (SC) يساوي قدرة استطارة الذرة الوحيدة في خلية الوحدة. وهذا يعني ان أي سطح يحقق قانون براك توجد له قيمة لشدة الموجة المستطارة تتناسب مع مربع قدرة استطارة الذرة f^2 . ولما كانت f لاي سطح (hkl) تتناسب عكسياً مع $\frac{\sin\theta}{\lambda}$ او طردياً مع d_{hkl} لذلك السطح. لذا سيكون هنالك انخفاض في قيم شدة الموجة المستطيرة من مستويات شبيكة البلورة كلما ازدادت قيم دلائل ميلر للسطح المشتت للاشعة السينية. وفي الواقع لا توجد بلورات حقيقية ذات شبيكة sc وباساس مكون من ذرة واحدة. أي ان هذا المثال هو مثال خيالي غير واقعي.

مثال2: احسب عامل التركيب لشبيكة مكعب متمركز الجسم (BCC).

اذا كانت الذرتان متشابهتان يعني $f_2 = f_1$, متساوية N=2 000 $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$

موقع الذرة الأولى $u_1 = 0 \quad v_1 = 0 \quad w_1 = 0$

وموقع الذرة الثانية $u_2 = \frac{1}{2} \quad v_2 = \frac{1}{2} \quad w_2 = \frac{1}{2}$

$$\left\{F_{(hkl)} = \sum_{n=1}^{n=N} f_n exp[2\pi i(\mathrm{u_n}h + \mathrm{v_n}k + \mathrm{w_n}l)]\right\}$$

$$F_{(hkl)} = \sum_{n=1}^{n=2} f_n e^{2\pi i(\mathrm{u_n}h+\mathrm{v_n}k+\mathrm{w_n}l)}$$

$$F_{(hkl)} = f\left[e^{2\pi i(0h+0k+0l)} + e^{2\pi i\left(\frac{1}{2}h+\frac{1}{2}k+\frac{1}{2}l\right)}\right]$$

$$F_{(hkl)} = f\left[1 + e^{\pi i(h+k+l)}\right] \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots 2$$

عامل التركيب هنا يعتمد على الحد $e^{i\pi(h+k+l)}$ وكما يلي :-

(a) اذا كان (h+k+l) مجموعهم عدد فردي

$$e^{-i\pi} = e^{i\pi} = \cos\pi + i\sin\pi = -1 + 0 = -1 = e^{-i\pi(\text{عدد فردي})} = e^{i\pi(\text{عدد فردي})}$$

وبالتعويض في معادلة 2 سيكون عامل التركيب :-

$$F_{(hkl)} = f[1-1] = 0$$

القاعدة ستكون هنا هي اذا كان $\{(h+k+l) = \text{عدد فردي}\}$ فان عامل التركيب: $\{F_{hkl} = 0\}$

$I \propto |F_{hkl}|^2 = 0$ انعكاس مفقود (غائب) -- والشدة ستكون:

اما اذا كان مجموع (h+k+l) هو عدد زوجي

$$e^{-i2\pi} = e^{i2\pi} = \cos 2\pi + i\sin 2\pi = 1 + 0 = 1 = e^{-i\pi(\text{عدد زوجي})} = e^{i\pi(\text{عدد زوجي})}$$

وعند التعويض بالمعادلة 2 سيكون عامل التركيب :-

$F_{hkl} = f\ [1+1] = 2f$

القاعدة: ستكون هنا هي اذا كان $\{$ عدد زوجي $= h + k + l\}$ فان عامل التركيب: $\{ F_{hkl} = 2f \}$
انعكاس موجود (حاضر) -- والشدة ستكون: $I \propto |F_{hkl}|^2 = 4f^2$

مناقشة المثال السابق لحساب عامل التركيب لشبيكة مكعب متمركز الجسم (BCC):-

هنالك مصطلح الانعكاس الغائب والانعكاس الحاضر من السطوح فمثلاً (100) و (111) فهي انعكاسات غائبة . اما (110) و (231) ومثيلاتهم هي انعكاسات حاضرة .

Planes المستويات	$(h + k + l)$	F_{hkl}	Notes الملاحظات
(100)	فردي Odd	0	***absent reflection*** × انعكاس مفقود (غائب)
(110)	وزوجي Even	$2f$	***present reflection*** انعكاس موجود (حاضر)
(111)	فردي odd	0	***absent reflection*** × انعكاس مفقود (غائب)
(200)	وزوجي even	$2f$	***present reflection*** انعكاس موجود (حاضر)
(210)	فردي odd	0	***absent reflection*** × انعكاس مفقود (غائب)
(220)	وزوجي even	$2f$	***Reflections present*** انعكاس موجود (حاضر)

ان بعض العناصر لها شبيكة bcc مثل الصوديوم والبوتاسيوم والباريوم والسيزيوم ولذلك لا يشمل طيف الحيود وفق القواعد المذكورة سابقاً خطوط او اشعة حيود من المستويات مثل
(100) (300) (111) (113) (234) (010) (001)
ان هذه الانعكاسات تحقق قانون براك ولكن سبب التلاشي والظهور يعتمد على فرق الطور حيث يكون تداخل تقوية (بناء) او تداخل اتلافي .

مثال3: احسب عامل التركيب لشبيكة مكعب متمركز الجسم (BCC). اذا كانت الذرتان مختلفتان يعني $f_1 \neq f_2$ غير متساوية . خذ على سبيل المثال بلورة كلوريد السيزيوم CsCL

س) احسب عامل التركيب لشبيكة بلورة كلوريد السيزيوم CsCL ؟

قدرة التشتت f_{cl} f_{cs} (مختلفة لان في Cs 54 الكترون اما في الكلور CL 18 الكترون)
احداثيات Cs هي في الموقع 000 واحداثيات ذرة cl هي في الموقع $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$

$$\left\{F_{(hkl)} = \sum_{n=1}^{n=N} f_n exp[2\pi i(u_n h + v_n k + w_n l)]\right\}$$

$$F_{(hkl)} = \sum_{n=1}^{n=2} f_n e^{2\pi i(u_n h + v_n k + w_n l)}$$

$$F_{(hkl)} = f_{cs} e^{2\pi i(0h+0k+0l)} + f_{cl} e^{2\pi i\left(\frac{1}{2}h+\frac{1}{2}k+\frac{1}{2}l\right)}$$

$$F_{(hkl)} = f_{cs} e^{0} + f_{cl} e^{2\pi i\left(\frac{1}{2}h+\frac{1}{2}k+\frac{1}{2}l\right)}$$

$$F_{(hkl)} = f_{cs} + f_{cl} e^{\pi i(h+k+l)} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots 3$$

لمناقشة المعادلة الاخيرة 3

a- اذا كان مجموع (h+k+l) هو عدد صحيح فردي $\{h + k + l =$ عدد فردي $\}$
وبذلك تصبح المعادلة 3 $F_{hkl} = f_{cs} - f_{cl}$
اقل شدة $I = (f_{cs} - f_{cl})^2$

$$e^{-i\pi} = e^{i\pi} = \cos\pi + i\sin\pi = -1 + 0 = -1 = e^{-i\pi(\text{عدد فردي})} = e^{i\pi(\text{عدد فردي})}$$

- حسب هذه المعادلة لهذه الحالة لا يكون فيها الانعكاس الغائب وانما ذو شدة قليلة (لا يكون اتلافي 100%) .

b-اما اذا كان مجموع دلائل ميلر زوجي $\{h + k + l =$ عدد زوجي $\}$
فستكون معادلة 3 $F_{hkl} = f_{cs} + f_{cl}$
اعظم شدة $I = (f_{cs} + f_{cl})^2$

$$e^{-i2\pi} = e^{i2\pi} = \cos 2\pi + i\sin 2\pi = 1 + 0 = 1 = e^{-i\pi(\text{عدد زوجي})} = e^{i\pi(\text{عدد زوجي})}$$

- وهذه الحالة المعادلة مجموع (h + k + l) هو اعداد زوجية ويكون الشدة قوية (تداخل بناء) .

مثال4: احسب عامل التركيب لشبيكة مكعب متمركز الاوجه F.C.C ؟ وان اساسها يمتلك ذرات متماثلة (ذرات متشابهة) عند الاحداثيات u v w (000) , ($\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$ O), ($\frac{1}{2}$ O $\frac{1}{2}$), (O $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$)

أي ان قدرة التشتت N=4 $f_1 = f_2 = f_3 = f_4 = f$ الذرات متشابهة

$$\left\{F_{(hkl)} = \sum_{n=1}^{n=N} f_n exp[2\pi i(\mathrm{u_n}h + \mathrm{v_n}k + \mathrm{w_n}l)]\right\}$$

$$F_{(hkl)} = \sum_{n=1}^{n=4} f_n e^{2\pi i(\mathrm{u_n}h + \mathrm{v_n}k + \mathrm{w_n}l)}$$

$$F_{hkl} = f\left[e^{2\pi i(0h+0k+0l)} + e^{2\pi i\left(0h+\frac{1}{2}k+\frac{1}{2}l\right)} + e^{2\pi i\left(\frac{1}{2}h+0k+\frac{1}{2}l\right)} + e^{2\pi i\left(\frac{1}{2}h+\frac{1}{2}k+0l\right)}\right]$$

$$F_{hkl} = f\left[e^{2\pi i(0)} + e^{\pi i(k+l)} + e^{\pi i(h+l)} + e^{\pi i(h+k)}\right]$$

$$F_{hkl} = f\left[1 + e^{\pi i(k+l)} + e^{\pi i(h+l)} + e^{\pi i(h+k)}\right] \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots .4$$

القاعدة: اذا كان { (كلها زوجي او كلها فردي) متشابهة = $(h \,\&k\, \&\, l)$ }

فان **عامل التركيب:** { $F_{hkl}= 4f$ } و**الشدة** ستكون: $I \propto |F_{hkl}|^2 = 16f^2$

حيث انه اذا كانت (h+k+l) كلها فردية أو كلها زوجية فان كل حد اسي سيعطي (1) وسيحصل على حيود من هذه الاسطح . لانه (زوجي+زوجي= زوجي) & (فردي+فردي=زوجي)

$$e^{-i2\pi} = e^{i2\pi} = \cos 2\pi + i\sin 2\pi = 1 + 0 = 1 = e^{-i\pi(\text{عدد زوجي})} = e^{i\pi(\text{عدد زوجي})}$$

ومن امثلة هذه الاسطح : (111) ، (135) (200) ، (224) ، (406)

القاعدة: اذا كان { (زوجي وفردي) مختلطة = $(h \,\&k\, \&\, l)$ }

فان **عامل التركيب:** { $F_{hkl}= 0$ } و**الشدة** ستكون: $I \propto |F_{hkl}|^2 = 0$

$$e^{-i\pi} = e^{i\pi} = \cos\pi + i\sin\pi = -1 + 0 = -1 = e^{-i\pi(\text{عدد فردي})} = e^{i\pi(\text{عدد فردي})}$$

ومن امثلة هذه السطوح

(221) (234) (123) (221) , (210), (110) , (100)

فمثلاً للنحاس والذهب والنيكل والفضة شبيكة fcc لذلك يكون طيف الحيود من بلورات هذه العناصر خالياً من الانعكاسات من مثل هذه المستويات.

Planes المستويات	$(h \,\&k\, \&\, l)$	F_{hkl}	الملاحظات Notes
(100)	مختلطة	0	*absent reflection* × انعكاس مفقود (غائب)
(110)	مختلطة	*0*	*absent reflection* × انعكاس مفقود (غائب)
(111)	متشابهة كلها فردي	4f	*Reflections present* انعكاس موجود (حاضر)
(200)	متشابهة كلها زوجي	4f	*present reflection* انعكاس موجود (حاضر)
(210)	مختلطة	0	*absent reflection* × انعكاس مفقود (غائب)
(220)	متشابهة كلها زوجي	4f	*Reflections present* انعكاس موجود (حاضر)

مثال5: احسب عامل التركيب لشبيكة مكعب متمركز الاوجه (FCC). اذا كانت الذرات مختلفة f غير متساوية. خذ على سبيل المثال بلورة كلوريد الصوديوم NaCl

س) احسب عامل التركيب لشبيكة بلورة كلوريد الصوديوم NaCl؟

د. رضا حزام رسن

$$Na^+ : \ 000 \ ، \ \frac{1}{2}\frac{1}{2}0 \ ، \ \frac{1}{2}0\frac{1}{2} \ ، 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$$
$$Cl^- : \ \frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2} \ ، \ 00\frac{1}{2} \ ، \ 0\frac{1}{2}0 \ ، \ \frac{1}{2}00$$

$$F_{(hkl)} = \sum_{n=1}^{n=N} f_n exp[2i\pi(\mathrm{u_n}h + \mathrm{v_n}k + \mathrm{w_n}l)]$$

$$F_{hkl} = f_{Na}\left[e^{2i\pi(0)} + e^{2i\pi\left(\frac{1}{2}h+\frac{1}{2}k+0l\right)} + e^{2i\pi\left(\frac{1}{2}h+0k+\frac{1}{2}l\right)} + e^{2i\pi\left(0h+\frac{1}{2}k+\frac{1}{2}l\right)}\right]$$
$$+f_{Cl}\left[e^{2i\pi\left(\frac{1}{2}h+\frac{1}{2}k+\frac{1}{2}l\right)} + e^{2i\pi\left(0h+0k+\frac{1}{2}l\right)} + e^{2i\pi\left(0h+\frac{1}{2}k+0l\right)} + e^{2i\pi\left(\frac{1}{2}h+0k+0l\right)}\right]$$
$$F_{hkl} = f_{Na}\left[1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)}\right] + f_{Cl}\left[e^{i\pi(h+k+l)} + e^{i\pi l} + e^{i\pi k} + e^{i\pi h}\right]$$

$$F_{hkl} = f_{Na}\left[1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)}\right] + f_{Cl}e^{i\pi(h+k+l)}\left[1 + e^{-i\pi(h+k)} + e^{-i\pi(h+l)} + e^{-i\pi(k+l)}\right]$$

لكن تغيير إشارة الاس للكميات الاسية ليس في قيمتها

$$e^{-i\pi(h+k)} = e^{i\pi(h+k)} \quad \text{مثل} \quad e^{-i\pi(\text{عدد زوجي})} = e^{i\pi\ (\text{عدد زوجي})}$$
$$e^{-i\pi(\text{عدد فردي})} = e^{i\pi\ (\text{عدد فردي})}$$

$$F_{hkl} = \left[1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)}\right]\left[f_{Na} + f_{Cl}e^{i\pi(h+k+l)}\right] \ \ldots\ldots\ldots 5$$

$$e^{-i2\pi} = e^{i2\pi} = \cos 2\pi + i\sin 2\pi = 1 + 0 = 1 = e^{-i\pi(\text{عدد زوجي})} = e^{i\pi\ (\text{عدد زوجي})}$$
$$e^{-i\pi} = e^{i\pi} = \cos\pi + i\sin\pi = -1 + 0 = -1 = e^{-i\pi(\text{عدد فردي})} = e^{i\pi\ (\text{عدد فردي})}$$

اولاً: ان عامل التركيب يساوي صفراً عندما تكون معاملات ميلر للمستوي (hkl) اعداداً مختلطة.

{ F_{hkl}= 0 }

القاعدة: ستكون هنا هي اذا كان [(زوجي وفردي) مختلطة = $(h\ \&k\ \&\ l)$]

فان **عامل التركيب:**

لا يحدث انعكاس { F_{hkl}= 0 }

الشدة صفر I=0

ثانياً: ان عامل التركيب يكون كمية كبيرة او صغيرة تبعاً لمعاملات ميلر للمستوي فيما اذا كانت جميعها اعداد زوجية او جميعها اعداد فردية.

القاعدة: ستكون هنا هي اذا كان [(كلها زوجي او كلها فردي) متشابهة = $(h\ \&k\ \&\ l)$]

فان **عامل التركيب:**

$$F_{hkl} = 4[f_{Na} + f_{Cl}] \ \ldots\ldots\ldots (\text{كلها زوجي}) \quad \text{اعظم شدة} \quad I = 16[f_{Na} + f_{Cl}]^2$$
$$F_{hkl} = 4[f_{Na} - f_{Cl}] \ \ldots\ldots\ldots (\text{كلها فردي}) \quad \text{شدة قليلة} \quad I = 16[f_{Na} - f_{Cl}]^2$$

هذا السؤال من د. تغريد & د. حسين مع الجواب

س6) أحسب عامل التركيب الهندسي للمركب Ni_3Al اذا كانت الذرة Al تقع بالموقع (000) وذرات Ni تقع في المواقع$(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0),(\frac{1}{2}0\frac{1}{2}),(0\ \frac{1}{2}\frac{1}{2})$؟

الحل:

$$f_{Ni} \neq f_{Al}$$

Al: 000 Ni: $\frac{1}{2}\frac{1}{2}0,\frac{1}{2}0\frac{1}{2},0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$

$$\left\{F_{(hkl)} = \sum_{n=1}^{n=N} f_n exp[2i\pi(u_n h + v_n k + w_n l)]\right\}$$

$$F_{hkl} = f_{Al}\left[e^{2\pi i(0h+0k+0l)}\right] + f_{Ni}\left[e^{2i\pi\left(\frac{1}{2}h+\frac{1}{2}k+0l\right)} + e^{2i\pi\left(\frac{1}{2}h+0k+\frac{1}{2}l\right)} + e^{2i\pi\left(0h+\frac{1}{2}k+\frac{1}{2}l\right)}\right]$$

$$F_{hkl} = f_{Al} + f_{Ni}\left[e^{\pi i(h+k)} + e^{\pi i(h+l)} + e^{\pi i(k+l)}\right]$$

$F_{hkl} = f_{Al} + 3f_{Ni}$ اذا كان(hkl)اعداد فردية أو زوجية

لانه (زوجي+زوجي= زوجي) & (فردي+فردي=زوجي)

$$e^{-i2\pi} = e^{i2\pi} = \cos 2\pi + i \sin 2\pi = 1 + 0 = 1 = e^{-i\pi(\text{عدد زوجي})} = e^{i\pi\ (\text{عدد زوجي})}$$

$F_{hkl} = f_{Al} - f_{Ni}$ اذاكان(hkl) اعداد مختلطة

$$e^{-i\pi} = e^{i\pi} = \cos \pi + i \sin \pi = -1 + 0 = -1 = e^{-i\pi(\text{عدد فردي})} = e^{i\pi\ (\text{عدد فردي})}$$

د. رضا حزام رسن

س) 2-النيوبيوم المعدني له تركيب بلوري BCC إذا حدثت زاوية الحيود من مجموعة المستويات (211) عند ° 75.99 عند استخدام أشعة سينية بطول 0.1659 nm , احسب (أ) المسافة البينية للمستويات (ب) نصف قطر ذرة النيوبيوم.

(أ) $\theta = \text{زاوية براك} = \frac{75.99}{2} = 37.995^{\circ}$ $2\theta = \text{زاوية الحيود} = \mathbf{75.99^{\circ}}$

$$d_{211} = \frac{n\lambda}{2\sin\theta} = \frac{(1)(\mathbf{0.1659\ nm})}{(2)(\sin 37.995^{\circ})} = 0.134748\ nm$$

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

$$a = d_{211}\sqrt{(2)^2+(1)^2+(1)^2} = (0.134748\ nm)(\sqrt{6}) = 0.33006\ nm$$

For BCC : $a = \frac{4r}{\sqrt{3}}$ $r = \frac{a\sqrt{3}}{4} = \frac{0.33006\ nm\sqrt{3}}{4} = 0.1429\ nm$

س) لأي مجموعة من المستويات البلورية ستحدث قمة حيود من الدرجة الأولى بزاوية حيود ° 44.93 للنيكل FCC عند استخدام إشعاع بطول موجي 0.1542 nm عندما يكون نصف القطر الذري للنيكل r_{Ni} = 0.1246 nm ؟

$2\theta = \text{زاوية الحيود} = \mathbf{44.93^{\circ}}$ $\theta = \text{زاوية براك} = \frac{44.93}{2} = 22.465^{\circ}$

$$d_{hkl} = \frac{n\lambda}{2\sin\theta} = \frac{(1)(\mathbf{0.1542\ nm})}{(2)(\sin 22.465^{\circ})} = 0.2017696\ nm$$

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

For FCC $a = \frac{4r}{\sqrt{2}}$

$$\sqrt{(h)^2+(k)^2+(l)^2} = \frac{a}{d_{hkl}} = \frac{4r}{d_{hkl}\sqrt{2}} = \frac{4 * \mathbf{0.1246\ nm}}{0.2017696\ nm * \sqrt{2}}$$

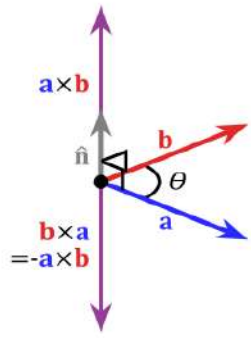
$$= 1.746655689179$$

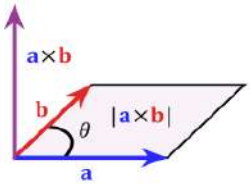
$$(h)^2+(k)^2+(l)^2 = 3$$

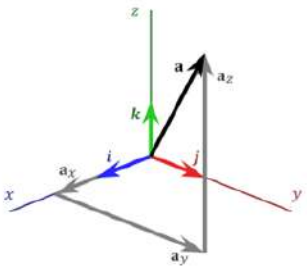
بالتجربة والخطأ ، الأعداد الثلاثة الوحيدة التي لها مجموع مربعاتها 3 هي 1 و 1 و 1. لذلك، فإن مجموعة المستويات المسؤولة عن ذروة الحيود هي (111) .

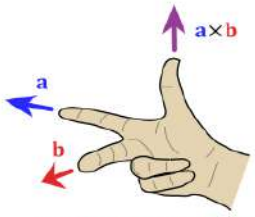
Table Miller Indices of the Diffracting Planes for BCC and FCC Lattices

Cubic planes $\{hkl\}$	$h^2+k^2+l^2$	Sum $\Sigma[h^2+k^2+l^2]$	Cubic diffracting planes $\{hkl\}$ FCC	BCC
{100}	$1^2+0^2+0^2$	1		
{110}	$1^2+1^2+0^2$	2	...	110
{111}	$1^2+1^2+1^2$	3	111	
{200}	$2^2+0^2+0^2$	4	200	200
{210}	$2^2+1^2+0^2$	5		
{211}	$2^2+1^2+1^2$	6	...	211
...		7		
{220}	$2^2+2^2+0^2$	8	220	220
{221}	$2^2+2^2+1^2$	9		
{310}	$3^2+1^2+0^2$	10	...	310



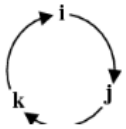






Finding the direction of the cross product by the right-hand rule

This little cycle diagram can help you remember these results.



$\mathbf{i}\times\mathbf{j}=\mathbf{k}$ $\quad \mathbf{j}\times\mathbf{i}=-\mathbf{k}$

$\mathbf{j}\times\mathbf{k}=\mathbf{i}$ $\quad \mathbf{k}\times\mathbf{j}=-\mathbf{i}$

$\mathbf{k}\times\mathbf{i}=\mathbf{j}$ $\quad \mathbf{i}\times\mathbf{k}=-\mathbf{j}$

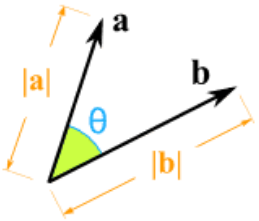
$$\mathbf{a}=(a_1,a_2,a_3)=a_1\mathbf{i}+a_2\mathbf{j}+a_3\mathbf{k}$$
$$\mathbf{b}=(b_1,b_2,b_3)=b_1\mathbf{i}+b_2\mathbf{j}+b_3\mathbf{k}$$
$$\mathbf{a}\times\mathbf{b}=(a_1\mathbf{i}+a_2\mathbf{j})\times(b_1\mathbf{i}+b_2\mathbf{j})$$
$$=a_1b_1(\mathbf{i}\times\mathbf{i})+a_1b_2(\mathbf{i}\times\mathbf{j})+a_2b_1(\mathbf{j}\times\mathbf{i})+a_2b_2(\mathbf{j}\times\mathbf{j})$$

$\mathbf{i}\times\mathbf{i}=\mathbf{0}=\mathbf{j}\times\mathbf{j}$ and that $\mathbf{i}\times\mathbf{j}=\mathbf{k}=-\mathbf{j}\times\mathbf{i}$,

$$\mathbf{a}\times\mathbf{b}=(a_1b_2-a_2b_1)\mathbf{k}$$
$$=\begin{vmatrix}a_1 & a_2\\ b_1 & b_2\end{vmatrix}\mathbf{k}.$$

$$\mathbf{a}\times\mathbf{b}=(a_1\mathbf{i}+a_2\mathbf{j}+a_3\mathbf{k})\times(b_1\mathbf{i}+b_2\mathbf{j}+b_3\mathbf{k})$$
$$=a_1b_1(\mathbf{i}\times\mathbf{i})+a_1b_2(\mathbf{i}\times\mathbf{j})+a_1b_3(\mathbf{i}\times\mathbf{k})$$
$$+a_2b_1(\mathbf{j}\times\mathbf{i})+a_2b_2(\mathbf{j}\times\mathbf{j})+a_2b_3(\mathbf{j}\times\mathbf{k})$$
$$+a_3b_1(\mathbf{k}\times\mathbf{i})+a_3b_2(\mathbf{k}\times\mathbf{j})+a_3b_3(\mathbf{k}\times\mathbf{k})$$
$$\mathbf{a}\times\mathbf{b}=a_1b_2\mathbf{k}-a_1b_3\mathbf{j}-a_2b_1\mathbf{k}+a_2b_3\mathbf{i}+a_3b_1\mathbf{j}-a_3b_2\mathbf{i}$$
$$=(a_2b_3-a_3b_2)\mathbf{i}-(a_1b_3-a_3b_1)\mathbf{j}+(a_1b_2-a_2b_1)\mathbf{k}.$$

$$\mathbf{a}\times\mathbf{b}=\begin{vmatrix}a_2 & a_3\\ b_2 & b_3\end{vmatrix}\mathbf{i}-\begin{vmatrix}a_1 & a_3\\ b_1 & b_3\end{vmatrix}\mathbf{j}+\begin{vmatrix}a_1 & a_2\\ b_1 & b_2\end{vmatrix}\mathbf{k}.$$



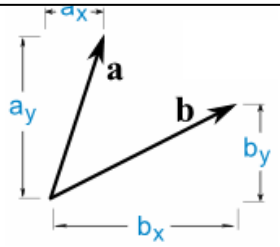
$\mathbf{a}\cdot\mathbf{b} = |\mathbf{a}| \times |\mathbf{b}| \times \cos(\theta)$

Where:

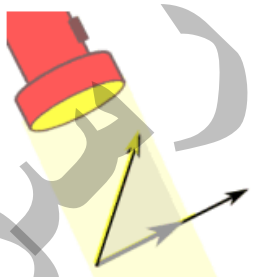
$|\mathbf{a}|$ is the magnitude (length) of vector $\mathbf{a}$

$|\mathbf{b}|$ is the magnitude (length) of vector $\mathbf{b}$

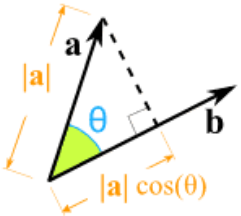
θ is the angle between $\mathbf{a}$ and $\mathbf{b}$

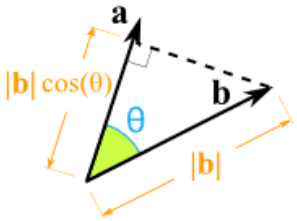


$\mathbf{a}\cdot\mathbf{b} = a_x \times b_x + a_y \times b_y$



Like shining a light to see where the shadow lies





$\mathbf{a}\cdot\mathbf{b} = |\mathbf{a}| \times |\mathbf{b}| \times \cos(\theta)$ $\quad \mathbf{a}\cdot\mathbf{b} = |\mathbf{a}| \times \cos(\theta) \times |\mathbf{b}|$ $\quad \mathbf{a}\cdot\mathbf{b} = |\mathbf{a}| \times |\mathbf{b}| \times \cos(\theta)$

The dot or scalar product ⇨ $A \cdot B = |A| \cdot |B| \cdot \cos\Theta$

Where |A| and |B| represents the magnitudes of vectors A and B and ⊙ is the angle between vectors A and B.

$A = a_1 i + a_2 j$ and $B = b_1 i + b_2 j$ ⇨ $A \cdot B = a_1 \cdot b_1 + a_2 \cdot b_2$

الفصل الثالث: ديناميكية الشبيكة
Lattice Dynamics

اهتزازات الشبيكة:

يعد موضوع حركية الشبيكة في فيزياء الحالة الصعبة ذات اهمية بالغة جداً وذلك لتداخله في تفسير مفاهيم الخواص الفيزيائية للمواد الصلبة. ويقصد بحركية الشبيكة هو دراسة اهتزازات ذرات الشبيكة. ان دراسة الحركة الاهتزازية للذرات المكونة للشبيكة البلورية تمكننا من وصف السلوك الاجمالي للمادة الصلبة من خلال الخواص الحرارية او الكهربائية او الميكانيكية او غيرها.

الذرات داخل البنية البلورية تكون في حالة حركة اهتزازية، اي انها تتحرك حركة توافقية بسيطة دون ان تنتقل من موقعها الى موقع اخر. تعتمد الحركة التوافقية البسيطة للذرات على درجات الحرارة. ولو فرضنا ان الذرات داخل الشبيكة تكون عند درجة الصفر المطلق فانها ستستقر في مواقع الاتزان في حالة سكون. وعند رفع درجة الحرارة تبدأ الذرات بالتذبذب حول مواقع الاتزان بإزاحة تتوقف على درجة الحرارة.

ان انماط الاهتزاز "Vibrational modes" للذرات في داخل التركيب البلوري يعبر عنه بموجب النظرية الكلاسيكية على انها موجات صوتية مرنة تسير في وسط مستمر على نسق معين ويمتد سريانه خلال بلوره غير محددة اما في النظريات الحديثة فتعتبر انماط الاهتزاز مجموعة من جسيمات يتعذر تميزها تدعى الفونونات "Phonons".

ان الصفات الحرارية للمواد الصلبة والسعة الحرارية والتوصيل الحراري وكذلك الاستطاره غير المرنة للنيوترونات او الاشعة السينية بواسطة البلورات وغيرها تفسر جميعها من خلال اهتزاز الشبيكة والحاصل عنها فونونات.

تكمم اهتزازات الشبيكة:

بموجب النظرية الكلاسيكية يعبر عن أنماط الاهتزاز في بلورة بوصفها موجات مرنة في وسط مستمر على نسق معين ويمتد جريانها خلال بلورة غير محددة. اما النظرية الحديثة **فتعتبر أنماط الاهتزاز مجموعة من الدقائق يتعذر تمييزها تدعى الفونونات.** كلمة فونانات مشابهة لكلمة فوتونات.

والفونونات تمتلك طاقة محددة $\hbar\omega$ ولكن لا يمكن القول انها تملك زخماً حقيقاً. ان الكمية الاتجاهية $\hbar\vec{K}$ (حيث $\vec{K}$ يمثل متجه الموجة الحاصلة من الاهتزاز)، تكون كمية صغيرة جدا في تفاعلات بين الفونونات واشعاعا خارجياً.

ان الفوتون والفونون يخضعان لاحصاء بوز- اينشتين. واذا اردنا ان نعطي تعريف مبسط للفونون نقول. ان الازاحات الدورية للذرات عن مواضع اتزانها (موجات مرنة) يمكن وصفها عن طريق **الفونون وهو وحدة طاقة مكممة quantized لاهتزاز ذرات البلورة (او كم طاقة اهتزاز الشبيكة)**، له طاقة E تساوي $\hbar\omega$ وزخم او شبه زخم $\vec{P}$ وسرعة المجموعة $\left(v_g = \frac{d\omega}{dK} = \frac{dE}{dP}\right)$ وطول موجي ومتجه موجة $\vec{K}$ وتردد وسرعة انتشار نمط الاهتزاز او سرعة الطور $\left(v = \frac{\omega}{K}\right)$ وفضلاً عن ذلك يخضع الفونون لقوانين حفظ الزخم والطاقة.

ان جميع الأفكار المطبقة على الفوتون كازدواج صفة الموجة وصفة الدقيقة وتكممية الفوتون يمكن ان تطبق على الفونون. فهنالك الكثير من المعلومات التجريبية تشير الى اهتزاز الشبيكة وهذا الاهتزاز ممثلاً بالفونون يكون مكمماً حيث ان كثير من الصفات الحرارية للمواد الصلبة كالسعة الحرارية والتوصيل الحراري وكذلك الاستطارة غير المرنة للنيوترونات او الاشعة السينية بواسطة البلورات وغيرها تقدم دلائل قوية على ان اهتزاز الشبيكة يكون مكمم. **ويطلق عادة على الاهتزاز في بلورة والحاصل من مؤثرات حرارية بالفونونات المهيجة حرارياً.**

وتوجد تهيجات أولية مكممة مهمة أخرى فضلاً عن الفونون وينتهي اسمها بالحرفين ون on

1- **ماكنون magnon :** يمثل موجة برم مغناطيسي وهو تهيج للبروم في المواد الصلبة ذات مغناطيسية حديدية مثل الحديد والكوبلت والنيكل حيث تكون جميع البروم متوازية تماما ف حالة الأســـاس او الحالة الأرضية.

2- **بلازمون Plasmon :** وهو تهيج متراكم لســـحابة الالكترونات الحرة نســـبياً والهاربة من المدارات الخارجية للذرات المعدنية وتسمى هذه السحابة بغاز الالكترون وهذا يعني التذبذب المتشاكه او المترابط لجميع الالكترونات والناشـــئ من قوى كولوم ذات المدى الطويل او الاســـتطارة غير المرنةللالكترونات الساقطة على غشاء معدني.

3- بولارون Polaron : ويمثل الكتروناً يرافقه تشـويه مرن في البلورة. فعند تفاعل الكترون في شـبيكة بلورة مع الذرات او ايونات تلك الشبيكة بواسطة شحنته الكهربائية فانه يسبب تشويهاً مرناً (استقطاب في البلورات الايونية) وموضعياً للشبيكة.

4- **اكسـيتون Exciton :** ويمثل موجة اسـتقطاب تنتج من ترابط بين الكترون وفجوة او ثقب hole في شريط التكافؤ او نطاق التكافؤ Valence Band ان طاقة الفوتون اللازمة لتوليد هذا الزوج المترابط من الكترون وفجوة يجب ان تكون اقل من فجوة الطاقة أي اقل من الفرق بين طاقة شـــريط التكافؤ وشـــريط التوصيل.

الاستطاره غير المرنة للفوتونات (فوتونات الاشعة السينية) بواسطة الفونونات:

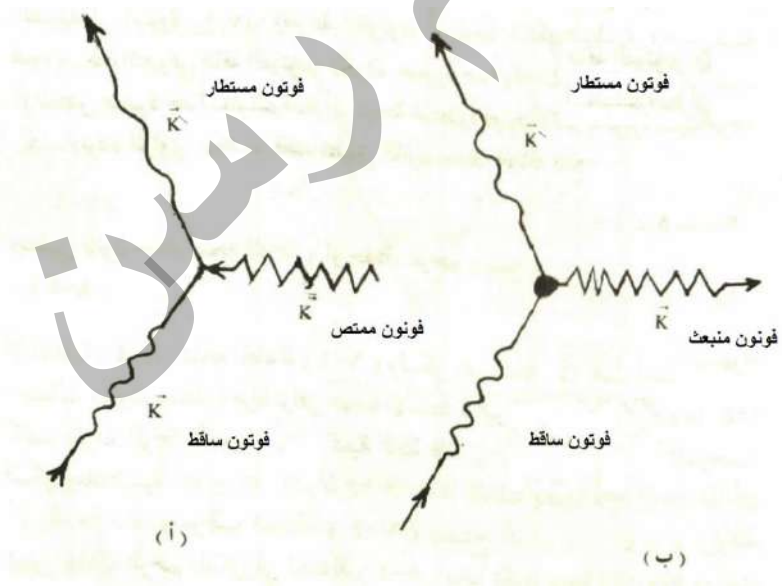
حيود براك (استطاره مرنة) للأشعة السينية بواسطة بلورة يخضع لقانون حفظ متجه الموجه اي ان:

$$\vec{k'} - \vec{k} = \vec{G}$$

$\vec{k}$هو متجه الفوتون (الموجه) الســـاقطة & $\vec{k'}$ هو متجه الفوتون المســـتطير & $\vec{G}$ متجه الشـــبيكة المقلوبة. وهذه الاســـتطارة هي اســـتطارة مرنة. وقد تحدث اســـتطارة غير مرنة بين الاشـــعة الســـينية (الفوتونات) الســـاقطة على البلورة والموجات (الفونونات) الحاصـــلة من اهتزاز ذرات البلورة مما يسـبب انبعاثاً او تولد (creation) او فناء (annihilation) فونون ذو متجه $\vec{K}$ وباســـتخدام قانون حفظ متجه الموجه نحصل على:

$$\vec{k'} - \vec{k} = \vec{G} \mp \vec{K}$$

حيث ان الاشارة السالبة تشير الى تولد فونون والاشارة الموجبة الى فناء او امتصاص فونون.



ان المـجـال الـكـهـربـائـي للفوتون الساقط على البلورة يولد اجهـادا ميكـانيكيـا دوريـا داخـل البلورة مما يسبب تغير الصفات المرنة للبلورة في هذا النوع من التفاعل يمكن للفوتون ان يولد او يمتص فونونا.

وبذلك يتغير $\vec{k}$ (متجه الفوتون "الموجه" الســـاقطة الذي تردده الزاوي ω) الى $\vec{k'}$ (متجـه الفوتون المســـتطير الذي تردده الزاوي ω').

فان هذا التغير في قيمة واتجاه متجه موجة الفوتون وكذلك طاقته، نتيجة تولد او فناء فونونات صوتية (acoustic phonons) هو السبب في اعتبار عملية التفاعل هذه **استطارة غير مرنة** ويطلق على هذه العملية **تشتت او استطارة برليون (Brillauim scattering)** ولكن بسبب الفرق الكبير بين سرعة الموجه الصوتية في البلوة (v_s.) وسرعة الفوتون او الموجه الكهرومغناطيسية c (سرعة الضوء) فان التغير في طاقة الفوتون تكون صغيرة جدا ولذلك تكون طاقة الفونون المتولد او الممتص صغيرة جدا.

فلو افترضنا ان نتيجة استطارة فوتون كانت تولد فونونا متجه موجه $\vec{K}$ وتردده الزاوي ω_o ، فعند تطبيق قانون حفظ الطاقة ينتج

$$\hbar\omega = \hbar\omega' + \hbar\omega_o \quad \ldots\ldots 1$$

وبتطبيق قانون حفظ متجه الموجه (او حفظ الزخم) ينتج:

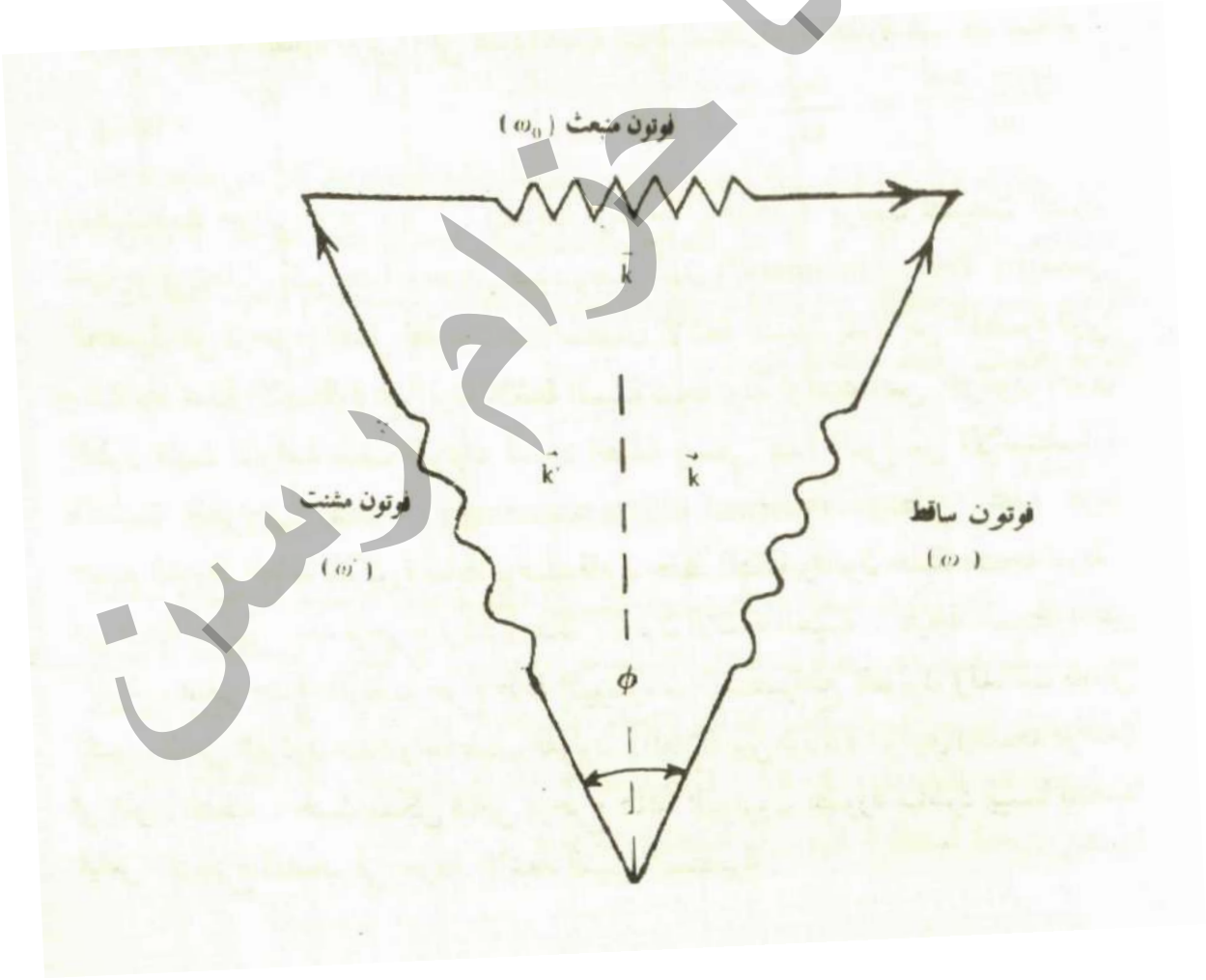
$$\hbar\vec{k} = \hbar\vec{k}' + \hbar\vec{K} \quad \ldots\ldots 2$$

ان سرعة الموجه الصوتيةv_sهي كمية ثابتة فان $\vec{K}v_s = \omega_o$

اما بالنسبة للموجه الكهرومغناطيسية $kc = \omega$ وان $c \gg v_s$ لذلك يكون $ck \gg v_sK$ أي ان $\omega \gg \omega_o$

ومن المعادلة الاولى (1) نستنتج ان $\omega = \omega'$ ، $k = k'$

وعند تمثيل تعادل الزخم في (2) بيانيا تكون النتيجة مثلث متساوي الساقين تقريبا



$$\vec{K} = 2k \sin\frac{\emptyset}{2} \dots\dots (3)$$

حيث $\emptyset$ تمثل زاوية الاستطارة. ويمكن كتابة معادلة (3) بدلالة معامل الانكسار للبلورة " n " النسبة بين سرعة الفوتون في الفراغ وسرعته في البلورة حيث ان

$$n = \left(\frac{c}{\frac{\omega}{k}}\right) \dots\dots (4)$$

وبذلك تصبح معادلة " 3 " بعد ضرب طرفيها بسرعة الموجه الصوتية في البلورة v_s كالاتي:

$$v_s K \cong 2v_s \omega n c^{-1} sin\frac{\emptyset}{2} \dots\dots (5)$$

ولكن $\omega_o = v_s K$ يكافئ تردد الفونون المنبعث (ω_o) لذلك فان المعادلة " 5 " تكتب بالصيغة الاتية:

$$\omega_o \cong 2v_s \omega n c^{-1} sin\frac{\emptyset}{2} \dots\dots (6)$$

وبذلك نكون قد حصلنا على علاقة تقريبية لتردد فونونات متولدة في بلورة عند استطارة فوتونات استطارة غير مرنة عند زاوية φ.

ان اقصى تغير نسبي لتردد الفوتون (الضوء المرئي) في هذه العملية نتيجة استطارته استطارة غير مرنة هو

$$\frac{\omega - \omega'}{\omega} = \frac{\omega_o}{\omega} \cong 2v_s n c^{-1} \dots\dots (7)$$

يعد تزحزح تردد (طاقة) فوتون الاشعة السينية نتيجة استطارته غير المرنة صغير جدا مقارنة بتزحزح طاقة النيوترونات المستطيره مع الفونون لذلك يفضل النيوترون على الفوتون عند دراسة طيف الفونون (العلاقة بين تردده الزاوي ومتجه موجته) في المواد الصلب.

حيث يمكن قياس تزحزح طاقة النيوترون بصورة مباشرة بينما تصعب قياس التزحزح الصغير في حزمة الاشعة السينية المستطيره.

سؤال 1 في كتاب فيزياء الحالة الصلبة د. مؤيد جبرائيل:

س1) فوتون ضوئي طول موجته في الفراغ $5*10^{-7}$ m يستطير بواسطة بلورة معامل انكسارها 1.5 وسرعة الصوت فيها $4.5*10^{3}$ m/s احسب

1-اقصى تردد زاوي ومتجه موجة الفونون المتولد عن هذه الاستطارة؟

2- اقصى تغير نسبي للتردد الزاوي للفوتون نتيجة الاستطارة؟

الاستطاره غير المرنة للنيوترونات بوساطة الفونونات:

يمكن تعريف النيوترون الحراري (thermal neutron) بانه نيوترون ذو طاقة حرارية حوالي (0.025ev) بدرجة حرارة (288°k) وتعد طاقة النيوترون الحراري مقاربة لطاقة الفونون. ولذلك يتوقع تغير ملموس في طاقة النيوترون خلال عملية استطارته غير المرنة مع نوى ذرات البلورة.

اذا كانت سرعة النيوترون $\vec{v}$ وكتلته M_n سيكون متجه موجته وطاقته الحركية:

$$\left.\begin{aligned}\overrightarrow{K_n} &= \frac{M_n\vec{v}}{\hbar}\\ E &= \frac{\hbar^2 K_n^2}{2M_n}\end{aligned}\right\} \quad \ldots\ldots(8)$$

وعند استطاره النيوترون غير المرنة بامتصاص او توليد فونون فان متجه موجته وطاقته تتغير الى E' ،K'_n على التوالي وباستخدام قانون حفظ الطاقة:

$$\left.\begin{aligned}\overrightarrow{K_n} - \overrightarrow{K'_n} &= \vec{G} \pm \vec{K}\\ E - E' &= \pm \hbar\,\omega_k\end{aligned}\right\} \quad \ldots\ldots(9)$$

ان قياس قيمة الطاقة المكتسبة او المفقودة للنيوترون المستطير كدالة لاتجاه الاستطاره $\left(\vec{K}_n - \vec{K}'_n\right)$

عمليا يمكننا استخدام العلاقة (9) لايجاد علاقة التفريق بين K، ω_k للفونون المتولد او الممتص نتيجة استطاره النيوترون استطاره غير مرنة.

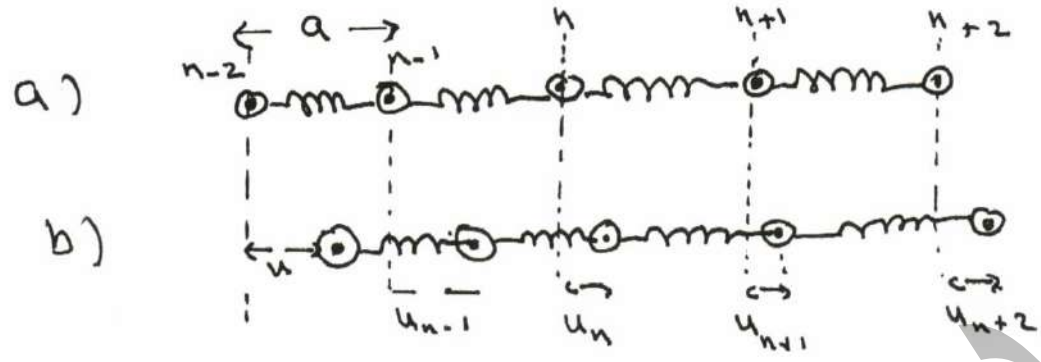
انماط الاهتزاز لشبيكة خطية احادية الذرات:

يمكن ايجاد علاقة التفريق بين التردد الزاوي (ω) للذرة المهتزة ومتجه الموجه (K) للموجه الحاصلة من ذلك الاهتزاز نفترض سلسلة خطية طويلة جدا من الذرات المتشابهة حيث ان:

m = كتلة كل ذرة من ذرات السلسلة.
a = فسحة الاتزان بين أي ذرتين متجاورتين (ثابت السلسلة).
C = ثابت قوة بين أي ذرتين متجاورتين (ثابت المرونة).
U_n = ازاحة الذرة "n" عن موضع الاتزان وهي دالة للزمن.
N = العدد الكلي لذرات السلسلة.
F_n = محصلة القوى المؤثرة على الذرة n.

يمكن اعتبار(على افتراض) السلسلة الذرية الخطية عبارة عن مجموعة من الكرات المتشابهة المربوطة بعضها مع بعض بنوابض افقية بحيث تكون حركة كل كرة باتجاه موازي للسلسلة وبذلك تكون الموجات الحاصلة من الاهتزاز موجات طولية فقط.

فاذا كانت استطالة او انكباس احد هذين النابضين اكثر من الاخر فسوف تتعجل الذرة الواقعة بينهما، أي تكون الذرة في حالة اهتزاز بقوة تتناسب مع الفرق بين اجهادي النابضين. ويمكن حساب محصلة القوة المؤثرة في الذرة$n(F_n)$ في الشكل التالي لحساب المركبة من جهة اليسار $[F_L]$ ومن جهة اليمين $[F_R]$



الشكل: (a) سلسلة خطية من الذرات المتشابهة في مواضع اتزانها.
(b) ازاحات الذرات عن مواضع اتزانها.

$$F_R = c(u_{n+1} - u_n)$$
$$F_L = c(u_n - u_{n-1})$$
$$F_n = F_{(R)} - F_{(l)}$$
$$F_n = c\,[u_{n+1} - u_n - u_n + u_{n-1}]$$
$$F_n = c[u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n] \quad \dots\dots\dots (1)$$

ان المعادلة (1) تمثل هذا تعبير خطي لكل الازاحات بصيغة قانون هوك تحت تأثير اقرب الجيران فقط.
ويمكن تمثيل انتقال موجه طولية في صلب متجانس باتجاه معين مثلx

$$u = Ae^{[i(Kx-\omega t)]}$$

حيث x تمثل موضع استقرار الذرة المهتزة عن نقطة الأصل و بما ان ازاحة الذرة "n" عن موضع استقرارها عن نقطة الأصل x يساوي na عندئذ يمكن كتابة المعادلة (13) كما يلي:

$$u_n = Ae^{[i(Kna-\omega t)]}$$

وباشتقاق الازاحة بالنسبة الى الزمن مرتين نحصل على تعجيل هذه الذرة وكما يلي:

$$\frac{d^2u_n}{dt^2} = -\omega^2 Ae^{[i(Kna-\omega t)]} \qquad \frac{d^2u_n}{dt^2} = -\omega^2 u_n$$

وهذا يعني ان اتجاه التعجيل او اتجاه القوة المسببة للتعجيل يكون معاكسا لاتجاه الازاحة، أي ان القوة المعيدة المؤثرة في الذرة n هي:

$$F_n = -m\omega^2 u_n \quad \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots (2)$$

وبربط المعادلتين (1) (2) نحصل معادلة الحركة لاي ذرة في المستوى على

$$-m\omega^2 u_n = c\,[u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n] \dots\dots\dots\dots (*)$$
$$-m\omega^2 = c\,[\frac{u_{n+1}}{u_n} + \frac{u_{n-1}}{u_n} - \frac{2u_n}{u_n}]$$
$$\omega^2 = \frac{c}{m}[2 - \frac{u_{n+1}}{u_n} - \frac{u_{n-1}}{u_n}]$$

ولكن

$$\frac{u_{n+1}}{u_n} = \frac{Ae^{[iK(n+1)a-i\omega t]}}{Ae^{[iK(na)-i\omega t]}} = e^{iKa}$$

وبذلك

$$\omega^2 = \frac{c}{m}[2 - e^{iKa} - e^{-iKa}]$$

$$= \frac{c}{m}[2-(\cos ka + i\sin ka)-(\cos ka - i\sin ka)]$$

$$= \frac{c}{m}[2-2\cos ka] = \frac{2c}{m}(1-\cos ka)$$

(1-coska) =$2sin^2$ ($\frac{Ka}{2}$)

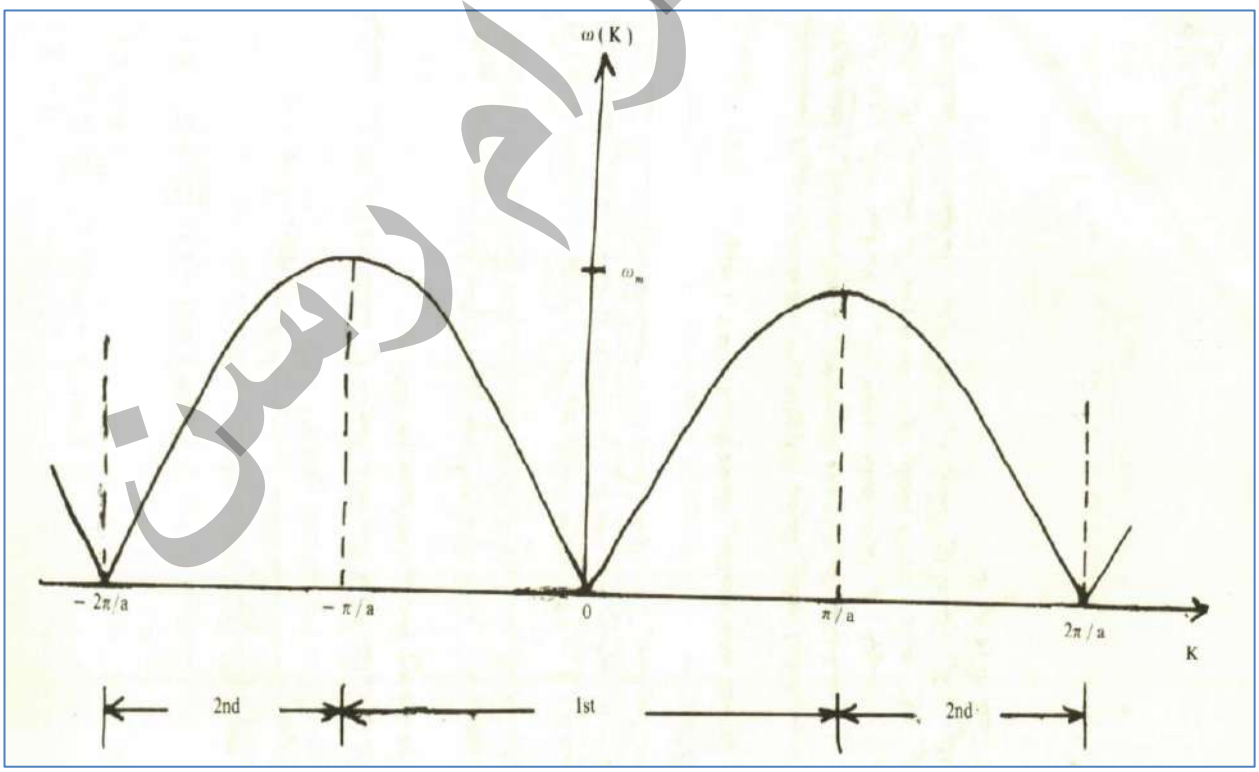
$$\boldsymbol{\omega^2 = \frac{4c}{m} sin^2\left(\frac{Ka}{2}\right)}$$

$$\omega = \mp 2\left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{Ka}{2}\right) \ldots\ldots\ldots \text{ علاقةالتفريق } \ldots\ldots\ldots.(3)$$

$\omega_m = 2\left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}} = \left[\frac{4c}{m}\right]^{\frac{1}{2}}$ .... ω_{max} القيمة العظمى للتردد الزاوي

$$\omega = \mp\omega_m \sin\left(\frac{Ka}{2}\right) \ldots\ldots\ldots \text{ علاقةالتفريق } \ldots\ldots\ldots.(3)$$

والمعادلة (3) تمثل علاقة التفريق بين التردد الزاوي (ω) وقيمة متجه الموجه [K] لسلسلة احادية الذرات. والشكل ادناه يوضح هذه العلاقة، ان الاشارة الموجبة والسالبة تعين اتجاه انتقال الموجه اذا كان نحو اليمين (+) او نحو اليسار (-) حيث الحركة عند أي نقطة تكون دورية مع الزمن.



ويمكن ملاحظة الخصائص التالية للمعادلة (3) اهمها: توقف فاصل

1- وجود قيمة عظمى للتردد الزاوي (ω_m) عندما تكون قيم K تساوي $\left(\mp\frac{\pi}{a}\right)$ او مضاعفاتها الفردية وهذا يعني ان هناك **حد اعلى او قطع لتردد الموجات المرنة (الصوتية)** في المواد الصلبة. ان قيمة (ω_m) تعتمد على ثابت القوة وكتلة الذرة أي ان

$$\omega = \mp 2\left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{Ka}{2}\right) \ldots\ldots\ldots \text{ علاقةالتفريق } \ldots\ldots\ldots (3)$$

وجود قيمة عظمى للتردد الزاوي (ω_m) عندما تكون قيم K تساوي $\left(\mp\frac{\pi}{a}\right)$ او مضاعفاتها الفردية وهذا يعني ان هناك **حد اعلى او قطع لتردد الموجات المرنة (الصوتية)** في المواد الصلبة.

$$\omega = \mp 2\left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{Ka}{2}\right) = \mp 2\left(\frac{c}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{\pi a}{2a}\right)$$

$$= \mp 2\left(\frac{c}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) \quad \& \quad \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) = 1$$

$$\boldsymbol{\omega_m = 2\left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}} = \left[\frac{4c}{m}\right]^{\frac{1}{2}}} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (4) \quad \textbf{(تردد القطع)}$$

2- لكل متجه موجه K يقابله تردد زاوي وان جميع الاهتزازات المحتملة تحدد بقيم K في المدى

$$-\frac{\pi}{a} \le K \le \frac{\pi}{a} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \textit{حدود منطقة برليون الاولى}$$

ويدعى هذا المدى بنطاق او منطقة برليون الأولى (1st B.Z.) (First Brillauin Zone) للشبيكة الخطية، اما المدى الذي يلي مدى منطقة برليون الاولى وبنصف دوره $\left(\mp\frac{\pi}{a}\right)$ لكل من جهتيها فيدعى بمنطقة برليون الثانية(2st B.Z.)

$$-\frac{2\pi}{a} \le K \le -\frac{\pi}{a} \qquad \frac{\pi}{a} \le K \le \frac{2\pi}{a} \quad \ldots\ldots\ldots \textit{حدود منطقة برليون الثانية}$$

تتبعها منطقة برليون الثالثة على نفس المنوال وهكذا بقية مناطق برليون الرابعة والخامسة. ان الكمية $\left(\frac{2\pi}{a}\right)$ تمثل قيمة متجه الشبيكة المقلوبة $\left(\vec{G}\right)$ لشبيكة او سلسلة احادية الذرات ذات بعد واحد، وهذا المتجه يربط بين أي نقطتين متكافئتين في منطقتين مختلفتين من مناطق برليون (ان فضاء برليون هو فضاء متجه الموجه أي فضاء شبيكة مقلوبة).

اذا فرضنا ان $\overrightarrow{K'}$ ، $\overrightarrow{K}$ تمثل متجهات موجه داخل وخارج منطقة برليون على التوالي فان:

$$K = K' \mp n\left(\frac{2\pi}{a}\right) \qquad \boldsymbol{K = K' + G}$$

بعد اهمال صفة الاتجاهية لانهما يقعان على خط واحد، حيث n عدد صحيح

3- ان التناسب بين التردد الزاوي (ω) ومتجه الموجهK **لقيم صغيرة جداً اي ان (Ka<< 1) (أي عند منطقة اطياف موجات طويلة)** ويماثل ذلك للموجات المرنة في وسط مستمر متجانس اي ان:

$$\omega = \mp 2(\frac{c}{m})^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \ldots \text{ علاقةالتفريق } \ldots (3)$$

وبما ان قيمة K صغيرة جدا فعليه تكون الزاوية $\left(\frac{ka}{2}\right)$ ستكون صغيرة جدا وعند ذلك سيكون جيب الزاوية يساوي الزاوية

$$\sin\left(\frac{ka}{2}\right) = \left(\frac{ka}{2}\right) \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad \text{عندما تكون الزاوية صغيرة}$$

$$\omega \approx \mp 2\left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}}\left(\frac{ka}{2}\right)$$

$$\omega \approx \mp \left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}} Ka \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (5)$$

س2) لشبيكة خطية أحادية الذرات وعند منطقة الأمواج الطويلة اثبت ان: $\boldsymbol{\omega \approx \mp \left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}} Ka}$

وهذا يعني ان كان الطول الموجي للاهتزاز (او الاضطراب) اكبر بكثير من ثابت السلسلة (a) فان سلسلة الذرات تتصرف كانها سلك مستمر كما يصفه الميكانيك الكلاسيكي حيث تكون سرعة انتشار الموجه كمية ثابتة لا تعتمد على الطول الموجي

أي انه عندما يكون Ka<< 1 فان $K \ll \frac{1}{a}$ **بما ان** $\frac{1}{\lambda} = K$ **فان** $\lambda \gg a$

أي عند (<u>منطقة اطياف موجات طويلة</u>) ولذلك تتناسب (ω) خطيا مع K تقريبا اي ان:

$$\omega = \mp 2(\frac{c}{m})^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \ldots \text{ علاقةالتفريق } \ldots (3)$$

وبما ان قيمة K صغيرة جدا فعليه تكون الزاوية $\left(\frac{ka}{2}\right)$ ستكون صغيرة جدا وعند ذلك سيكون جيب الزاوية يساوي الزاوية

$$\sin\left(\frac{ka}{2}\right) = \left(\frac{ka}{2}\right) \quad \ldots\ldots\ldots\ldots \quad \text{عندما تكون الزاوية صغيرة}$$

$$\omega \approx \mp 2\left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}}\left(\frac{ka}{2}\right) \qquad \omega \approx \mp \left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}} Ka = 2\pi\nu \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (5)$$

ν = نيو (Nu) يمثل تردد الموجه التي طولها λ.

$$\lambda\nu = \left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}} a = V_{\circ}$$

$$\omega \approx \mp \left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}} Ka = V_{\circ}K$$

$$\omega \approx V_o K$$

س3) لشبيكة خطية أحادية الذرات وعند منطقة الأمواج الطويلة اثبت ان: $\boldsymbol{\omega \approx V_o K}$

وايضاً $\left(V_{\circ} = \left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}} a\right)$ حيث $V_{\circ}$ هي سرعة انتشار الموجة الصوتية او المرنة في منطقة أطياف الموجات الطويلة لسلسلة خطية من الذرات المتشابهة وهي كمية ثابتة تقريبا كما هو الحال لسرعة انتشار موجة طولية في وسط مستمر مرن ومتجانس ذو بعد واحد. بالنسبة للموجات ذات الاطوال الموجية الكبيرة (أي عندما تكون λ كبيرة) (بعبارة أخرى عندما تكون K صغير) تنتقل ترددات هذه الموجات خلال الشبيكة، بينما الترددات الأخرى سوف تتلاشى بسرعة وبذلك تعمل الشبيكة عمل مرشح ميكانيكي للتخلص من الترددات الواطئة.

وبما ان قيمة K صغيرة جدا فعليه يمكن اعتبار جيب الزاوية مساوياً للزاوية أي ان:

$$\omega = \mp 2\left(\frac{c}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \dots\dots\dots \text{علاقةالتفريق} \dots\dots\dots (3)$$

القيمة العظمى للتردد الزاوي .....

$$\omega_m = 2\left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\omega = \mp \omega_m \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \dots\dots\dots \text{علاقةالتفريق} \dots\dots\dots (3)$$

$$\sin\left(\frac{ka}{2}\right) = \left(\frac{ka}{2}\right)$$

$$\omega = \omega_m \left(\frac{ka}{2}\right) = \left(\frac{\omega_m a}{2}\right) k \qquad \because \quad \omega = V_o k \qquad \therefore \quad V_o = \frac{\omega_m a}{2}$$

$$\therefore \quad \boldsymbol{\omega_m = \frac{2V_o}{a}}$$

وايضاً يمكن ان نستنتج:

$$V_o = \frac{\omega_m a}{2} \qquad \because \quad \omega_m = 2\left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}} \qquad \therefore \quad V_o = a\left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}}$$

اما عند قيم K اكبر من ذلك فان سرعة انتشار الموجه لا تكون ثابتة بل تتناقص كلما ازداد متجه الموجه (او صغر الطول الموجي). وعندما تصبح قيمة K مساوية الى $\left(\mp\frac{\pi}{a}\right)$ فهذا يعني ان الطول الموجي اصبح يساوي (2a) والدالة ω_k تنحني الى مماس افقي وتصبح قيمتها (ω_m) وتساوي $\left(\frac{2V_o}{a}\right)$.

$$\left(\boldsymbol{\omega_m = \frac{2V_o}{a}}\right)$$

ان هذا التباين في سرعة انتقال الموجه بسبب تباين اطوالها الموجيه نتيجة انتقالها من وسط مفرق او مشتت (dispersive) يقودنا الى التمييز بين سرعة الطور υ (Phase velocity) وسرعة المجموعة υ_g (group velocity) حيث يمكن التعبير عنها بصورة عامة باستخدام المعادلة (3) التي تمثل علاقة التفريق:

$$\omega = \mp 2\left(\frac{c}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \dots \text{علاقةالتفريق} \dots (3) \qquad V_\circ = a\left(\frac{c}{m}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$v = \frac{\omega}{K} = \frac{2}{K}\left(\frac{c}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{Ka}{2}\right) = \frac{2a}{Ka}\left(\frac{c}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{Ka}{2}\right) = \frac{2}{K}\left(\frac{V_\circ}{a}\right)\left[\frac{\sin\left(\frac{Ka}{2}\right)}{\left(\frac{Ka}{2}\right)}\right]$$

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial K} = V_\circ \cos\left(\frac{Ka}{2}\right) v = V_\circ \left[\frac{\sin\left(\frac{Ka}{2}\right)}{\left(\frac{Ka}{2}\right)}\right]$$

في منطقة الترددات الواطئة فان كلا من سرعة الطور v وسرعة المجموعة v_g تساوي $V_\circ$ أي ان

$$\left[v = v_g = V_\circ = a\left(\frac{c}{m}\right)^{\frac{1}{2}}\right]$$

وهي سرعة الموجة الصوتية المنتشرة في تلك المنطقة، حيث تكون قيم $Ka << 1$.

وهذه النتيجة مطابقة تماما لسرعة انتشار الموجة الصوتية في وسط مرن ومستمر. ومن الناحية العملية يمكن معرفة ثابت القوة C عند قياس سرعة الموجات الصوتية الطويلة في مادة صلبة.

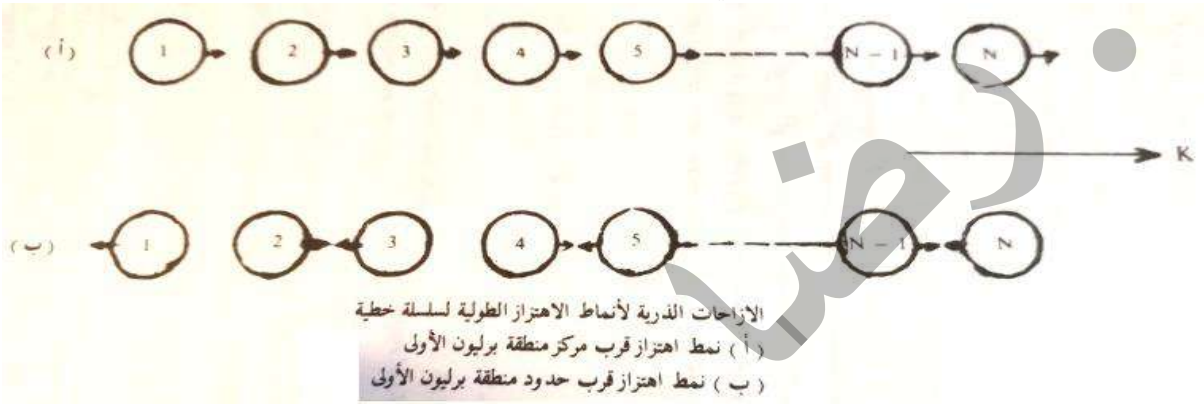
كلما ابتعدنا عن منطقة الترددات الواطئة حيث تزداد القيم المطلقة لمتجه الموجه K اكثر فاكثر (موجات قصيرة) فان سرعة الطور (υ) هي دالة لمتجه الموجه، تقل حتى تبلغ اقل قيمة لها $\left(\frac{2V_o}{\pi}\right)$ عندما تكون $\left(K = \mp\frac{\pi}{a}\right)$ والتردد الزاوي اعظم ما يمكن $\left[\omega_m = 2\left(\frac{c}{m}\right)^{\frac{1}{2}}\right]$.

اما سرعة المجموعة (υ_g) فهي كذلك تقل بازدياد القيم المطلقة ل K حتى تبلغ قيمتها الصفر عندما تكون $K = \mp\frac{\pi}{a}$. ان سرعة المجموعة عندما تكون صفر (υ_g=0) تعني ان الموجه الحاصلة من الاهتزاز ليست موجه متنقلة بل موجه واقفة عند حدود منطقة برليون حيث الازاحة عند تلك الحدود هي $K = \left(\mp\frac{\pi}{a}\right)$.

$$u_n = Ae^{[i(Kna-\omega t)]} \quad \& \quad K = \left(\mp\frac{\pi}{a}\right)$$

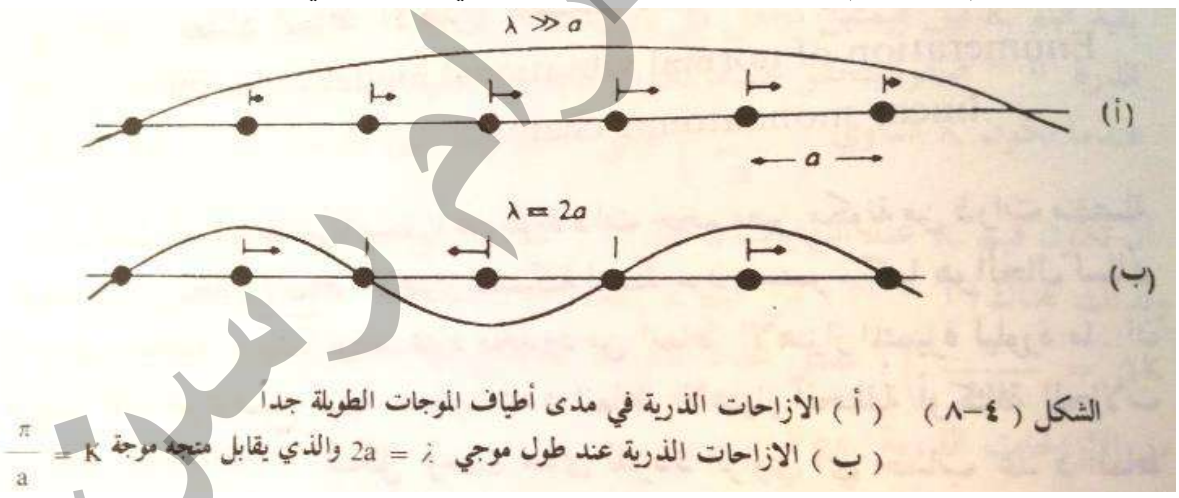
$$u_n = Ae^{-i\omega t}\cos n\pi \qquad u_n = \mp Ae^{-i\omega t}$$

حيث ان الإشارة الموجبة تكون لقيم n الزوجية والاشارة السالبة تكون لقيم n الفردية. فمثلا إزاحة الذرة الرابعة تساوي وتعاكس إزاحة الذرة التي قبلها (الثالثة) او التي تليها (الخامسة). أي ان الذرات المتجاورة تتحرك باطوار متعاكسة كما في الشكل:



الازاحات الذرية لأنماط الاهتزاز الطولية لسلسلة خطية
(أ) نمط اهتزاز قرب مركز منطقة برليون الأولى
(ب) نمط اهتزاز قرب حدود منطقة برليون الأولى

وبذلك فان نمط الاهتزاز عند حدود منطقة برليون الاولى لا يمكن ان ينتشر خلال السلسلة الخطية بل ينعكس الى الخلف ثم الى الامام على التعاقب كموجه واقفة كما في الشكل الاتي:



الشكل (٤–٨) (أ) الازاحات الذرية في مدى أطياف الموجات الطويلة جدا
(ب) الازاحات الذرية عند طول موجي $\lambda = 2a$ والذي يقابل متجه موجة $K = \frac{\pi}{a}$

السؤال الثالث في الفصل السادس في كتاب فيزياء الحالة الصلبة تأليف: د. يحيى نوري الجمال.
س 4) سلسلة خطية احادي الذرات ذات مسافة بينية ($a=3*10^{-10}$ m) فاذا كانت سرعة الصوت تساوي $3*10^2$ m/sec ، احسب تردد القطع؟
ملاحظة : توجد أخطاء طباعية في هذا السؤال في كتاب د. يحيى نوري الجمال مثل
- **ذات مسافة بينية ($a=3*10^{10}$ m)**
- **سرعة الصوت تساوي $3*10^3$ m/sec**

خلاصة ما تقدم:

✓ هي عندما تكون K صغيرة فان $a<<\lambda$ فتتحرك جميع الذرات في الطور نفسه بعضها بالنسبة للبعض الاخر وان القوة المعيدة الموثرة في ذرة بسبب تفاعلها مع جيرانها الأوائل تكون صغيرة ولهذا السبب تكون ω صغيرة كذلك.

✓ وعندما تكون K=0 تكون $\lambda = \infty$ ولذلك تتحرك الشبيكة الخطية برمتها بوصفها (جسما صلدا ذا اجزاء غير قابلة للاهتزاز) (rigidbody) بسبب ضألة القوة المعيدة. مما يفسر بسبب كون $\omega = 0$ عندما تكون $K = 0$

✓ وعندما تكون $K = \frac{\pi}{a}$ حيث $\lambda = 2a$ تتحرك الذرات المتجاورة بأطوار متعاكسة وبعد ذلك تكون القوة المعيدة والتردد الزاوي اعظم ما يكون وتكون (موجات واقفة).

السرع في الحركة الموجية:

هنالك ثلاث سرع في الحركة الموجية متميزة عن بعضها تماما وهي:

1- سرعة الذرة: وهي السرعة التوافقية للذرة حول موقع الاتزان، وهي مقدار متغير فهي تكون في غايتها العظمى في لحظة مرور الذرة في موقع الاتزان. وتكون صفراً عندما تكون في اقصى إزاحة عن موقع الاتزان.

2- سرعة الطور (v) : وهي سرعة تقدم طور معين للموجة المفردة وهي مقدار ثابت في الوسط الواحد والتي يمكن التعبير عنها رياضياً بالعلاقة التالية: $\left(v = \frac{\omega}{K}\right)$

أي ان سرعة الطور هي عبارة عن سرعة انتشار موجة نقية ذات تردد معين (ω) ومتجه موجي K

3- سرعة المجموعة (v_g): عبارة عن سرعة انتشار عدد غير محدود من الترددات. أي ان سرعة المجموعة تمثل سرعة النبضة (Pulse) والتي متوسط ترددها (ω) ومتجه الموجة **K**. والتي يمكن التعبير عنها رياضياً بالعرقة التالية: $\left(v_g = \frac{\partial \omega}{\partial K}\right)$

انماط الاهتزاز لشبيكة احادية ثلاثية الابعاد:

سابقا افترضنا وجود نوع واحد من الازاحات الذرية هي ازاحات طولية (Longiludinal)، اي ان اتجاه الذرات باتجاه انتشار الموجه (K) ولكن توجد ايضا ازاحات ذرية مستعرضة (transvers) باتجاه عمودي على اتجاه انتشار الموجه. ان الموجه في شبيكة او بلورة ثلاثية الابعاد لها الخصائص المستعرضة والطولية والمعادلات الخاصة بذلك تصبح أكثر تعقيد من تلك المعادلات لشبيكة خطية حيث ان كل بعد يولد مركبة ديكارتية إضافية لمتجه الازاحة ولذلك يجب ان تتضمن المعادلات حدودا مناسبة لثوابت القوى وكذلك السرع بحيث تناسب الازاحات الطولية والمستعرضة.

وخلاصة القول انه لشبيكة ذات ثلاثة ابعاد يجب علينا إيجاد حل لمعادلة تكعيبية أي معادلة من الدرجة الثالثة في ω^2 بينما المعادلة (*) للشبيكة الخطية تمثل معادلة في ω^2 . ويمكن فيزيائيا معرفة الجذور الثلاثة للمعادلة التكعيبية عند التركيز على حدود الاطوال الموجية الطويلة أي كاننا نتعامل مع وسط مرن مستمر. فمن المعروف جيدا انه في وسط مرن مستمر، يمكن ان تنتشر ثلاث انواع من الموجات الصوتية (acoustic) ذات سرع مختلفة والاختلاف الاساسي بينها يكمن في طبيعة استقطابها Polarization.

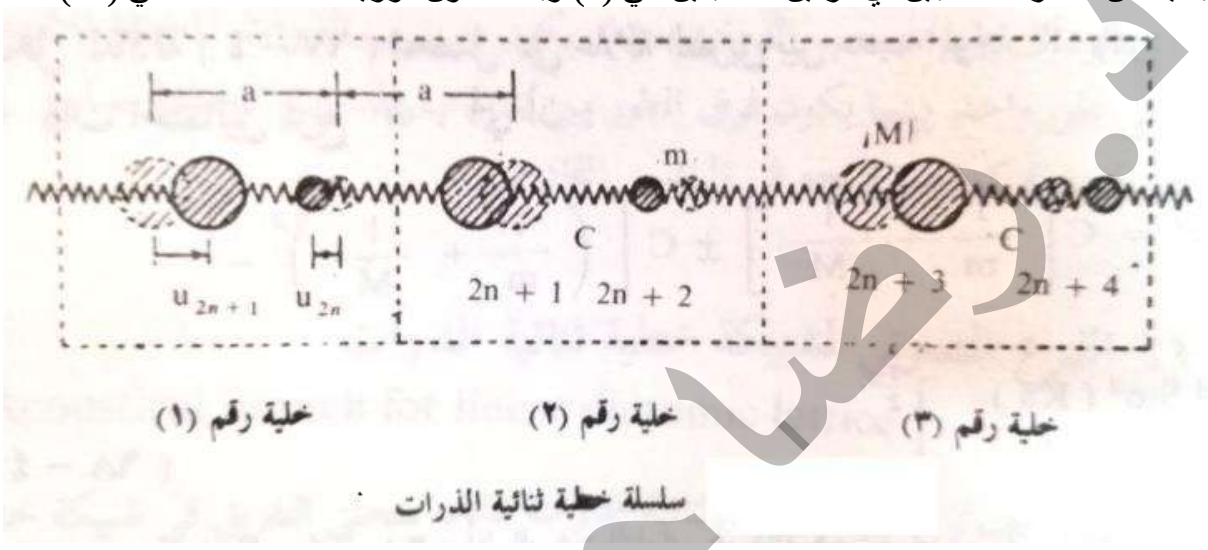
فمثلاً لوسط مستمر متماثل الخواص الاتجاهية يكون أحد الانماط ذات استقطاب طولي (متجه الازاحة لكل ذرة يكون في موازاة اتجاه انتشار الموجه). اما النمطان الاخران فلهما السرعة نفسها واستقطابها مستعرض (اي تتحرك الذرات في سطوح عمودية على اتجاه متجه الموجه). وبصورة عامة تكون سرعة النمط الطولي اعلى من سرعة النمط المستعرض.

انماط الاهتزاز لشبيكة خطية ثنائية الذرات:

هنا ترافق نقطة الشبيكة الواحدة ذرتان قد تكونان متشابهتين في الكتلة كما في الماس او مختلفتين في الكتلة كما في (Nacl) في هذه الحالة فان علاقة التفريق بين ω & K لكل نمط من الاستقطاب. يظهر فرعان رئيسان هما الفرع الصوتي (acoustical branch) والفرع البصري (optical branch) وكل منهما يضم موجات طولية ومستعرضة. وهذا يعني انه يمكن الحصول على موجات او فونونات:

صوتية مستعرضة (TA) وصوتية طولية (LA) وبصرية مستعرضة (TO) وبصرية طولية (LO).

الان نفترض وجود سلسلة تحوي **نوعين من الذرات الصغيرة (m) والذرات الكبيرة (M)** مرتبة بالتعاقب بحيث ان اقصر مسافة بين اي ذرتين متعاقبتين هي (a) وبذلك تكون دورية فضاء السلسلة هي (2a).



تنتشر الموجه الطولية على طول السلسلة. عندئذ يمكن كتابة ازاحات الذرات المتباينة الاتية وهي تمثل موجات منتقلة وكما يلي:

$$u_{2n} = A\exp\{i[K(2n)a - \omega t]\}$$
$$u_{2n+1} = B\exp\{i[K(2n+1)a - \omega t]\} \qquad (7)$$

حيث ان A،B تمثلان سعة اهتزاز الذرات الصغيرة والكبيرة على التوالي وتكون عادة ذات قيم متباينة، وعلى فرض :

1- ان ثابت القوة (c) متساو في جميع ازواج هذه السلسة. أي ان الثابت المرن لأية اصرة كمية ثابتة.
2- وان القوة المعيدة للجيران الاوائل هي المؤثرة فقط في اية ذرة في السلسلة.
3- وقوع الازاحات الذرية ضمن المدى المرن لقانون هوك

فبذلك يمكن كتابة معادلات الحركة لكل من m،M هي:

$$m\left(\frac{d^2u_{2n}}{dt^2}\right) = m\left(-\omega^2u_{2n}\right) = c\left[u_{2n+1} + u_{2n-1} - 2u_{2n}\right]$$
$$M\left(\frac{d^2u_{2n+1}}{dt^2}\right) = M\left(-\omega^2u_{2n+1}\right) = c\left[u_{2n+2} + u_{2n} - 2u_{2n+1}\right] \qquad (8)$$

ومن خلال تعويض الازاحات الذرية u_{2n+1} & u_{2n} من المعادلة (7) في (8) ينتج:

$$-m\omega^2 A = cB[\exp(iKa)+\exp(-iKa)]-2cA$$
$$-M\omega^2 B = cA[\exp(iKa)+\exp(-iKa)]-2cB$$

$$\exp(iKa)+\exp(-iKa)=2\cos Ka$$

$$(m\omega^2-2c)A+2cB\cos Ka=0$$
$$(M\omega^2-2c)B+2cA\cos Ka=0 \qquad \text{.....(9)}$$

المعادلة (9) تمثل معادلتين خطيتين متجانستين ويمكن حلهما آنياً للتخلص من المجاهيل A , B لنحصل:

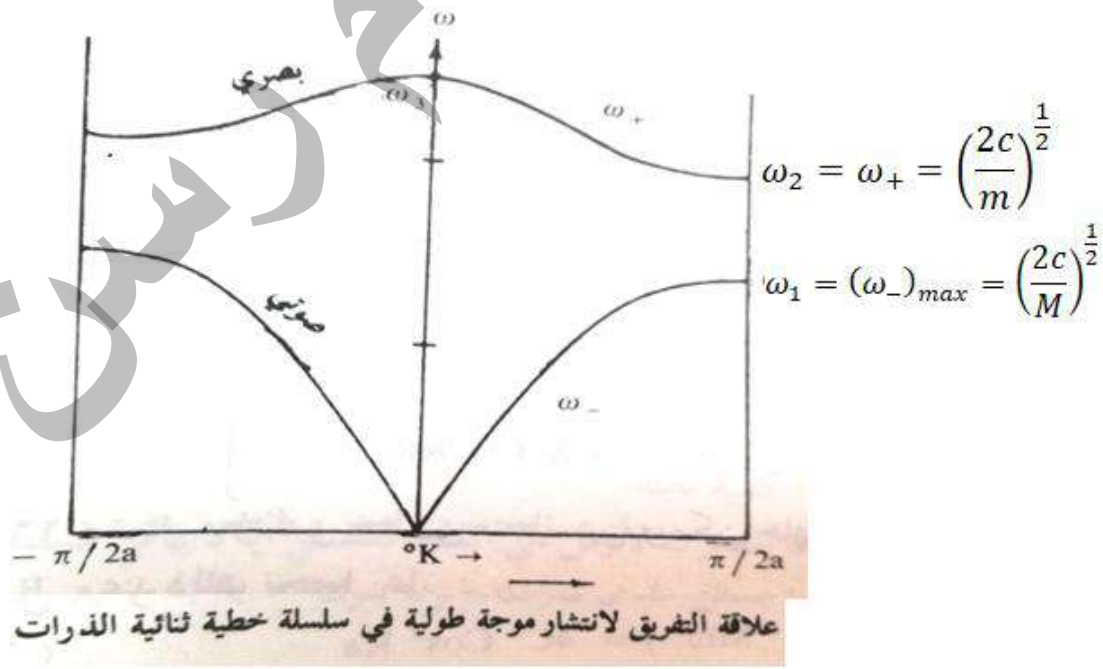
$$\therefore (2c-m\omega^2)(2c-M\omega^2)=4c^2\cos^2 Ka.....$$

وبحل هذه المعادلة نحصل على علاقة التفريق بين متجه الموجة K والتردد الزاوي ω

$$\boldsymbol{\omega_{\pm}^2(k)=C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)\pm C\left[\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)^2-\frac{4\sin^2(Ka)}{mM}\right]^{\frac{1}{2}}} \qquad (10)$$

المعادلة (10) تمثل علاقة التفريق لشبيكة خطية ثنائية الذرات.

الشكل التالي يوضح الفرع الصوتي (المنحني السفلي) والفرع البصري (العلوي) لسلسلة خطية ثنائية الذرات ويعود السبب في هذه التسمية الى طور تذبذب الذرات حيث يكون تذبذب الذرات المختلفة للأنماط الصوتية في طور واحد، بينما يكون فرق الطور بين تذبذب الذرات المختلفة مساويا ل (π) للأنماط البصرية.



علاقة التفريق لانتشار موجة طولية في سلسلة خطية ثنائية الذرات

يتضح من هذه المعادلة (10)

- ان التردد الزاوي هو دالة دورية لمتجه الموجة (K) ولما كانت قيمة (ω) كمية موجبة دائما، فان اية قيمة من قيم (ω^2) تؤدي الى قيمة واحدة لـ (ω) وهذا يعني وجود قيمتين للتردد الزاوي ω– ، ω+ لكل قيمة واحدة لمتجه الموجة (K) .
- وهذا يعني وجود فرعين لطيف اهتزاز سلسلة خطية ثنائية الذرات احدهما يمثل جميع الاختيارات لقيم (ω-) للمعادلة (10) اي مجاميع الانماط الصوتية ويدعى بالفرع الصوتي. والاخر يمثل جميع الاختيارات الموجبة لقيم (ω+) للمعادلة (10) اي مجاميع الانماط البصرية ويدعى بالفرع البصري.

الفرع الصوتي لشبيكة خطية ثنائية الذرات:

الفرع الصوتي لشبيكة خطية ثنائية الذرات مشابه لمنحني التفريق في شبيكة خطية أحادية الذرات. ولكن توجد بعض الاختلافات الأساسية بين هذين المنحنين. في المعادلة (10) تعتمد (ω^2) على ($\sin^2 Ka$)

علاقة التفريق لشبيكة لشبيكة خطية ثنائية الذرات:

$$\omega_{\pm}^2(k) = C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right) \pm C\left[\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4\sin^2(Ka)}{mM}\right]^{\frac{1}{2}} \qquad (10)$$

للفرع الصوتي

$$\omega_{-}^2(k) = C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right) - C\left[\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4\sin^2(Ka)}{mM}\right]^{\frac{1}{2}}$$

عند $K = \pm\frac{\pi}{2a}$

$$\sin^2(Ka) = \sin^2\left(\pm\frac{\pi}{2a}a\right) = \sin^2\left(\pm\frac{\pi}{2}\right) = \pm 1$$

$$\omega_{-}^2(k) = C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right) - C\left[\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4}{mM}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\omega_{-}^2(k) = C\left(\frac{M+m}{mM}\right) - C\left[\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4}{mM}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\omega_{-}^2(k) = C\left(\frac{M+m}{mM}\right) - C\left(\frac{M-m}{mM}\right)$$

عند $\left(K = \pm\frac{\pi}{2a}\right)$ ..... $\omega_1 = \omega_-(K) = \left(\frac{2C}{M}\right)^{\frac{1}{2}}$

س5) لشبيكة خطية ثنائية الذرات وللفرع الصوتي_ω ، اثبت ان علاقة التفريق عند $\left(K = \pm\frac{\pi}{2a}\right)$ تصبح:

$\omega_1 = (\omega_-)_{max} = \left(\frac{2c}{M}\right)^{\frac{1}{2}}$ اعظم قيمة ممكنة للتردد الزاوي في الفرع الصوتي

س6) لشبيكة خطية ثنائية الذرات وللفرع الصوتي_ω ، اثبت ان: $\omega = 0$ عندما $K = 0$

اي ان قيمة (ω^2) يكون ضـــمن مدى لمتجه الموجه K من $\left(\frac{\pi}{2a}\right)$ الى $\left(-\frac{\pi}{2a}\right)$ للفرع الصـــوتي (الاختيار السالب) او الفرع البصري (الاختيار الموجب). وهذا المدى يمثل حدود منطقة برليون الاولى :

مدى منطقة برايون الاولى $\left(-\frac{\pi}{2a}\right) \leq K \leq \left(\frac{\pi}{2a}\right)$

وتقابل $\left(\mp\frac{\pi}{a}\right)$ لشـــبيكة خطية احادية الذرات. وهذا الاختلاف يعني ان مدى منطقة برليون الاولى يعتمد على دورية الشبيكة لان (دورية الشبيكة الاحادية هي "a" ودورية الشبيكة الثنائية هي "2a").

وعند تعويض عن قيمة $\left(K = \mp\frac{\pi}{2a}\right)$ في المعادلة (10) لغرض الحصـول على اعظم قيمة ممكنة للتردد الزاوي ω_1 :

$$\omega_1 = (\omega_-)_{max} = \left(\frac{2c}{M}\right)^{\frac{1}{2}} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (11)$$

نرى بوضوح ان اعظم تردد زاوي لاهتزازات الانماط الصوتية لا يعتمد على كتلة الذرة الصغيرة (m) بل يعتمد فقط على كتلة الذرة الكبيرة (M) حيث انه عند تساوي كتل ذرات السلسلة (m = M) تتحول الشبيكة الى شبيكة أحادية.

اما المعنى الفيزياوي للمعادلة (11) فيمكن توضيحه من المعادلة (12) حيث نرى ان النسبة بين سعة الذرة الكبيرة (B) الى سعة الذرة الصغيرة (A) هي:

$$\frac{B}{A} = \left[\frac{2c - m\omega_-^2}{2c\cos(Ka)}\right]$$

$$\text{So } \frac{B}{A} = \frac{2c\cos(Ka)}{2c - M\omega_-^2} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots (12)$$

✓ وتقترب هذه النسبة من الواحد عندما تقترب قيمة (K) من الصفر وهذا يعني ان جميع الذرات الصغيرة والكبيرة في السلسلة تتحرك بالاتجاه نفسه او بالطور نفسه في منطقة الترددات الواطئة او الاطوال الموجية الطويلة. وبهذا نجد ان الموجات الصوتية تحقق الشروط التالية:

$|K| \ll \frac{\pi}{2a}$ *متجه الموجة*

$\mathbf{v_o} = \left[\frac{2Ca^2}{M+m}\right]^{\frac{1}{2}}$ ***السرعة***

$\omega = K\mathbf{v_o} \ll \left[\frac{2C}{M}\right]^{\frac{1}{2}}$ ***التردد الزاوي***

✓ ولكن عندما تكون قيم (K) صغيرة بحيث يمكن التعويض عن قيمة $\sin^2(Ka)$ في المعادلة 10 بقيمة (K^2a^2) فان التردد الزاوي ω_ يتناسب طرديا مع قيمة متجه الموجه (K) عندئذ تكون سرعة انتشار الموجه الصوتية (V_0) كمية ثابتة وكأن الانتشار في وسط مرن مستمر اي ان

$$\omega_- \cong \left(\frac{2c}{m+M}\right)^{1/2} Ka$$

اي

$$V_0 = \frac{\omega_-}{K} = \left(\frac{2c}{m+M}\right)^{1/2} a \quad \text{.....(13)}$$

وكلما زادت قيمة (K) تزداد قيم (ω_) ولكن بنسب متفاوتة اي ان زيادة قيمة (K) بنسب معينة ما تسبب في زيادة قيمة (ω_) ولكن بنسبة اقل، لان العلاقة ليست خطية بل تعتمد على (Sin Ka) اي ان نسبة السعات ستزداد بازدياد (K).

وعند الوصول الى اقصى قيمة لمتجه الموجه (حدود منطقة برليون) $\left(\mp\frac{\pi}{2a}\right)$ فان (ω_) تقترب من (ω_1) وبذلك تقترب السعات $\left(\frac{B}{A}\right)$ من اللانهاية وتقترب سرعة المجموعة من الصفر اي ان:

$$K = \mp\frac{\pi}{2a} \qquad \omega_1 \to (\omega_-)_{max} = \left(\frac{2c}{M}\right)^{\frac{1}{2}} \qquad \frac{B}{A} = +\infty$$

$$\frac{\omega}{K} = \left(\frac{8ca^2}{\pi^2 M}\right)^{1/2}, \qquad \frac{d\omega}{dK} = 0 \qquad (14)$$

يمكن تفسير المعادلة (14) فيزيائيا كالاتي:

- عند بلوغ اعلى تردد زاوي للأنماط الصوتية (ω_1) فان اهتزاز الذرة الصغيرة (m) يضمحل وتصبح سعة اهتزازها (A) تساوي صفر اي تتوقف عن الحركة بغض النظر عن قيمة سعة اهتزاز الذرة الكبيرة (B) ولذلك لا تعتمد (ω_1) على كتلة الذرة الصغيرة بل تعتمد على كتلة الذرة الكبيرة وثابت القوة (c).
- من جهة اخرى لما كانت سرعة المجموعة تساوي صفر عند اعلى قيمة للتردد الزاوي معنى ذلك ان الموجه المنتقلة قد اصبحت واقفة وتنعكس بزاوية (180) بموجب قانون براك للحيود

ان المنطقة الفاصلة بين الفرع الصوتي والبصري في الشكل السابق هي منطقة التردد المحظور او الطاقة المحضورة، بسبب عدم وجود قيم ل ω_ اكبر من ω_1.

الفرع البصري لشبيكة خطية ثنائية الذرات:

ان الفرع البصري يشمل جميع الترددات الزاوية (ω_+) في الشكل السابق والحاصلة من الاختيارات الموجبة للمعادلة (10). **علاقة التفريق لشبيكة خطية ثنائية الذرات:**

$$\omega_{\pm}^2(k) = C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right) \pm C\left[\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4\sin^2(Ka)}{mM}\right]^{\frac{1}{2}}$$

للفرع البصري

$$\omega_{+}^2(k) = C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right) + C\left[\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4\sin^2(Ka)}{mM}\right]^{\frac{1}{2}}$$

عندما $K \cong 0$ فان التردد الزاوي (ω_3) يكون اعظم ما يمكن والانماط الصوتية = صفر اي عندما

$$K \Rightarrow 0,\quad \omega_+ \to \omega_3 = \left[2c\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)\right]^{1/2}$$

$$\frac{\omega}{K} \to \infty,\quad \frac{d\omega}{dK} \Rightarrow 0,\quad \frac{B}{A} \to -\frac{m}{M} \qquad \text{..........(15)}$$

وهذا يعني ان للأطوال الموجيه الطويلة ذات الاهتزاز البصـــري تتحرك الذرات المتجاورة باتجاهات متعاكســـة او بفرق طور (π) بحيث ان مركز الكتلة لأية ذرتين متجاورتين يبقى ســاكنا اي كأن الجزيئة الثنائية في كل خلية تهتز بصورة مستقلة عن جيرانها من الجزيئات مع بقاء مركز الخلية ساكناً.

ان نسبة السعات $\left(\frac{B}{A}\right)$ تبقى سالبة خلال الفرع البصري ولكنها تقترب من الصفر عندما تقترب قيمة (K) من اعظم قيمة لها $\left(\frac{\pi}{2a}\right)$ وتقترب (ω_+) من اقل تردد زاوي (ω_2) حيث يكون طول الموجه اقصـــر ما يمكن ($4a = \lambda$).

$$K = \frac{\pi}{2a} \qquad \omega_2 = \omega_+ = \left(\frac{2c}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \qquad \frac{B}{A} = 0$$

$$\frac{\omega}{K} = \left(\frac{8ca^2}{\pi^2 m}\right)^{\frac{1}{2}} ،\qquad \frac{d\omega}{dk} = 0 \qquad \text{.................................(16)}$$

س7) لشبيكة خطية ثنائية الذرات وللفرع البصري ω_+ ، اثبت ان علاقة التفريق تصبح:

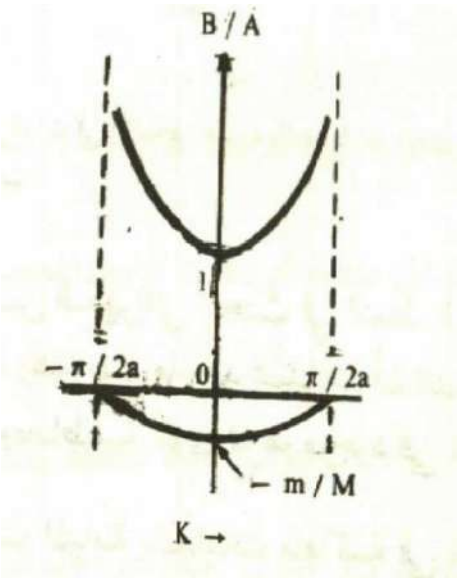
$$\omega_3 = \omega_{+max} = \left[2C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)\right]^{\frac{1}{2}} \qquad \text{عندما} \qquad K = 0$$

س8) لشبيكة خطية ثنائية الذرات وللفرع البصري ω_+ ، اثبت ان علاقة التفريق تصبح:

$$K = \mp\frac{\pi}{2a} \qquad \text{عندما} \qquad \omega_2 = \omega_+ = \left(\frac{2c}{m}\right)^{\frac{1}{2}}$$

ان نسبة السعات اصبحت صفرا في هذه الحالة وهذا يعني ان سعة اهتزاز الذرة الكبيرة (B) اصبحت صفرا بغض النظر عن سعة اهتزاز الذرة الصغيرة (A) اي ان الذرة الكبيرة توقفت عن الحركة ولذلك تعتمد ω_2 فقط على كتلة الذرة الصغيرة (m) وثابت القوة (c).

- في هذا الشكل نلاحظ ان النسبة بين سعات الذرات المختلفة الكتلة لأنماط الاهتزاز الصوتية تتغير من واحد (للموجات الطويلة جدا) الى مالا نهاية (لأقصر موجه ممكنة).



- بينما تتغير هذه النسبة لأنماط الاهتزاز البصرية من $\left(\frac{-m}{M}\right)$ (للموجات الطويلة جدا) الى صفر(لأقصر طول موجه ممكنة).
- ان النمط البصري يظهر انبعاثاً او امتصاصا للموجات الكهرومغناطيسية اقوى مما هو موجود في النمط الصوتي.
- يمكن اثارة الانماط البصرية بوساطة المجال الكهربائي لموجه ضوئية. وللسبب نفسه تعود تسمية هذه الانماط بالانماط البصرية.

نعود الى المنطقة المحضورة، ان عرض هذه المنطقة يعتمد على نسبة كتل الذرتين $\left(\frac{m}{M}\right)$. فعند تقارب كتل الذرتين تضيق منطقة الترددات المحضورة ثم تنعدم هذه المنطقة عندما $(\omega_1 = \omega_2)$ عندما تتساوى كتل هاتين الذرتين والعكس صحيح حيث يزداد عرض المنطقة بازدياد نسبة كتلتيهما $\left(\frac{m}{M}\right)$.

ان مدى الترددات للفرع البصري (ω_3-ω_2) يعتمد على نسبة الكتل $\left(\frac{m}{M}\right)$ فعند تقارب كتل الذرتين تضيق منطقة الترددات المحضورة ليتسع مدى ترددات الفرع البصري وتكون $\frac{\omega_3}{\omega_2}$ حوالي 40% اكبر من ω_2.

وتتقيد جميع اهتزازات الفرع البصري في مدى ضيق جداً ذات تردد زاوي مقارب الى (ω_2) وهذا يعني ان التردد الزاوي للفرع البصري لا يعتمد على متجه الموجه تقريبا وان $\left(\frac{d\omega}{dK}\right)$ تكون مقاربة للصفر.

انماط الاهتزاز لشبيكة ثلاثية الابعاد متعددة الذرات:

يمكن اعتبار صفات طيف الاهتزاز لشبيكة ثلاثية الابعاد (بلورة) تحوي خليتها الاولية ذرتين متشابهتين او مختلفتين، مشابهة تقريبا لصفات طيف الاهتزاز لشبيكة خطية ثنائية الذرات، ان ذلك يعني وجود فرعين اساسين لطيف اهتزاز البلورة هما الفرع الصوتي والبصري وكل من هذين الفرعين يشتمل على فروع للموجات الطولية والمستعرضة. ان عدد الانماط المستعرضة هو دائما ضعف عدد الانماط الطولية.

بصورة عامة اذا كان عدد الذرات في خلية الوحدة لبلورة هو P، فان عدد الفروع لطيف تفريق الفونون (اهتزاز الشبيكة هو (3P) ثلاثة منها هي مجموع الفروع الصوتية و(3P-3) هي مجموع الفروع البصرية.

اما اذا كان لدينا بلورة تحوي على N من الخلايا الاولية فيصبح العدد الكلي للفروع 3PN موزعا كالاتي:

عدد الانماط الصوتية الطويلة	**N**
عدد الانماط الصوتية المستعرضة	**2N**
عددالانماط البصريه الطوليه	**(P-1)N**
عدد الانماط البصريه المستعرضه	**2(PN)N**

تفاعل الاشعة تحت الحمراء وانماط الاهتزاز البصرية:

هنالك سطوح للبلورة تعكس الاشعاع الكهرومغناطيسي الساقط عليها بينما هناك سطوح اخرى تمتص هذا الاشعاع. وهذه الظواهر تعتمد على ترددات الاشعاع الساقط وعلى الترددات الذاتية للمواد الصلبة.

ان سرعة الموجات الكهرومغناطيسية أكبر بكثير من سرعة الصوت حيث ان نسبة الزخم الى طاقة الاشعاع الكهرومغناطيسي اقل بكثير من تلك لأنماط الاهتزاز الصوتية الذاتية للمواد الصلبة. وسبب هذا التفاوت بين السرعتين لا يمكن تحقيق قوانين حفظ الزخم والطاقة عند تحويل فوتون بصري الى فوتون صوتي ولكن من الممكن افناء فوتون بصري لتوليد فونون بصري فعند امتصاص بلورة لفوتون اشعة تحت الحمراء ذات تردد زاوي $\approx 10^B$ زاوية نصف قطرية لكل ثابت وتولد فونون نتيجة فناء ذلك الفوتون فان قانون حفظ متجه الموجه (حفظ الزخم) يصح عندئذ متجه الفوتون يساوي متجه موجه الفونون.

بصورة عامة فان البلورات التي تحوي خليتها الاولية ذرتين فقط، يمكن القول ان الترددات الزاوية للفرع البصري تقع ضمن منطقة الاشعة تحت الحمراء من طيف الاشعاع الكهرومغناطيسي، لذلك تظهر الانماط البصرية انبعاثاً او امتصاصاً للأشعة تحت الحمراء من طيف الاشعاع الكهرومغناطيسي لذلك تظهر الانماط البصرية انبعاثاً او امتصاصاً للأشعة تحت الحمراء اقوى مما تظهره الانماط الصوتية.

عند مرور فوتونات موجه كهرومغناطيسية خلال اي تركيب ايوني يستقطب متجه المجال الكهربائي لذلك التركيب بحيث ان الايونات المتجاورة ذات القطبية المختلفة تشجع على الحركة بأطوار متضادة لذلك فان هناك علاقة بين الاستقطاب وبين عملية فوتون وتولد فونون بصري في البلورات الايونية.

وبزيادة التردد الزاوي، كتردد الاشعة فوق البنفسجية او اعلى فقد تنعدم مساهمة الالكترونات الخارجية لعدم وجود الوقت الكافي لكي تتجاذب هذه الالكترونات والتردد العالي للإشعاع الكهرومغناطيسي. هناك علاقة بين ثابت عزل البلورة المتعرضة للإشعاع الكهرومغناطيسي ومربع معامل انكسارها كما في العلاقة:

$$n^2 = \varepsilon(\omega) = \frac{c^2}{\mathrm{v}^2} = \frac{c^2 K^2}{\omega^2}$$

v = سرعة الاشعاع الكهرومغناطيسي في الوسط المادي
c = السرعة في الفرغ
$\varepsilon(0)$ = ثابت العزل
n = معامل الانكسار

انماط الفونون الموضعي:

تكون البلورات الحقيقية عادة بلورات غير مثالية، اي وجود عيوب فيها ولهذه العيوب تأثير كبير على الصفات المرنة والكهربائية والصوتية للمواد الصلبة.

ومن العيوب التقليدية في البلورات احلال شائبة (impurity) محل احدى ذرات او ايونات البلورة ويدعى نمط الاهتزاز المرافق لهذه الشائبة بنمط الفونون الموضعي. ان هذا الاحلال يؤدي الى تشويش ضعيف على ترددات انماط الاهتزازات الطبيعية للبلورة وخلق حالات اهتزازية ضمن مدى الترددات الزاوية المحصورة بين الفرع الصوتي والبصري تتلاشى سعتها اسياً مع المسافة من الذرة الشائبة حيث تكون متجهات الموجه لهذه الحالات مركبة.

أسئلة ومسائل

س) عرف: - الفونون، تردد القطع، سرعة الطور، سرعة المجموعة، تشتت برليون (استطارة برليون)، الفونونات المهيجة حراريا، النيوترون الحراري.

س) علل ما يأتي:

1-في تشتت او استطارة برليون يكون التغير في طاقة الفوتون تكون صغيرة جدا؟

ج) بسبب الفرق الكبير بين سرعة الموجه الصوتية في البلوة (v_s.) وسرعة الفوتون او الموجه الكهرومغناطيسية c (سرعة الضوء) فان التغير في طاقة الفوتون تكون صغيرة جدا ولذلك تكون طاقة الفونون المتولد او الممتص صغيرة جدا

2- علل: في تشتت او استطارة برليون تكون طاقة الفونون المتولد او الممتص صغيرة جدا؟

ج) بسبب الفرق الكبير بين سرعة الموجه الصوتية في البلوة (v_s.) وسرعة الفوتون او الموجه الكهرومغناطيسية c (سرعة الضوء) فان التغير في طاقة الفوتون تكون صغيرة جدا ولذلك تكون طاقة الفونون المتولد او الممتص صغيرة جدا

3- علل: يفضل النيوترون على الفوتون عند دراسة طيف الفونون؟

يعد تزحزح تردد (طاقة) فوتون الاشعة السينية نتيجة استطارته غير المرنة صغير جدا مقارنة بتزحزح طاقة النيوترونات المستطيره مع الفونون لذلك يفضل النيوترون على الفوتون عند دراسة طيف الفونون (العلاقة بين تردده الزاوي ومتجه موجته) في المواد الصلب. حيث يمكن قياس تزحزح طاقة النيوترون بصورة مباشرة بينما تصعب قياس التزحزح الصغير في حزمة الاشعة السينية المستطيره.

4- علل: سرعة المجموعة هي الأكثر أهمية فيزيائياً من سرعة الطور؟

الجواب: وبما ان الطاقة والزخم تنقل عملياً بواسطة النبضات وليس الموجات النقية لذا فان سرعة المجموعة هي الأكثر أهمية فيزيائياً .

سؤال 1 في كتاب فيزياء الحالة الصلبة د. مؤيد جبرائيل:

س1) فوتون ضوئي طول موجته في الفراغ $5*10^{-7}$ m يستطير بواسطة بلورة معامل انكسارها 1.5 وسرعة الصوت فيها $4.5*10^{3}$ m/s احسب. 1-اقصى تردد زاوي ومتجه موجة الفونون المتولد عن هذه الاستطارة؟. 2- اقصى تغير نسبي للتردد الزاوي للفوتون نتيجة الاستطارة؟

الجواب: (1)

$$\omega_o \cong 2v_s\omega nc^{-1}\sin\frac{\emptyset}{2} \quad \& \quad \omega_{omax} \cong 2v_s\omega nc^{-1} \quad \& \quad \sin\frac{\emptyset}{2} = \sin\left(\frac{180}{2}\right) = 1$$

ω_o تردد الفونون المنبعث & ω تردده الزاوي لمتجه الفوتون الساقط

v_s سرعة الموجه الصوتية & c سرعة الضوء & $\emptyset$ تمثل زاوية الاستطارة

$$\omega = 2\pi f = \left(\frac{2\pi c}{\lambda}\right)$$

$$\omega_o \cong \frac{2v_s\omega n}{c} = \frac{2v_s n}{c}\left(\frac{2\pi c}{\lambda}\right) = \frac{4\pi v_s n}{\lambda}$$

$$= \frac{4\times\pi\times4.5\times10^{3}\times1.5}{5\times10^{-7}} = 16.9\times10^{10}\ \text{Hz} = 1.69\times10^{11}\ \text{Hz}$$ **اقصى تردد زاوي**

$v_s K \cong 2v_s\omega nc^{-1}\sin\frac{\emptyset}{2}$ **يمثل متجه موجة الفونون** K

$$K \cong 2\omega nc^{-1}\sin\frac{\emptyset}{2}$$

$$K \cong 2\omega nc^{-1} = \frac{2\omega n}{c} = \frac{2n}{c}\left(\frac{2\pi c}{\lambda}\right) = \frac{4\pi n}{\lambda}$$

$$= \frac{4\times3.14\times1.5}{5\times10^{-7}} = 37.68\times10^{6}\ \ \text{m}^{-1}$$ متجه موجة الفونون المتولد نتيجة الاستطارة

2) ان اقصى تغير نسبي لتردد الفوتون (الضوء المرئي) في هذه العملية نتيجة استطارته استطارة غير مرنة هو

$\frac{\omega-\omega'}{\omega}=\frac{\omega_o}{\omega}\cong 2v_s nc^{-1}$ $\frac{\omega_o}{\omega}\cong\frac{2v_s n}{c}=\frac{2\times4.5\times10^3\times1.5}{3\times10^8}=45\times10^{-6}$

ولهذا قلنا بان تزحزح تردد (طاقة) فوتون الاشعة السينية نتيجة استطارته غير المرنة يكون صغير جدا. حيث يصعب قياس التزحزح الصغير في حزمة الاشعة السينية المستطيره.

س2) لشبيكة خطية أحادية الذرات وعند منطقة الأمواج الطويلة اثبت ان: $\omega\approx\mp\left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}}Ka$

الجواب:

ان التناســـب بين التردد الزاوي (ω) ومتجه الموجهK **لقيم صـــغيرة جداً اي ان (Ka<< 1) (أي عند منطقة اطياف موجات طويلة)** ويماثل ذلك للموجات المرنة في وسط مستمر متجانس اي ان:

$\omega=\mp2(\frac{c}{m})^{\frac{1}{2}}\sin\left(\frac{ka}{2}\right)$ ... علاقةالتفريق ... (3)

وبما ان قيمة K صـــغيرة جدا فعليه تكون الزاوية $\left(\frac{ka}{2}\right)$ ســتكون صـــغيرة جدا وعند ذلك ســيكون جيب الزاوية يساوي الزاوية

$\sin\left(\frac{ka}{2}\right)=\left(\frac{ka}{2}\right)$ ..... عندما تكون الزاوية صغيرة

$\omega\approx\mp2\left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}}\left(\frac{ka}{2}\right)$ $\omega\approx\mp\left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}}Ka$ ... ... (5)

س3) لشبيكة خطية أحادية الذرات وعند منطقة الأمواج الطويلة اثبت ان: $\omega\approx V_oK$

الجواب:

عندما يكون Ka<< 1 فان $K<<\frac{1}{a}$ **أو** $\lambda>>a$

أي عند (<u>منطقة اطياف موجات طويلة</u>) ولذلك تتناسب (ω) خطيا مع K تقريبا اي ان:

$\omega=\mp2(\frac{c}{m})^{\frac{1}{2}}\sin\left(\frac{ka}{2}\right)$ ... علاقةالتفريق ... (3)

وبما ان قيمة K صـــغيرة جدا فعليه تكون الزاوية $\left(\frac{ka}{2}\right)$ ســتكون صـــغيرة جدا وعند ذلك ســيكون جيب الزاوية يساوي الزاوية

$\sin\left(\frac{ka}{2}\right)=\left(\frac{ka}{2}\right)$ ..... عندما تكون الزاوية صغيرة

$\omega\approx\mp2\left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}}\left(\frac{ka}{2}\right)$ $\omega\approx\mp\left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}}Ka=2\pi v$ ... ... (5)

ν = نيو (Nu) يمثل تردد الموجه التي طولها λ.

$\lambda v=\left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}}a=V_\circ$ $\omega\approx\mp\left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}}Ka=V_\circ K$ $\omega\approx V_oK$

س 4) سلسلة ذرية خطية احادي الذرات ذات مسافة بينية ($a=3*10^{-10}$ m) فاذا كانت سرعة الصوت تساوي 300 m/sec ، احسب تردد القطع؟

الجواب:

$$\omega = \mp 2\left(\frac{c}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \text{ .... علاقةالتفريق .... (3)}$$

وجود قيمة عظمى للتردد الزاوي (ω_m) عندما تكون قيم K تساوي $\left(\mp\frac{\pi}{a}\right)$ او مضاعفاتها الفردية وهذا يعني ان هناك **حد اعلى او قطع لتردد الموجات المرنة (الصوتية)** في المواد الصلبة.

$$\omega = \mp 2\left(\frac{c}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{ka}{2}\right) = \mp 2\left(\frac{c}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{\pi a}{2a}\right)$$

$$= \mp 2\left(\frac{c}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) \quad \& \quad \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) = 1$$

$$\omega_m = 2\left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}} = \left[\frac{4c}{m}\right]^{\frac{1}{2}} \text{ .... (4)} \quad \textbf{(اعلى تردد) او (تردد القطع)}$$

$$\because\ V_\circ = \left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}} a \qquad \frac{V_\circ}{a} = \left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}} \qquad \omega_m = 2\left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}} = 2\left(\frac{V_\circ}{a}\right)$$

$$\omega_m = 2\left(\frac{V_\circ}{a}\right) = 2 \times \left(\frac{300}{3 \times 10^{-10}}\right) = 2 \times 10^{12}\ (S^{-1})$$

<u>**طريقة أخرى للحل**</u>

$$\omega = \mp 2\left(\frac{c}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \text{ .... علاقةالتفريق .... (3)}$$

$$\omega_m = 2\left[\frac{c}{m}\right]^{\frac{1}{2}} \text{ .... القيمة العظمى للتردد الزاوي}$$

$$\omega = \mp \omega_m \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \text{ .... علاقةالتفريق .... (3)}$$

بالنسبة للموجات ذات الاطوال الموجية الكبيرة (أي عندما تكون λ كبيرة) (بعبارة أخرى عندما تكون K صغير) تنتقل ترددات هذه الموجات خلال الشبيكة، بينما الترددات الأخرى سوف تتلاشى بسرعة وبذلك تعمل الشبيكة عمل مرشح ميكانيكي للتخلص من الترددات الواطئة. وبما ان قيمة K صغيرة جدا فعليه يمكن اعتبار جيب الزاوية مساوياً للزاوية أي ان:

$$\sin\left(\frac{ka}{2}\right) = \left(\frac{ka}{2}\right)$$

$$\omega = \omega_m\left(\frac{ka}{2}\right) = \left(\frac{\omega_m a}{2}\right) k \qquad \because\ \omega = V_o k \qquad \therefore\ V_o = \frac{\omega_m a}{2}$$

$$\therefore\ \boldsymbol{\omega_m = \frac{2V_o}{a}} \qquad \omega_m = 2\left(\frac{V_\circ}{a}\right) = 2 \times \left(\frac{300}{3\times10^{-10}}\right) = 2 \times 10^{12}\ (S^{-1})$$

د. رضا حزام رسن

س5) لشبيكة خطية ثنائية الذرات وللفرع الصوتي_ω ، اثبت ان علاقة التفريق عند $\left(K=\pm\frac{\pi}{2a}\right)$ تصبح:

$\omega_1=(\omega_-)_{max}=\left(\frac{2c}{M}\right)^{\frac{1}{2}}$ اعظم قيمة ممكنة للتردد الزاوي في الفرع الصوتي

الجواب:

علاقة التفريق لشبيكة لشبيكة خطية ثنائية الذرات:

$$\omega_{\pm}^2(k)=C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)\pm C\left[\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)^2-\frac{4\sin^2(Ka)}{mM}\right]^{\frac{1}{2}} \qquad (10)$$

للفرع الصوتي

$$\omega_-^2(k)=C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)-C\left[\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)^2-\frac{4\sin^2(Ka)}{mM}\right]^{\frac{1}{2}}$$

عند $K=\pm\frac{\pi}{2a}$

$$\sin^2(Ka)=\sin^2\left(\pm\frac{\pi}{2a}a\right)=\sin^2\left(\pm\frac{\pi}{2}\right)=\pm1$$

$$\omega_-^2(k)=C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)-C\left[\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)^2-\frac{4}{mM}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\omega_-^2(k)=C\left(\frac{M+m}{mM}\right)-C\left[\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)^2-\frac{4}{mM}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\omega_-^2(k)=C\left(\frac{M+m}{mM}\right)-C\left(\frac{M-m}{mM}\right) \quad \therefore \quad \omega_1=\omega_-^2(K)=\left(\frac{2c}{M}\right)^{\frac{1}{2}}$$

س6) لشبيكة خطية ثنائية الذرات وللفرع الصوتي_ω ، اثبت ان: $\omega=0$ عندما $K=0$

تمثل علاقة التفريق لشبيكة لشبيكة خطية $\omega_{\pm}^2(k)=C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)\pm C\left[\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)^2-\frac{4\sin^2(Ka)}{mM}\right]^{\frac{1}{2}}$ **ثنائية الذرات**

وللفرع الصوتي نستعمل (ω_-) $at\ (K=0)$

$$\omega_-^2(k)=C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)-C\left[\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)^2-0\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\omega_-^2(k)=C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)-C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)=0$$

س7) لشبيكة خطية ثنائية الذرات وللفرع البصري ω_+ ، اثبت ان علاقة التفريق تصبح:

$\omega_3 = \omega_{+max} = \left[2C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)\right]^{\frac{1}{2}}$ عندما $K = 0$

علاقة التفريق لشبيكة لشبيكة خطية ثنائية الذرات:

$$\omega_{\pm}^2(k) = C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right) \pm C\left[\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4\sin^2(Ka)}{mM}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\omega_+^2(k) = C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right) + C\left[\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4\sin^2(Ka)}{mM}\right]^{\frac{1}{2}}$$ للفرع البصري

$$\omega_+^2(k) = C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right) + C\left[\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)^2 - 0\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\omega_+^2(k) = C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right) + C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)$$

$$\omega_+^2(k) = \left[2C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)\right]$$

$$\omega_3 = \omega_+(k) = \left[2C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)\right]^{\frac{1}{2}}$$

س8) لشبيكة خطية ثنائية الذرات وللفرع البصري ω_+ ، اثبت ان علاقة التفريق تصبح:

$K = \mp\frac{\pi}{2a}$ عندما $\omega_2 = \omega_+ = \left(\frac{2c}{m}\right)^{\frac{1}{2}}$

علاقة التفريق لشبيكة لشبيكة خطية ثنائية الذرات:

$$\omega_{\pm}^2(k) = C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right) \pm C\left[\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4\sin^2(Ka)}{mM}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\omega_+^2(k) = C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right) + C\left[\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4\sin^2(Ka)}{mM}\right]^{\frac{1}{2}}$$ للفرع البصري

$K = \pm\frac{\pi}{2a}$ عند $\sin^2(Ka) = \sin^2\left(\pm\frac{\pi}{2a}a\right) = \sin^2\left(\pm\frac{\pi}{2}\right) = \pm 1$

$$\omega_+^2(k) = C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right) + C\left[\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4}{mM}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$\omega_+^2(k) = C\left(\frac{M+m}{mM}\right) + C\left(\frac{M-m}{mM}\right) = \frac{2C}{m}$ $\omega_2 = \omega_+ = \left(\frac{2c}{m}\right)^{\frac{1}{2}}1$

H.W

الفصل الرابع
(الخواص الحرارية)
Thermal Properties

يمكن تعريف السعة الحرارية C: بأنها كمية الحرارة (طاقة) المسببة لتغيير درجة حرارة مادة ما درجة مئوية (او مطلقة) وهي صفة لنظام معين.

$$C = \Delta Q / \Delta T$$

اما السعة الحرارية النوعية: هي النسبة بين السعة الحرارية للنظام الجامع لتلك المادة الى كتلة ذلك النظام (أو عدد المولات في النظام) ووحداتها $J/kg.deg$ او $J/mol.deg$

قبل ظهور الميكانيك الكمي، كان الاعتقاد السائد ان ذرات المادة تُجبر على التذبذب حول نقاط ثابتة بتأثير قوى كبيرة نسبيا تنتج من تفاعلها مع بقية الذرات المحيطة بها، ولذلك تنجز كل ذرة حركة توافقية بسيطة ذات ثلاث درجات للحرية ولكل درجة من درجات الحرية (K_BT) من الطاقة (نصفها طاقة حركية والنصف الآخر كامنة) ولهذا تكون الطاقة الاهتزازية الكلية للبلورة U التي تحتوي على N من الذرات هي:

$$U = 3N\,K_BT$$

K_B ثابت بولتزمان $= 1.38 \times 10^{-23}$

T درجة الحرارة المطلقة

ويمكن حساب الحرارة النوعية c_v عند ثبوت الحجم ولمول واحد يحوي على عدد فوكادرو (6.0225×10^{23}) من الذرات.

$$C_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right) = 3\ N_A\ K_B$$

$$C_v = 3 \times 6.0225 \times 10^{23} \times 1.3805 \times 10^{-23}$$

$$C_v = 24.9422\ J/mol.^oK$$

إن ثابت الغازات

$$R = 8.3142\ J/mol.^oK$$

ولهذا ان الرقم اعلاه للحرارة النوعية C_v يكون مساوياً الى $3R$

$$\therefore C_v = 3R$$

<u>ينص قانون دلونك وبيتيت:</u> على انه عند درجات حرارة غير منخفضة جداً تكون الحرارة النوعية المولية عند حجم ثابت لجميع المواد الصلبة النقية مقارباً جداً لـــ $3R$. وهذا ما وجد عملياً عند درجات الحرارة العالية.

اما عند درجات الحرارة المنخفضة فان هذه الحجة لا تصح حيث تقترب الحرارة النوعية للمواد الصلبة بأنواعها كافة تقترب من الصفر عند اقتراب درجة حرارة هذه المواد من درجة الصفر المطلق $0\ ^oK$. لذلك لم يستطع الميكانيك الكلاسيكي إعطاء جواب صحيح لهذه المشكلة لذا وجب التوجه الى الميكانيك الكمي.

توجد عادة أنواع مختلفة من الحرارة النوعية لمادة ما، ويقصد بذلك وجود عدد غير محدود من الحرارات النوعية لمادة تماثل عدد الطرق غير المحدودة لتغيير درجة الحرارة لتلك المادة حيث يمكن تغيير درجة الحرارة بثبوت الحجم او الضغط او كليهما. ولذلك يركز الاهتمام على الحرارة النوعية المولية عند حجم ثابت C_v والحرارة النوعية المولية عند ضغط ثابت C_p

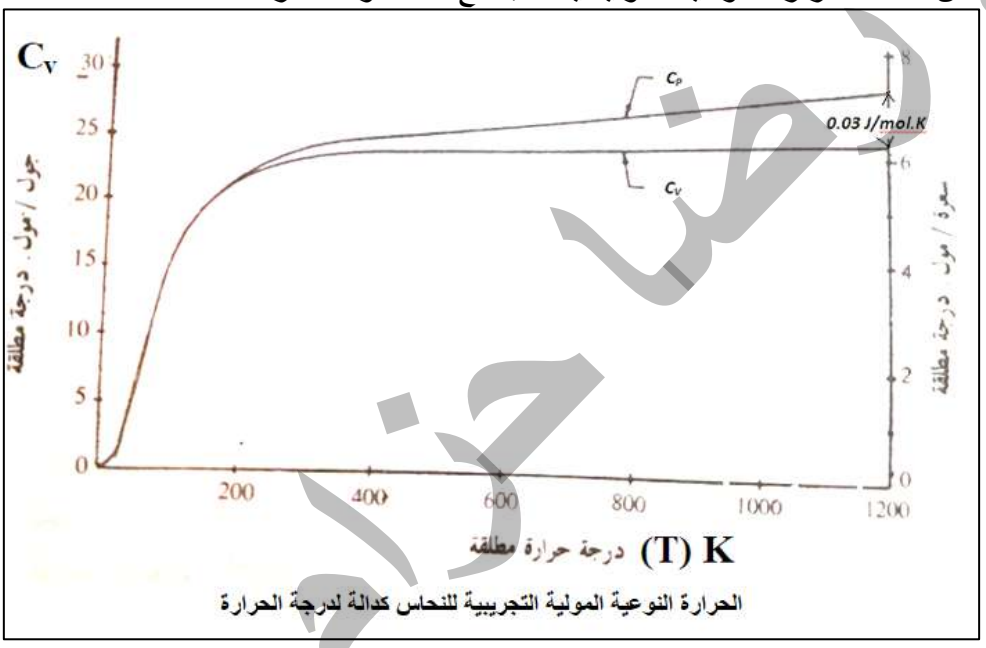
نماذج دراسة الحرارة النوعية هي

(النموذج الكلاسيكي) و (نموذج انشتاين) و (نموذج ديباي)

الشكل التالي يوضح تغير الحرارة النوعية المولية عند حجم ثابت C_v والحرارة النوعية المولية عند ضغط ثابت C_p مع تغير درجات الحرارة لمعدن النحاس عند ضغط قدره ضغط جوي واحد.

- عند درجات حرارة منخفضة تكون C_v و C_p متساويتين تقريباً.
- بالقرب من درجة الصفر المطلق $0\ ^oK$ فأن C_v و C_p تتناقصان بسرعة حتى تبلغان قيمة الصفر.
- عند درجات حرارة مرتفعة تستمر C_p بالزيادة بينما تكون C_v ثابتة تقريباً وتساوي $J/mol.^oK$. ولقد وجد ان قيمة C_v هذه هي أعظم قيمة يمكن ان تبلغها معظم المواد الصلبة عند درجات الحرارة العالية وتدعى عادة **بقيمة دلونك وبيتيت 3R**. علماً ان الفرق بينها يكون صغيراً جداً للمواد الصلبة حوالي *0.03* $J/mol.^oK$.
- ان هذا السلوك هو صفة مميزة لمعظم المواد الصلبة عل الرغم من تباينها الكبير في درجة الحرارة التي عندها يحدث الانخفاض الحاد للحرارة النوعية وكذلك أسلوب هذا الانخفاض حيث:

✓ الانخفاض الحاد للحرارة النوعية المولية يتناسب مع T للمواد المعدنية.
✓ الانخفاض الحاد للحرارة النوعية المولية يتناسب مع T^3 للمواد العازلة.



الحرارة النوعية المولية التجريبية للنحاس كدالة لدرجة الحرارة

س) لأغراض القياسات الفعلية يكون تعيين الحرارة النوعية عند ضغط ثابت اكثر ملائمة من الحرارة النوعية عند حجم ثابت. علل ذلك؟

الجواب :

- لانه عند درجات حرارة منخفضة تكون C_v و C_p متساويتين تقريباً.
- وعند درجات حرارة مرتفعة تستمر C_p بالزيادة بينما تكون C_v ثابتة تقريباً وتساوي 24.9422 $J/mol.^oK$.
- لذلك فان تعيين الحرارة النوعية عند ضغط ثابت أكثر ملائمة لأغراض القياسات الفعلية. وهي التي تستخدم للتميز بين معظم المواد الصلبة

س) الفرق بين C_v و C_p عند درجات حرارة مرتفعة يكون صغيراً جداً للمواد الصلبة حوالي *0.03* $J/mol.^oK$. ما السبب في نشوء هذا الفرق بين C_v و C_p ؟

الجواب:

الفرق ناشئ من الشغل المنجز في اثناء التمدد الحراري، لذلك يمكن اهماله في كثير من الحالات واعتبار C_v مساوية تقريباً الى C_p

النموذج الكلاسيكي: يفترض أن

1) ذرات المادة الصلبة تزاح عن مواقع اتزانها تحت تأثير قوة معيدة خطية (حسب قانون هوك). وتتذبذب حول تلك المواقع بحركة توافقية بسيطة.

2) أنماط الاهتزاز الطبيعية للشبيكة تكون مستقلة بعضها عن البعض عندما تخضع تلك الاهتزازات لقانون هوك ولذلك لا تعتمد طاقة اي نمط اهتزاز شبيكة على تردده الزاوي ω وقيمة n التي يحتلها او يمتلكها الفونون *phonon occupancy* ولا تعتمد على القيم التي تمتلكها الفو نونات الأخرى.

3) عند ارتفاع درجة حرارة المادة تزداد السعة ومن ثم الطاقة للحركة التذبذبية. حيث ان (K_BT) القيمة المتوقعة للطاقة الكلية لمتذبذب توافقي واحد وتعني ان معدل الطاقة، المرافقة لاحدى الاحداثيات كالسرعة او الازاحة، ولكل ذرة في مجموعة من الذرات المتوازنة ثرموديناميكياً عند درجة حرارة T مساوية (K_BT) وبما ان هنالك ثلاثة درجات للحرية. والمادة تتكون من N من الذرات.

$\therefore U = 3\, K_BT\, N$ ← وفي حالة مول واحدة $N_A = N$

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right) = 3\, N_A\, K_B$$

الخلاصة العامة للنموذج:

1. الطاقة U والحرارة النوعية C_V لا تعتمد على التردد الزاوي (يعني التردد كمية ثابتة وليس متغير).
2. يصح هذا النموذج من درجة حرارة الغرفة ($27°$) مئوية فما فوق.
3. فشلت النظرية في تفسير تناقص قيمة الحرارة النوعية بانخفاض درجة الحرارة.

نموذج أنشتاين للحرارة النوعية:

افترض انشتاين:

- ان الذرات في الشبيكة تهتز بصورة مستقلة بعضها عن بعض **وبترددات زاوية متساوية** بسبب تشابه الذرات المحيطة لها.
- ان البلورة تضم $3N$ من المتذبذبات التوافقية كل منها ذات تردد زاوي ω.
- وهي نفس فرضيات النظرية الكلاسيكية ولكن أينشتاين اختلف مع النظرية الكلاسيكية وادخل شيء جديد وهو حساب معدل الطاقة للمتذبذب التوافقي (استفاد من نظرية بلانك الخاصة بإشعاع الجسم الاسود).

التي **تنص (نظرية بلانك)** على ان المتذبذب التوافقي لا يمكن ان تمتلك طيفاً مستمراً للطاقة بل هنالك شروط تقييدية يجب ان تتحقق وهي ان الطاقة تكون مكممة وتساوي عدداً صحيحاً مضروباً في$h\nu$ ولهذا تكون الطاقة للمتذبذب التوافقي. حيث ν = نيو (Nu) يمثل التردد

$$E_n = nh\,\nu = n\hbar\omega \;\ldots\ldots\ldots\; 1$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054 \times 10^{-34} \quad J.Sec$$

$$n = 0, 1, 2, \ldots\ldots$$

علماً ان الميكانيك الكمي الحديث ظهر بعد 25 سنة من ظهور نظرية بلانك وحسب الميكانيك الكمي تكون تكون الطاقة للمتذبذب التوافقي:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = n\hbar\omega + \frac{1}{2}\hbar\omega$$

$\frac{1}{2}\hbar\omega$ **طاقة نقطة الصفر** هي الطاقة الملازمة للذرة المهتزة حتى عندما تصل درجة الحرارة الى الصفر المطلق.

مقارنة بين الميكانيك الكلاسيكي والميكانيك الكمي:

1. في الميكانيك الكمي توجد قيمة غير صفرية (صغرى) لطاقة نقطة الصفر عند درجة حرارة الصفر المطلق وغيرها من درجات الحرارة. بينما يسمح الميكانيك الكلاسيكي للذرة بالبقاء ساكنة وبطاقة تساوي صفراً عند درجة حرارة الصفر المطلق.
2. في الميكانيك الكمي توجد قيم محددة ومقيدة لمستويات طاقة اهتزاز الذرة بينما يسمح الميكانيك الكلاسيكي للذرة لأن تمتلك أية قيمة للطاقة.
3. الميكانيك الكلاسيكي يتنبأ بأحتمالية ثابتة عن وجود الذرة في موقع معين حيث تتناسب تلك الاحتمالية عكسياً مع سرعة الذرة في ذلك الموقع. بينما لا يتنبأ الميكانيك الكمي بأحتمالية ثابتة بل بإحتمالية متذبذبة.

الطاقة حسب نموذج انشتاين هي:

$$U = 3N \langle E \rangle$$

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar\omega}{e^{(\hbar\omega / K_B T)} - 1}$$

$$U = \frac{3N\hbar\omega}{e^{(\hbar\omega / K_B T)} - 1} \qquad \& \qquad C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V$$

$$\mathbf{F_E(\omega_E, T) = \left(\frac{\hbar\omega_E}{K_B T}\right)^2 \frac{e^{\hbar\omega_E/K_B T}}{\left[e^{\hbar\omega_E/K_B T} - 1\right]^2}}$$ ---------------- تسمى دالة أنشتاين

$$T_E = \frac{\hbar\omega_E}{K_B} = \theta_E$$ ---------------- درجة حرارة انشتاين

$$F_E(\omega_E, T) = \left(\frac{T_E}{T}\right)^2 \frac{e^{T_E/T}}{\left[e^{T_E/T} - 1\right]^2}$$ ---------------- دالة أنشتاين

$$C_V = 3R\, F_E(\omega_E, T)$$

س) اثبت انه عند درجات الحرارة العالية يقترب نموذج انشتاين من النموذج الكلاسيكي؟

الجواب:

عند درجات الحرارة العالية، أي عند T اعلى من بكثير من درجة حرارة اينشتاين (T_E او θ_E) أي ان ($T \gg T_E$) فعليه تكون قيمة $\frac{T_E}{T}$ صغيرة جدا. وعليه فأن :

$$e^{T_E/T} = 1 + \frac{T_E}{T}$$

نعوضها في دالة اينشتاين فنحصل على

$$F_E(\omega_E, T) = \left(\frac{T_E}{T}\right)^2 \frac{e^{T_E/T}}{\left[e^{T_E/T} - 1\right]^2} = \left(\frac{T_E}{T}\right)^2 \frac{1 + \frac{T_E}{T}}{\left[1 + \frac{T_E}{T} - 1\right]^2}$$

$$= \left(\frac{T_E}{T}\right)^2 \frac{1 + \frac{T_E}{T}}{\left[\frac{T_E}{T}\right]^2} = 1 + \frac{T_E}{T}$$

$\because \frac{T_E}{T}$ صغيرة جدا

$$\therefore \; F_E(\omega_E, T) = 1$$

$$\therefore C_V = 3R$$

س) عند درجات الحرارة الواطئة اثبت ان الحرارة النوعية حسب نموذج اينشتاين سيكون

$$\therefore\ C_V = 3R\left(\frac{T_E}{T}\right)^2 e^{-T_E/T}$$

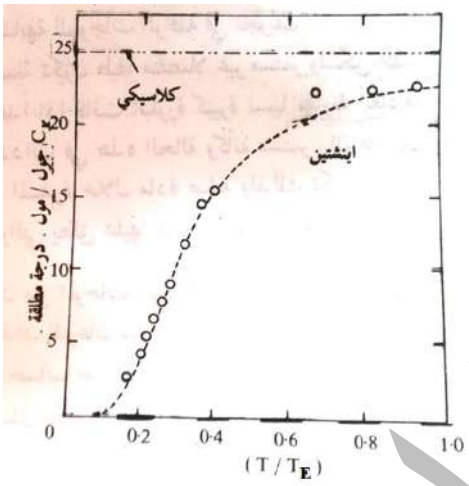
الجواب: عند درجات الحرارة الواطئة، أي عند T اقل بكثير من درجة حرارة اينشتاين $(T_E$ او $\theta_E)$ ستكون $(T \ll T_E)$ فعليه ستصبح دالة اينشتاين ستكون:

$$F_E(\omega_E, T) = \left(\frac{T_E}{T}\right)^2 \frac{e^{T_E/T}}{[e^{T_E/T}-1]^2} = \left(\frac{T_E}{T}\right)^2 \frac{e^{T_E/T}}{[e^{T_E/T}]^2} = \left(\frac{T_E}{T}\right)^2 e^{-T_E/T}$$

$$C_V = 3R\, F_E(\omega_E, T)$$

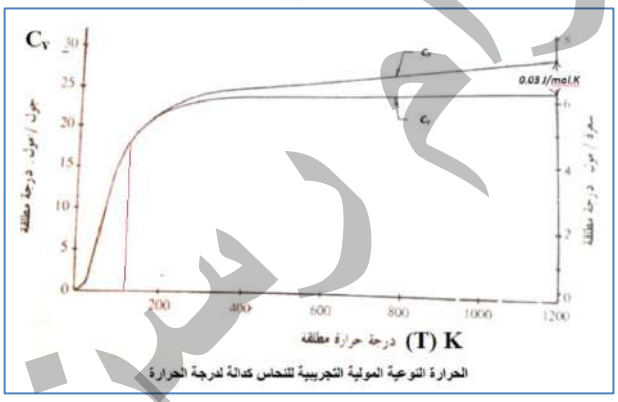
$$C_V = 3R\left(\frac{T_E}{T}\right)^2 e^{-T_E/T}$$

==========



حيث T_E **درجة حرارة انشتاين المهتزة** والمعادلة (2) تمثل الحرارة النوعية حسب نظرية انشتاين.

ينحرف المنحني بموجب نموذج انشتاين ويبدأ بالإنخفاض كلما انخفضت درجة الحرارة بإتجاه الصفر تناقصاً اسياً حيث ان الحرارة النوعية تتناسب مع $e^{-T_E/T}$ وقد وجد ان الكثير من المواد تتناسب مع T^3 عند الدرجات الحرارة المنخفضة كما تنبأ بذلك نموذج ديباي.



س1: د. مؤيد ص325 من الشكل (1-5) احسب درجة حرارة أينشتاين المميزة T_E للنحاس بحيث تتوافق معادلة أينشتاين للحرارة النوعية مع القيمة التجريبية عند درجة حرارة $(100K)$.

الجواب:

من الشكل (1-5) وبعد وضع المسطرة ورسم مستقيم من درجة $100K$ الى الاعلى ليقطع المنحني ثم نأخذ القيمة المناظرة لها على منحني c_v نجد ان القيمة تساوي $(19\ J/mol.K)$ وبعد التعويض بمعادلة السعة الحرارية لأينشتاين:

$$c_v = 3R\left(\frac{T_E}{T}\right)^2 e^{-T_E/T} \qquad 19 = 25\left(\frac{T_E}{100}\right)^2 e^{-T_E/100}$$

$$\frac{19}{24.9422} = \frac{T_E^2}{10^4} e^{-T_E/100} \qquad \frac{19\times10^4}{24.9422} = T_E^2 e^{-T_E/100} = 7.618 * 10\text{^}3$$

وبعد أخذ لوغارتم لطرفي المعادلة سوف نجد قيمة T_E

177.13746222539723269 *-115.79292501997552413i*

$T_E = 177.137\ K$

نموذج ديباي للحرارة النوعية:

افترض ديباي كما افترض أينشتاين قبله ان البلورة تحوي N من الذرات تمتلك $3N$ من انماط الاهتزاز وكل نمط له معدل طاقة ولكن ديباي اضاف ما يلي:

1. التعامل مع حركة الشبيكة كلياً وكأنها (متذبذبات متقارنة) تتذبذب جماعياً بدلاً من اعتبارها مستقلة بعضها عن البعض وتتفاعل الذرات بعضها مع البعض كما افترضها نموذج أينشتاين.
2. اذا كان الطول الموجي لموجه مرنه تنتشر خلال بلورة اكبر من المسافات الذرية لتلك البلورة أمكن اعتبار البلورة وسطاً مستمراً لذا يمكن استخدام مواصفات الوسط المستمر **حيث** $\left(V_O = \frac{\omega}{k}\right)$ **كميه ثابته وتساوي V_o سرعة الصوت** حيث تعتمد على متجه الموجه K وليس كمية ثابتة.
3. ان طيف الاهتزاز للتردد الزاوي ينقطع عند قيمة معينة للتردد الزاوي لكي يستجيب مع العدد الكلي لأنماط الاهتزاز $3N$.

ان اقصى تردد زاوي يحدث عنده انقطاع الطيف يسمى **تردد ديباي ω_D** ويطلق عليه تردد القطع، ويسمى متجه الموجه المقابل لهذا التردد **بمتجه موجة ديباي K_D.**

ويعبر عن الطاقة الكلية:

$$U = \frac{9N}{\omega_D^3}\int_0^{\omega_D}\frac{\hbar\omega^3 d\omega}{e^{\hbar\omega/K_B T}-1}$$

للتبسيط سندخل درجة حرارة ديباي المُميزة θ_D والتي تكون عندها معدل الطاقة الحرارية الكلية للمتذبذب تساوي كمية ثابتة مقدارها $\hbar\omega_D$ أي ان:

$$K_B\theta_D = \hbar\omega_D,$$

$$\left[\omega_D = \frac{K_B\theta_D}{\hbar} \quad \ldots\ldots\ldots \text{تردد ديباي}\right]$$

$$\left[\theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{K_B} \quad \ldots\ldots\ldots \text{درجة حرارة ديباي}\right]$$

$$\left(x = \frac{\hbar\omega}{K_B T}\right) \qquad \left(\omega = \frac{K_B T}{\hbar}x\right) \qquad \left(d\omega = \frac{K_B T}{\hbar}dx\right) \qquad \left(x_m = \omega_D = \frac{\theta_D}{T}\right)$$

$$U = \frac{9NK_B T^4}{\theta_D^3}\int_0^{x_m}\frac{x^3}{e^x-1}dx$$

$$U = 9NK_B T\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3\int_0^{x_m}\frac{x^3}{e^x-1}dx = 9RT\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3\int_0^{x_m}\frac{x^3}{e^x-1}dx$$

$$U = 9RT\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 f\left(\frac{\theta_D}{T}\right)$$

حيث $f\left(\frac{\theta_D}{T}\right)$ تعرف بدالة ديباي

س) اثبت انه عند درجات الحرارة العالية ان نموذج ديباي يقترب من النموذج الكلاسيكي؟

الجواب: عند درجات الحرارة العالية، أي عند T اعلى من بكثير من درجة حرارة ديباي (θ_D) أي ان $(T \gg \theta_D)$ فعليه تكون قيمة x صغيرة جدا. وعليه فأن :

$e^{x} = 1 + x + \frac{x^2}{2} +$ مع اهمال الأسس العالية $x = \frac{\hbar\omega}{K_B T}$

$$U = \frac{9NK_BT^4}{\theta_D^3}\int_0^{x_m}\frac{x^3}{e^x-1}dx = \frac{9NK_BT^4}{\theta_D^3}\int_0^{x_m}\frac{x^3}{1+x-1}dx$$

$$= \frac{9NK_BT^4}{\theta_D^3}\int_0^{x_m}x^2dx = \frac{9NK_BT^4}{\theta_D^3}\frac{x_m^3}{3} \qquad x_m = \omega_D = \frac{\theta_D}{T}$$

$$U = \frac{3NK_BT^4}{\theta_D^3}x_m^3 = \frac{3NK_BT^4}{\theta_D^3}\frac{\theta_D{}^3}{T^3} = 3NK_BT$$

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V$$

$$C_V = 3NK_B = 3R$$

وهذه النتيجة مطابقة تماما لنتيجة الحرارة النوعية في النظرية الكلاسيكية

س) عند درجات الحرارة الواطئة اثبت ان الحرارة النوعية حسب نموذج ديباي سيكون

$$C_V = \frac{12}{5}\pi^4 R\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 = 1944\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \frac{J}{mol.K}$$

الجواب: عند درجات الحرارة الواطئة، أي عند T اقل بكثير من درجة حرارة ديباي (θ_D) ستكون $(T \ll \theta_D)$ فعليه يمكن تبسيط الحد $\int_0^{x_m}\frac{x^3}{e^x-1}dx$ بالاستعانة بدالة زيتا

$$U = \frac{9NK_BT^4}{\theta_D^3}\int_0^{x_m}\frac{x^3}{e^x-1}dx$$

$\lim_{x\to\infty}\int_0^{x_m}\frac{x^3dx}{e^x-1} = \frac{\pi^4}{15}$ (Riemann Zeta function)

$$U = \frac{9NK_BT^4}{\theta_D^3}\frac{\pi^4}{15}$$

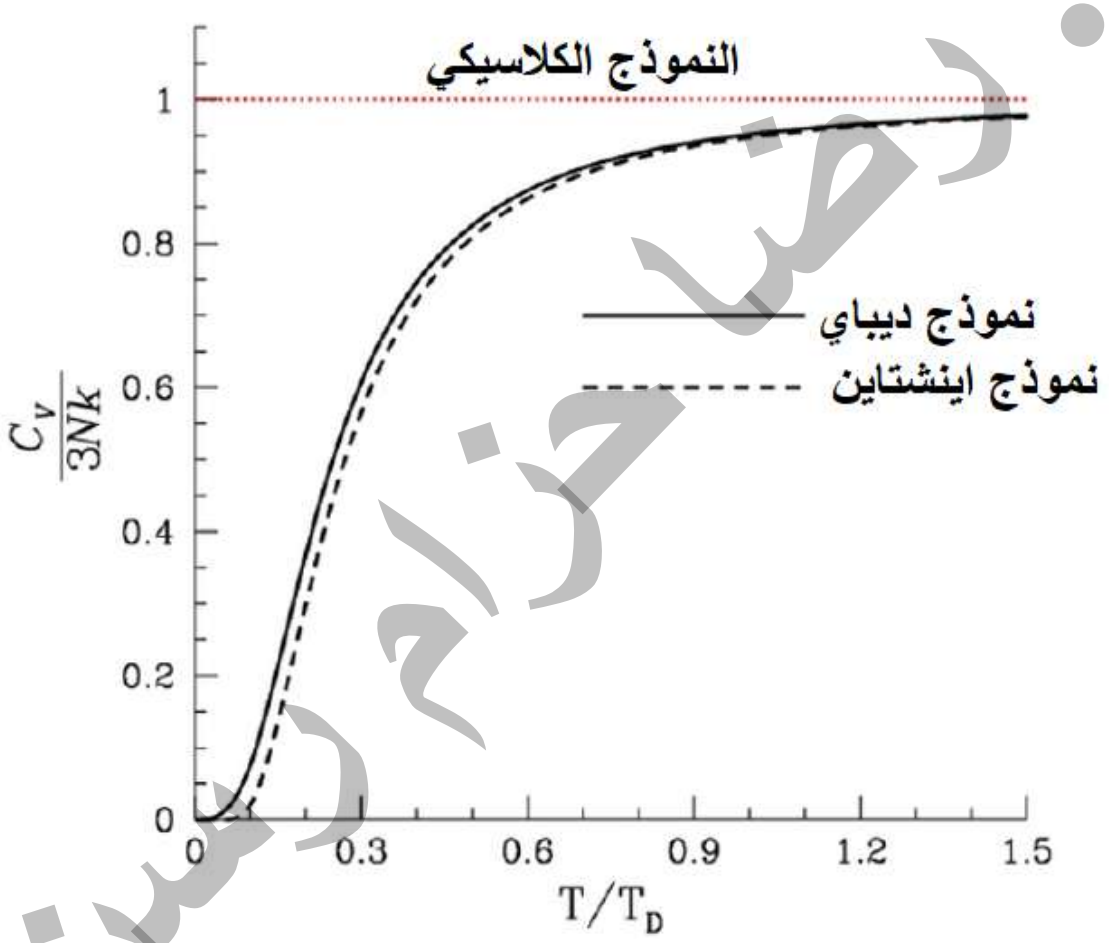
$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = \frac{12NK_BT^3}{\theta_D^3}\frac{\pi^4}{5} = \frac{12\,RT^3\pi^4}{5\,\theta_D^3}$$

$C_V = \frac{12}{5}\pi^4 R\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 = 1944\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \frac{J}{mol.K}$ قانون ديباي

ان نموذج ديباي يتفق بصورة جيدة مع النتائج التجريبية في درجات الحرارة الواطئة $\left(T < \frac{\theta_D}{12}\right)$ وكذلك في درجات الحرارة العالية $(T > \theta_D)$. ولكنه لا يتفق بصورة جيدة مع النتائج التجريبية في درجات الحرارة المتوسطة (درجات الحرارة المعتدلة).

ان من أخطاء نظرية ديباي انه افترض وجود نوع واحد من اختزان الطاقة داخل المادة وعلى شكل طاقة حركة تذبذبية للذرات المكونة لها. ولكن تحدث حالات شاذة وانحراف عن صحة النظرية عند ادخال الطرق الأخرى الممكنة التي تختزن بواسطتها الطاقة مثلاً:

1- يمكن ان يكون لجزيئات المادة درجة حرية دورانية
2- يمكن ان تختزن في حركة الالكترونات.
3- تتغير الطاقة عند حدوث تحول داخل المادة أي تحول الطور في المادة.



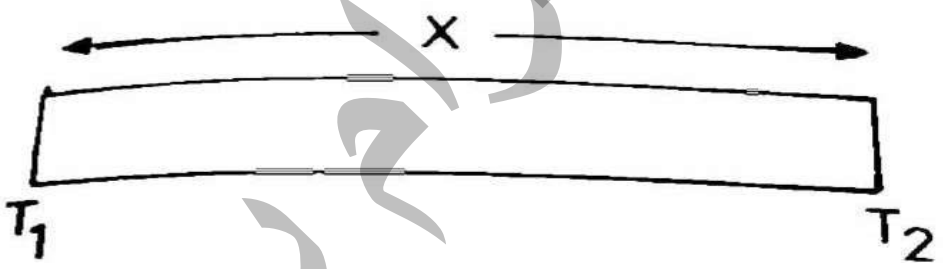
د. رضا حزام رسن

التوصيل الحراري Thermal Conductivity:

إن التوصيل الحراري في المواد الصلبة هي ظاهرة انتقال الفوتونات والالكترونات الحرة اللذين يمتلكا معدل طاقة أعلى في منطقة معينة إلى منطقة اخرى ذات طاقة أوطأ.

- **في المواد الصلبة الفلزية الخالية نسبياً من العيوب تنتقل الحرارة بواسطة كل من الفونونات والالكترونات الحرة. في المواد شبه الموصلة والمواد الفلزية تعد الالكترونات المساهم الأكبر في عملية التوصيل الحراري.**
- **في المواد شبه الموصلة التي تحتوي في بنيتها على عيوب وعلى نسبة عالية من الشوائب فأنه يتم بواسطة الفونونات والالكترونات. وتقوم الفونونات بالدور الأساس في عملية التوصيل الحراري في هذه المواد.**
- **في المواد الصلبة العازلة فيتم التوصيل الحراري بواسطة الفونونات حيث تعد الناقل الوحيد للطاقة الحرارية.**
- **عند درجات الحرارة العالية تلعب الفوتونات الدور الرئيسي في عملية التوصيل الحراري لجميع انواع المواد الصلبة.**

لذلك سوف نركز في هذا البند على عملية التوصيل الحراري بواسطة الفونونات فقط. لغرض حساب قيمة التيار الفونوني (ω) ،افترض قضيباً بلورياً طوله X وقيمة درجة حرارة نهايته تساوي T1 و T2 حيث تكون T2>T1وكما هو مبين في الشكل



رسم توضيحي للتوصيل الحراري

وكما هو معلوم ان الحرارة سوف تسري بأتجاه الانحدار الحراري ، أي من النهاية ذات الدرجة الحرارة العالية إلى النهاية ذات الدرجة الحرارة الواطئة ، وأن قيمة التيار الفونوني المار في أية نقطة من نقاط القضيب البلوري وفي أية لحظة تكون كمية ثابتة ، فعلية

$$\frac{dQ}{dt} = -K_l \frac{dT}{dX} \qquad \frac{dQ}{dt} \alpha \frac{dT}{dX}$$

حيث ان K_l تمثل معامل التوصيل الحراري. إن الاشارة السالبة تعني أن اتجاه تدفق التيار الحراري يكون بأتجاه معاكس لاتجاه تدرج درجة الحرارة.

إن الطاقة الحرارية تنتشر خلال البلورة بمسارات مختلفة حيث تتغير تلك المسارات من موقع إلى آخر وعليه يمكن القول أن انتقال الحرارة داخل البلورة بطريقة عشوائية. ولهذا السبب تعتمد الطاقة المتنقلة على **الانحدار الحراري** أي **على الفرق بين درجات حرارة نهايتي البلورة وطولها** وليس فقط على الفرق بين درجات حرارة نهايتي البلورة.

فعند مناقشة عملية التوصيل الحراري بواسطة الفونونات فمن الملائم أن نتصور أن الفونونات عبارة عن جزيئات غاز وأن عملية التوصيل الحراري تم في **غاز فونوني phonon gas**.

عند تطبيق المفاهيم الفيزياوية المعروفة للنظرية الحركية للغازات على الغاز الفونوني فسوف نحصل على نفس خاصية التوصيل الحراري للغازات وهي :

$$K_l = \frac{1}{3} C_v V_\circ \lambda$$

حيث أن C_v الحرارة النوعية لكل وحدة حجم للفونونات عند حجم ثابت.

$V_\circ$ سرعة الفونونات (سرعة الصوت).

λ متوسط معدل المسار الحر للفونون.

يعرف **معدل المسار الحر للفونون** على أنه معدل المسافة التي يقطعها الفونون بين تصادمين متعاقبين. وعليه فان قيمة λ أذن تحدد من قبل عمليات التصادم الفونونية التي يمكن أن تحدث داخل المادة الصلبة.

وإن من أهم عمليات التصادم هي:

1_ تصادم فونون مع فونون آخر

2_ تصادم فونون مع العيوب البلورية

3_ تصادم الفونون مع الحدود الخارجية للبلورة.

ان لكل عملية من العمليات الثلاثة معدل مسار حر خاص بها. أما معدل المسارات الحرة الكلية (λ) للبلورة فتكون :

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{\lambda 1} + \frac{1}{\lambda 2} + \frac{1}{\lambda 3} + \ldots \ldots \ldots \qquad \ldots (7.82)$$

حيث أن $\lambda 1$ معدل المسار الحر في العملية الاول

$\lambda 2$ معدل المسار الحر في العملية الثانية

$\lambda 3$ معدل المسار الحر في العملية الثالثة

د. رضا حزام رسن

أسئلة ومسائل من كتاب د. يحيى الجمال & كتاب د. مؤيد جبرائيل

س1) أي من العبارات التالية صحيحة؟

- في المواد الصلبة الفلزية الخالية نسبياً من العيوب تنتقل الحرارة بواسطة كل من الفونونات والالكترونات الحرة. في المواد شبه الموصلة والمواد الفلزية تعد الالكترونات المساهم الأكبر في عملية التوصيل الحراري.
- في المواد شبه الموصلة التي تحتوي في بنيتها على عيوب وعلى نسبة عالية من الشوائب فأنه يتم بواسطة الفونونات والالكترونات. وتقوم الفونونات بالدور الأساس في عملية التوصيل الحراري في هذه المواد.
- في المواد الصلبة العازلة فيتم التوصيل الحراري بواسطة الفونونات حيث تعد الناقل الوحيد للطاقة الحرارية.
- عند درجات الحرارة العالية تلعب الفوتونات الدور الرئيسي في عملية التوصيل الحراري لجميع انواع المواد الصلبة.
- جميع العبارات السابقة صحيحة. ✔

س2) أي من العبارات التالية خاطئة؟

- يُعد تصادم فونون مع فونون آخر احد عمليات التصادم الفونونية التي يمكن أن تحدث داخل المادة الصلبة.
- يُعد تصادم تصادم فونون مع العيوب البلورية احد عمليات التصادم الفونونية التي يمكن أن تحدث داخل المادة الصلبة.
- يُعد تصادم تصادم الفونون مع الحدود الخارجية للبلورة احد عمليات التصادم الفونونية التي يمكن أن تحدث داخل المادة الصلبة.
- يُعد تصادم تصادم الفونون مع انوية الايونات الموجبة والسالبة احد عمليات التصادم الفونونية التي يمكن أن تحدث داخل المادة الصلبة. ✔

د. رضا حزام رسن

س3) (الجمال س1 & جبرائيل س2) اذا كانت قيمة C_v التجريبية عند درجة حرارة 207 K لبلورة ماس تساوي 2.68 J/ mol. K.
(1) احسب قيمة C_v باستعمال نظرية اينشتاين.
(2) احسب قيمة C_v باستعمال نظرية ديباي.
(3) قارن النتائج مع القيمة التجريبية اذا علمت ان درجة حرارة اينشـــتاين المميزة هي 1320 K ودرجة حرارة ديباي المميزة هي 1860 K.

$$C_V \text{ (التجريبية)} = 2.68 \frac{\text{J}}{\text{mol}}.\text{K} \quad \text{عند} \quad T = 207\ K$$

$\mathrm{T_E} = 1320\ K \qquad \theta_D = 1860\ K$

1) باستعمال نظرية اينشتاين

عند درجات الحرارة الواطئة، أي عند T اقل بكثير من درجة حرارة اينشـــتاين $(\mathrm{T_E}$ او $\theta_E)$ ســـتكون $(T \ll \mathrm{T_E})$ قيمة C_v باستعمال نظرية اينشتاين

$$\boldsymbol{C_V = 3R\left(\frac{T_E}{T}\right)^2 e^{-T_E/T}}$$

$T = 207\ K \qquad \mathrm{T_E} = 1320\ K \qquad \therefore (T \ll \mathrm{T_E})$

$$\boldsymbol{C_V = 3R\left(\frac{T_E}{T}\right)^2 e^{-T_E/T}}$$

$R = 8.3142\ J/mol.^oK$

$$\boldsymbol{C_V = 3(8.3142\ J/mol.K)\left(\frac{1320\ K}{207\ K}\right)^2 e^{-\left(\frac{1320\ K}{207\ K}\right)}}$$

$$\boldsymbol{C_V = 1.7247 = 1.725 = 1.73\ J/mol.K}$$

2) باستعمال نظرية ديباي

عند درجات الحرارة الواطئة، أي عند T اقل بكثير من درجة حرارة ديباي (θ_D) ســـتكون $(T \ll \theta_D)$ قيمة C_v باستعمال نظرية ديباي

$$\mathrm{C_V} = 1944\left(\frac{\mathrm{T}}{\theta_\mathrm{D}}\right)^3 \frac{J}{mol.K}$$

$T = 207\ K \qquad \theta_D = 1860\ K \qquad \therefore \mathrm{T} \ll \theta_D$

$$\mathrm{C_V} = 1944\left(\frac{207\ \mathrm{K}}{1860\ \mathrm{K}}\right)^3 \frac{J}{mol.K}$$

$$\mathrm{C_V} = 1944\left(\frac{\mathrm{T}}{\theta_\mathrm{D}}\right)^3 \frac{J}{mol.K} = 2.67959 = 2.68\ \frac{J}{mol.K}$$

س4) احسب قيمة Cv باستخدام معادلة اينشتاين عند درجة حرارة $-50\ ^{\circ}C$ إذا كانت درجة حرارة اينشتاين المميزة هي 1340 K .

باستعمال نظرية اينشتاين

عند درجات الحرارة الواطئة، أي عند T اقل بكثير من درجة حرارة اينشتاين (T_E او θ_E) ستكون ($T \ll T_E$) قيمة C_V باستعمال نظرية اينشتاين

$$C_V = 3R\left(\frac{T_E}{T}\right)^2 e^{-T_E/T}$$

$T = -50\ ^{o}C = -50 + 273 = 223\ K \qquad T_E = 1340\ K \qquad \therefore\ (T \ll T_E)$

$$C_V = 3R\left(\frac{T_E}{T}\right)^2 e^{-T_E/T}$$

$R = 8.3142\ J/mol.^{o}K$

$$C_V = 3(8.3142)\left(\frac{1340}{223}\right)^2 e^{-1340/223} = 2.21248 = 2.21\ J/mol.oK$$

س 5/ احسب درجة حرارة ديباي لبلورة الجرمانيوم عند درجة حرارة 200 K إذا كانت السعة الحرارية له 317.2 J/mol.K.

باستعمال نظرية ديباي

عند درجات الحرارة الواطئة، أي عند T اقل بكثير من درجة حرارة ديباي (θ_D) ستكون ($T \ll \theta_D$) قيمة C_V باستعمال نظرية ديباي

$$C_V = 1944\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \frac{J}{mol.K}$$

$T = 200\ K \qquad \theta_D = ? \qquad \therefore\ T \ll \theta_D \qquad C_V = 317.2\ \frac{J}{mol.K}$

$$C_V = 1944\left(\frac{207\ K}{1860\ K}\right)^3 \frac{J}{mol.K}$$

$$317.2\ \frac{J}{mol.K} = 1944\left(\frac{200}{\theta_D}\right)^3 \frac{J}{mol.K}$$

$$317.2 = 1944\left(\frac{200}{\theta_D}\right)^3 \qquad \sqrt[3]{317.2} = \sqrt[3]{1944}\left(\frac{200}{\theta_D}\right)$$

$$\theta_D = \sqrt[3]{1944}\left(\frac{200}{\sqrt[3]{317.2}}\right) = 366.0027\ K$$

س 6 / احسب درجة حرارة ديباي لبلورة النحاس عند درجة حرارة 180 K إذا كانت السعة الحرارية له 243 J/mol.K .

$$C_V = 1944\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \quad \frac{J}{mol.K}$$

$$243 = 1944\left(\frac{180}{\theta_D}\right)^3 \qquad \sqrt[3]{243} = \sqrt[3]{1944}\left(\frac{180}{\theta_D}\right)$$

$$\theta_D = \sqrt[3]{1944}\left(\frac{180}{\sqrt[3]{243}}\right) = 359.999\ K$$

س7) احسب تردد ديباي عند درجة حرارة 300K

$\theta_D = \frac{\hbar\,\omega_D}{k_B}$ حفظ

$$\omega_D = \frac{\theta_D k_B}{\hbar}$$

$$\omega_D = \frac{300 * 1.38 * 10^{-23}}{1.05 * 10^{-34}} = (3.94 * 10^{13})\ \left(\frac{rad}{sec}\right)$$

س8) اذا كانت الحرارة النوعية التجريبية لمعدن الالمنيوم تســـاوي 0.28 J/mol.K عند درجة حرارة 19.2 k . احسب درجة حرارة ديباي المميزة للالمنيوم ؟

الحل

قيمة C_v باستعمال نظرية ديباي

$$C_V = 1944\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \quad \frac{J}{mol.K}$$

$T = 19.2\ K$ $\theta_D = ?\ K$ C_V **=0.28 J/mol.K**

$$0.28 = 1944\left(\frac{19.2\ K}{\theta_D}\right)^3$$

$$\sqrt[3]{0.28} = \sqrt[3]{1944}\left(\frac{19.2}{\theta_D}\right)$$

$$\theta_D = \sqrt[3]{1944}\left(\frac{19.2}{\sqrt[3]{0.28}}\right) = 366\ K$$

س9) اذا كانت سرعة الصوت V_O تساوي $5*10^3\ m/s$ وان عدد الذرات لوحدة حجم $\left(\frac{N}{V}\right)$ يساوي (10^{29}) ذرة لكل متر مكعب. احسب

(1) تردد ديباي ω_D (اقصى قيمة للتردد الزاوي) (تردد القطع)

(2) متجه موجة ديباي k_D (متجه الانقطاع)

(3) درجة حرارة ديباي المميزة θ_D

الحل:

1) $\boldsymbol{\omega_D = V_o \left(\frac{6\pi^2 N}{V}\right)^{\frac{1}{3}}}$ حفظ

$$\omega_D = V_o (6\pi^2)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{1}{3}}$$

$$\omega_D = (5 * 10^3)(6\pi^2)^{\frac{1}{3}}(10^{29})^{\frac{1}{3}} \cong 91 * 10^{12} \left(\frac{1}{s}\right)$$

2) $\boldsymbol{k_D = \frac{\omega_D}{V_o}}$ حفظ

$$k_D = \frac{91 * 10^{12}}{5 * 10^3} = 18 * 10^9 \left(\frac{1}{m}\right)$$

3) $\boldsymbol{\theta_D = \frac{\hbar\, \omega_D}{k_B}}$ حفظ

$$\theta_D = \frac{(1.05 * 10^{-34})(J.S)\ (91 * 10^{12})\ \left(\frac{1}{s}\right)}{(1.38 * 10^{-23})\left(\frac{J}{K}\right)} = 692.4\ K$$

د. رضا حزام رسن

الفصل الخامس: الإلكترونات الحرة

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

مقدمة:

أن عناصـــر المواد الصـــلبة تحتوي إما على أيونات موجبة او ســـالبة أو على الكترونات. فإذا أثر مجال كهربائي أو مغناطيسي على هذه الاجسام المشحونة، فأن حركتهم سوف تتأثر حيث تفقد الصفة العشوائية في الحركة وتصبح ذات حركة اتجاهية.

أهم العوامل التي تؤثر على حركة حاملات الشحنة في المواد الصلبة هي:

1- طاقة الكترونات التكافؤ الموجودة في الغلاف الخارجي الالكترونات للذرة.
2- حركة برم الالكترونات في الذرة.
3- الهسترة التي تصحب المجال الكهربائي والمغناطيسي *Hysteresis*
4- البنية البلورية للمادة الصلبة

التوصيل الكهربائي للمواد الصلبة:

يعرف التوصـيل الكهربائي في المواد الصـلبة على أنه قابلية انتقال الشـحنة الكهربائية من موقع إلى موقع آخر وتعتمد هذه على الأيونات والتي تتوقف قابلية حركتهم على نوع المادة الصـــلبة المكونة لهم والالكترونات وكذلك الفراغات الالكترونية *Electronic Vacancy* .

- ✓ تتكون الفراغات الإلكترونية في البنية البلورية ذات الأواصر التساهمية في حالة فقدان أحد الالكترونات من المزدوج الالكتروني للآصرة.
- ✓ كما يتكون الفراغ الالكتروني في المواد ذات الأواصـر الأيونية عند كسـر الاصـرة الأيونية فيتكون في هذه الحالة الكترون حر *Free electron* وفجوة *Hole* وتعتبر الفجوة شـــحنة موجبة على الرغم انها في الحقيقة نقص في الشحنة السالبة ضمن البنية البلورية.
- ✓ في التوصيل الايوني تكون حاملات الشحنة *charge carries* إما أيونات سالبة أو أيونات موجبة.
- ✓ أما في التوصيل الالكتروني للمعادن تكون حاملات الشحنة هي الإلكترونات.

ويرمز لمعامل التوصـيل الكهربائي σ وهو حاصـل ضـرب عدد حاملات الشـحنات (n) ومقدار الشحنة q والتي تحملها حامل الشحنة والقابلية الحركية لحاملات الشحنة (μ) *mobility*، أي أن:

$$\sigma = nq\mu$$

تصنيف المواد الصلبة بالاعتماد على معاملات توصيلها الكهربائي:

1- الموصـــلات (مواد جيدة التوصـــيل الكهربائي) وهي المواد الفلزية (المعدنية) مثل النحاس الذي يكون معامل توصيله الكهربائي بحدود $(10^7\ ohm^{-1}m^{-1})$.
2- اشباه الموصلات مثل السليكون والجرمانيوم وكبريتيد الرصاص الذي معامل توصيله بحـــــدود $(10^2\ ohm^{-1}m^{-1})$.
3- مواد رديئة التوصيل الكهربائي أو عازلة كهربائية مثل الابونيت ومعامل توصـيله بحـــــــدود $(10^{-8}\ ohm^{-1}m^{-1})$.

التوصيل الالكتروني في الفلزات:

يمتاز المعدن من وجهة النظر الفيزيائية بامتلاكه سطح فيرمي. ومن الخواص الشائعة للفلزات

- توصيلها الكهربائي والحراري الجيد.
- تتميز بالمتانة *Strength* له متانة عالية عادةً (ذرات الجوار الأول كثيرة وبذلك تتكون اواصر وفرتها تجعل متانة المعدن عالية).
- لمعان و مطاوع للطرق والسحب و كثافة عالية
- تمتاز بالعاكسية الضوئية *Optical reflectivity* المسؤولة عن تمييز الفلزات بمظهرها البراق.
- ومن بين هذه الصفات نقطة الانصهار والكثافة والصلابة والصلادة وقابلية الطرق.

تتبلور المعادن الصلبة عادة بثلاث تراكيب هي

- تركيب *bcc* مثل معدن اليثيوم *Li*
- وتركيب *fcc* مثل معدن النحاس *Cu*
- وتركيب *hcp* مثل معدن الزنك *Zn*

تعتمد الصفات الفيزيائية للفلزات (المعادن) على:

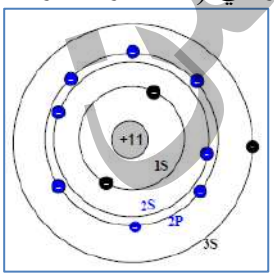
- البنية الذرية
- والمتغيرات الذرية *Atomic Parameters* لذرات الفلزات واهمها عدد الكترونات التكافؤ *Valance electrons* لكل ذرة.

ومن البديهي ان تشذ اعداد قليلة من المعادن عن الأكثرية الساحقة حيث نجد معادن الكاليوم *Ga* ومعدن الزئبق *Hg* يمتلكان نقطة انصهار واطئة. ان كلا من هذين المعدنين يمتلك تركيباً بلورياً غير اعتيادي ويعتقد ان الكترونات التكافؤ لا تسهم كلها في عملية الترابط في هذين المعدنين عندما يكونان في حالة الصلابة. علماً ان الزئبق يتجمد عند (-36.9 درجه مئوية). بينما الكاليوم ينصهر عند درجة أعلى من درجة حرارة الغرفة قليلاً (درجة انصهاره 29.6 درجة مئوية). والصورة التالية توضح ذوبان معدن الغاليوم بدرجة حرارة جسم الإنسان.

الكترونات التكافؤ وهي الالكترونات التي تشغل الغلاف الخارجي للذرة الحرة التي تستعمل لربط الذرات بعضها ببعض لتنشأ بلورة. أما عدد الكترونات التكافؤ فيختلف من عنصر إلى آخر ولكن يكون دائما أقل من العدد اللازم لإشباع او ملء الغلاف الخارجي لذرة حرة.

منشأ إلكترونات التوصيل:

ابسط أنواع المعادن هو الصوديوم *Na* ذو تركيب *bcc* وسنفرض بانه لدينا غاز صوديوم عبارة عن مجموعة من ذرات حرة متعادلة الشحنات كل ذرة تملك *(11)* الكترون *($Na: 1s^2\ 2s^2 2p^6 3s$)* وتتوزع مدارياً حول النواة ونلاحظ ان الالكترون الأخير *3s* وحده في المدار الخارجي (القشرة الذرية الثالثة) والذي يكون مقيداً بصورة غير محكمة (او غير مستقرة) بينما بقية الالكترونات العشرة *$1s^2\ 2s^2 2p^6$* والتي تمثل **الكترونات اللب او الكترونات القلب للذرة** تحتل القشرة الذرية الأولى والثانية والتي يحتوي عليها التركيب المستقر.



الان عند تقريب ذرات الصوديوم الحرة بعضها من بعض لتشكيل معدن الصوديوم. في حالة الصلابة تتراكب كل ذرتين متجاورتين او تتشابك قليلاً وهذا يعني ان الكترون التكافؤ لذرة ما *3s* لم يعد مقيداً لأيون خاص بمفرده بل يكون منتمياً في الوقت نفسه الى كلا الايونين المتجاورين *Na^+* . ويمكن تعميم هذه الفكرة لتشمل كل الذرات التي تؤلف بلورة صوديوم كاملة. اذ باستطاعة هذه الالكترون والالكترونات المشابهة له الحركة من ايون الى ايون اخر مجاور له ثم الى ايون اخر مجاور للأيون الأخير وهكذا. ان هذا الالكترون المتنقل الذي يدعى الكترون تكافؤ يصبح نفسه ما نسميه الكترون توصيل في المعدن.

الكترونات التوصيل: جميع الكترونات التكافؤ لذرات المعدن المتشابكة تصبح الكترونات توصيل في البلورة الحاصلة من تلك الذرات. وهذه الالكترونات تستطيع حمل تيار كهربائي تحت تأثير مجال خارجي. أي ان التوصيل يكون ممكناً عند توافر اعداد كبيرة من الالكترونات غير المقيدة وغير المحصورة في مكان او موضع معين وغير المرتبطة بذرة خاصة بل تنتشر في كل البلورة المعدنية ولهذا سميت هذه الالكترونات بإلكترونات التوصيل.

أي انه يطلق على الكترونات التكافؤ لذرة حرة **بإلكترونات التوصيل** في الفلزات البسيطة مثل الصوديوم والليثيوم والفلزات الثمينة مثل الذهب والفضة والنحاس.

ان عدد الكترونات التوصيل في فلز لوحدة الحجوم يساوي عدد الكترونات التكافؤ لذرة الفلز الحرة مضروبة في عدد الذرات لوحدة الحجوم، ويعبر عن ذلك رياضياً بـ

$$n = Z\left(\frac{\rho}{M}\right)N_A$$ **(اعداد الكترونات التوصيل او التركيز الالكتروني)**

حيث ان: Z التكافؤ الذري، ρ كثافة الفلز، M الوزن الذري للفلز، N_A عدد أفوكادو.

مع الاخذ بنظر الاعتبار فيما اذا كانت الذرة أحادية التكافؤ او ثنائية التكافؤ حيث:

- **في الذرات الأحادية التكافؤ** مثل البوتاسيوم k ، النحاس C_u ، الذهب A_u : يكون عدد الكترونات التوصيل مساوياً لعدد الذرات الأحادية التكافؤ.
- **في الذرات ثنائية التكافؤ** مثل الزنك Z_n ومغنيسيوم Mg و الكادميوم Cd: يكون عدد الكترونات التوصيل مساوياً لضعف عدد الذرات المشاركة في تكوين المعدن (أي ضعف عدد الذرات).

غاز الالكترون الحر: يطلق على الكترونات التوصيل مصطلح **الغاز الالكتروني الحر *free electron gas*** وذلك بسبب اعتبار حركة الكترونات التوصيل بكل حرية داخل البلورة وهذا يشبه حركة ذرات الغاز المثالي في حيز مغلق.

يختلف الغاز الالكتروني الحر في الفلز عن الغازات الاعتيادية ببعض الصفات المهمة:

1- يكون الغاز الالكتروني الحر ذا شحنة سالبة بينما تكون جزيئات الغاز الاعتيادية متعادلة الشحنة في الغالب ولذلك يمكن اعتبار الغاز الالكتروني الحر في فلز مثل بلازما *Plasma* مادة عالية التأين، فيها اعداد متساوية من النويات الذرية المؤينة والالكترونات الحرة.

2- - يكون تركيز الالكترونات في المعادن **كبيراً جدا** حوالي $10^{28} \times 2$ لكل متر مكعب، حيث يعتمد تركيز الالكترونات (اي كثافة الغاز الالكتروني الحر) على مواقع الذرات الفلزية في الجدول الدوري بينما يكون تركيز الغاز الاعتيادي حوالي 10^{25} جزيئة لكل متر مكعب.

نظريات الغاز الالكتروني الحر (نظريات الإلكترونات الحرة):

أن خاصية التوصيل الكهربائي والحراري للمواد الفلزية تعتمد على الكترونات التكافؤ او الغاز الالكتروني الحر. وقد وضعت نظريات مختلفة لتفسير تصرف الغاز الالكتروني الحر في المواد الفلزية (المعدنية). ولقد تطورت هذه النظريات ومرت بثلاثة مراحل:

1- **النظرية الكلاسيكية للغاز الالكتروني الحر:** وضعت من قبل العالمين درود *Drude* ولورنتز *Lorentz* وقد افترضا فيها أن الفلزات تحتوي الكترونات حرة تخضع في حركتها لقوانين الميكانيك الكلاسيكي.

2- **النظرية الكمية للغاز الالكتروني الحر:** وضعها العالم سمرفيلد *Sommerfeld* عام 1928 حيث فرض بان الالكترونات الحرة في الفلزات تخضع لقوانين ميكانيك الكم.

3- **نظرية الحزم:** وقد درست من قبل العالم بلوخ *Bloch* عام 1928 وكرونك وبني - *Kronig Penney* حيث اعتبروا حركة الالكترونات في مجال جهد دوري *Periodic Potential field* ناشئ عن الشبيكة. وسنشرحها في الفصل القادم.

الصفات الأساسية للمعادن: في درجة حرارة الغرفة يمتاز المعدن

1) يخضع لقانون اوم $(J = \sigma \vec{E})$ عند ثبوت درجة الحرارة.
2) موصل جيد للكهربائية $\sigma = 10^6 - 10^8\ (\Omega\ .\ m)^{-1}$
شبه الموصل $\sigma = 10^{-4} - 10^5 (\Omega\ .\ m)^{-1}$
المادة العازلة $\sigma = 10^{-16}\ (\Omega\ .\ m)^{-1}$
3) جيد التوصيل للحرارة: وذلك لإمتلاكه توصيلية حرارية الكترونية عالية (K_{el})
4) النسبة بين التوصيلية الحرارية الالكترونية الى التوصيلية الكهربائية يدعى عدد لورنس (يعرف بقانون وايدمان – فراتر)

$$L = \frac{K_{el}}{\sigma T} = 2.45 \times 10^{-8}\ watt - ohm/deg^2$$

5) عند درجات الحرارة الواطئة تبلغ قيمة التوصيلية الكهربائية قيمة الهضبة حيث يكون لتأثير الشوائب وعيوب الشبيكة دورها الأساسي في التحكم وضبط تلك القيمة. علماً ان المقاومية الكهربائية (المقاومة الكهربائية النوعية) هي مقلوب التوصيلية الكهربائية $\left[\rho\ (\Omega.m) = \frac{1}{\sigma}\ (\Omega.m)^{-1}\right]$. وحيث ان اسهام شوائب المعدن وعيوب الشبيكة في المقاومية الكهربائية هو كمية ثلبتة عند جميع درجات الحرارة بموجب قاعدة ماثيزين *Mathiessen* التي تنص على ان المقاومية الكهربائية العائدة الى الشوائب لا تعتمد على درجة الحرارة عندما يكون تركيز الشوائب صغيراً.

$$\rho = \rho_o + \rho(T)$$

حيث ρ_o تمثل اسهام الشوائب في المقاومية الكهربائية وهي كمية ثابتة لا تتغير بتغير درجة الحرارة. اما $\rho(T)$ فتمثل المقاومية الكهربائية لمعدن نقي خال من الشوائب وهو يعتمد على درجة الحرارة ويعودد الى المقاومية الناجمة عن حركة الشبيكة وقيمته تتناقص للصفر عند $0K$ وبهذا تقترب التوصيلية الكهربائية للمعدن النقي من اللانهاية عند $0K$.

6) تتناقص المقاومية الكهربائية (المقاومة الكهربائية النوعية) (ρ) تبعاً لزيادة الضغط لمعظم المعادن. علماً ان المقاومية الكهربائية (المقاومة الكهربائية النوعية) هي مقلوب التوصيلية الكهربائية $\rho\ (\Omega.m) = \frac{1}{\sigma}\ (\Omega.m)^{-1}$
7) تسهم التأثيرات في المقاومية الكهربائية في كل من السبائك والمعادن ذات المغناطيسية الحديدية أي الفيرومغناطيسية.
8) عند درجات حرارة واطئة جدا يصبح نصف عدد العناصر المعدنية تقريبا موصلات فائقة.
9) تكون الحرارة النوعية الالكترونية والقابلية البارامغناطيسية لغاز الكتروني حر صغير جداً. لكن الحرارة النوعية الالكترونية تتناسب مع درجة الحرارة بالكلفن بينما القابلية البارامغناطيسية تبقى ثابتة عن تغيير درجة الحرارة.

التوزيع الكلاسيكي للسرع (توزيع ماكسويل - بولتزمان):

إن احدى أهم تطبيقات قانون توزيع ماكسويل - بولتزمان هي ايجاد سرعة الجزيئية في الغاز. وبما أننا اعتبرنا أن الغاز الالكتروني الحر يشابهه الجزيئية في الغاز، فعليه نحاول الان ايجاد سرعة الغاز الالكتروني الحر. أن الجزيئات في الغاز المثالي تتفاوت قيم سرعاتها بين الصفر ومالا نهاية، ولكن لمعظمها سرعة متوسطة تعبر عن حالة الغاز. قد تتغير سرعة أي جزيئة نتيجة لتصادمها مع غيرها او مع جدران الوعاء ولكن يبقى ثابتة عدد الجزيئات التي لها سرع في المدى v و v + dv ويظل هذا العدد لا يتغير مع الزمن. ولأجل حساب عدد الجزيئات الواقعة ضمن المدى v و v + dv يجب علينا أن نعتبر الغاز في حالة اتزان حراري أي أن درجة حرارته ثابتة. وكذلك خضوع الجزيئات لقوانين الاحتمالية بسبب الحركة العشوائية للجزيئات. **حيث أن (S) تمثل الانطلاقspeed (مقدار السرعة)** أي سرعة الاتجاهية وهي القيمة العددية للسرعة V ولذلك يمكن كتابة:

$$s^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$$

وعلى هذا الأساس تكون احتمالية الانطلاق s بغض النظر عن اتجاه هذا الانطلاق في المدى من s الى s + ds . ان معدل الطاقة لكل الكترون في توزيع بولتزمان يساوي:

$$\frac{3}{2}K_B T = \frac{1}{2}m((S_{RMS})^2$$

حيث ان S_{RMS} تمثل جذر متوسط مربع مقدار السرعة (الانطلاق) أي ان

$$S_{RMS} = \left(\frac{3K_B T}{m}\right)^{1/2}$$

فعند الدرجات الحرارية الاعتيادية تكون قيمة جذر متوسط مربع السرع حوالي 10^5 متر لكل ثانية.

النظرية الكلاسيكية للإلكترونات الحرة:

قام العالم الالماني درود *Drude* بوضع النظرية الكلاسيكية للغاز الالكتروني الحر في سنة (1900) حيث قام بمسح شامل لخواص المادة البصرية، وفي عام 1905 طور العالم لورنتز *Lorentz* نظرية درود والتي تدعى في الغالب بنظرية درود - لورنتز *Drude - Lorentz*

نظرية درود:

تعد نظرية درود اول نظرية كلاسيكية بسيطة للغاز الالكتروني الحر في الفلزات.

فرضيات درود

- افترض درود البنية البلورية لأي فلز على انه رص من قلوب الايونات الموجبة يتخللها عدد كبير من الالكترونات الحرة الناتجة من مساهمة كل ذرة في الفلز بإلكترون او أكثر ويطلق على هذه الالكترونات بإلكترونات التكافؤ او الكترونات التوصيل والتي تمثل الغاز الالكتروني الحر.
- هذه الالكترونات هي التي تتأثر بالمجالات الكهربائية والمغناطيسية.
- افترض ان الالكترونات السالبة الشحنة تتصرف كجزيئات متعادلة لغاز مثالي.
- أهمل وجود المجال الدوري (بسبب دورية الشبيكة) الذي تتحرك فيه الالكترونات.
- افترض ان الكترونات التوصيل تُستطار *scattered* نتيجة تصادمها العشوائي بقلوب الايونات الموجبة أي أن معدل سرعتها بعد كل تصادم مباشرة يساوي صفراً.
- عند تسليط مجال كهربائي خارجي على فلز (معدن) تكتسب الالكترونات تعجيلاً اي تتغير قيمة او اتجاه سرعة انجراف الالكترونات *Drift velocity* او كل من القيمة والاتجاه.

ولكن هذا التغيير يباد ويُستأصل عند كل تصادم بين الالكترونات وقلوب الايونات الموجبة، اي ان الالكترون بسبب التصادم يفقد جمع طاقته التي اكتسبها بواسطة المجال الكهربائي المسلط وان سرعته بعد التصادم تكون عشوائية ليس لها علاقة باتجاه حركته قبل التصادم وكأن اصطدام الكترون بقلب أيون موجب يسبب للإلكترون بعد التصادم مباشرة فقدان تصرف حالته الحركية قبل التصادم. أن هذا يعني التغيير في سرعة الالكترون يظهر فقط خلال فترة بين تصادم وآخر ولذلك يزداد تأثير المجال الكهربائي المسلط على الكترونات التوصيل كلما ازدادت **الفترة الزمنية بين تصادمين متتالين** وتدعى هذه الفترة **بمتوسط الزمن الحر** او **متوسط زمن المسار الحر *mean free time* τ_m**

ويطلق كذلك على τ_m **بزمن الاسترخاء *relaxation time*** يعرف τ_m بانه معدل الزمن اللازم الذي يستغرقه الكترون لقطع المسافة بين تصادمين متعاقبين.

معدل سرعة الانجراف تعطى:

$$\Delta\bar{V} = \left(-\frac{e\bar{E}\tau_m}{m}\right)$$

اما اذا فرضنا ان الفلز يحتوي على عدد (n) من الالكترونات لكل متر مكعب، وان جميعها تتحرك بسرعة انجراف ثابتة $\Delta\bar{V}$ في مجال كهربائي $\bar{E}$، فعليه تكون كثافة التيار الكهربائي:

$$J = (-en\Delta\bar{V}) = \frac{ne^2\tau_m}{m}\bar{E} = \sigma\bar{E} \qquad \text{وحيث} \qquad J = \sigma\bar{E}$$

حيث ان:

$$\sigma = ne^2\tau_m/m$$

تمثل σ معامل التوصيل الكهربائي وهي كمية موجبة غير اتجاهية.

إن العلاقة التي تربط $\bar{E},\bar{J}$ هي علاقة خطية ومنها يمكن تقدير قيمة معامل التوصيل الكهربائي وبدلالة المقادير المعروفة ىn وm وτ_m وe.

ويمكن التعبير عن قيمة معامل التوصيل الكهربائي σ باستخدام الحركية الانجرافية *Drift mobility* والتي تعرف على أنها السرعة الانجرافية المنتظمة. لكل وحدة مجال كهربائي أي أن:

$$\mu = \frac{\Delta\bar{V}}{\bar{E}} = \frac{e\tau_m}{m}$$

ويتعويض هذه المعادلة في المعادلة السابقة، نحصل على:

$$\sigma = ne\mu$$

ويمكن كتابة المعادلة $\sigma = ne^2\tau_m/m$ بدلالة متوسط المسار الحر ودرجة الحرارة .

متوسط المسار الحر الالكتروني λ على انه المسافة التي يتحركها أي الكترون توصيل بفاعلية **انطلاقه الحراري (S_{th})** خلال متوسط الزمن الحر τ_m

ويقصد **بالأنطلاق الحراري (S_{th})** انطلاق الكترون عند حركته من مركز استطارة إلى مركز استطارة أخرى. أي أن

$$S_{th} = \frac{\lambda}{\tau_m} = \left(\frac{3k_B T}{m}\right)^{\frac{1}{2}}$$

وبتعويض $\tau_m = \frac{\lambda}{S_{th}}$ من المعادلة الاخيرة في $\sigma = ne^2\tau_m/m$ وبعدها نعوض عن قيمة S_{th} من المعادلة الأخيرة فنحصل على:

$$\sigma = \frac{ne^2\tau_m}{m} = \frac{ne^2\lambda}{mS_{th}} = \frac{ne^2\lambda}{(3mk_BT)^{1/2}}$$

وهكذا يمكن التعبير عن معامل التوصيل الكهربائي بموجب نظرية درود بالصيغ الثلاثة الواردة في المعادلة الاخيرة. تبين المعادلة الاخيرة ان معامل التوصيل الكهربائي مع (σ) تتناسب طردياً مع $(T^{-\frac{1}{2}})$ وفوق مدى واسع من درجات الحرارة. ولقد وجد انه عند تبريد الفلز الى درجات حرارة واطئة أن معامل التوصيل الكهربائي يزداد بموجب الدالة (T^{-5}) قبل الوصول إلى مستوى مستقر $Plateau$

وبهذا **تفشل نظرية درود** في تفسير النتائج عند درجات الحرارة الواطئة وذلك لأن الكترونات التوصيل لا تتصرف تماما كجزيئات الغاز المثالي وأن الالكترونات لا ترتد عن اصطدامها بقلوب الأيونات الموجبة....

التوصيل الحراري للغاز الالكتروني الحر:

يعرف **التوصيل الحراري الالكتروني** على انه انتقال الطاقة الحرارية للإلكترونات الحرة في الفلزات ويرمز لها بالرمز K_{el} . إن التوصيل الحراري بواسطة الفونونات الموجودة في الفلزات يمكن اهمالها وذلك لوفرة الكترونات التوصيل بشكل كبير جدا وهي التي تسيطر على عملية التوصيل الحراري.

يمكن تطبيق فرضيات درود بشأن طبيعة حركة الكترونات التوصيل في فلز، المستخدمة في حساب معامل التوصيل الكهربائي وفي حساب معامل التوصيل الحراري للغاز الالكتروني الحر. وسوف نستخدم العلاقة التالية:

$$K_{el} = \frac{2}{3}\tau_m S^2 C_{el}$$

حيث ان C_{el} تمثل الحرارة النوعية الالكترونية الكلاسيكية لغاز الكتروني عند ثبوت الحجم. وتعطى بالعلاقة التالية:

$$C_{el} = \frac{3}{2}K_B n$$

فبتعويض المعادلة C_{el} والمعادلة S_{th} في معادلة K_{el} نحصل على:

$$K_{el} = \frac{2}{3}\tau_m S^2 C_{el}$$

$$K_{el} = \frac{2}{3}\tau_m (S^2)(C_{el}) = \frac{2}{3}\tau_m \left(\frac{3k_B T}{m}\right)\left(\frac{3}{2}K_B n\right)$$

$$K_{el} = nK_B\tau_m S^2 = \left(\frac{3n\tau_m K_B^2 T}{m}\right)$$

ان النسبة بين معامل التوصيل الحراري الالكتروني K_{el} ومعامل التوصيل الكهربائي σ لكل درجة حرارة يعرف **بعدد لورنز** *Lorenz number* ويعطى بهذه العلاقة:

$$\mathbf{L} = \frac{\text{معامل التوصيل الحراري}}{\text{معامل التوصيل الكهربائي}}$$

$$L = \frac{K_{el}/\sigma}{T} = 3\left(\frac{K_B}{e}\right)^2$$

$$= 2.2 \times 10^{-6}\left(\frac{Volt}{Kelvin}\right)^2$$

تبين المعادلة (6.33) ان عدد لورنز كمية ثابتة لا تعتمد على عدد الكترونات التوصيل ولا على كتلة. ولابد من الإشارة الى ان عدد لورنز المحسوب في المعادلة (6.33) هو بناءً على النظرية الكمية بينما وجدت قيمة عدد لورنز حسب النظرية الكلاسيكية بـ $1.1 \times 10^{-6}\, Volt/Kelvin$.

نظرية لورنتز للتوصيل الكهربائي:

لقد عمل العالم لورنتز عام 1905 على تطوير نظرية درود للغاز الإلكتروني الحر حيث دحض فرضيته التي تنص على أن الإلكترونات الحرة في الفلز لها انطلاق حراري واحد.

فرضيات لورنتز:

- **فرض** أن الغاز الالكتروني الحر في الفلز يكون في حالة اتزان حراري ويمتلك سرعة تخضع لدالة توزيع السرع f_0 (انظر المعادلة 6.8) عند غياب تأثير أي مجال كهربائي خارجي وكما هو مبين في الشكل *(6.5a)*.
- ومن اجل تبسيط معادلة بولتزمان سوف نفترض أن الفلز يكون متجانس البنية البلورية وعند ذلك تكون غير معتمدة على الاحداثيات المكانية.
- فعند تسليط مجال كهربائي على الفلز، سوف ينتج عن ذلك انجراف الالكترونات بشكل متماثل، وينشأ تبعاً لذلك نظام جديدة أو دالة جديدة لتوزيع السرع ويطلق عليها f وتختلف تماماً عن دالة توزيع السرع f_0 التي تكون في حالة الاتزان الحراري وفي حالة غياب المجال الكهربائي.
- لقد **فرض** لورنتز أن الازاحة الاجمالية للدالة f عن موقعها والناتجة عن تأثير المجال يكون صغيرة بالمقارنة بقيمة الجذر التربيعي المتوسط مربع الانطلاق S_{rms} وكما أن التشوية الذي يحدث عن التوزيع يكون صغيرة جداً.
- وقد **افترض** لورنتز أن استطارة الالكترونات تكون مرنة عند تصادمها مع صفوف القلوب الايونية الموجبة الساكنة نسبية، حيث يكون التغير في طاقة الكترون طفيفة جدة بسبب الفرق الشاسع بين كتلة الالكترون وكتلة القلب الأيوني الموجب.

ولا يعتمد متوسط المسار الحر λ على انطلاق الالكترون

$$\tau_r = \frac{\lambda}{S}$$

,نحصل على معامل التوصيل الكهربائي σ.

$$\sigma = \frac{4ne^2\lambda}{3(2\pi m K_B T)^{1/2}}$$

ان المعادلة تعطي معامل التوصيل الكهربائي للفلز بموجب نظرية لورنتز للغاز الالكتروني الحر وهي تشبه بصورة عامة صيغة معادلة درود لمعامل التوصيل الكهربائي.

ان الفرق بين العالمين هو $\left(\frac{3\pi}{8}\right)^{1/2}$ ويساوي (1.09) في حالة تشابه درود ولورنتز في تعريفهما لمتوسط المسار الحر λ .

إن معادلة النقل لبولتزمان المستخدمة بموجب نظرية لورنتر تؤدي الى صيغة التوصيل الحراري الالكتروني مشابهة الى صيغة درود ولكنها أصغر من تلك الصيغة المستنبطة بموجب نظرية درود بحوالي الثلث.

اخفاقات او فشل النماذج الكلاسيكية:

إن سبب فشل النظرية الكلاسيكية للغاز الالكتروني الحرفي اعطاء نتائج دقيقة لقيم الحرارة النوعية الالكترونية ومعامل التوصيل الكهربائي تعود إلى الفرضية الأساسية في النظرية بأن الكترونات التوصيل تشبه جزيئات الغاز المثالي وتتبع احصائية احصاء ماكسويل – بولتزمان حيث يمكن لأي عدد من الالكترونات أن يكون على نفس مستوى الطاقة. ان هذه الفرضية لا تسمح بها قاعدة باولي للاستبعاد التي تنص على أن كل مستوي من مستويات الطاقة يشغله الكترونين ذو برمين متعاكسين $\left(S = \mp\frac{1}{2}\right)$.

ولهذا السبب أصبح إحصاء ماكسويل – بولتزمان غير صالح للتطبيق على حالة الغاز الالكتروني الحر

ومن اهم الإخفاقات التي عانت منها النماذج الكلاسيكية هي الاتي:

اولاً: افتراض الطاقة الحركية للإلكترونات الحرة $(\frac{3}{2} n K_B T)$ وهذا يعني امتلاك المعدن او الفلز حرارة نوعية الكترونية عالية. بينما التجارب تشير الى ان أي معدن لا يظهر حرارة نوعية الكترونية كبيرة. ونفس الشيء يقال عن القابلية البارامغناطيسية العالية المتوقعة لحاملات شحنة حرة تماماً.

ثانياً: متوسط المسار الحر الالكتروني المستنتج عمليا من تأثير هول والتوصيلية الكهربائية كان كبير جداً مقارنة بالفسح بين ذرات المعدن.

ثالثاً: لم تستطع النظريات الكلاسيكية إعطاء تفسير للتصرف المعقد الذي تسلكه مقاومة المعدن تحت تاثير مجال مغناطيسي (المقاومة الكهربائية المغناطيسية).

رابعاً: لم تستطع النظريات الكلاسيكية إعطاء تفسير الإشارات الشاذة لمعامل هول R_H في بضعة معادن.

النظرية الكمية للغاز الالكتروني الحر :

هنالك نوعان من إحصاء الكم كل منهما يفترض ان الجسيمات تكون مماثلة بعضها لبعض ولا يمكن تميز بعضها عن بعض وهما:

اولاً: إحصاء فيرمي – ديراك ويهتم هذا الإحصاء بالجسيمات التي **تخضع لقاعدة باولي** في الاستثناء (قاعدة باولي للاستبعاد) (يسمح لجسيم واحد فقط ان يشغل حالة كمية معينة) وتدعى الجسيمات في هذا النوع من إحصاء الكم **بالفيرميونات** او جسيمات فيرمي ديراك **مثل الالكترونات** (جسيمات غير متميزة وطاقتها مكماة ويسمح لجسيم واحد فقط ان يشغل حالة كمية معينة)

ثانياً: إحصاء بوز – اينشتاين ويهتم هذا الإحصاء بالجسيمات التي **لا تخضع لقاعدة باولي** في الاستثناء (قاعدة باولي للاستبعاد) وتدعى الجسيمات في هذا النوع من إحصاء الكم **بالبوزونات** او جسيمات بوز- اينشتاين **مثل الفوتونات والفونونات** (جسيمات غير متميزة وطاقتها مكماة وليس هناك تحديد لعدد الجسيمات التي يمكن ان تشغل حالة كمية معينة)

النظرية الكمية لسمرفيلد (النظرية الكمية للغاز الالكتروني الحر)

اعتمدت التوزيع الكمي لفيرمي - ديراك

الإحصاء الكمي لفيرمي – ديراك *Fermi – Dirac quantum statistics* :

يطبق احصاء فيرمي - ديراك على الجسيمات التي لها دوال موجية غير متماثلة --*anti symmetric wave Function* مثل الالكترونات والبروتونات والتي تخضع لقاعدة باولي للاستبعاد (يسمح لجسيم واحد فقط ان يشغل حالة كمية معينة)

يمكن التعبير عن قانون التوزيع لفيرمي - ديراك لعدد (n_i) من الجسيمات المسموح بها في أي مستوى طاقة (E_i) بالصيغة الرياضية التالية:

$$n_i = g_i[1 + exp(\propto + \beta E_i]^{-1}$$

حيث ان g_i احتمالية الحالة *State probability*

و β كمية ثابتة وتساوي

$$\beta = \frac{1}{K_B T}$$

$\propto$ تمثل كمية ثابتة وتساوي

$$\propto = -\frac{E_f}{K_B T}$$

حيث ان E_f تمثل طاقة فيرمي $Fermi - energy$ فبتعويض $\propto$ & β في n_i نحصل على:

$$n_i = g_i \left\{1 + exp\left[\left(-\frac{E_f}{K_B T}\right) + \left(\frac{E_i}{K_B T}\right)\right]\right\}^{-1}$$

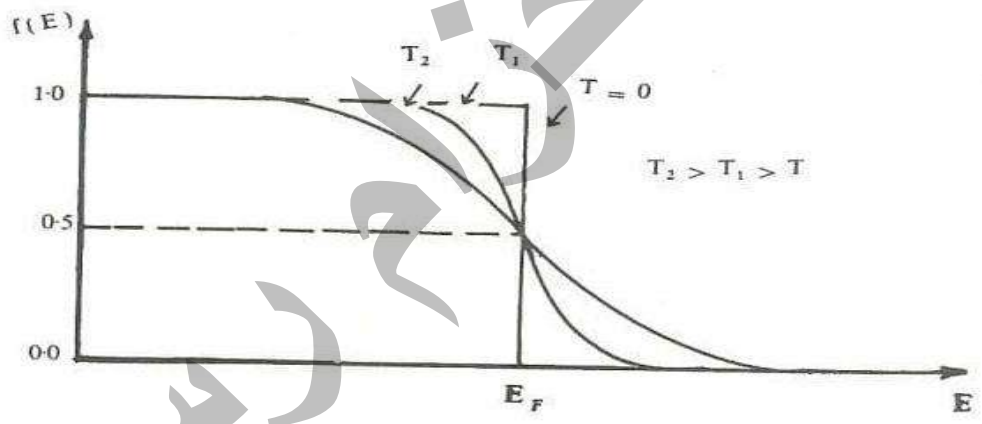
$$\therefore \frac{n_i}{g_i} = \left\{1 + exp\left[\frac{E_i - E_f}{K_B T}\right]\right\}^{-1}$$

يطلق على $\left(\frac{n_i}{g_i}\right)$ بـ **(دالة التوزيع لفيرمي – ديراك)** حيث تمثل احتمالية أي مستوى ذي طاقة E_i بأن يكون مشغولاً بالجسيمات (الالكترون) ويرمز لهذه الدالة بـــ $F(E)$. وعليه يمكن إعادة كتابة المعادلة الاخيرة بالصيغة التالية:

$$f(E) = \{1 + exp[(E - E_f)/K_B T]\}^{-1}$$

هذه المعادلة تمثل احتمال إشغال حالة ما ذات طاقة E بالجسيمات ذات الاتزان الحراري، أي عدد الجسيمات في تلك الحالة أو التوقع لاحتلال حالة كمية طاقتها E، ومن ناحية اخرى، نلاحظ في المعادلة الاخيرة عند درجة حرارة $(T = 0K)$، إن جميع حالات الطاقة لغاية $E = E_f$ تكون مشغولة تماماً اي ان $[n_i = g_i$ أو $F(E) = 1]$ بينما تكون جميع الحالات لطاقة $E_f > E$ فارغة$[f(E) = 0]$ ان سبب ذلك هو:

$$\lim_{T \to 0} e^{\frac{E - E_f}{k_B T}} = \begin{cases} 0 & f(E) = 1 & E_f > E \\ 1 & f(E) = 0.5 & E_f = E \\ \infty & f(E) = 0 & E_f < E \end{cases}$$



الشكل (8.6) احتمالية الاشغال F(E) ذات الطاقة E في درجات حرارة مختلفة .

تدل المعادلات السابقة على ان مستويات الطاقة التي تقع اسفل مستوى فيرمي E_F تكون ممتلئة تماما بينما تكون المستويات اعلى مستوي فيرمي فارغه تماما.

يوضح الشكل (6.6) اعتماد دالة التوزيع لفيرمي – ديراك $F(E)$ أي توزيع احتمالية الاشغال على الطاقة E في إحصاء فيرمي – ديراك لثلاثة قيم لـ $K_B T$.

$K_BT = 0$ $K_BT = 0.1\ eV$ $K_BT = 2.5\ eV$

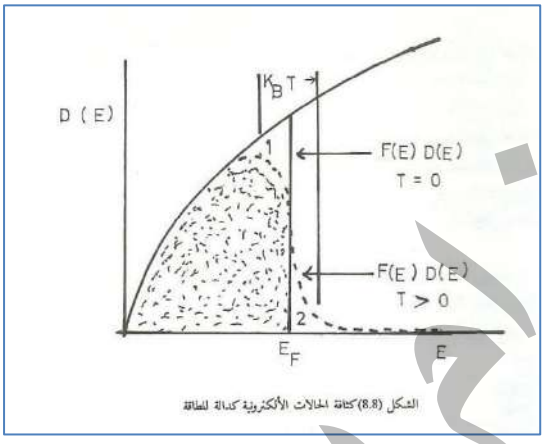
$T = 0$ $T = 1200\ K$ $T = 3 \times 10^4 K$

حيث ان الجسيمات عند درجة حرارة $o°K$ تشغل اوطأ مستويات الطاقة المتوفرة ثم تكبر حتى تصل الى الطاقة E_f وذلك تمثل الطاقة E_f مؤشراً لأقصى طاقة للجسميات في المنظومة ولذلك سميت بطاقة فيرمي.

ان الكرة التي نصف قطرها k_f والتي تكون فيها جميع مستويات الالكترون الواحد مملؤة تسمى **كرة فيرمي *(Fermi Sphere)*** ان سطح كرة فيرمي الذي يفصل بين المستويات المملؤة والمستويات الفارغة يسمى **سطح فيرمي *(Fermi Surface)***. كما ان سطح فيرمي ليس من الضروري ان يكون كروياً.

6.6.2 كثافة الحالات لغاز الكتروني حر في ثلاثة ابعاد

تعرف كثافة الحالات $D(E)$ لغاز الكتروني حر بأنها **عدد الحالات الكمية الالكترونية المتوفرة لكل وحدة مدى للطاقة وبعبارة أخرى تمثل $D(E)dE$ عدد الحالات الالكترونية المتاحة خلال مدى طاقة بين E و$E+dE$.**



الشكل (8.8) كثافة الحالات الألكترونية كدالة للطاقة

ولما كانت كل حالة تتسع للإلكترونين $\left(\mp\frac{1}{2}\right)$ فإن عدد المراتب $D(E)$ المتوفرة عند الطاقة E وضمن المادة لكل وحدة حجم من الفلز هي:

$$D(E) = \frac{6\sqrt{2}\,\pi m^{3/2}}{h^2}\sqrt{E}$$

وبهذا فإن $D(E)$ يتغير مع الطاقة (E) وفق الشكل التالي.

نظرية سومرفيلد للتوصيل الكهربائي:

يعد العالم سومرفيلد من الرواد الأوائل لدراسة الغاز الالكتروني مستخدمة مفاهيم الميكانيك الكمي في الفلزات. ولقد استفاد من نظرية لورنتز حيث استعمل في دراسته احصاء فيرمي - ديراك بدلا من احصاء ماكسويل - بولتزمان. وعلى الرغم من أن سومرفيلد لم يقدم أية إضافة في البحث عن التقنية الفعلية للتصادم بين الالكترونات والقلوب الايونية الموجبة

- افترض أن زمن الاسترخاء τ_r بين تصادمين متتاليين، يمكن اعتبارها دالة لطاقة الالكترونات فقط.

لقد أدرك سومرفيلد انه عند درجات حرارة اعتيادية، تكون طاقة معظم الكترونات الغاز الالكتروني الحر لفلز هي اقل من طاقة فيرمي بعدة مرات للكمية K_BT ولهذا لا يمكن أن

تساهم في عملية التوصيل الكهربائي. اما إذا كانت قيمة طاقة فيرمي فأنها تساهم في عملية التوصيل الكهربائي.

لأجل حساب معامل التوصيل الكهربائي، استخدم سومرفيلد معادلة احصاء فيرمي - ديراك الخاصية الدالة التوزيع في فضاء الزخم الثلاثي الأبعاد لكل وحدة حجم.

$$\sigma = ne^2\lambda(E_f)/mS(E_f)$$

وهكذا نجد أنه بالإمكان التعبير عن معامل التوصيل الكهربائي بدلالة الكثافة الكلية للإلكترونيات n والانطلاق $S(E_f)$ ومتوسط المسار الحر $\lambda(E_f)$ لإلكترونات تمتلك طاقة فيرمي E_f فقط.

ويمكن كتابة معامل التوصيل الحراري أيضاً بدلالة متوسط الزمن الحر (τ_m) بين تصادمات لالكترونات توصيل ذات طاقة E_f حيث ان:

$$\tau_m = \left[\lambda(E_f)/S(E_f)\right] = \tau_f \quad \ldots (6.70)$$

فبتعويض معادلة (6.70) في معادلة (6.69) نحصل على:

$$\sigma = ne^2\tau_m/m \quad \ldots (6.71)$$

لقد وجد بأن النتائج المحصلة عملية مطابقة بشكل جيد مع النتائج النظرية المحسوبة في المعادلة (6.71) وهذا يدل على أن نظرية سومرفيلد جيدة.

6.6 التوصيل الحراري بموجب نظرية سومرفيلد

لقد توصل سومرفيلد الى علاقة رياضية لمعامل التوصيل الحراري الالكتروني معتمدة على فرضياته المذكورة في موضوع معامل التوصيل للغاز الالكتروني الحر. لقد أهمل سومرفيلد دور الفونونات في عملية انتقال الحرارة في الفلزات. فلقد استخدم معامل التوصيل الحراري لجسيمات الغاز المذكورة في النظرية الحركية للغازات وهي:

$$K = \frac{1}{3}c_v \mathrm{v}_e \lambda$$

حيث ان c_v تمثل الحرارة النوعية عند حجم ثابت. و λ معدل المسار الحر و v_e سرعة الالكترون . ولحساب معامل التوصيل الحراري K_{el} حسب نظرية سومرفيلد علينا استبدال C_v بالحرارة النوعية الالكترونية c_{el} والسرعة v_e بـ v_f فنحصل على:

$$K_{el} = \frac{\pi^2 K_B^2 T n \tau_m}{3m}$$

ان قيمة K_{el} المحسوبة في نظرية سومرفيلد اكبر من قيمة K_{el} المحسوبة في نظرية درود بحوالي 10%. ان النسبة بين معامل التوصيل الحراري الالكتروني K_{el} ومعامل التوصيل الكهربائي σ لكل درجة حرارة يعرف **بعدد لورنز** ويعطي بالعلاقة التالية:

$$L = \frac{K_{el}/\sigma}{T} = \frac{\pi^2}{3}\left(\frac{K_B}{e}\right)^2$$

وهذا العدد أكبر من العدد أكبر من العدد المحسوب بموجب نظرية درود بحوالي 10%.

سؤال 4) اوجد عدد الذرات لوحدة الحجم يساوي عدد الالكترونات لوحدة الحجم لعنصر النحاس cu^{29} اذا علمت ان $\left(\rho = 8.5 \ \frac{gm}{cm^3}\right)$ والوزن الذري هو $\left(M = 63.5 \ \frac{gm}{mol}\right)$ ، (N_A) عدد أفوكادو= $\left(6.022 * 10^{23} \ \frac{1}{mol}\right)$.

$4s^{110}1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d = cu^{29}$

$n = Z\ N$

Z =1 =التكافؤ الذري (عدد الكترونات التكافؤ)

$$n = Z\left(\frac{\rho N_A}{M}\right)$$

n = عدد الالكترونات لوحدة الحجم

N =عدد الذرات لوحدة الحجم

$$N = \left(\frac{\rho N_A}{M}\right)$$

$$N = \left(\frac{8.5 * 10^3 \ \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} * \left(6.022 * 10^{23} \ \frac{1}{\text{mol}}\right)}{63.546 * 10^{-3} \ \frac{\text{Kg}}{\text{mol}}}\right) = 0.806 * 10^{29} \ atoms/\text{m}^3$$

ملاحظة: ولان النحاس احادي التكافؤ وفي الذرات الأحادية التكافؤ مثل البوتاسيوم والنحاس والذهب يكون عدد الكترونات التوصيل مساوياً لعدد الذرات. أي ان:

$$N = n = 0.85 * 10^{29} \ \frac{atoms}{\text{m}^3} = 0.85 * 10^{29} \quad \text{elec/m}^3$$

ولا داعي لاكمال الحل لإيجاد عدد الكترونات التوصيل.

طريقة إيجاد دد الكترونات التوصيل:

Z=1 =التكافؤ الذري (عدد الكترونات التكافؤ)

ρ = كثافة الفلز & M = الوزن الذري للفلز

N_A ، عدد أفوكادو= $\left(6.022 * 10^{23} \ \frac{1}{mol}\right)$.

$$\rho = 8.9 \ \frac{gm}{cm^3} = \ 8.9 \ \frac{gm * 10^{-3}}{cm^3 * 10^{-6}} = 8.9 * 10^3 \ \frac{Kg}{m^3}$$

$$M = 63.5 \ \frac{gm}{mol} = 63.5 \ \frac{gm * 10^{-3}}{mol} = \ 63.5 * 10^{-3} \ \frac{Kg}{mol}$$

$$n = Z\left(\frac{\rho N_A}{M}\right)$$

$$\text{n} = 1\left(\frac{8.96 * 10^3 \ \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} * \left(6.022 * 10^{23} \ \frac{1}{\text{mol}}\right)}{63.5 * 10^{-3} \ \frac{\text{Kg}}{\text{mol}}}\right) = 0.806 * 10^{29} \quad \text{elec/m}^3$$

$$= 8.06 * 10^{28} \ \frac{elec}{m^3}$$

نلاحظ ان عدد الذرات لوحدة الحجم تساوي عدد الالكترونات لوحدة الحجم لان العنصر احادي التكافؤ وكل ذرة تعطي الكترون واحد.

$N = 0.806 * 10^{29} \ atoms/\text{m}^3$=عدد الذرات لوحدة الحجم

$\text{n} = 0.806 * 10^{29} \quad \text{elec/m}^3$ =عدد الالكترونات لوحدة الحجم

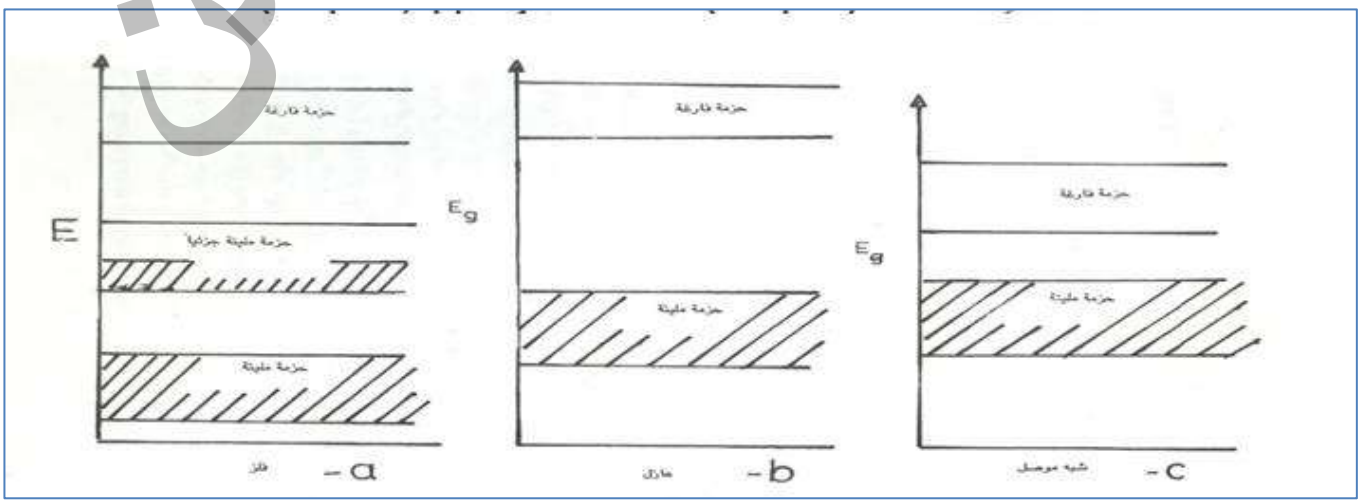
نظرية الانطقة (الحزم) للمواد الصلبة

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

المقدمة:

أسباب فشل النظرية الكلاسيكية والنظرية الكمية للغاز الالكتروني:
1- لم تستطع هذه النظريات تفسير تلك الفوارق الكبيرة في التوصيل الكهربائي للمواد المختلفة من عازلة إلى شبه موصلة إلى موصلة، وذلك بسبب إهمال التفاعل بين الكترونات التوصيل والطبيعة الدورية للشبيكة البلورية.
2- وكذلك عدم الأخذ بنظر الاعتبار بأن المادة الصلبة تمتلك حزمة Band متكونة من عدد كبير من مستويات الطاقة قريبة بعضها من البعض.

إن عدد مستويات الطاقة يساوي عدد الذرات في البلورة وعليه فأن حزمة الطاقة Energy Band تظهر وكأنها مستمرة، إن حزم الطاقة يمكن أن تكون مفصولة بعضها عن بعض بمناطق محظورة Forbidden تمنع إلكترونات التوصيل من احتلالها أو الوجود فيها وتسمى هذه المناطق بفجوة الطاقة Energy Gap. إن التوصيل الكهربائي في المادة الصلبة يتم عن طريق انتقال الالكترونات ضمن المادة، ولما كان لابد للإلكترون أن يحتل مستوي من الطاقة، فأن انتقال الإلكترون يجب أن يتم عن طريق انتقاله من مستوي إلى أخر. لهذا فأن التوصيل الكهربائي يتطلب وجود الكترونات ومستويات شاغرة من الالكترونات في الحزمة.



في الموصـــل (المعادن): إن التوصـــيل الكهربائي الجيد في الفلزات يعود إلى كون الحزمة العليا والذي يطلق عليها حزمة التوصيل Conduction Band مليئة جزئيا بالالكترونات وهذا يكون ناشئا عن أحد أمرين:

- فأما أن يكون المستوي الأصـلي في ذرة الفلز ملئ جزئيا وبهذا فأنه ينشـطر إلى حزم بحيث تبقى الحزمة مليئة جزئيا
- أو أن تكون ناشـــئة عن حزمتين متداخلتين أحدها مليئة وتعود إلى مســـتوى ملئ في الأصل وأخرى فارغة ناشئة عن مستوي أعلى وبهذا ينجم عن هذا التداخل حزمة مليئة جزئيا وكما هو مبين في الشكل (a).

في المواد العازلة: أما في المواد العازلة فتكون حزمة التكافؤ Valance band مليئة بالالكترونات وعلى العكس من ذلك تكون حزمة التوصـيل band Conduction فارغة من الالكترونـات. وأمـا بـالنســـبـة إلى الفجوة المحظورة بين الحزمتين فتكون كبيرة جدا بالمقارنة مع الفجوة المحظورة في الفلزات أو أشباه الموصـلات، وكما هو مبين في الشكل (b).

إن التوصـــيـل الكهربـائي يتطلـب انتقـال الإلكترون من حزمـة التكـافؤ المملوءة بالالكترونات إلى حزمة التوصـــيل الفارغة من الالكترونات عبر الفجوة المحظورة بينهما، أي أنه يجب على الإلكترون أن يكتســب طاقة لكي يتمكن من الانتقال من حزمة إلى حزمة ويطلق عل هذه الطاقة (Eg) بفجوة الطاقة.

في المواد شبه الموصلة: أما بالنسبة إلى المواد شبه الموصلة. فأن الفرق الأساس بينها وبين المواد العازلة يكمن في قيمة فجوة الطاقة التي تكون أقل بكثير من قيمة فجوة الطاقة في المواد العازلة وكما هر موضح في الشكل (c)

س) التوصيل الكهربائي في المواد العازلة قليل جدا. علل ذلك؟

الجواب: وذلك لكون فجوة الطـاقـة كبيرة تجعل عـدد الالكترونـات المنقولـة إلى حزمـة التوصيل قليلة في درجات الحارة الاعتيادية أو حتى في درجات الحرارة العالية.

إن قيمة فجوة الطاقة في الكثير من المواد العازلة تتراوح بين 3 إلى 10 إلكترون فولت أما التوصيل الكهربائي في المواد شبه الموصلة فتكون معتدلة نوعا ما عند درجات الحرارة العالية.

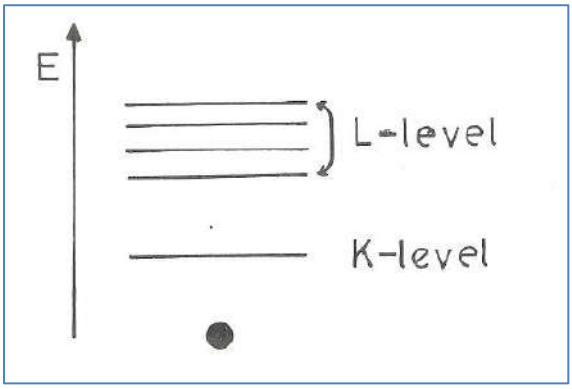
س) عند درجات الحرارة الواطئة فيكون التوصـــيل الكهربائي قليل جدا في المواد شـــبه الموصلة؟

الجواب: وذلك لأن حزمة التوصـيل تكون فارغة عند درجة حرارة الصـفر المطلق. وكلما ارتفعت درجات الحرارة ينتقل عدد كبير من الالكترونات إلى حزمة التوصـيل وترتفع قيمة التوصيل الكهربائي إلى حد كبير.

أصل فجوة الطاقة:

مستويات الطاقة وحزم الطاقة:

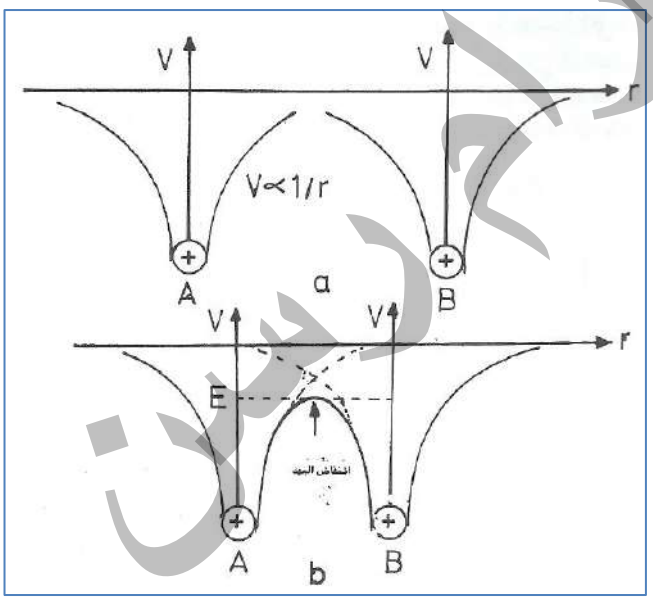
- من المعروف أن الالكترونات في حركتها في الذرة تستقر في أغلفة حول النواة وفي مجموعات أو مستويات ذات طاقة محددة.
- تقل طاقة ارتباطها بالنواة كلما بعدت مستويات وجودها عن مركز النواة وبذلك يسهل انطلاقها بحرية في مجال نفوذها.
- ولا تتساوى طاقات الالكترونات الموجودة في غلاف واحد (عدا غلاف K) بل تتفاوت (زوجيا) بقدر قربها أو بعدها عن النواة.



بين الشكل رسما توضيحيا للذرة مفردة معزولة، عن باقي الذرات (أي بإهمال أثر الذرات الأخرى عليها) وفيه توضح المستويات التي يمكن أن تحتلها الالكترونات.

ويلاحظ أن الالكترونات تبدأ أولا في شغل المستويات القرية من النواة (ذات الطاقة الأقل) وبحيث كل مستوي لا يمكن أن يحوي أكثر من إلكترونين فقط لهما دوران برمي يتعاكس في الاتجاه وذلك حسب قاعدة باولي للاستبعاد.

إن السؤال الذي يطرح نفسه الآن هو ماذا يحدث لهذه المستويات عند تجميع الذرات لتكوين المادة الصلبة؟.



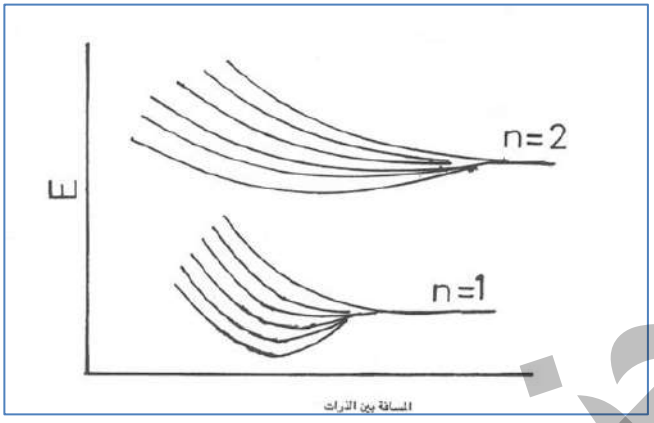
دعنا نأخذ ذرة منفردة، فأن الإلكترون يتحرك حول النواة ويكون تحت تأثير جاذبية النواة فإذا كان لهذا الإلكترون أن يتحرر من جذب النواة فعليه أن يعبر حاجز الجهد وهذا الجهد يتناسب عكسيا مع المسافة من النواة أي ان $(V \propto \frac{1}{r})$ وهكذا يبدو منحني الجهد وكما هو موضح في الشكل (a)

وألان إذا أخذنا الذرتين A وB وجعلناهما تقتربان الواحدة من الأخرى فأنه كلما ازداد التقارب بينها أصبحت قوة التجاذب بين النواة الواحدة والالكترونات الأخرى أشد وينجم عن ذلك أنه ينخفض حاجز الجهد في المجال ما بين الذرتين وكما يبدو ذلك في الشكل (b) في حين يبقى حاجز الجهد عاليا في الطرف الآخر للذرتين.

أن زيادة التقارب بين الذرتين يؤدي إلى تداخل أغلفتهما، وبهذا ينخفض حاجز الجهد بينها إلى الحد الذي يصبح فيه مستوي الطاقة E المبين في الشكل السابق واحدا لكل من

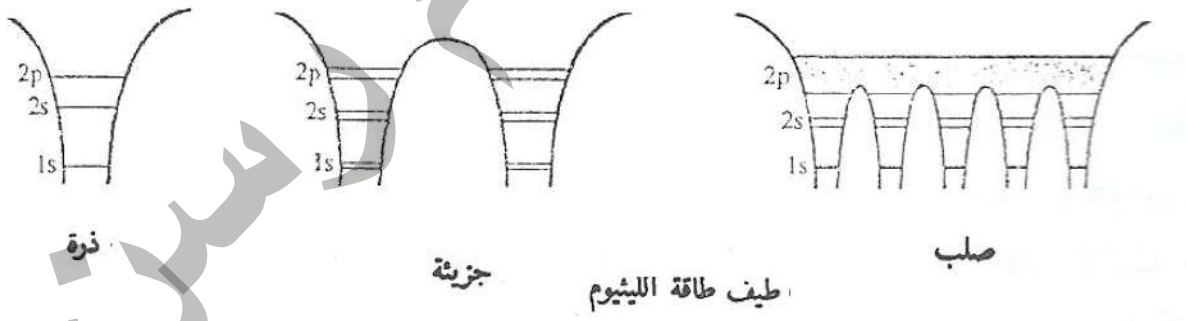
الذرتين. فإذا كان لكل مستوي إلكترون واحد فأن تداخل المستويين يعني أن المستوي الموحد للذرتين سيضم إلكترونين وعندئذ يتعذر التمييز بين إلكترون الذرة A والذرة B. إن احتواء المستوي لإلكترون لا يتعارض مع قاعدة باولي للاستبعاد شرط أن يكون للإلكترونين دوران برمي متعاكس (s=±1/2).في كل الأحوال يسع كل مستوي إلكترونان فان في الطاقة قليلا حيث لكل اتجاه دوراني طاقة.

ولكن الصورة تختلف أذا كان المستوى في الذرة المنفردة في الأصل يحتوي على إلكترونين فمثلا عند التقاء أربعة ذرات من المادة فأن المستوي n =1 في كل ذرة ويكون له إلكترونان فعند تداخل الأغلفة للذرات الأربعة يصبح لدينا ثمانية الكترونات بالمستوي نفسه وهذا يتناقض مع قاعدة باولي للاستبعاد ولهذا يتحتم عندئذ انشطار المستوي n=1 إلى اربعه مستويات متقاربة بالطاقة وكل مستوي فيه إلكترونان.



ونستطيع أن نعمم هذا المبدأ بقولنا إنه إذا التقى N من الذرات في مادة فأن كل مستوي يجب أن ينشطر إلى N من المستويات ولكل مستوي إلكترونان إن المستوي الواحد يتحول إلى حزمة من المستويات level band ولها طاقة حزمة Energy band تساوي بضع إلكترون – فولت وكما هو مبين في الشكل.

لاجل توضيح ذلك دعنا نأخذ فلز الليثيوم Li^3 مثالا على إن ذرة الليثيوم تحتوي عل ثلاثة الكترونات موزعة عل الأغلفة الثانوية $1s^2\ 2s^1$وعند حل معادلة شرودينكر نحصل على طاقة منفصلة لذرة الليثيوم ويرمز لها 1s,2s,2pوكما هو مبين في الشكل.

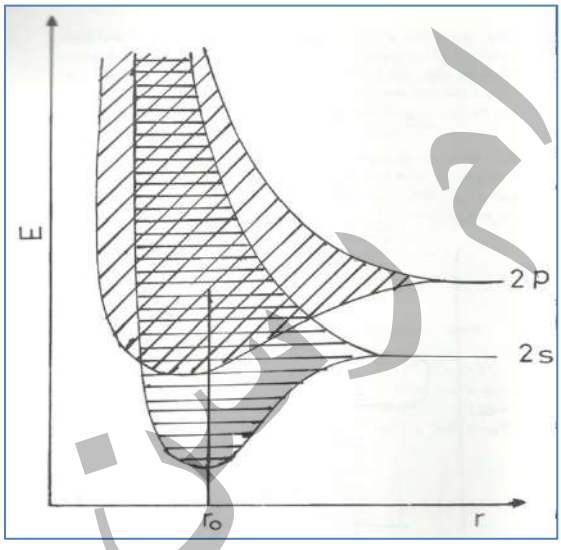


وألان إذا أخذنا ذرتين من الليثيوم وجعلناهما يقتربان الواحدة من الأخرى لتكون جزيئه الليثيوم Li_2. فإذا كان لكل غلاف موحد للذرتين يضم إلكترونين لها دوران برمي متعاكس (s=±1/2) ويملكان طاقة مختلفة قليلا. وعليه ينشطر الغلاف الموحد إلى مستويين فرعين للطاقة وكما هو مبين في الشكل اعلاه.

يعتمد مقدار الانشطار في كل مستوي وطاقة (غلاف موحد) أساسا على المسافة بين نواتي الذرتين المكونتين لجزيئه وعلى الغلاف الذري فمثلا يكون الانشـــطار في الغلاف الثانوي 2p اعلي من ذلك الانشطار في الغلاف الثانوي 2s ويكون الانشطار في الغلاف الثانوي 1s أوطأ من ذلك الانشطار للغلاف الثانوي 2s. إن تفسير ذلك أن، نصف قطر الغلاف الثانوي 1s يكون صغيرا جدا، أي يكون الإلكترون في هذا الغلاف مقيدا بقوة إلى نواة ذرته ولا يتأثر كثيرا بالمجال الناشئ عن اقتراب ذرة من ذرة أخرى. ومن جهة أخرى يكون العكس صحيحا، حيث يكون ارتباط الالكترونات الأغلفة الثانوية 2s و 2p مضطربا مع نوى ذراتها وذلك لكون أنصاف أقطار 2p,2s كبيرة.

يمكن تعمم الاعتبارات المذكورة أعلاه لجزيئه Li المتعددة الذرات. فلجزيئة اللثيوم ذات الذرات الثلاثة ينشطر كل غلاف إلى مستويات بينما كل غلاف في جزيئه ذات أربع ذرات إلى مجموعة رباعية. وهكذا يمكن اعتبار الليثيوم الصلب حالة نهائية عندها يصبح عدد الذرات كبيرا جدا وينتج عنها بلورة صلبة.

وبموجب ما تقدم تنشطر الأغلفة الموحدة إلى N من المستويات الثانوية المتقاربة بعضها مع بعض حيث N تمثل عدد الذرات إلي تضمها المادة الصلبة، ولما كان عدد الذرات N في المستويات الصلبة كبيرا جدا (حوالي 10^{23} ذرة لكل مول) كانت المستويات الثانوية مقاربة جدا بعضها من بعض حيث يمكن لها أن تتداخل بعضها ببعض لتشكل ما يسمى بحزمة الطاقة Energy band. وعلى هذا الأساس تكون كل من الأغلفة الثانوية 2p,2s,1s.. الخ حزم طاقة 2p,2s,1s... الخ عل التعاقب وكما هو مبين في الشكل (5.9c).

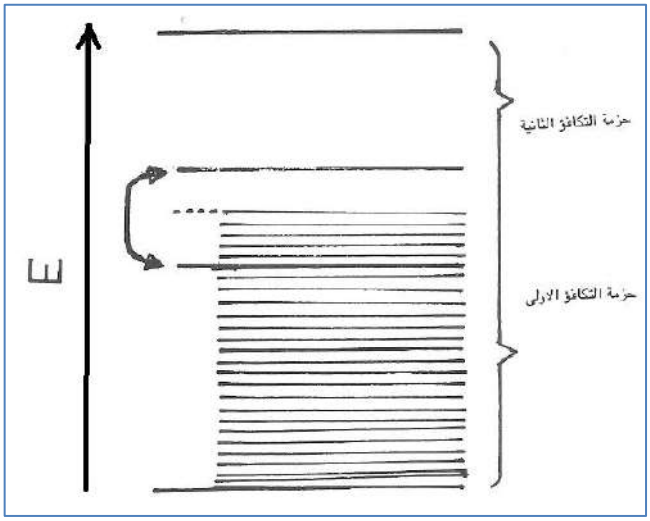


إن الفلزات في طبيعة بنيتها البلورية يحتم تقارب ذراتها من بعضها البعض بحيث لا يمكن اعتبار ذراتها معزولة عن بعضها لبعض بحيث أن كل ذرة تؤثر بمجالها على جارتا وهذا التأثير في الحقيقة متبادل بينها. فدلا من إن تحتل مستويات الطاقة المختلفة في الذرة حدودا ضيقة في حالة الذرة المعزولة فعد أن هذه الحدود أو المستويات تتوسع في حدودها كلما اقتربت ذرتان من بعضها البعض فتأخذ شكل حزم من مستويات عديدة الطاقة. وهذه الحزم تشتد في توسعها بصفة خاصة في مستويات الأغلفة الخارجية وكما هو مبين في الشكل.

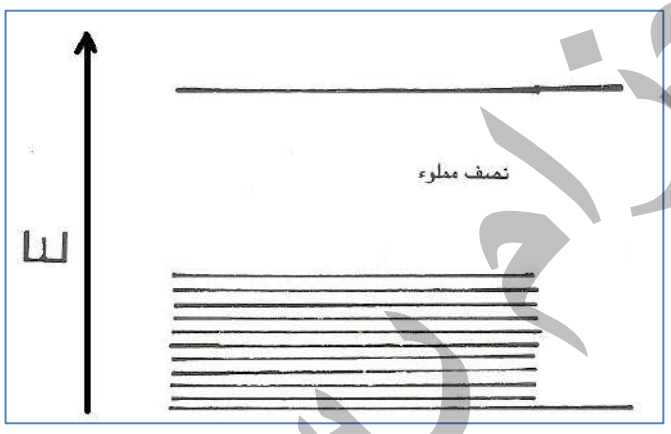
إن هذا التوسع يتوقف على المسافة الذرية (r). فإذا كانت هذه المسافات صغيرة أشتد التوسع في كل مستوى حتى تتداخل الحزم الناتجة لها. بينما لو كانت المسافات كبيرة بن التوسع في حدود ضيقة فلا يحدث تداخل بل تبقى فجوات gaps بينها، وحزم الطاقة الناتجة تحتوي في حد ذاتها على مستويات طاقة عديدة متباينة. وهذه المستويات يمكن إن يشغلها ويمر عبرها الكترونات، إذا أعطي للإلكترونات طاقة كافية تسمح برفعها وتواجدها في هذه المستويات. أي أن هذه المستويات الجديدة في حزم

الطاقة تعتبر ممرات لتلك الالكترونات التي يؤهلها مستوى طاقتها للارتفاع إليها. وتتواجد مستويات الطاقة المكونة للحزم بإعداد فضخمة يمكنها أن تستوعب مرور كل الإلكترونان
(من الغاز الالكتروني) في كل ذرة والتي يساوي عددها عدد ذرات الفلز. ولكون هذه الالكترونات إما أن تكون أحادية في الغلاف الواحد أو ثنائية.

- فإذا كان الفلز ثنائي التكافؤ فهذا يعني أن الالكترونات تشغل حزمة بكاملها.
- أما إذا كان الفلز أحادي التكافؤ فهذا يعني أن الالكترونات تشغل نصف الحزمة.



في بعض الفلزات يكون رص الذرات فيها بدرجة كبيرة تجعل من الحزم المتكونة تقترب من بعضها البعض فتتضاءل الفجوات وقد تتلاشى بل قد يحدث تداخل بين الحزم وكما هو مبين في **الشكل السابق والشكل التالي** وفي هذه الحالة لا يبذل الغاز الالكتروني أي مجهود لإيجاد مسارات له إذ أن الحزمة الثانية متصلة في تدرج مستويات طاقتها مع مستويات الحزمة الأولى وبالتالي يتصف الفلز بأنه جيد التوصيل للكهربائية.

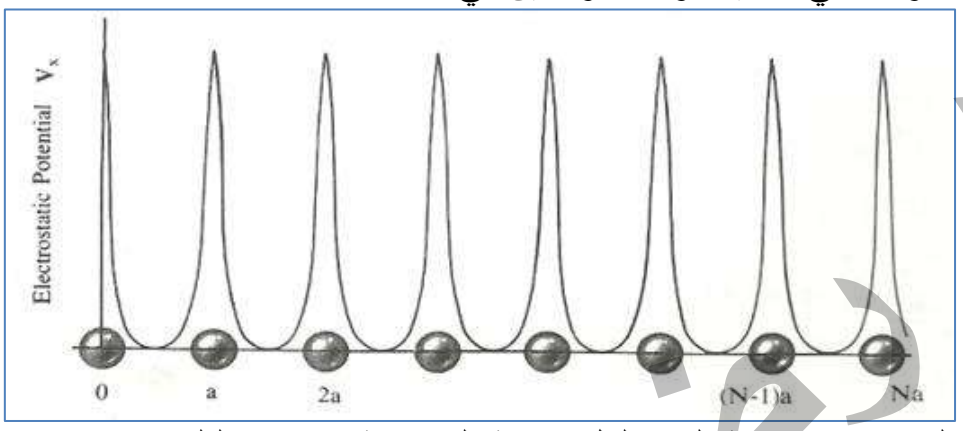


أما في الفلزات الأحادية فأن الكترونات الغاز الالكتروني لا تشغل كل الحزمة الأولى وكما مبين في الشكل وبالتالي تبقى بها مسارات فارغة تصلح لمرور الالكترونات دون إعطاء طاقة عالية لها حيث يكفي الجهد لرفع هذه الالكترونات.

د. رضا حزام رسن

الجهد الدوري ونظرية بلوخ:

كما هو معروف أن القلوب الايونية الموجبة في البلورة المثالية تترتب عل شكل صفوف دورية منتظمة، وتكون في حالة غير مستقرة حيث تهتز حول مواقع توازنها. تتحرك الالكترونات الحرة بوجود جهد دوريpotential Periodic ناتج من ترتيب قلوب الايونات الموجبة في الشبيكة وكما هو مبين في الشكل.



لقد تمكن بلوخ من دراسة الجهد لكل دورية الشبيكة اي جهد البلورة واستنتج إن الجهد يتضمن جزئيين أساسيين هما:

أولا: جهد كهروستاتيكي $V_{i(r)}$ ينشأ عن تفاعل إلكترون التوصيل مع جميع القلوب الأيونية الموجبة إلي تشكل شبيكة البلورة. إن هذا الجزء من جهد البلورة V(r) يجب أن يمتلك الدورية الانتقالية للشبيكة المثالية نفسها $(\bar{R})$ (أي عند إهمال اهتزاز القلوب الأيونية الموجبة).

ثانيا: جهد $V_e(r)$ ينشأ من تفاعل إلكترون التوصيل وبقية الكترونات التوصيل (إلكترون بلوخ) المتحركة خلال شبيكة البلورة. إن هذا الجهد يجب أن يكون جهدا دوريا لكي تحقق متطلبات التعادل الكهربائي في البلورة والأخذ بنظر الاعتبار فكرة التنافر بين إلكترون وأخر.

وعلى هذا الأساس يمكن كتابة الجهد الكلي للبلورة بـ:

$$V(\bar{r}) = V_i(\bar{r}) + V_e(\bar{r})$$

وألان وبعد معرفة الجهد الكلي يمكن كتابة معادلة شرودينكر بالصيغة الرياضية التالية:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - e\,V(\bar{r})\right]\psi = E\psi$$

وممكن كتابة الجهد الكلي الدوري لإلكترون التوصيل بالصيغة التالية:

$$U(r) = -e\,V(\bar{r})$$

وبالتعويض نحصل عل:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + u(\bar{r})\right]\psi = E\psi$$

لقد تمكن بلوخ من حل المعادلة الاخيرة لتعطي نوعين من الحلول:

$$\psi(\bar{r}) = u_k(\bar{r})\, e^{\pm 2\,\mu.\bar{r}}$$

$$\psi(\bar{r}) = u_k(\bar{r})\, e^{\pm\, i.j.k}$$

✓ الحل الأول غير محدود حيث أن الدالة الموجية $\psi(\bar{r})$ تؤول إلى ما لانهاية عندما تؤول r إلى ما لانهاية لذلك فلهذا الحل يمثل أمواج متقدمة Progressive wave غير موجودة بالشبيكة.

✓ أما الحل الثاني فيمثل أمواجا موقوفة Stationary Wave وتسمى هذه المعادلة بنظرية بلوخ.

في الحلين السابقين $\bar{k}$ هي متجه الموجة الذي يرافق طول موجة ديبرولى إي $\left(\bar{k} = \frac{2\pi}{\lambda}\right)$ وزخم ديرولي $\left(\bar{p} = \hbar\bar{k}\right)$ حيث يدعى الزخم P بالزخم البلوري للإلكترون.

إن $u_k(\bar{r})$ هي دالة موجية لاتتوقف على الزمن ولكن على متجه الموجه $\bar{k}$ فقط الذي ينسب عادة إلى زخم الإلكترون فضلا عن امتلاكها تماثلا انتقالي$\bar{R}$ إي لها نفس دورية الشبيكة وهذا بعني أن:

$$u_k(\bar{r}) = u_k(\bar{r} + \bar{R})$$

حيث إن ($\bar{R}$) تمثل المتجه الانتقالي للشبيكة

وبتعويض المعادلة الاخيرة في الحل الثاني نحصل عل:

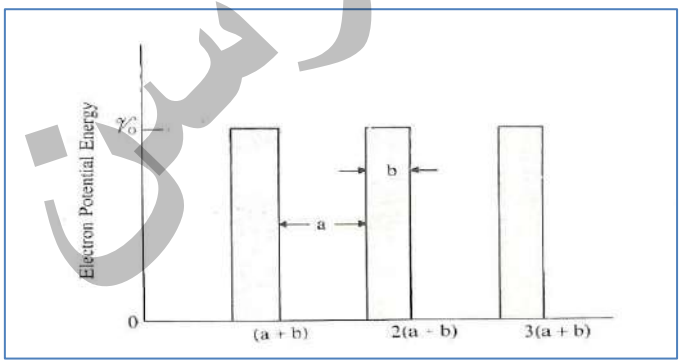
$$\psi_k(\bar{r} + \bar{R}) = u_k(\bar{r} + \bar{R})e^{i\bar{k}(\bar{r}+\bar{R})}$$

$$\psi = \psi_k(\bar{r})e^{i\bar{k}.\bar{R}}$$

وندعى هذه المعادلة بدالة بلوخ.

إن ملخص نظرية بلوخ تنص على أن الدوال الذاتية لمعادلة موجة مرافقة لإلكترون تحت تأثير جهد دوري تكون بصيغة حاصل ضرب موجة مستوية متنقلة e^{ikr} مع الدالة $u_k(\bar{r})$ ذات دورية مثل تلك لشبيكة البلورة $(\bar{R})$

نموذج كرونيج وبيني:



لتوضيح وجود مناطق من الطاقة مسموح بها للإلكترون وأخرى محظورة عليه وضع كرونيج وبيني نموذجا من بعد واحد يمثل شبيكة خطية مكونة من ذرات تبعد بعضها مسافة (a + b) وكما هو مبين في الشكل. يمكن تمثيل الخواص المميزة لانتشار الأمواج الالكترونية عل هذه الشبيكة بتركيب دوري مربع له نفسر دورية الشبيكة ويمثل بئر الجهد الذي تتحرك عليه الالكترونات، لقد اعتبر الطاقة الكامنة مساوية صفرا في مناطق مثل (0<x<a) بينما اعتبرها مساوية ل($u_\circ$) في مناطق مثل a<x<a +b ولذلك تكون دورية الشبيكة (period) في (a +b)

حيث ان b تمثل سمك حاجز الجهد وان a يمثل اتساع بئر الجهد. إن الدوال الموجبة إلي استخدماها كرونيج وبيني لحل معادلة شرودنكر الخطية في أتجاه (x) تكون بصيغة ($\psi_K(x) = u_k(x)e^{ikx}$) حيث إن $u_k(x)$ تمثل دالة معدلة modulating للموجات المستوية المنتقلة ولها دورية الشبكة نفسها. لقد تمكن كرونيج وبيني من حل معادلة شرودنكر

$$\frac{d^2(k)}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{\hbar^2}(E - u_\circ)\psi(k) = 0$$

$$\frac{d^2u(k)}{dx^2} + 2ik\frac{du(k)}{dx} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - E_k - v)u_k = 0$$

يمكن حل معادلة شرويدنكر للمنطقتين المتميزتين وهما:

أولا: في المنطقة 0<X<a إي داخل بئر الجهد يكون حل المعادلة على هذا الشكل

$$u_1(k) = Ae^{i(\alpha-k)x} + Be^{-i(\alpha+k)x}$$

حيث أن

$$\alpha = \sqrt{\frac{8\pi^2 m}{2h}}E = \frac{2\pi}{h}\sqrt{2mE}$$

ثانيا: في المنطقة a<x<(a + b) أي داخل حاجز الجهد يكون حل المعادلة على هذا الشكل:

$$u_2(k) = Ce^{(\beta-ik)x} + De^{-(\beta+ik)x}$$

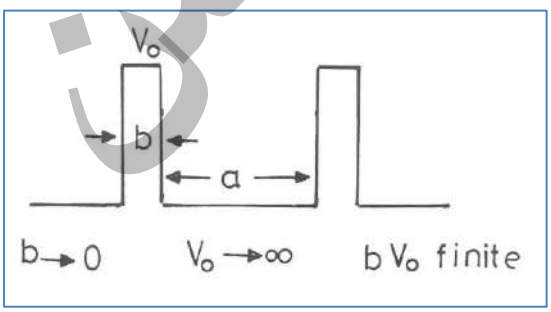
حيث أن

$$\beta = \left[\frac{8\pi^2 m}{h^2}(u_\circ - E)\right]^{\frac{1}{2}}$$

إن الحل النهائي للمعادلات يؤدي إلى:

$$\left[\frac{\beta^2-\alpha^2}{2\beta\alpha}\right]\sinh\beta b\sin\alpha a + cosh\beta b\cos\alpha a = \cosh(a+b)$$

وللحصول عل حل بسيط فلقد اجري كرونيج وبيني التقريب التالي والموضح في الشكل.



لقد اعتبر كرونيج وبيي أن سمك حاجز الجهد أ صغيرا جدا ويؤول للصفر كما اعتبرا إن ارتفاع حاجز الجهد $V_\circ$ كبيرا جدا ويؤول إلى مالا نهاية. ولكن يبق حاصل الضرب $bV_\circ$ محدود القيمة.

إن هذا التقريب لا يغير من طبيعة الحل النهائي ولكن فقط يسهل إيجاد حل للمشكلة باستخدام العلاقات الرياضية البسيطة كما يأتي:

أ- فإذا كانت $V_\circ \to \infty$ فأن قيمة E تكون صغيرة نسبيا ولذلك يجد أن قيمة β تصبح:

$$\beta = \left(\frac{8\pi^2 m}{h^2}\right)^{1/2}$$

تعويض هذه الفرضيات في معادلة الحل النهائي نحصل عل:.

$$\cos ka = \cos \alpha a + P\,\frac{\sin \alpha a}{\alpha a}$$

حيث أن

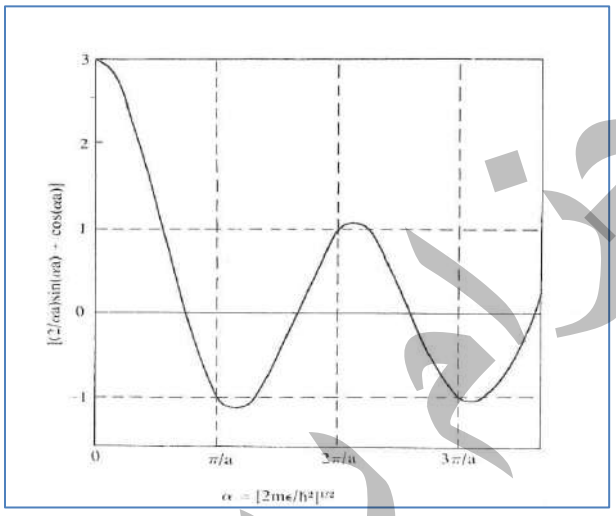
$$p = \frac{4\pi^2 m V_o a b}{h^2}$$

وان

$$\alpha = \left(\frac{8\pi^2 mE}{h^2}\right)^{1/2}$$

ولدراسة المعادلة نرسمها بيانيا، ليكن الطرف الأيسر من المعادلة يقع على المحور Xوالطرف الأيمن يقع عل المحور Y وكما هو مبين في الشكل.

نلاحظ إن الطرف الأيسر من المعادلة coska أخذ قيمة واحدة فقط لكل قيمة ل K أي لكل قيمة طاقة الكترونية E.



كما إن دالة جيب التمام تجعل حدود التغير للطرف الأيسر من المعادلة لا تتعدى ١ ± هي قيم تغير coska مابين أقل قيمة واكبر قيمة.

لذلك فكل قيم αa التي تعطي قيمة للطرف الأيمن من المعادلة اكبر من ١+ أو اقل من ١- تعتبر غير حقيقية.

يمثل المحور السيني (αa) محورا للطاقة الالكترونية وتكون بذلك قيم الطاقة الالكترونية الممثلة بقيم αa التي تعطي قيما للطرف الأيمن من المعادلة داخل الحدود ±1 هي فقط القيم المسموح بها لطاقة الإلكترون. إما القيم الأخرى التي تخرج بقيمة الطرف الأيمن من هذه الحزمة فهي كلها **قيم غير حقيقية** أو بمعنى أخر **قيم غير مسموح** بها.

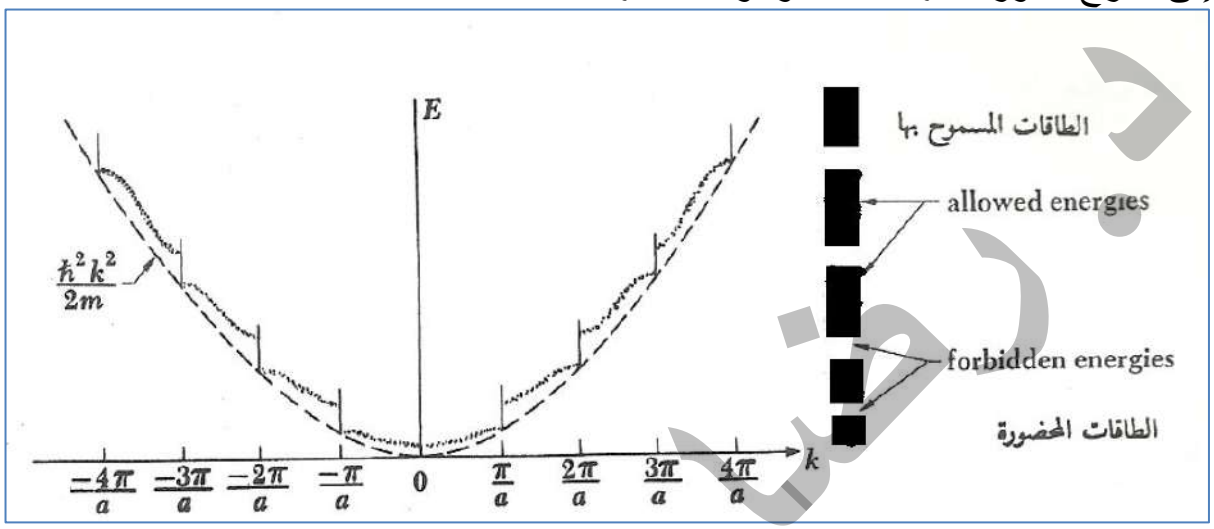
من هنا يتضح وجود حزم للطاقة مسموح بها وأخرى محظورة. اي أن الجهد الدوري لذرات الشبيكة قد جعل وجود حزم محضوره من الطاقة الالكترونية لا يمكن لأي إلكترون أن يتواجد بداخلها. ويلاحظ انه كلما ازداد ارتفاع بئر الجهد (أي إن $V_o b$ تزداد) نجد إن أتساع هذه الحزمة المحظورة يقل.

إذا رسمت العلاقة بين **طاقة الإلكترون ومقلوب طول الموجة المرافق** نحصل عل الشكل التالي والذي فيه تظهر الحزم المحظورة من الطاقة، يلاحظ من الشكل وجود انقطاع في المنحني كلما كان $k = \frac{\pi n}{a}$ و بما إن $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

فعليه نحصل على

$$n\lambda = 2a$$

إن هذه المعادلة هي نفس معادلة براك التي تعطي انعكاسا قويا للالكترونات الساقطة عموديا عل سطح البلورة. إن هذا يعني انه تبعا لقانون براك فأن أي إلكترون يتحصل داخل البلورة عل طاقة تدخله في المنطقة المحظورة يستطار وdنعكس على المستويات الذرية إلى خارج البلورة لأنها لا تقبل وجوده بداخلها.



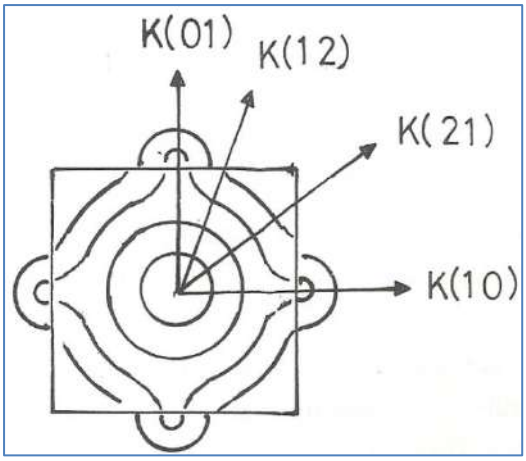
9.5 مناطق برليون في نظرية الحزم

سبق أن تكلمنا عن مناطق برليون وقلنا أن نظرية الحزم يمكن تفسيرها معتمدا عل مفهوم الشبكة المقلوبة، أي على الفضاء المقلوب k.space. إن مناطق برليون تعد أصغر حجم في الفضاء المقلوب ويحوي على نقطة شبيكة مقلوبة مركزة في داخله، يحاط الحجم من قبل مجموعة من المستويات تكون عمودية على المسافات التي تربط نقطة الشبيكة المتمركزة مع نقاط الشبيكة المقلوبة المجاورة لها.

9.6 سطح فيرمي Fermi surface

إن سطح فيرمي عبارة عن سطح في فضاء متجه الموجة k ذي طاقة ثابتة تساوي E_f. يعد سطح فيرمي ذا أهمية في تفسير الكثير من الظواهر الفيزيائية خاصة في فيزياء الحالة الصلبة. *إن شكل ومواصفات سطح فيرمي لفلز ما ذا أهمية كبيرة في تحديد الخواص الالكترونية لذلك الفلز حيث يعزى سريان التيار الكهربائي في الفلز إلى التغيرات الحاصلة في احتمالية الإشغال للحالات الالكترونية قرب سطح فيرمي. يعتمد شكل سطح فيرمي على التفاعل بين الالكترونات والشبيكة ولذلك يحدد شكل سطح فيرمي بواسطة هندسة المنحنيات المقفلة للطاقة Contours Energy في الحزمة حيث يعتبر سطح فيرمي نفسه منحنى مقفل للطاقة.*

دعنا نفرض أن بلورة ذات بعدين وأنها فارغة من الالكترونات وافرض أن البنية البلورية لها منطقة برليون الأول عل شكل مربع. دعنا نبدأ ألان بملء الشبيكة تدريجيا بالالكترونات، إذا وصلنا النقط المختلفة في فضاء متجه الموجة والتي يكون لها نفس الطاقة الالكترونية نحصل عل إشكال دائرية طالما كنا بعيدين عن حدود منطقة برليون. إن حركة الالكترونات في هذه الدوائر تكون غير مقيدة ولكن إذا اقتربنا من حدود المنطقة نجد أن **منحنيات تساوي الطاقة** Contours Energy تنتهي عند هذه الحدود إذ أن قيم K تكون اكبر في الأركان عنها عند الجوانب. مثلا k(21) >k (10) و كما هو مبين في الشكل.



إن الاستمرار في إضافة الكترونات للبلورة تمتلئ أركان منطقة برليون الأولى تماما. وبعد هذه المرحلة لن يدخل أي الكترون في المنطقة الثانية إلا إذا كانت طاقته من الكبر بحيث يستطيع تعدي المنطقة الممنوعة للطاقة بين منطقتي برليون الأولى والثانية.

الكتلة الفعالة للإلكترون:

عندما تنتشر الموجة $e^{i(kx+\omega t)}$ في وسط التشتت فان سرعة الموجة تساوي $\frac{\omega}{k}$. بينما سرعة مجموعة الأمواج $V_g = \frac{d\omega}{dk}$ في بعد واحد وتساوي $(\mathrm{grad}_k \omega)$ $(\nabla_k . \omega)$ في ثلاثة ابعاد. أن الإلكترون الواقع تحت تأثير جهد دوري يتعجل بالنسبة للشبيكة عند تسليط مجال كهربائي خارجي عليه ولكن لا يحافظ عل كتلته الاعتيادية (m) في فضاء الحر، بل تتغير إلى ما يسمى **بالكتلة الفعالة** ويرمز لها بالرمز m^*. اذن، فعندما يتعرض الإلكترون داخل البلورة إلى قوة خارجية F، فأن مقدار التغير الحاصل في طاقته في زمن dt يساوي

$$\frac{dE}{dt} = -F.V_e$$

حيث أن V_e تمثل سرعة الالكترون:

$$E = \hbar\omega$$
$$\bar{P} = \hbar\,\bar{k}$$

والتي تساوي

$$V_e = \nabla_p . \omega = \frac{1}{\hbar}\nabla_k E$$
$$V_e = \mathrm{grad}_p . \omega = \frac{1}{\hbar}\mathrm{grad}_k E$$

نعوض V_e في المعادلة الأولى نحصل على:

$$\frac{dE}{dt} = -F.\frac{1}{\hbar}\nabla_k E$$

$$\therefore\ dE = \frac{1}{\hbar} F.\nabla_k E dt$$

وبما أن

$$E = \hbar\omega \qquad \frac{dE}{d\bar{k}} = \nabla_k E$$
$$\therefore\ dE = \nabla_k E.d\bar{k}$$

فمن المعادلتين نحصل عل:

$$\frac{1}{\hbar} F.\nabla_k E dt = \nabla_k E.dk$$
$$\frac{1}{\hbar} F.\nabla_k E dt - \nabla_k E.dk = 0$$

$$\nabla_k \mathrm{E}\left[\frac{1}{\hbar}\mathrm{F.dt} - \mathrm{dk}\right] = 0 \qquad \text{أو}$$

ولكن $\nabla_k \mathrm{E} \neq 0$ وذلك لأن قيمة k غير ثابتة لوجود المجال الكهربائي، وعليه فأن

$$\frac{1}{\hbar}\mathrm{F.dt} - \mathrm{dk} = 0 \qquad \therefore\ F = \hbar\,\frac{dk}{dt}$$

وبذلك فإن القوة تمثل معدل تغيير زخم البلورة $(\hbar k)$ crystal momentum.

إن الإلكترون تحت تأثير هذه القوة يتحرك بتعجيل مقداره

$$\vec{a} = \frac{\mathrm{dv_e}}{\mathrm{dt}} = \frac{1}{m}\vec{F} \qquad \frac{1}{\hbar}\nabla_{\mathrm{k}}\ \frac{\mathrm{dE}}{\mathrm{dt}} = \frac{1}{\hbar}\nabla_{\mathrm{k}}\bar{\mathrm{F}}.\bar{\mathrm{v}}$$

او

$$\vec{a} = \frac{1}{m^*}\vec{F} = \frac{1}{\hbar^2}\nabla_{\mathrm{k}}[\bar{\mathrm{F}}.\nabla_{\mathrm{k}}\mathrm{E}]$$

إن المعادلة الاخيرة لها صيغة قانون نيوتن الثاني في الحركة بشرط أن نعد المقدار $\left(\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2\mathrm{E}}{\mathrm{dk}^2}\right)^{-1}$ يمثل كتلة.

F=ma $\qquad \frac{1}{m^*} = \frac{a}{F}$

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2\mathrm{E}}{\mathrm{dk}^2} = \left[\frac{\left(\frac{d^2\mathrm{E}}{\mathrm{dk}^2}\right)}{\hbar^2}\right]$$

ولذلك يمكن تعريف الكتلة الفعالة m^* بالصيغة التالية

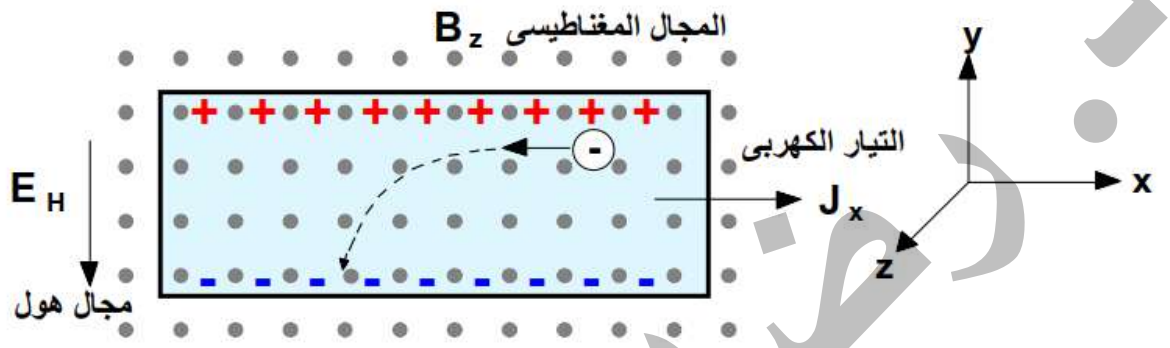
$$\boldsymbol{m^* = \hbar^2 / (d^2E / dk^2)}$$

وهكذا نجد أنه اذا كانت F تمثل القوة الخارجية المؤثرة على إلكترون في مادة صلبة دورية ذي بعد واحد وكان $\bar{a}$ يمثل التعجيل الفعلي لإلكترون ناشي عن كل من القوة الخارجية F وتفاعل الإلكترون وجهد البلورة فأن إلكترون بلوخ يتصرف مثل إلكترون حر (في خارج المادة الصلبة) ذي كتلة فعالة لا تعطي بالعلاقة $F = m^* a$. تختلف m^* عن كتلة الإلكترون الحر (m) من حيث أنها ليست كمية ثابتة وموجبة الإشارة دائما ولكن تكون m^* مساوية m عندما يكون إلكترون بلوخ إلكترونا حرا وتعطى طاقته بالعلاقة:

$$\left(\boldsymbol{E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}\right)$$

تأثير هول Hall's Effect:

عندما يمر تيار كهربائي كثافته J_x في سلك باتجاه محورX تحت تاثير مجال مغناطيسي عمودي على هذا الاتجاه شدته B_z يتولد مجال كهربائي عمودي على كل من التيار الكهربائي والمجال المغناطيسي اي في اتجاه محور y تعرف هذه الظاهرة بتأثير هول ويمكن توضيحها بالشكل الاتي:



لفهم هذا التأثير نفترض اولا حاله ما قبل تطبيق المجال المغناطيسي في هذه الحاله يتدفق التيار الكهربائي في الاتجاه الموجب لمحورX وهذا يعني ان الكترونات التوصيل تتحرك بسرعه انجرافV في الاتجاه السالب لمحور X. عند تطبيق المجال المغناطيسي فان الالكترونات تقع في نفس الوقت تحت تأثير قوة لورنتز (Lorentz force) مقدارها $\vec{F} = -e(\vec{v} \times \vec{B})$ وتسبب هذه القوه انحناء لحركه الالكترونات في الاتجاه الاسفل كما هو مبين بالشكل أعلاه.

ومع مرور الوقت تتكدس الالكترونات على السطح الاسفل و تتولد نتيجة للاستقطاب شحنات موجبه مساويه على السطح العلوي. يولد تراكم الشحنات السالبة و الموجبة على السطحين السفلي والعلوي مجالا كهربائيا يسمى مجال هول.

لحساب مجال هول افترض ان قوة لورنتز التي تؤدي الى تراكم الشحنات في المكان الاول تكون في الاتجاه السالب لمحور y وتعطي بالعلاقة

$$F_L = ev_x B_z$$

اختفاء الإشارة السالبة (نتيجة الضرب الاتجاهي) من المعادلة السابقة يعني F_L تكون سالبة وذلك لان v_x تكون في الاتجاه السالب لمحور X كما موضح في الشكل السابق.

ينتج المجال المتكون من الشحنة الموجودة على السطح قوه تعاكس قوه لورنتز تستمر عمليه تراكم الشحنة حتى تساوي قوه هول (F_H) تماما مع قوة لورنتز و نحصل على حاله اتزان عند هذه الحالة تكون $F_L=F_H$ وبالتالي نحصل على،

$$-F_H=- e\, v_x\, B_z$$

نقسم على e

$$E_H= v_x\, B_z$$

ويسمى هذا المجال بمجال هول.

احيانا يكون من المفيد التعبير عن هذا المجال بكميات قابله للقياس ولذلك يتم التعبير عن السرعة Vx بدلاله كثافة التيار:

$$J_x = N(-e)v_x$$

وهذا يؤدي الى ان المجال:

$$E_H = \frac{-1}{Ne} J_x B_z$$

يتضح من المعادلة السابقة ان مجال هول يتناسب طرديا مع كل من كثافه التيار و شده المجال المغناطيسي و يعرف ثابت التناسب $\left(\frac{E_H)}{J_x B_z}\right)$ هذا بثابت هول ويرمز له عادة بالرمز R_H. وهكذا يكون ثابت هول على الصورة:

$$R_H = -\frac{1}{N\, e}$$

تعتبر النتيجة السابقة مهمه جدا من الناحية العلمية. وبما ان ثابت هول يتناسب عكسيا مع كثافه الالكترونات(N) فان هذا يعني اننا يمكننا تعيينN بواسطه قياس جهد هول عمليا وتعتبر هذه الطريقة هي الطريقة القياسي لتعيين تركيز الالكترونات في المادة. ومن الناحية العملية فان هذه التقنيه ذات اهميه عملية لأنه بخلاف N، فان الكميه الاخرى التي يعتمد عليها ثابت هول هي شحنه الالكترون (e−) وهي ثابت فيزيائي اساسي وقيمته معروفه بدقة.

من السمات الاخرى المفيدة لثابت هول والتي تعطي معلومات اضافية عن المادة هي ان اشاره الثابت تحدد نوع حاملات التيار حيث تدل الإشارة السالبة على حاملات التيار هي الالكترونات (كما في الفلزات) بينما

تدل الإشارة الموجبة على ان حاملات التيار هي الفجوات الموجبة (كما في اشباه المواصلات) حيث يمكن كتابه معامل ها للفجوات التي تركيزها P كمايلي:

$$R_H = \frac{1}{P\,e}$$

المعدن	ثابت هول	المعدن	ثابت هول
Na	−2.50	Au	−0.72
Li	-1.7×10^{-10}	Cd	+0.60
Cu	−0.55	Zn	+0.30
Ag	−0.84	Al	−0.30

$R_e = -\frac{1}{n_e e}$ n_e = تركيز الالكترونات

والأشارة السالبة نتيجة الشحنة السالبة للالكترون

$R_h = \frac{1}{n_h e}$ n_h = تركيز الفجوات

في هذه الحالة مقدار موجب بسبب شحنة الفجوة الموجبة
في المعادن لا توجد الفجوات فقط ولكن دائما توجد بعض الالكترونات، وبالتالي عندما تتداخل حزمتين معا فإن الالكترون توجد في الحزمة العليا بينما توجد الفجوات في السفلى. في هذه الحالة، يمكن كتابة ثابت هول لكل من الالكترونات والفجوات على الصورة،

$$R = -\frac{R_e\sigma_e^2 + R_h\sigma_h^2}{(R_e + R_h)^2}$$

حيث σ_e و σ_h هي التوصيلية الكهربائية للإلكترونات والفجوات على الترتيب

$$\sigma_e = \frac{n_e e^2 \tau_m}{m} \qquad \sigma_h = \frac{n_h e^2 \tau_m}{m}$$

أن إشارة ثابت هول تكون سالبة أو موجبة طبقا للمشاركة السائدة من الالكترونات أم من الفجوات.
وبفرض أن $n_e = n_h$ كما في حالة المعادن فان $R_e=R_h$.

المعادن، العوازل، اشباه الموصلات:

بصورة عامة **يعتمد تحديد خواص المادة الصلبة** ذات تركيب معين اهو موصل ام شبه موصل ام عازل **على معرفة عدد الالكترونات الحرة لكل خلية أولية.** اذ من هذا العدد يمكن الاستدلال على نطاق الطاقة اهو مملوء تماماً ام فارغ تماماً ام مملوء جزئياً. وعلى هذا الأساس يمكن تحديد هوية المواد الصلبة في الطبيعة كالاتي:

اولاً: يكون الصلب موصل دائماً عندما يمتلك الكتروناً حراً واحداً لكل خلية أولية مثل المعادن الأحادية التكافؤ **كالمعادن القلوية مثل Li, Na, K, Cs, Rb والمعادن الكريمة مثل Ag, Au, Cu** ففي حالة النحاس يكون نصف نطاق التكافؤ (النطاق 4s) مملوءاً لان كل خلية أولية في تركيبه fcc تُسهم بالكترون واحد فقط. أي ان كل صلب من المعادن القلوية والكريمة يمتلك نطاق تكافؤ نصف مملوء (او منطقة برليون نصف مملوءة).

ثانياً: يكون الصلب دائما موصلاً عندما يمتلك عدداً فردياً من الالكترونات الحرة لكل خلية أولية. ففي كل من Al, Ga, In, Tl توجد ثلاث الكترونات حرة في كل ذرة تستطيع ان تملئ تماماً نطاقاً واحداً فضلا عن ملئها للنطاق التالي الى حد النصف لذلك تُعد عناصر موصلة.

اما **العناصر Bi, Sb, As** التي تتبلور بتركيب ذي ذرتين لكل خلية أولية وان كل ذرة تمتلك خمسة الكترونات حرة **فلا تُعد معادن بل شبه معادن** لان العشرة الالكترونات التي تضمها الخلية الأولية تملا خمسة انطقة ولكن النطاق الخامس يكون في الغالب غير مملوء تماما.

ثالثاً: ان امتلاك صلب لعدد زوجي من الالكترونات الحرة لكل خلية أولية لا يعني انه مادة عازلة بل قد تكون مادة موصلة. ويتوقف ذلك على كون الانطقة متفاوتة او متراكبة. فمثلاً فلزات او معادن الاتربة القلوية كالعناصر Ca, Sr, Ba, Ra الثنائية التكافؤ يمتلك كل منها الكترون لكل خلية أولية لذلك يجب ان يكون كل منها مادة عازلة وبسبب تراكب الانطقة تتصرف هذه العناصر كانها معادن ولكنها ليست معادن جيدة جداً.

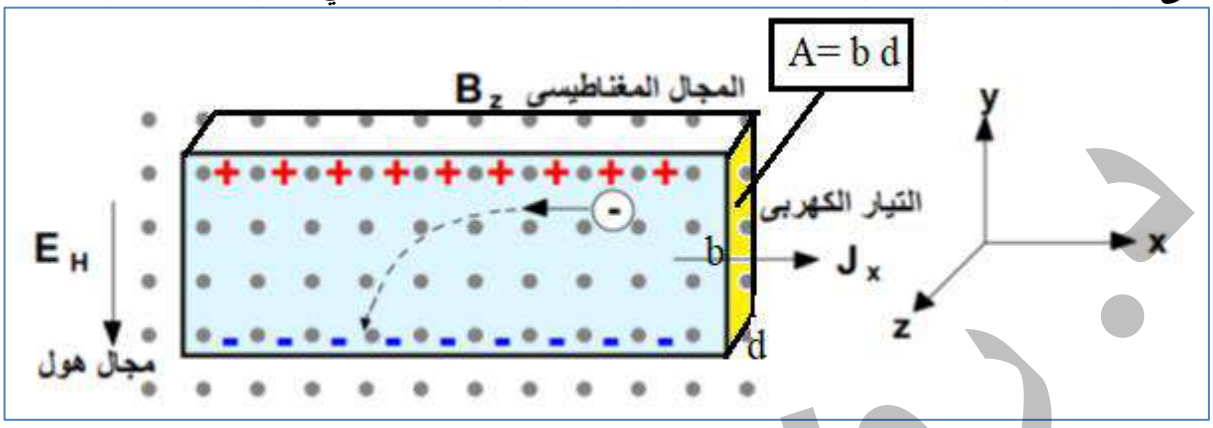
رابعاً: تكون العناصر الرباعية التكافؤ موصلات او شبه موصلات او عوازل. فمثلا يتبلور كل من الماس والسيليكون والجرمانيوم بتركيب ذي ذرتين لكل خلية أولية وكل ذرة تمتلك أربعة الكترونات تكافؤ أي تضم الخلية الأولية ثمانية الكترونات تكافؤ. ويكون الماس النقي والسيليكون والجرمانيوم مادة عازلة عند 0K . بينما يُعد السيليكون والجرمانيوم مادة شبه موصلة عند درجة حرارة الغرفة. كما ان الماس ينتقل للحالة المعدنية تحت ضغط عالي حوالي 1.5 ميكابار. اما عنصر القصدير Sn فيكون موصل في طور وشبه موصل في طور اخر حيث ان التركيب البلوري يغير شكل منطقة برليون الأولى ومن ثم تغير فسحة الطاقة.

خامساً: اما العناصر الانتقالية او التحويلية ومنها عناصر زمرة الحديد مثل Ni, Co, Fe, Mn, Cr فتتميز بقشرتها الداخلية 3d الناقصة (غير المملوءة تماماً) ففي ذرة الحديد حيث تتوزع الالكترونات كالاتي: $Fe: [1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^6\ ]\ 4s^2$

تكون ستة حالات الكترونية مشغولة فقط من اصل عشر حالات ممكنة للقشرة 3d على الرغم من قيام الكترونين أخريين باشغال القشرة الخارجية 4s . ولذلك يعاني النطاق d تقاطعا وتهجينا مع النطاق s وان أي منها لا يكون مملوءاً تماما ولذلك تعد عناصر زمرة الحديد في حالتها الصلبة موصلات. وبصورة عامة تتراكب الانطقة 4s, 4p, 3d في زمرة الحديد حيث يكون عدد الالكترونات المتوفرة غير كاف لملء هذه الانطقة.

اما في معادن الاتربة النادرة مثل Ce, Pr, Nd, Sm, Eu فتكون قشرتها الداخلية 4f مملوءة جزئياً ولذلك يمكن ان يحدث تراكب يشمل الانطقة 6p, 6s, 5d, 4f وبموجب ذلك تعد الاتربة النادرة في حالتها الصلبة موصلات مثل بلورات زمرة الحديد.

مثال(تاثير هول): شريط من النحاس عرضه b=1 cm وسمكه d=0.1 cm يمر خلاله تيار كهربائي شدته 20 Amp كما في الشكل. عند تسليط مجال مغناطيسي منتظم كثافة فيضه 1.2 Tesla بصورة عمودية على سطحه ظهر فرق جهد مقداره 18 μv بين نقطتين متقابلتين واقعتين على عرض الشريط. جد سرعة انسياب الالكترونات؟ واوجد عددها في المتر المكعب الواحد؟



$$E_H = E_y = v_x B_z = \frac{V}{b}$$

$$v_x * (1.2) = \frac{18*10^{-6}}{1*10^{-2}}$$

$$v_x = \frac{18*10^{-4}}{(1.2)} = 1.5 * 10^{-3}\ m/s$$ **= سرعة انسياب الالكترونات**

$$J_x = \frac{I}{A} = \frac{20}{1 * 10^{-2} * 0.1 * 10^{-2}} = 20 * 10^5\ A$$

$$E_H = \frac{-1}{Ne} J_x B_z$$

$$\frac{E_H}{J_x B_z} = \frac{1}{Ne}$$

$$E_H = \frac{V}{b} = \frac{18 * 10^{-6}}{1 * 10^{-2}} = 18 * 10^{-4}\ \frac{V}{m}$$

$$\frac{18 * 10^{-4}}{20 * 10^5 * 1.2} = \frac{1}{N * 1.6 * 10^{-19}}$$

$$N = \frac{20 * 10^5 * 1.2}{18 * 10^{-4} * 1.6 * 10^{-19}}$$

$$N = 8.3 * 10^{27} = 0.83 * 10^{28}\ \ \text{electron/m}^3$$

وتساوي عدد الالكترونات في المتر المكعب الواحد

د. رضا حزام رسن

الفصل السابع: العيوب البلورية

العيوب النقطية – الثغرات – عيوب شوتكي – عيوب فرنكل – العيوب الخطية – الانخلاعات – الانخلاع الحافي – الانخلاع البرمي – العيوب السطحية – العيوب الحجمية

العيب البوري: هو اختلال في اســـتمرارية ترتيب الذرات المنتظم في الشـــبيكة. أي انه عدم الانتظام في البنية البلورة. وتتكون العيوب البلورية في اثناء عملية النمو البلوري. تخليص البلورات كلياً من الشـوائب والعيوب أمراً مستحيلاً اما تقليلها اصبح ممكناً.

ان للعيوب البلورية تأثير كبير على تغيير الخواص الفيزيائية كالتوصـيل الكهربائي والتوصـيل الحراري وأيضا تأثير كبير على تغيير الخواص البصرية والميكانيكية للمواد الصلبة.

الا ان فوائد العيوب الكثير في مجالات عديدة جعلت العلماء يتجهون لخلق العيوب في المواد الصـــلبة. حيث وجد العلماء ان تغيير الخواص الفيزيائية (كهربائية، ميكانيكي، بصـــري، حراري) نحو الأحســـن وحسب الحالة واشهرها تطعيم المواد شبه الموصلة حسب المواصفات المطلوبة مثل إضافة Mg لبلورة فلوريد الليثيوم LiF لتستخدم كمجس للأشعاع (بلورة قياس جرعات التألق الحراري LiF/Mg).

أهم أنواع العيوب هي:

1- العيوب النقطية (العيوب ذات البعد الصفري)
الفراغات (عيوب شوتكي ، عيوب فرنكل) ، الذرات الاضافية
2- العيوب الخطية (الانخلاعات)(عيوب أحادية البعد)
- الانخلاع الحافي - الانخلاع البرمي
3- العيوب السطحية (عيوب ثنائية البعد)
- حدود الحبيباب - خطأ التراص - التوائم
4- العيوب الحجمية (الحقلية) (عيوب ثلاثية الأبعاد)

ان التحكم في كثير من الخواص المهمة للبلورات يعتمد على طبيعة تركيب البورة ومنها:

1. التحكم بالتوصيلية الكهربائي للمواد شبه الموصلة تنسب الى نسبة الشوائب.
2. التحكم بالمقاومة الميكانيكية: تتحدد بوســـاطة العيوب في تركيبها بالنســـبة للبلورات مثال (الحديد رخواً في حالته النقية ولكن خلطه بالكاربون ومعادن اخرى تزداد مقاومته الميكانيكية).
3. تعجيل انتشار ذرات في بلورة بواسطة شوائب او عيوب بلورية.
4. انخفاض او ارتفاع درجة حرارة انصهار البلورة يعتمد على وجود عيوب.
5. التألق او الضيائية يرتبط مع وجود الشوائب.
6. الألوان التي تُرى بها كثير من البلورات تنشأ عادة من عيوبها التركيبية.

العيوب النقطية:

العيوب النقطية هي انحراف أو اختلال في موقع ذرة او مواقع عدد قليل من الذرات المجاورة. وهي اما ان تكون :

1- **فراغات (الفجوات) او (ثغرات)**
2- **ذرات اضافية:**

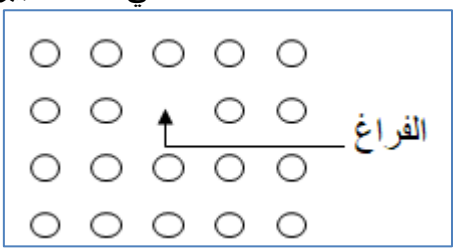
الذرة الإضافية الأستبدالية
الذرة الاضافية البينيه (الذرة الاضافية الخلالية): وهي نوعين:
ذرة إضافية بينية ذاتية
ذرة إضافية بينية شائبة (شوائب بينية)

3- **عيوب شوتكي**
4- **عيوب فرنكل**

تكون العيوب النقطية مألوفة في بلورات المعادن والبلورات الايونية والتســـاهمية ولكن غير مألوفة في البلورات الجزيئية وتأثير هذه العيوب يكون في اللون والضيائية والتوصيلية الكهربائية.

س) لماذا سمي العيب النقطي بهذا الاسم؟

ج) لانه يحدث في منطقة صغيرة جداً بالنسبة لحجم البلورة، ولهذا تُعد هذه المنطقة كنقطة في فضاء كبير



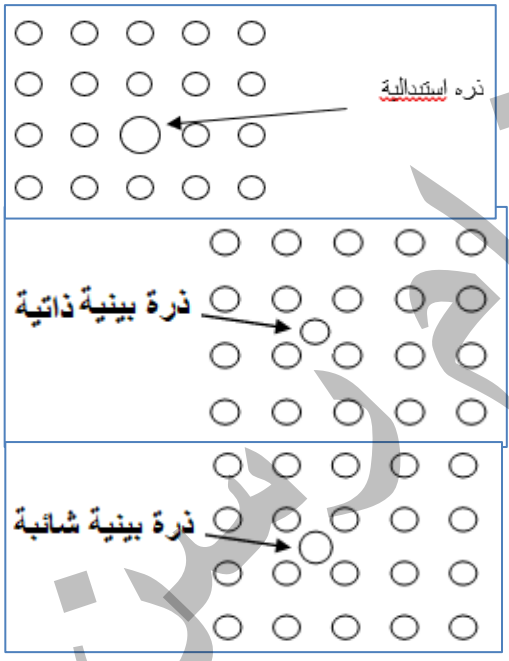
الفراغ (الثغرة): وهو عبارة عن حيز الذرة المفقودة ضـــمن الترتيب المنتظم للشبيكة ويحدث نتيجة عيب في الرص الذري اثنـاء عمليـة الانمـاء البلوري جراء التذبذب الحراري حول مواقعها في الشـــبيكة عند درجات الحرارة العالية. ونقصـــد بالثغرة هو فراغاً شبيكياً او فجوة في النسق البلوري.

س) في المعادن ، كما هو الحال في المواد الصـلبة الأخرى ، يتم إنشـاء الفراغ (الثغرة) عن طريق الإثارة الحرارية ، بشـرط أن تكون درجة الحرارة مرتفعة بما فيه الكفاية، علل ؟

ج) لأنه مع اهتزاز الذرات حول مواقعها العادية، يكتسـب البعض من الذرات طاقة كافية لمغادرة الموقع تمامًا.

س) عندما تغادر الذرة العادية، تكون المنطقة المحيطة بالفراغ مشـوهة أي سـيتم توليد اضـطرابا في تركيب البلورة، علل؟

ج) بسبب استرخاء الشبيكة، كما كانت، من أجل ملء الفراغ الذي تركته الذرة جزئيًا. هذا يساهم كذلك في عدم انتظام الشبيكة في الجوار المباشر للفراغ (الثغرة).



الذرات الإضـــافية: وهو وجود ذرة اضـــافية داخل البنية البورية ويطلق عليها بالشوائب وتكون على نوعين:

1- الأستبدالية. 2- البينية.

الذرة الإضافية الأستبدالية: اذا احتلت الذرة الإضـافية موقع الذرة الاصلية .

الذرة الاضـــافية البينيه (الذرة الاضـــافية الخلالية): اذا احتلت الذرة الإضـافية موقع ما بين الذرات الأصلية ولربما تكون من نفس النوع او ذرة شائبة.

حيث ان الذرات البينية تكون على نوعين:

ذرة إضـافية بينية ذاتية: حيث تكون الذرة البينية من نفس نوع ذرات الشـــبيكة ويتم ذلك بإزاحة الذرة الاصـــلية من موقعها الى موقع بيني.

ذرة إضـافية بينية شـائبة (شـوائب بينية): الذرات البينية تكون من نوع اخر يختلف عن الـذرات الاصـــلية للبنيـة البلورية.

س) الذرات الصـــغيرة فقط يمكن أن توجد بأعداد كبيرة كشوائب بينية، علل؟

ج) : لأن المساحة بين ذرات المادة الاصلية (المضيف) (host atoms) صغيرة ، خاصـة في المعادن ، حيث تكون الذرات معبأة بإحكام.

س) كيف يتم إضافة الشوائب للبنية البلورية؟

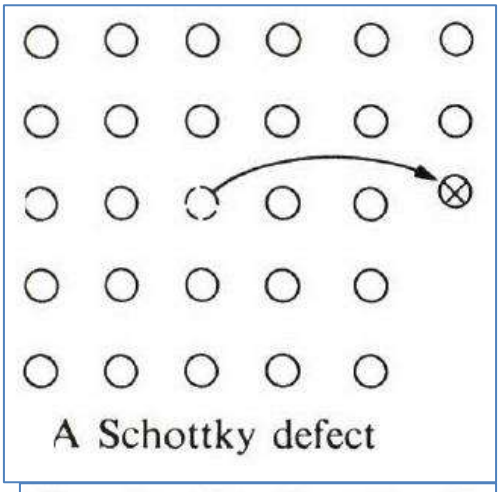
ج) يتم إضافة الشوائب الى البنية البلورية بعدة طرق أهمها:

1- طريقة النمو البلوري. 2- طريقة الانتشار. 3- طريقة الغرس الايوني.

س) في المواد الصلبة ذات الرص المحكم من الصعب جداً ان تحتوي بنيتها على ذرات بينية؟

ج) وذلك لصغر الحيز بين الذرات حيث لا يمكن ان يستوعب ذرة إضافية مثل النحاس والخارصين.

اما في الرص غير المحكم يمكن للذرة الشائبة ان تحتل مكان بينياً خاصة اذا كان حجمها صغير جدا أي بنصف قطر A 0.8 .

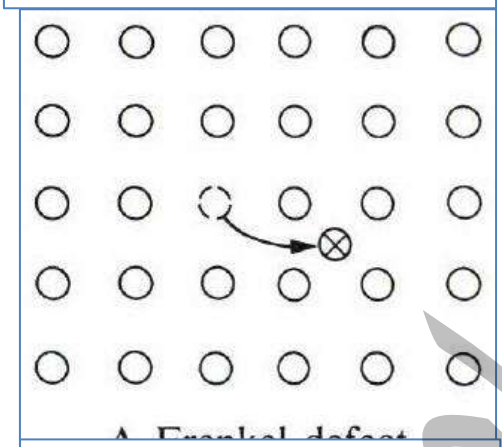


عيب شوتكي: اذا كانت الذرة او الذرات المزالة او المهاجرة عن موقعها الشبيكي النظامي بمراحل متعاقبة وتستقر في آخر الامر عند سطح البلورة.

❖ **أي ان عيب شوتكي يعني حدوث فراغات (ثغرات) في البلورة من دون وجود ذرات إضافية ذاتية تقابل تلك الثغرات.**

❖ فعيب شوتكي هو فقدان احدى الذرات من موقعها الأصلي الى خارج البلورة (أي الى سطح البلورة) تاركة وراءها حيزاً من الفراغ.

❖ يحدث عيب شوتكي في البلورات الايونية مثل كلوريد الصوديوم.



عيب فرنكل: اذا كانت الذرة او الذرات المزالة عن موقعها الشبيكي النظامي تُقحم الى مواضع بينية.

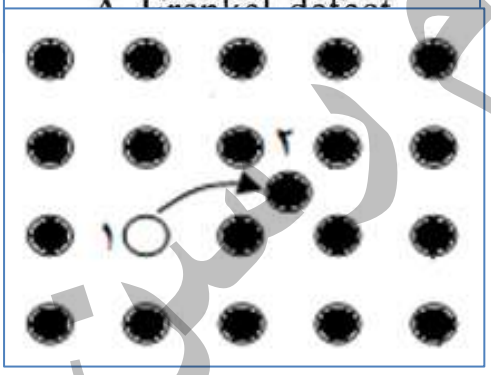
أي إزالة ذرة من مكانها في الشبيكة البورية واقحامها في موقع بيني (موقع لا يشغل بواسطة الذرات).

عيب فرنكل يتضمن زوجاً:

خلق فجوة او ثغرة + ذرة إضافية (ذرة بينية ذاتية)

تسحب الذرة من الموقع (1) وتوضع بالموقع (2)" يبقى الموقع (1) فارغاً وتوضع الذرة في الموقع (2) .

❖ أي ان عيب فرنكل ناشئ عن ثغرة وذرة بينية".



س) **عيب فرنكل يحتاج الى مقدار من طاقة اكبر مما يحتاجه عيب شوتكي، علل؟**

ج) بسبب الطاقة المرنة الإضافية اللازمة لادخال الذرة المزاحة بين ذرات الشبيكة الاخرى في وضع بيني (خلالي)، حيث يتطلب عيب فرنكل كمية كبيرة من الطاقة، ولهذا السبب لا يوجد عادة في المعادن إلا في ظل ظروف خاصة.

س) ناقش بإيجاز أسباب عدم وجود عيب فرنكل عادة في المعادن إلا في ظروف خاصة؟

ج) بسبب الطاقة المرنة الإضافية اللازمة لادخال الذرة المزاحة بين ذرات الشبيكة الاخرى في وضع بيني (خلالي)، حيث يتطلب عيب فرنكل كمية كبيرة من الطاقة، ولهذا السبب لا يوجد عادة في المعادن إلا في ظل ظروف خاصة.

س). لماذا توجد الفراغات (الثغرات) عادة فقط بالقرب من الأسطح الحرة وحدود الحبوب والانخلاعات، وليس داخل البلورة المثالية؟

لأنه فقط على الأسطح أو الحدود أو الانخلاعات يمكن إنشاؤها بدون تشكيل ما يصاحب ذلك من تشكيلات بينية. وبعبارة أخرى، فإن هذه العيوب الممتدة تعمل كمصادر للفراغات.

حساب عدد ثغرات شوتكي المُسبب عن التهيج الحراري:

لاجل حساب عدد ثغرات شوتكي المسببة عن التهيج الحراري. افرض بلورة في حالة اتزان حراري عند درجة حرارة T وان كل ذرة تهتز جيئة وذهاب حول موضـــع اتزانها وعندئذ يكون معدل طاقتها $3k_BT$

عند درجة حرارة الغرفة 300^oK $(27°C)$.

الطاقة $3K_BT$ تكون حوالي $0.78\ eV$ عند درجة حرارة الغرفة 300^oK $(27°C)$ وهي اقل بكثير من الطاقة اللازمة لتكوين ثغرة E التي تكون بحدود واحد $1eV$. وهذا يقودنا الى الاعتقاد بعدم وجود احتمالية لنشؤ ثغرات في بلورة عند درجة حرارة الغرفة.

بموجب الميكانيك الإحصـــائي: حيث ان عامل بولتزمان للإتزان الحراري هو (e^{-E/K_BT}) ســيتناقص بانحدار شديد كلما تزداد E ويعني هنالك احتمالية ضعيفة جداً للذرة لان تمتلك طاقة عالية ولكن تزداد هذه الإحتمالية كلما ارتفعت T.

- افرض ان N هو للعدد الكلي للذرات في بلورة لكل وحدة حجم
- E تمثل الطاقة اللازمة لتوليد ثغرة.
- وان الثغرات لكل وحدة حجم n اي التركيز المتزن للثغرات
- ولهذه $(N\text{-}n)$ يمثل العدد الكلي من الذرات في البلورة بعد طرح الثغرات.

وبهذا يمكن كتابة معادلة تتضمن معامل بولتزمان و (E) (الطاقة اللازمة لتكوين ثغرة)

$n = (N-n)e^{-E/K_BT}$ عندما $n << N$

$$\therefore \boldsymbol{n = Ne^{-E/K_BT}}$$

مثال: افرض لديك بلورة عدد ذراتها $(N = 10^{29})$ ذرة \ m^3 عند درجة حرارة الغرفة 300^oK $(27°C)$ وطاقة التكوين لثغرة شوتكي هي$(E = 1eV)$ فأحسب عدد الثغرات n.

$$\boldsymbol{n = Ne^{-E/K_BT}}$$

$$\boldsymbol{n = 10^{29}e^{-1\times1.6\times10^{-19}/1.38\times10^{-23}\times300}}$$

$$\boldsymbol{n = 10^{29}e^{1.6\times10^{2}/4.14} \approx 10^{12}}$$ ثغرة $/m^3$

$$\boldsymbol{\frac{n}{N} = \frac{10^{12}}{10^{29}} = 10^{-17}}$$ عند 300^oK

- عدد الثغرات النسبي يكون صغير لأن $K_BT << E$.
- اما عندما ترتفع درجة الحرارة الى 900^oK وعندئذ يرتفع عدد الثغرات الى ما يقارب الى 10^{23} ثغرة $/m^3$ وستكون النسبة تقريباً (التركيز $\frac{n}{N} \simeq 10^{-7}$) .

ارتفاع درجات الحرارة من 300 الى 900 كلفن ســيؤدي الى زيادة نســبية حادة وكبيرة جدا في عدد الثغرات تقدر بحوالي عشرة الاف مليون مرة 10^{10} .

ملاحظة: يمكن حساب طاقة تكوين الثغرة من المعادلة:

$n = N\, e^{-E/K_BT}$

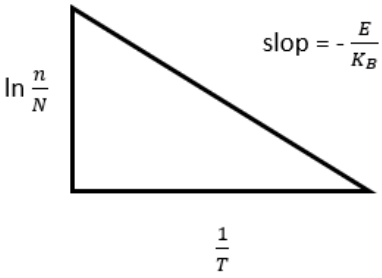
$(\frac{n}{N}) = e^{-E/K_BT}$

$ln\,(\frac{n}{N}) = -\frac{E}{K_BT} = (-\frac{E}{K_B})\frac{1}{T}$

$ln\,(\frac{n}{N}) = (-\frac{E}{K_B})\frac{1}{T}$

$y = -m\,x$

$slop = -\frac{E}{K_B}$



ومن تحديد قيمة الميل يمكن حساب E $E = -\text{slop} \times K_B$

تراكيز عيوب شوتكي في بلورة آيونية (ثنائية):

ان وجود الثغرات في البلورة يزيد من القصـــور الذاتي او الأنتروبي S للبلورة وبهذا تكون الطاقة الحرة للبلورة اصغر من تلك الطاقة لبلورة مثالية . ان هذا التغيير بالطاقة الحرة لهيلمهولتز ΔF مساوياً للتغيير في الطاقة الكلية للبلورة ΔU مطروحاً منه حاصل ضرب درجة حرارة البلورة مع تغيير الانتروبي.

$\Delta F = \Delta U - T\,\Delta S$ ………… 1

$S = K_B \ln P$ ………… 2

K_B ثابت بولتزمان & P احتمالية التوزيع (عدد الطرائق او الأســـاليب التي يمكن لذرات البلورة ان تستخدمها لترتيب نفسها داخل البلورة).

البلورات الآيونية تفضـــل تكوين تراكيز متكافئة من الثغرات الآيونية الموجبة والســـالبة (للمحافظة على التعادل الكهربائي الاستاتيكي).

$N \;=+n =- n$

وبهذا تكون الاحتمالية الكلية التي يمكن تكوين ازواج من الفراغات الموجبة والسالبة.

$P = \left[\frac{N\,!}{(N-n)!n!}\right]^2$ ………… 3

تعوض المعادلة (3) في (2) والناتج يعوض في المعادلة (1) نحصل على:

$\Delta F = n\,E_P \;- K_B T \ln\left[\frac{N!}{(N-n)!n!}\right]^2$ ………… 4

وبأستخدام التقريب:

$\ln(x!) \simeq x\ln x - x,$ for $x >> 1$

$\ln\left[\frac{N!}{(N-n)!n!}\right]^2 \cong 2\left[N\ln N - (N-n)\ln(N-n) - n\ln n\right]$…… 5

الان اذا افترضـــنا E_P تمثل الطاقة اللازمة لإزالة زوج من الايونات من باطن بلورة (طاقة التكوين لزوج من الثغرات). وبتعويض المعادلة (5) في المعادلة (4) نحصل على:

$\Delta F = nE_P - 2\,K_BT\,[N\ln N - (N-n)\ln(N-n) - n\ln n]$ ………… 6

عند حالة الاتزان الحراري يكون التغير في طاقة هيلمهولتز الحرة عند ادنى مستـوى لذلك تكون المشـتقة الأولى لهذا التغيرΔF بالنسـبة الى التغير في عدد ازواج الثقوب n عند درجة حرارة T مسـاوية صـفراً أي ان :

$\frac{\delta\,(\Delta F)}{\delta\,n} = 0 = E_P - 2\,K_BT\,[\ln(N-n)\ln n]$

$= E_P + 2K_BT\ln\left[\frac{n}{N-n}\right]$

$- E_P / 2\,K_BT = \ln\left[\frac{n}{N-n}\right]$

$\therefore n = (N-n)\,e^{-E_p/\,2K_BT}$ $n << N$

$n = Ne^{-E_P\,/\,2K_BT}$ ………… 7

عيوب فرنكل: تنشـأ من إزاحة ذرة او آيون من احد مواقع نقاط شـبيكة نظامية في باطن بلورة واحتلالها موقعاً في باطن تلك البلورة (ينشأ فراغ وذرة بينية) (زوج) اما حساب تركيزها في البلورة

$n = (NN^-)^{\frac{1}{2}}\,e^{-E_P\,/\,2K_BT}$

- افرض ان N هو العدد الكلي من الذرات في بلورة لكل وحدة حجم
- E_I تمثل الطاقة اللازمة لترحيل ذرة عن موضع نقطة شبيكة الى موضع بيني (خلالي).
- عدد الذرات البينية لكل وحدة حجم (n) التي تكون في حالة اتزان مع عدد مشابه من ثقوب الشبيكة.
- $\acute{N}$ يمثل العدد الكلي من الذرات في البلورة بعد طرح الثغرات.

$$\therefore n \cong (N\acute{N})^{\frac{1}{2}} e^{-E_I/2K_BT}$$

عيوب الشبيكة :

اذا امتد العيب او الاختلال ليشمل مساحات عديدة من البلورة فيسمى عندئذ بالعيب الشبيكي. وتنقسم عيوب الشبيكة الى ثلاثة أنواع:

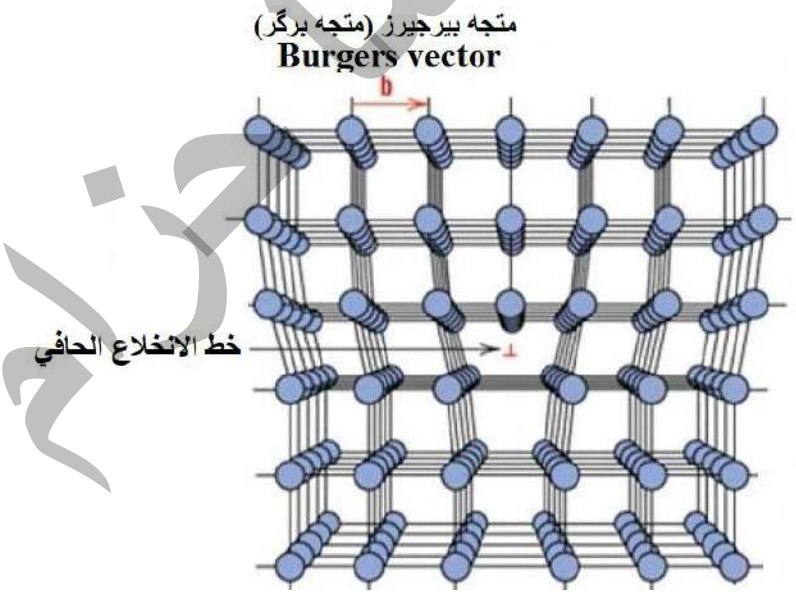
- العيوب الخطية (الانخلاعات) (عيوب أحادية البعد) وتشمل: الانخلاع الحافي & الانخلاع البرمي
- العيوب السطحية (عيوب ثنائية البعد) وتشمل: حدود الحبيباب & خطأ التراص & التوائم
- العيوب الحجمية (الحقلية) (عيوب ثلاثية الأبعاد)

العيوب الخطية:

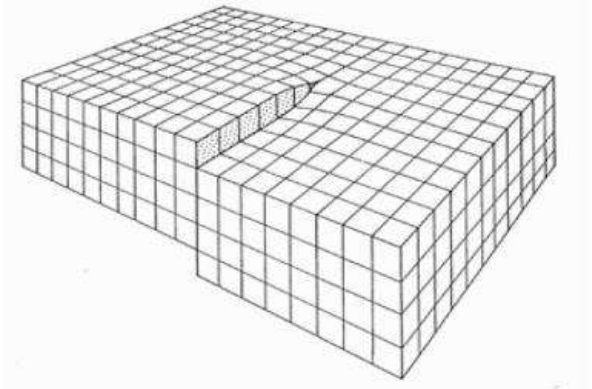
سمي العيب الخطي بهذا الاسم نظراً لأنه يكون على امتداد مسارات خطية. والعيوب الخطية تدعى بالانخلاعات Dislocations . والانخلاعات تؤثر بصورة كبيرة على الخواص الميكانيكية للمادة الصلبة حيث تضعف مقاومة المادة تحت تاثير الاجهاد كثيراً.

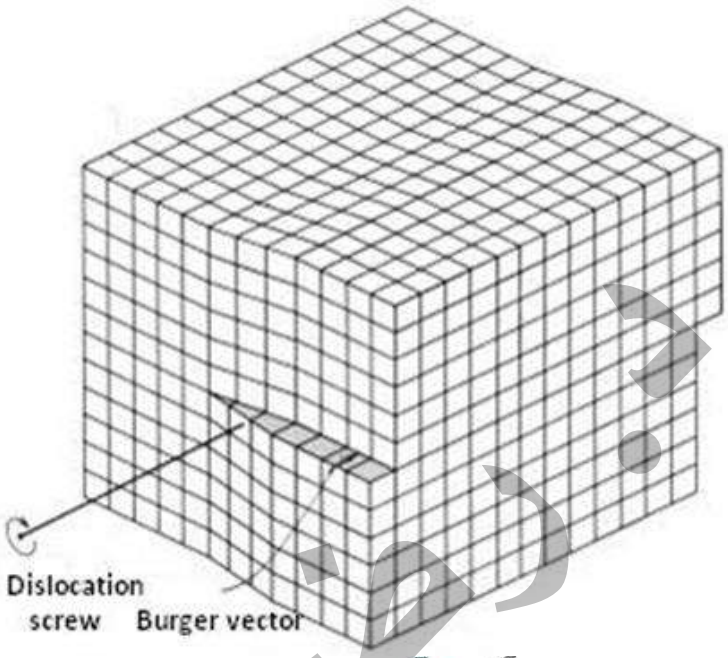
وتقسم الى نوعين:

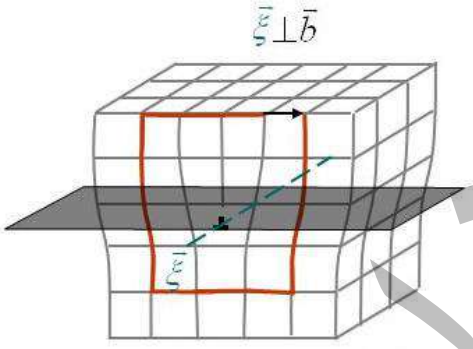
الانخلاع الحافي: Edge Dislocation (انخلاع تايلور – اوروان): وهو صف من الذرات يميز حدود حافة جزء من المستوى الذي امتد الى خارج البلورة ويرمز له عادة بمتجه بيرجيرز (متجه برگر) (وهو متجه يشكل زاوية قائمة مع خط الانخلاع في الانخلاع الحافي).



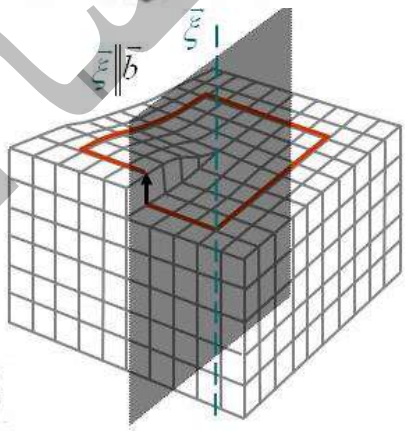
الانخلاع اللولبي (البرمي): وهو صف من الذرات للمستوى البلوري حول مسار لولبي ويكون متجه بيرجيرز (متجه برگر) موازي لخط الانخلاع زاوية صفر.







الانخلاع الحافي
Edge Dislocation



الانخلاع اللولبي
Screw Dislocation

Burger's Vector $\bar{b}$
متجه بيرجيرز $\bar{b}$

Dislocation Line $\bar{\xi}$
خط الانخلاع $\bar{\xi}$

Edge
Slip direction $\parallel \bar{b}$
$\bar{\xi} \perp \bar{b}$
Applied Shear stress $\parallel \bar{b}$

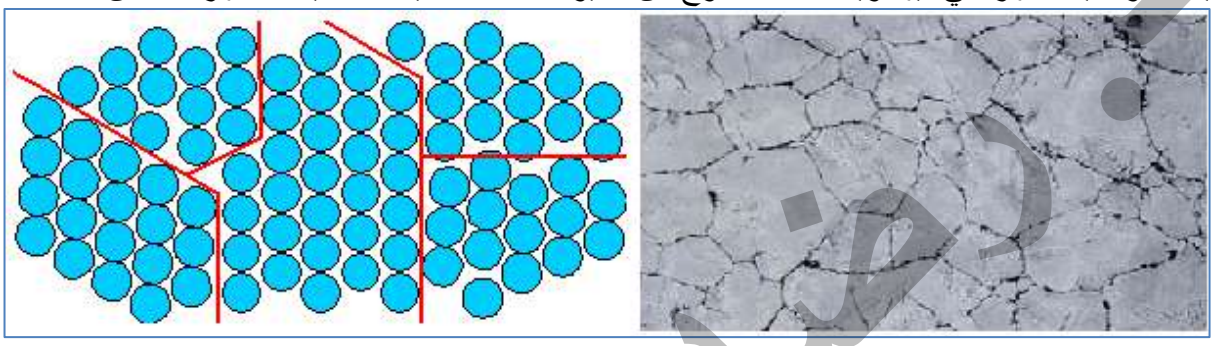
Screw
Slip direction $\parallel \bar{b}$
$\bar{\xi} \parallel \bar{b}$
Applied Shear stress $\parallel \bar{b}$

العيوب السطحية: سمي العيب السطحي بهذا الاسم لانه ينشأ من تجمع العديد من العيوب الخطية مكونة سطح من العيوب مثل حدود الحبيباب وخطأ التراص والتوائم.

حدود الحبيبات:

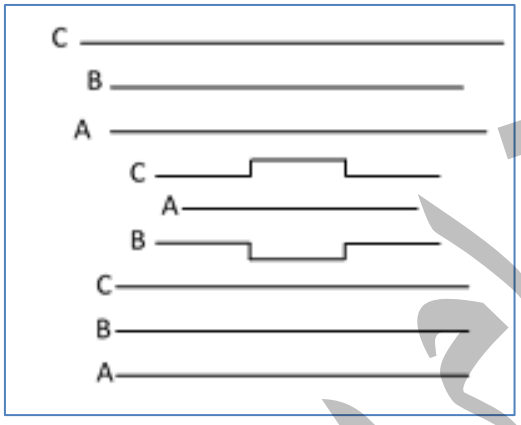
أن بعض المواد الصلبة لا تتكون بنيتها البلورية من بلورة واحدة بل من العديد من البلورات الصغيرة الحجم والتي يطلق عليها بالحبيبات وان كل حبيبة داخل بنية المادة الصلبة تختلف في اتجاها وحجمها وشكلها وبعدها عن جارتها وبالتالي لا بد أن يفصلها عن بعضها حدود فاصلة يطلق عليها بحدود الحبيبات.

تعمل حدود الحبيبات على إعاقة حركة الالكترونات الحرة وينتج بذلك مقاومة إضافية للمواد الفلزية حيث يقل التوصيل الكهربائي فيها ويحدث هذا النوع من العيوب خلال عمليات تصليد منصهر المعادن.



خلل التراص:

هي عيوب السطح التي تنشأ من تغيير في تراص الذرات في المستوى أو عبر الحدود، عندما ينتج ترتيب ABABC بدل من الترتيب ABCABC فإننا نقول أنه حدث خطاء في الرص.



أي ان خلل التراص يعني اختلال في تعاقب المستويات أي هو نتيجة لعدم استمرارية تعاقب المستويات بسبب خلل في ترتيب الذرات ذات النوع الواحد او اكثر من نوع.

التوائم: Twin:

يعتبر تشوه لدن يحدث نتيجة ازاحة صغيرة بين المستويات المتجاورة وتتم اثناء الانماء البلوري او التشوه الميكانيكي كالضغط وعند صهر المادة وانماء بلورة منها.

تعد التوائم من العيوب السطحية الشائعة والتي تحدث نتيجة لعدم استمرارية دورية الشبيكة وتعد عملية تكوين التوائم نمطا من أنماط التشويهات اللدنة وخلال عملية تكون البلورات التؤامية تحدث ازاحة صغيرة بين المستويات العديدة المجاورة. وان الجزء المشوه من البلورة له تماثلا مرآتي مع الجزء غير المشوه.

يتم حدوث التوأمة بالطرق التالية:

1- بطريقة النمو البلوري وتدعى بالتوائم النامية
2- يتم بطريقة التشوه الميكانيكي كالطرق او الضغط وتسمى بالتوائم المشوهة.

العيوب الحجمية: العيوب الحجمية مثل التشققات تنشأ في البلورات عندما يكون هناك اختلاف صغير بين الالكتروستاتيك للذر ت محكمة الرص في المعادن • .كما يعتبر وجود اماكن كبيرة شاغرة أو مساحة الفراغ، عندما تفقد مجموعة من الذرات باعتبارها النقص الحجم . والعيوب الحجمية تمتد خلال حجوم صغيرة في بلورة.

س) ما المقصود في العيوب السطحية وايهما اكثر حدوثا في البلورات؟

ج) سمي العيب السطحي بهذا الاسم لانه ينشأ من تجمع العديد من العيوب الخطية مكونة سطح من العيوب مثل حدود الحبيباب وخطأ التراص والتوائم. التوائم من العيوب السطحية الشائعة.

س) عرف كل مما يأتي: متجه برگر، الانخلاعات، العيوب الحجميه، الفراغ، الذرات الإضافية، العيب النقطي. العيب السطحي ، الانخلاع الحافي.

د. رضا حزام رسن

H.W.

س) اذا كانت الطاقة اللازمة لتكوين عيب شـــوتكي تســـاوي 2eV فبرهن على ان الكثافة النســـبية للفراغات بالنسبة للذرات سوف تكون دائما اقل من 10^{-10} عند درجة الغرفة.

س) احســـب عدد الثغرات (لكل ذرة) في اتزان حراري لبلورة عند درجة حرارة الغرفة 300k على أساس ان الطاقة اللازمة لتكوين ثغرة شوتكي تساوي الكترون فولت واحد.

س) طاقة 2 eV تحتاج لخلق عيب فرنكل في بلورة لها ذرة واحدة في الأســاس البدائي وثمانية مواقع خلالية في خلية الوحدة البدائية اوجد في حالة الاتزان عدد عيوب فرنكل لوحدة الخلية في درجة 1000°k و 300°k و 100°k

س) في الحديد اذا كان مقدار الطاقة المصـــاحبة لتوليد فراغ هو 1.05 eV . عند أي درجة حرارة سليلوزية (مئوية) سوف يتكون فراغ واحد لكل 10^5 ذرة.

==========

فيزياء الجوامد / سعود اللحياني

مثال: طاقة تكوين الفراغ في معظم البلورات تســـاوي بالتقريب واحد إلكترون فولت. احســـب تركيز الفراغات في بلورة نحاس عند درجة حرارة الغرفة وعند درجة حرارة 600 درجة مطلقة.

الحل/

$$n = Ne^{-E/K_BT}$$

$$\frac{n}{N} = e^{-E/K_BT} = e^{\frac{-1\times1.6\times10^{-19}}{1.38\times10^{-23}\times300}} = e^{\frac{-1\times1.6\times10^{-19}}{4.14\times10^{-21}}}$$

$$\approx 1.64 * 10^{-17} \quad at \quad 300\,K$$

$$\frac{n}{N} = e^{-E/K_BT} = e^{-1\times1.6\times10^{-19}/1.38\times10^{-23}\times600} \approx 4 * 10^{-9} \quad at \quad 600\,K$$

من د. شـــذى : احســـب درجة حرارة النحاس التي يكون فيها عند الاتزان عدد الفراغات لكل متر مكعب $2.2*10^{20}$ vacancies/ m^3. طاقة تكوين الفراغ هي 0.7eV/atom والعدد الكلي للذرات هو $.2*10^{30}$ atom/ m^3

$$\frac{n}{N} = e^{-E/K_BT} \qquad \ln\left(\frac{n}{N}\right) = \frac{-E}{K_BT}$$

$$T = \frac{-E}{K_B \log\left(\frac{n}{N}\right)} \qquad T = \frac{-0.7}{1.38\times10^{-23} * \log\left(\frac{2.2*10^{20}}{2*10^{30}}\right)} =$$

أ) 3541.4K ب) 300K

ج) 354.14K د) $2.82*10^{-3}$K

س) في الحديد اذا كان مقدار الطاقة المصـــاحبة لتوليد فراغ هو 1.05 eV . عند أي درجة حرارة سليلوزية (مئوية) سوف يتكون فراغ واحد لكل 10^5 ذرة.

$$n = Ne^{-E/K_BT}$$

$$\frac{n}{N} = e^{-E/K_BT}$$

$$\frac{1}{10^5} = e^{-E/K_BT} = e^{-1.05\times1.6\times10^{-19}/1.38\times10^{-23}\times T} = 10^{-5}$$

$$-1.05\times1.6\times10^{-19}/1.38\times10^{-23}\times T = ln(10^{-5})$$

$$\frac{-1.05\times1.6\times10^{-19}}{1.38\times10^{-23}\times T} = ln(10^{-5})$$

$$\frac{-1.05\times1.6\times10^{-19}}{1.38\times10^{-23}\times ln(10^{-5})} = T$$

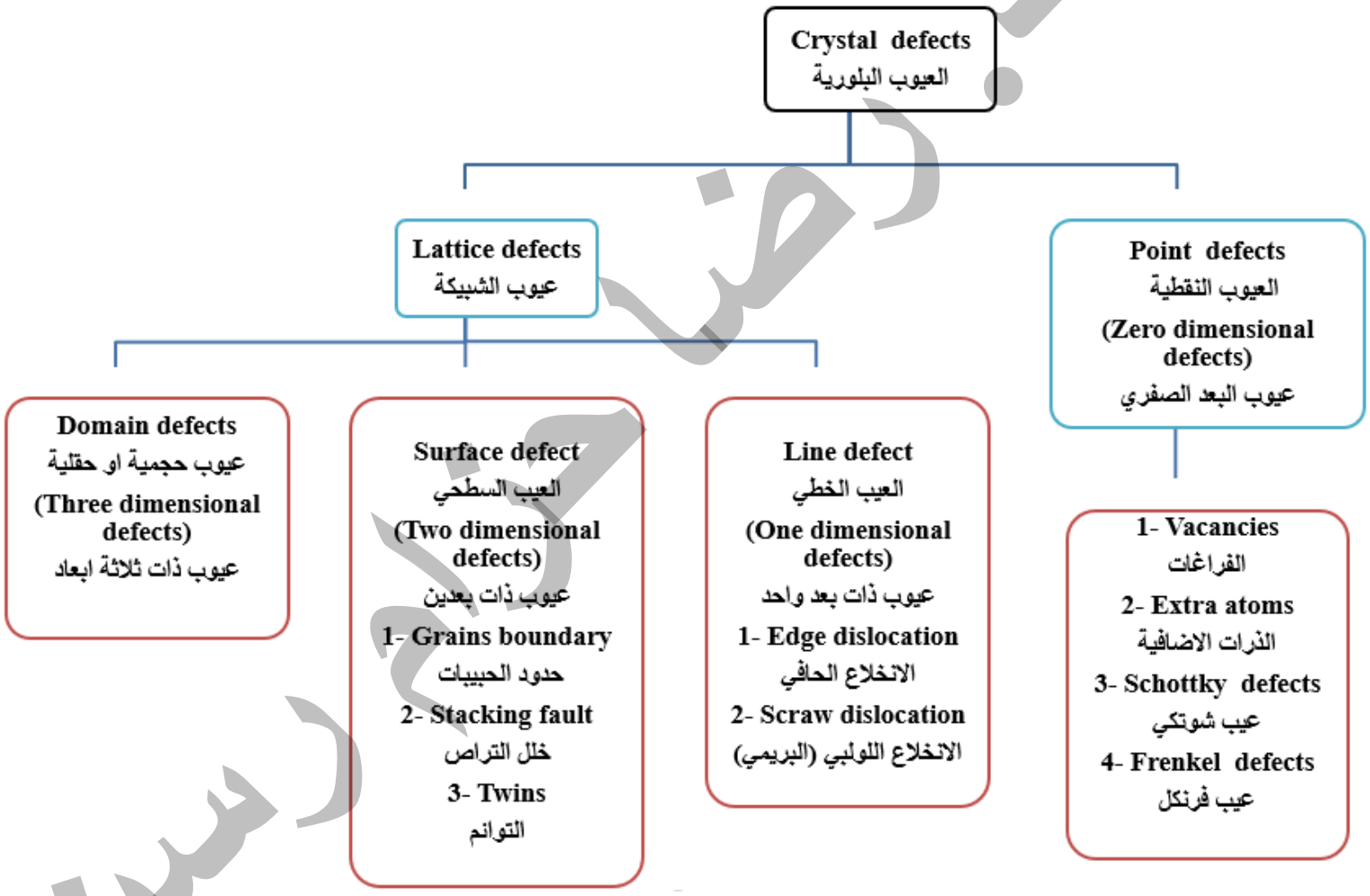
$$T = \frac{-1.68\times10^{-19}}{1.38\times10^{-23}\times(-11.51292546497)}$$

$$T = \frac{1.68\times10^{-19}}{15.887837\times10^{-23}} = 1057.4\ °K$$

$$T = 1057.4\ K - 273 = 784.4\ °C$$

$$T = -1057.4\ °K$$

د. رضا حزام رسن

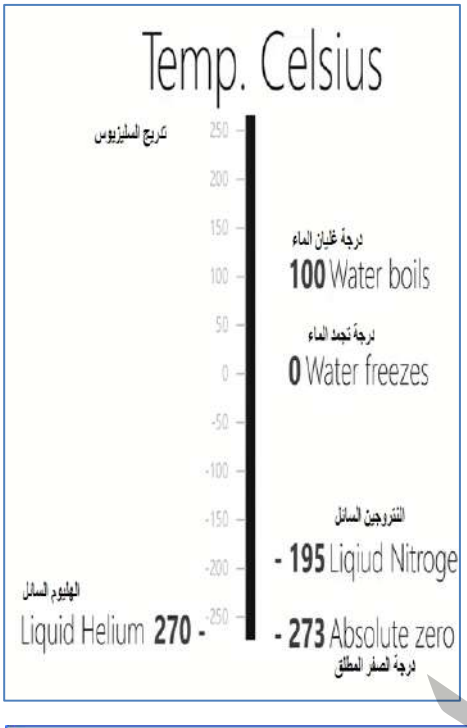


د. رضا حزام رسن

التوصيل المفرط (التوصيل الفائق)

مقدمة:

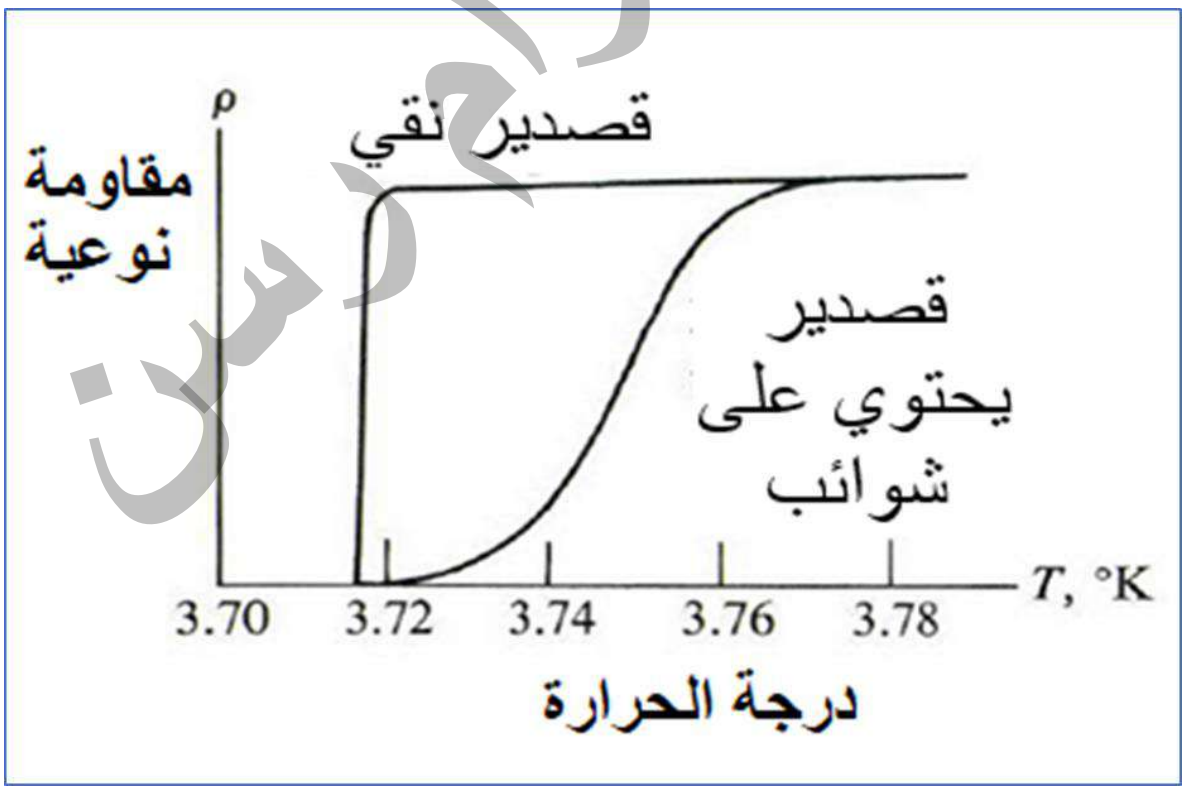
ان معظم العناصر المعدنية والمركبات والسبائك لها خاصية التوصيل المفرط عندما تنخفض درجة حرارتها لتقترب من الصفر المطلق. ان خواص المواد في حالة التوصيل المفرط (الفائق) تختلف كثيراً عن الحالة الاعتيادية بسبب التغير الحاصل في سلوك الكترونات التوصيل. ان المواد مفرطة التوصيل لها خاصية انعدام المقاومة النوعية وخاصية الدايا مغناطيسية المثالية.



درجة الحرارة الحرجة (T_C):

ان من اهم مزايا الموصل المفرط هو تلاشي المقاومة النوعية لتصبح قيمتها صفراً عند درجة حرارية معينة (T_C) تدعى (درجة الحرارة الحرجة) أي (درجة حرارة انتقالية) وهي تختلف من معدن الى آخر.

- عند زيادة درجة الحرارة الى درجة اعلى من T_C فإن المادة تعود الى طبيعتها الاعتيادية.
- ان عملية الانتقال من الحالة الاعتيادية الى حالة التوصيل المفرط لا تكون دائماً شديدة الانحدار ولكن تعتمد على نقاوة المعدن. كما في الشكل. (سائل النايتروجين 78 K و الهيليوم 3.4K)



ولقد وجد أن درجة الحرارة الحرجة تعتمد على العوامل التالية : -

1_ نقاوة المادة

2 الضغط المسلط على المادة

3_ سمك المادة

4 الشحنة الكهروستاتيكية على المادة

إن درجة الحرارة الحرجة للمادة تعتمد على الضـــغط المســـلط عليها . فلقد وجد أن زيادة الضغط يحدث انخفاضاً في الدرجة الحرجة Tc. اما تأثير سمك المادة على الدرجة الحرجة ، فأنه كلما كانت المادة على هيئة غشاء رقيق نجد أن Tc تقل بشكل كبير عند مقارنتها بعينة من نفس المادة ذات ســـمك كبير ، bulk . إن لهذين العاملين دور كبير على تحويل بعض اشباه الموصلات من الحالة الاعتيادية الى حالة فائقة التوصيل .

<u>حالة فرط التوصيل (ظاهرة فرط التوصيل):</u> الهبوط المفاجئ الى قيمة الصفر تقريباً للمقاومة الكهربائية لمادة عند تبريدها الى درجة حرارة واطئة جداً عندما تصـــل الى درجة الحرارة الحرجة. والمواد التي تظهر فيها حالة فرط التوصيل تدعى (**المواد مفرطة التوصيل**).

<u>المجال الحرج:</u>

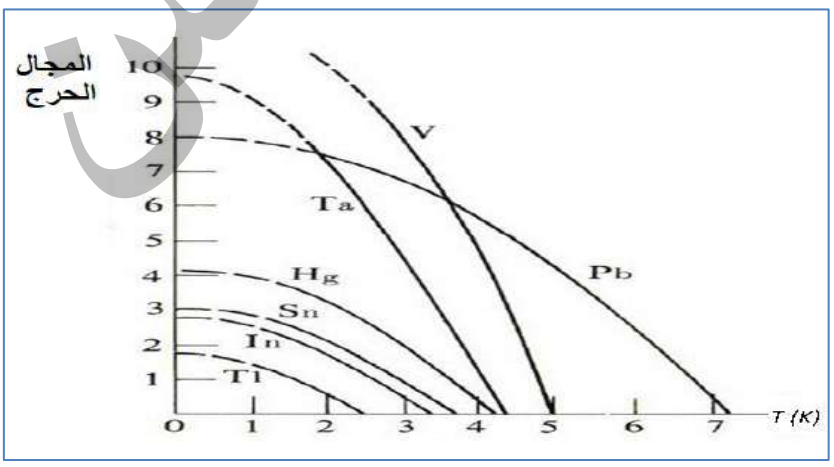
يتميز الموصـل المفرط بخاصـية أخرى، إضـافة الى كون مقاومته تسـاوي صـفراً بالنسـبة للتيار المســتمر، هي تحوله من حالة التوصــيل المفرط الى الحالة الاعتيادية وذلك بتســليط مجال مغناطيسي عالي يسمى المجال الحرج.

أي ان المواد المفرطة التوصيل تتحول الى حالتها الاعتيادية بتسليط مجال مغناطيسي عالي يسـمى المجال الحرج (B_C) وهو يعتمد على نوعية المادة المصـنوع منها الموصـل ودرجة الحرارة.

- حيث ان قيمة المجال الحرج تصبح صفراً عند درجة الحرارة الحرجة (T_C).
- وتزداد قيمتها بانخفاض درجة الحرارة.
- العلاقة التالية توضح العلاقة بين B_C , T_C:

$$B_C = B_O \left[1 - \left(\frac{T}{T_C}\right)^2\right]$$

ان قيمة المجال الحرج B_C تزداد لتصبح قيمته ثابتة وتساوي B_O هي اقصى قيمة للمجال المغناطيسي الحرج عند درجة الصفر المطلق. كما في الشكل التالي لبعض المواد المفرطة.



<u>نلاحظ من الشكل:</u>

- ان قيمة B_O تزداد بارتفاع T_C.
- في بعض الاحيان ليس من الضـروري ان نسـلط مجالاً مغناطيسـياً خارجياً لغرض ازالة خاصـــية التوصـــيل المفرط ولكن عندما تتجاوز قيمة التيار

المار في حلقة مصـــنوعة من مادة ذات توصـــيلية مفرطة قيمة **(التيار الحرج)** فإن المادة تتحول الى الحالة الاعتيادية. وتعتمد قيمة التيار الحرج على

- ✓ طبيعة المادة،
- ✓ شكلها الهندسي
- ✓ وعلى قيمة المجال المغناطيســـي الناتج عن مرور التيار. فاذا تجاوزت قيمة المجال الناتج عن مرور تيار في موصـــل مفرط القيمة الحرجة للمجال الحرج B_C فان المادة تكون في الحالة الاعتيادية.

- ان تحديد قيمة التيار المار في موصـل مفرط تُعد من احدى المشـاكل الصـناعية في توليد مجال مغناطيسي عالي.

س) متى يتحول الموصل المفرط من حالة التوصيل المفرط الى الحالة الاعتيادية؟

س) كيف يمكن ازالة خاصية التوصيل المفرط؟

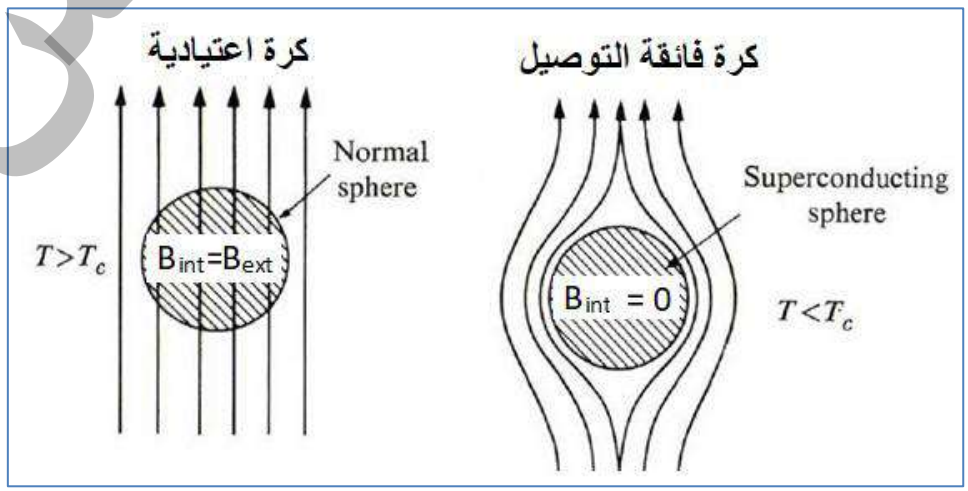
ج)1. يمكن ان تتحول المواد المفرطة التوصـــيل الى حالتها الاعتيادية بتســـليط مجال مغناطيســي عالي يسـمى المجال الحرج (B_C) وهو يعتمد على نوعية المادة المصـنوع منها الموصل ودرجة الحرارة.

2. او عندما تتجاوز قيمة التيار المار في حلقة مصـنوعة من مادة ذات توصـيلية مفرطة قيمة **(التيار الحرج)** فإن المادة تتحول الى الحالة الاعتيادية. فاذا تجاوزت قيمة المجال الناتج عن مرور تيار في موصـــل مفرط القيمة الحرجة للمجال الحرج B_C فان المادة تكون في الحالة الاعتيادية.

3. برفع درجة حرارة المادة بحيث تكون اعلى من T_c

ظاهرة مازنر MEISSNER EFFECT :

لقد لاحظ العالم الألماني مازنر انه عندما تكون المادة ذات التوصـــيل المفرط في مجال مغناطيســي فإن خطوط الفيض المغناطيســي تبتعد كلياً عن الموصـــل عند تبريده الى درجة حرارية اقل من T_C (وتدعى هذه الظاهرة بظاهرة مازنر او ظاهرة اقصـــاء الفيض المغناطيسي). يمكن فهم هذه الظاهرة على أساس ان عملية التحول بوجود مجال مغناطيسي من الحالة الاعتيادية الى حالة التوصيل المفرط تكون مصحوبة بتوليد تيارات سطحية كافية لإلغاء المجال المغناطيسي داخل العينة. كما في الشكل التالي:



ان المجال داخل المادة في الحالة الاعتيادية

$B_{int} = B_{ext} + \mu_o M_V$

حيث (B_{ext}) هو المجال المغناطيسي الخارجي. و μ_o تمثل النفاذية

$M_V \equiv$ العزم المغناطيسي لوحدة الحجم

وبما ان $B_{ext} = 0$ للموصل المفرطة $M_V = \frac{-B_{ext}}{\mu o}$

وعليه فإن الموصـــل المفرط له تأثير كما لو كان لديه عزم مغناطيســـي معاكس الى المجال الخارجي ولهذا فيمكن اعتبار ان المادة ذات دايا مغناطيسية مثالية.

هنالك نوعان من المواد المفرطة التوصيل:

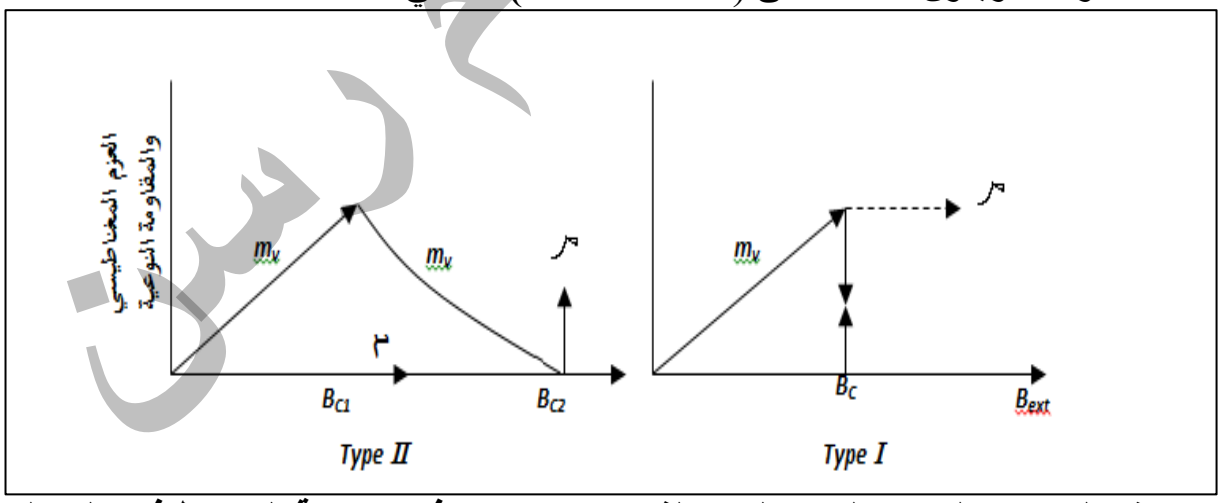
بالاعتماد على الطريقة التي يحدث بها الانتقال من حالة التوصـــيل المفرط الى الحالة الاعتيادية عندما تكون قيمة المجال المغناطيسي المسلط أكبر من قيمة المجال الحرج B_C.

1- **موصل مفرط من النوع الأول Type.I:** عندما تتجاوز قيمة المجال المغناطيسي المسلط المجال الحرج B_C فان الموصـــل يتحول كلياً الى الحالة الاعتيادية وبذلك يتمكن المجال الخارجي من اختراق الموصل وتصبح قيمة العزم المغناطيسي صفراً. أي ان

$B_{int} = B_{ext}$ كما موضح في الشكل السابق

2- **موصـــل مفرط من النوع الثاني Type. II:** النوع الثاني يتميز بوجود قيمتين للمجال الحرج B_{C1} تمثل اقل قيمة له و B_{C2} تمثل اعلى قيمة للمجال.

- فعندما تتجاوز قيمة المجال المسـلط اعلى قيمة للمجال الحرج B_{C2} $(B_{C2} > B_{C1})$ فان الموصـــل يتحول كلياً الى الحالة الاعتيادية وبذلك يتمكن المجال الخارجي من اختراق الموصل.
- اما إذا كانت قيمة المجال المسلط أعلى من B_{C1} واقل من B_{C2} فهنالك اختراق جزئي للموصل ويكون بحالة تسمى (**الحالة المختلطة**) كما في الشكل:



س) يفضل استعمال موصل من النوع الثاني Type. II في صناعة المغانيط ذات المجال العالي. علل ذلك؟

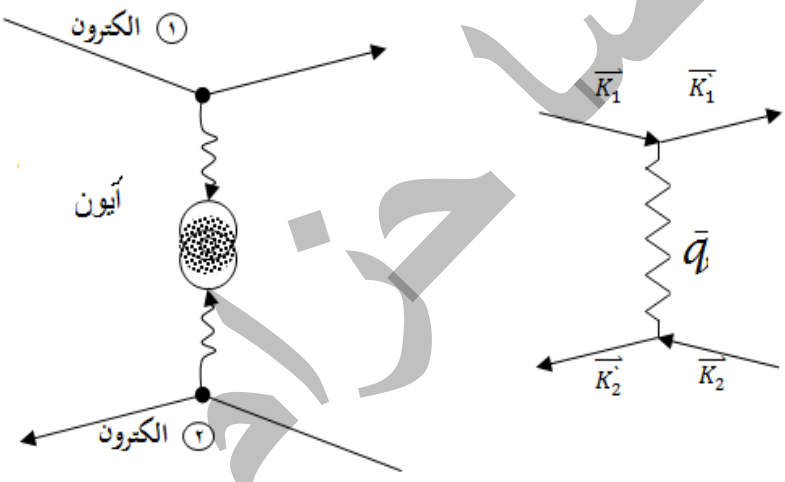
ج) ان القيمة النموذجية للمجال الحرج في موصـــل من نوع الأول I حوالي 10^2 كاوس بينما القيمة النموذجية للمجال الحرج في موصل من نوع الثاني II حوالي 10^5 كاوس ولهذا يكون الموصل من النوع الثاني مفضل في صناعة المغانيط ذات المجال العالي.

نظرية التوصيل المفرط:

تسمى نظرية BCS نسبة الى اسماء العلماء الفيزيائية Schrieffer , Cooper , Bardeen. لقد بنيت هذه النظرية على أساس النظرية الكمية.

ان مقاومة المعادن في درجات الحرارة الواطئة هو نتيجة لتصادم الكترونات التوصيل مع ذرات الشوائب وهي حالة لا يمكن التخلص منها.

- لذلك بنيت هذه النظرية على اساس آخر وهو مبدأ تجمع الالكترونات على شكل ازواج بواسطة قوة جذب من نوع خاص وبذلك تفسر ظاهرة انعدام المقاومة على اساس ان هذه الأزواج من الإلكترونات يمكن ان تتصادم بعد تزويدها بطاقة كافية لفصلها عن بعضها وتوليد الكترونين منفردين. ولكن عند درجات حرارة واطئة لا يمكن تزويد هذه الالكترونات بمثل هذه الطاقة وبذلك تمر هذه المجاميع من ازواج الالكترونات دون ان تتصادم مع الشوائب.
- ان تجاذب الالكترونات بدلاً من تنافرها نتيجة للقوى الكهروستاتيكية يمكن ان يُفهم على اساس استجابة الأيونات الموجبة في البلورة للأكترونات المارة بالقرب منها.



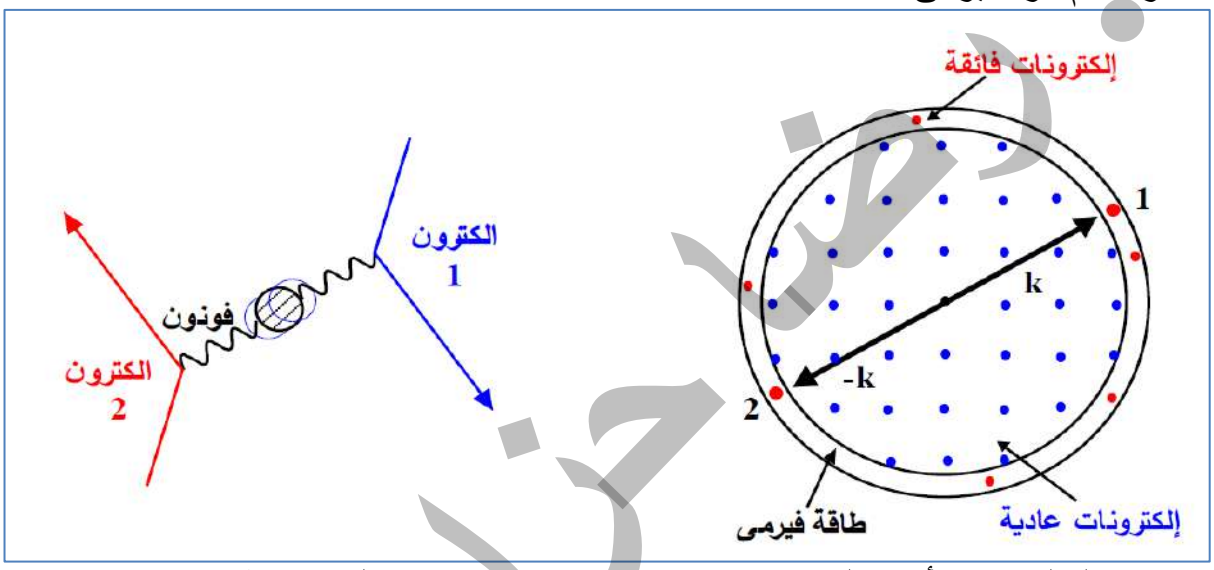
الشكل يبين تأثير التبادل بين الكترنين لتكوين زوج الكترون

- هنالك قوة جذب ولفترة وجيزة جداً بين الآيون الموجب والإلكترون المار قربه وربما يحدث عنه تحوير بسيط في اهتزاز ذلك الآيون.
- ويمكن ان يؤثر هذا الآيون على الكترون آخر ماراً قربه ويجذبه نحوه.
- ان نتيجة هذين التفاعلين هو ظهور قوة جذب بين الالكترونين ولا يمكن حدوث مثل هذا التجاذب لولا وجود الآيون الموجب.
- باستخدام نظرية المجال field theory فإن التأثير المتبادل هو نتيجة تبادل فونون افتراضي ذي طول موجي بين الالكترونين.

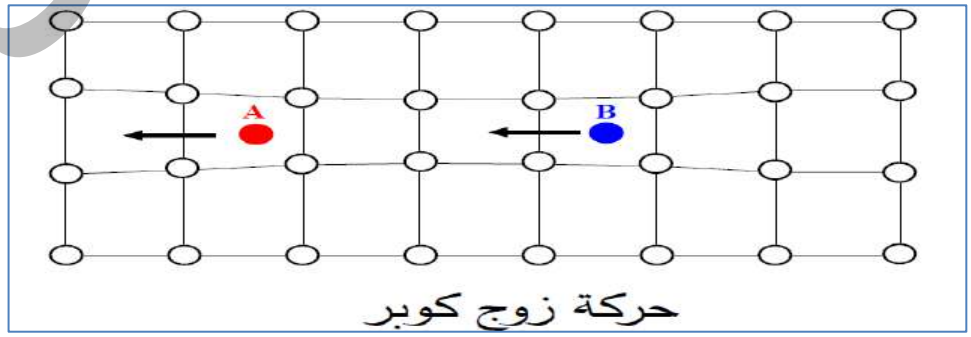
$$\overrightarrow{K_1} - \vec{q} = \overrightarrow{K_1}$$
$$\overrightarrow{K_2} + \vec{q} - \overrightarrow{K_2}$$
$$\therefore \overrightarrow{K_1} + \overrightarrow{K_2} = \overrightarrow{K_1} + \overrightarrow{K_2}$$

ازواج كوبر: أشـــار العالم كوبر عام 1956 انه في حالة وجود قوة جذب بين الالكترونات، مهما كانت ضـــعيفة، فان الحالة الارضـــية في درجة حرارة الصـــفر المطلق تحتوي على الكترونات متجمعة على اشـــكال ازواج. وهذه الأزواج من الالكترونات يطلق عليها ازواج كوبر.

ولإلقاء الضوء على تركيب زوج كوبر، نفترض معدن تقع الكترونات التوصيل فيه داخل كرة فيرمى ونفترض أن الكترونين يقعان بالقرب من سطح فيرمى تماما. يحدث تنافر بين هذين الالكترونين بسبب تشابه الشحنة وبالتالي توجد قوة كولوم. وبسبب الحجب الذي تسببه الالكترونات الاخرى الموجودة بين هذين الالكترونين فإن قوة تنافر كولوم يمكن أن تتناقص وعند أخذ هذا الحجب في الاعتبار فإن قوة التنافر بين الالكترونين تختفى تماما بالرغم من صغر حجم كرة فيرمى.

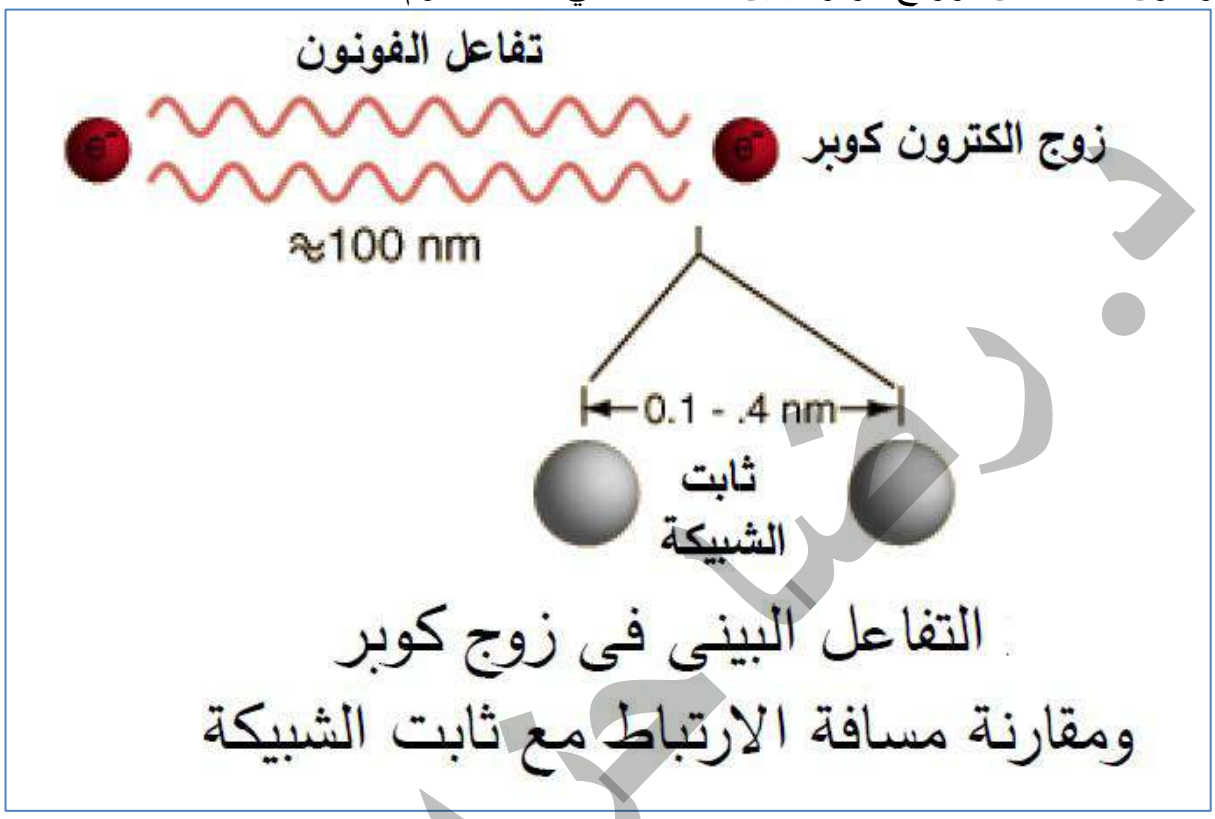


افترض العالم كوبر أن الالكترونين في زوج كوبر يكونان حالة ارتباط فيما بينهما وهذا الارتباط يُكون منهما نظاما واحدا وبالتالي ترتبط حركة أحدهما بالأخر ويتفكك زوج كوبر فقط عندما يأخذ النظام كمية طاقة تساوى طاقة الربط بين الالكترونين. فسر كوبر منشأ قوة الترابط في زوج الالكترونات على أساس وجود قوة جذب ولفترة وجيزة وتؤثر في اهتزاز الأيون الموجب الذي يمر بالقرب منه الالكترون) كما في الشكل السابق ويجذبه نحوه. وبالتالي ينتج تجمع استقطاب (للأيونات الموجبة بالقرب من الالكترون المار وهذا الاستقطاب يسبب ظهور جذب إضافي بين الالكترون والإلكترون الأخر وبالتالي يتولد زوج كوبر، كما هو مبين في الشكل التالي.



حركة زوج كوبر

تسمى قوة الارتباط بين الكتروني زوج كوبر بتفاعل الفونون وتكون طاقة الارتباط في بناء الزوج أكثر قوة عندما تكون عزوم ولف الالكترونين متعاكسة، بمعنى k- و k . على ذلك يمكن القول إن كل الالكترونات الموجودة بالقرب من سطح فيرمى تتكثف في الحالة الأرضية وتُكون أنظمة من أزواج كوبر. يبين الشكل التالي هذا المفهوم.



كما يوضح أيضا كيف أن أزواج كوبر ترتبط معا على مسافة مئات النانومتر أي على مسافة أكبر من ثابت الخلية بالف مرة ويكون سلوكها مثل سلوك البوزونات وتتكثف في الحالة الأرضية.

د. رضا حزام رسن

عمق الاختراق:

ان اهم فرضية في هذا النموذج هو انه في الموصل المفرط عند $T < T_C$ فإن جزءاً مقداره $n_s(T)/n$ من العدد الكلي لألكترونات التوصيل n يستطيع ان يساهم في (**التيار المفرط**). نفترض ان هنالك مجالاً كهربائياً لحظياً عبر موصل مفرط (المقدار n_s يدعى بكثافة **الكترونات التوصيل الفائق**). فتكون معادلة الحركة **للالكترونات (الالكترونات فائقة التوصيل) Superelectron** في هذا المجال الكهربائي:

$$m\frac{d\mathbf{v}_s}{dt} = -e\mathscr{E}$$

حيث أن V_s **سرعة الكترونات التوصيل الفائقة**. القوة الوحيدة المؤثرة على الإلكترون هي القوة الناتجة عن المجال الكهربائي. أما قوة الاستطارة أو التصادم فليست موجودة في المعادلة وذلك لأن الكترونات التوصيل الفائق لا تستطير أو تتصادم. وبالتالي يتم إعطاء **كثافة التيار الفائق J_s (كثافة التيار الناتجة عن الكترونات التوصيل الفائق)** بواسطة:

$$\mathbf{J}_s = n_s(-e)\mathbf{v}_s$$

$$\frac{dj_s}{dt} = -e\left(\frac{dV_s}{dt}\right)n_s$$

نأخذ مشتقة V_s بالنسبة للزمن من المعادلة الاولى ونعوضها في المعادلة الاخيرة، فينتج:

$$\dot{\mathbf{j}}_s = \frac{n_s e^2}{m}\mathscr{E}$$

حيث تشير النقطة فوق J إلى المشتقة بالنسبة للزمن.

في الحالة المستقرة، يكون التيار في الموصل الفائق ثابتًا. لذلك فإن المعادلة الأخيرة تشير الى أن $J_s = 0$ ، (مشتقة الثابت صفر) وهذا يعني ان المجال الكهربائي في المعادلة الأخيرة يساوي صفر:

$$\mathscr{E} = 0$$

يؤكد هذا الاستنتاج المهم أنه في الحالة المستقرة، يختفي المجال الكهربائي داخل الموصل الفائق. بعبارة أخرى، انخفاض الجهد عبر موصل فائق يساوي صفرًا.

المعادلة الأخيرة تؤدي على الفور إلى نتيجة مهمة أخرى. عندما يتم الجمع بين العلاقة مع معادلة ماكسويل،

$$\dot{\mathbf{B}} = -\nabla \times \mathscr{E}$$

ويمكن ان نجد

$$\dot{\mathbf{B}} = 0$$

هذا يؤكد أنه في الحالة المستقرة يكون المجال المغناطيسي ثابتًا.

لكن المعادلة الأخيرة تتعارض مع تأثير مايسنر (تاثير مازنر). تنص هذه المعادلة على أن B ثابت بغض النظر عن درجة الحرارة، بينما نتذكر أنه عند رفع T الى Tc سوف يخترق التدفق فجأة العينة عند الوصول إلى نقطة الانتقال. وعليه لابد لنا من ادخال بعض التعديلات على المعادلات المذكورة أعلاه لنحصل على النتيجة المطلوبة

نعوض $\mathscr{E}$ من المعادلة $\dot{\mathbf{j}}_s = \frac{n_s e^2}{m}\mathscr{E}$

في المعادلة الأخيرة، $\dot{\mathbf{B}} = -\nabla \times \mathcal{E}$

فنحصل على معادلة لندن *London equation*

$$\dot{\mathbf{B}} = -\frac{m}{n_s e^2}\nabla \times \dot{\mathbf{J}}_s$$

هذه المعادلة غير صحيحة، كما رأينا للتو، لأنها تتنبأ $\dot{\mathbf{B}} = 0$.

لتصحيح هذا، افترض الاخوين لندن العلاقة

$$\dot{\mathbf{B}} = -\frac{m}{n_s e^2}\nabla \times \dot{\mathbf{J}}_s \qquad \text{والتي لها نفس الشكل} \qquad \mathbf{B} = -\frac{m}{n_s e^2}\nabla \times \mathbf{J}_s,$$

إلا أنه تم إلغاء التمايز (المشتقة) بالنسبة للزمن. سنرى الآن أن العلاقة **(معادلة لندن)** تؤدي إلى نتائج تتفق مع التجربة.

$$\mathbf{B} = -\frac{m}{n_s e^2}\nabla \times \mathbf{J}_s,$$

هي علاقة بين B و J ترتبط هذه الكميات أيضًا بمعادلة ماكسويل

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J}_s.$$

μ_o تمثل النفاذية المغناطيسية . نأخذ التفاف curl المعادلة الاخيرة، نعوض عن $\nabla \times \mathbf{J}_s$ ثم استخدم المتطابقة:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{B} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{B}) - \nabla^2 \mathbf{B} = -\nabla^2 \mathbf{B} \qquad \text{لكن} \qquad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

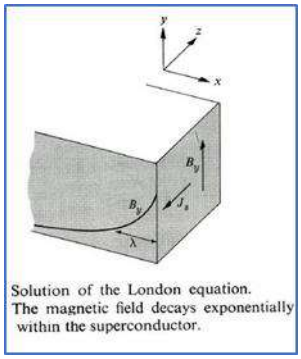
$$\nabla \times \nabla \times B = -\nabla^2 B = \mu_o \nabla \times j_s$$

$\because$

$$\mathbf{B} = -\frac{m}{n_s e^2}\nabla \times \mathbf{J}_s, \qquad \therefore \frac{-n_s e^2 B}{m} = \nabla \times j_s$$

$$-\nabla^2 B = \mu_o \nabla \times j_s = \mu_o \left(\frac{-n_s e^2 B}{m}\right)$$

$$\therefore \quad \nabla^2 \mathbf{B} = \frac{\mu_0 n_s e^2}{m}\mathbf{B}$$



Solution of the London equation. The magnetic field decays exponentially within the superconductor.

الان اذا طبقنا معادلة المجال هذه على حالة هندسية بسيطة. العينة مع سطحها في مستوى yz (كما هو موضح في الشكل) ، ويتم تطبيق الحقل في الاتجاه y نظرًا لأن الكميات تختلف فقط في الاتجاه السيني ، فإن المعادلة الأخيرة تختزل الى:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} B_y = \frac{\mu_0 n_s e^2}{m} B_y$$

حل هذه المعادلة التفاضلية البسيطة هو

$$B_y(x) = B_y(0)\, e^{-x/\lambda},$$

where

$$\lambda = (m/\mu_0\, n_s\, e^2)^{1/2}.$$

نستنتج من العلاقة الأخيرة التي تمثل عمق اختراق لندن: $\boldsymbol{\lambda = (m/\mu_0\, n_s e^2)^{1/2}}$

1. ان فيض المجال يستطيع ان ينفذ الى مسافة محدودة عند السطح وتسمى المسافة **(بعمق الاختراق)** $(\boldsymbol{\lambda})$.
2. ان عمق الاختراق يتغير مع درجات الحرارة حيث تزداد قيمة $(\boldsymbol{\lambda})$ بأرتفاع درجات الحرارة لتصبح مالا نهاية عند $T = T_C$ وذلك لأن المادة تتحول الى الحالة الاعتيادية

اذا **استبدلنا n من المعادلة التالية** التي تعطي تركيز الإلكترونات الفائقة:

نلاحظ بان عدد الإلكترونات الفائقة يعتمد على درجة الحرارة.

$$n_s = n\left[1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^4\right]$$

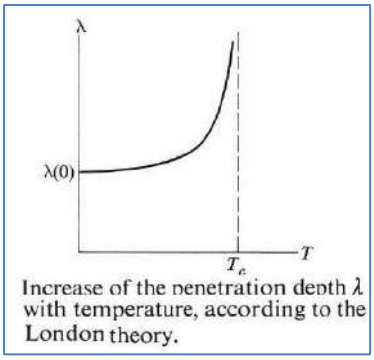
بالمعادلة $\boldsymbol{\lambda = (m/\mu_0\, n_s e^2)^{1/2}}$

نحصل على:

$$\lambda = \lambda(0)\left[1 - \frac{T^4}{T_c^4}\right]^{-1/2},$$

where

$$\lambda(0) = (m/\mu_0 n e^2)^{1/2}$$



Increase of the penetration depth λ with temperature, according to the London theory.

3. التيار الكهربائي في موصل مفرط يجري قرب السطح للموصل وليس بداخله:

$$J_z(x) = -\left(\frac{n_s e^2}{\mu_0 m}\right)^{1/2} B_y(x) = -J_s(0)\, e^{-(x/\lambda)}$$

وهذا يعني ان التيار يتناقص اسياً عندما ننتقل من سطح الموصل الى داخله. أي ان التيار محصور قرب سطح الموصل.

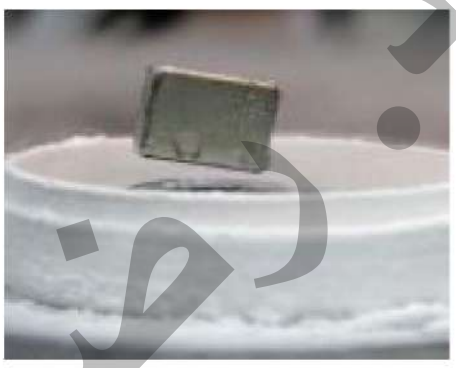
إذا كان الموصل على شكل أسطواني فان التيار يجري على سطح الأسطوانة فقط وهذا يختلف عن الموصل الاعتيادي حيث التيار يمر بشكل منتظم خلال العينة كلها.

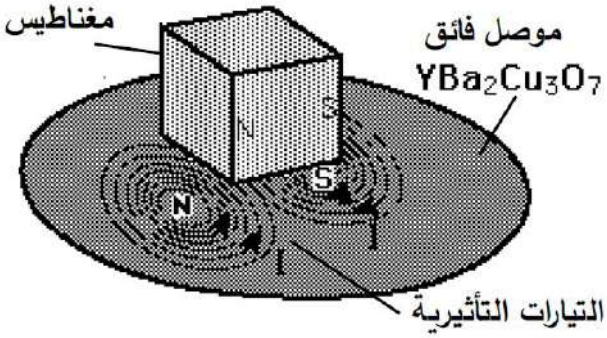
وبذلك فان ظاهرة مازنر هي نتيجة لهذا التيار السطحي الذي يحفظ الموصل من المجال المغناطيسي وبذلك يكون الموصل ذا خاصية دايامغناطيسية مثالية او بمعنى اخر، ان المجال الناتج عن التيارات السطحية يعاكس كلياً المجال المغناطيسي الذي ينفذ الى داخل الموصل.

ظاهرة الرفع:

تحدث في المواد فائقة التوصيل ظاهر مثيرة تسمى (ظاهرة الرفع). تنتج هذه الظاهرة عن التيارات الدوامة المتولدة في دوائر الموصلات الفائقة والتي بدورها تولد مجالات مغناطيسية تتنافر مع الأجسام الأخرى والتي تظهر كما لو كانت معلقة في الهواء فوق الموصل الفائق. فإذا أسقطنا مثلا مغناطيسا صغيراً فوق موصل فائق ينشأ مجال مغناطيسي تأثيري نتيجة

تكون تيارات دوامة على سطح الموصل وتكون التيارات التأثيرية صورة مرآة للأقطاب على سطح الموصل وبالتالي تتنافر مع أقطاب المغناطيس وتقاوم هذا المجال حركة السقوط. عند اقتراب المغناطيس من الموصل تزداد قوة التنافر حتى تتساوى مع وزن المغناطيس فيعلق فى الهواء فوق الموصل الفائق وكأنه مرفوع. تم الاستفادة من ظاهرة الرفع فى تقليل حركة الاحتكاك في القطارات فتم تصميم القطار بدون احتكاك حيث يتحرك مرفوعا فوق القضبان بواسطة الوسائد المغناطيسية والموصلات الفائقة وبالتالي تكون سرعته عالية نظراً لانعدام الاحتكاك.





تطبيقات المواد فائقة التوصيل:

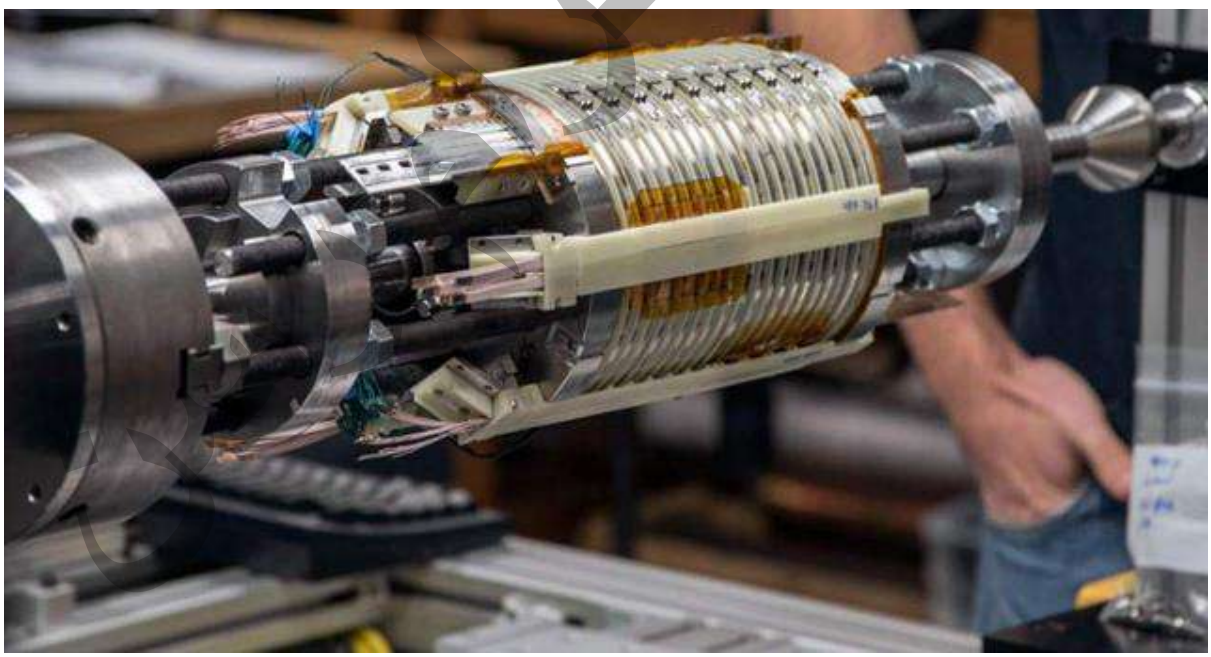
1_ صنع قطارات تسير بسرعة هائلة على وسادة من المغناطيس.
2_ صناعة الاجهزة الالكترونية المختلفة وخاصة صناعة اجهزة حاسوب صغيرة الحجم سريع الاداء.
3 _ صناعة اسلاك ضخمة فائقة التوصيل لنقل الكهرباء لإنارة المدن مثلاً.
4_ عمل ملفات عملاقة لكي تخزن الكهربائية.
5_ صناعة الاجهزة ذات التوصيل الفائق والتي تستخدم في مجال البحوث بدلاً من المغانيط التقليدية.
6- صناعة أجهزة خاصة لتوليد الطاقة الكهربائية.

امثلة على هذه التطبيقات: هي تستخدم في:

- أجهزة التصوير بالرنين المغناطيسي الطبية.
- وفي القياس بواسطة مطياف الكتلة.
- ومغناطيسات توجيه حزم الجسيمات المشحونة معجلات الجسيمات مثل معجل LHC التي تديره المنظمة الأوروبية للبحث النووي سيرن.
- كما يمكن استخدامها أيضا في الفصل المغناطيسي.
- وتستخدم الموصلات الفائقة في صنع مفارق جوزفين Josephson junctions أكثر مقاييس المغنطيسية حساسية على الإطلاق. وتستخدم أجهزة "SQUIDs" في المجهر الإلكتروني الماسح.
- والمواد النانو مجهرية مثل: أنابيب النانو، والمواد المركبة.
- والتبريد المغنطيسي فائق التوصيل.
- صناعة مجسات فائقة التوصيل

قطار مغناطيسي معلق يسير على وسادة

أقوى مغناطيس فائق التوصيل في العالم تم تصنيعه في مختبر(National MagLab)
الذي يقع في فلوريدا و قد حقق الاكتشاف الجديد رقما قياسيا يبلغ 32 تسلا



أسئلة:

س1) إذا علمت ان عمق الاختراق λ للزئبق Hg يساوي 75 nm عند درجة حرارة 3.5 K. فاذا علمت بان درجة الحرارة الحرجة للزئبق هي 4.15 K. جد

1- عمق الاختراق عند درجة الحرارة من الصفر المطلق $\lambda(0)$.

2- كثافة الكترونات التوصيل n_s عندما تقترب درجة الحرارة من الصفر المطلق

==========

س2) إذا علمت ان عمق الاختراق λ لمعدن النيوبيوم Nb يساوي 4890 Å عند درجة حرارة 5K. فاذا علمت بان درجة الحرارة الحرجة للنيوبيوم هي 9.5 K. جد

1- عمق الاختراق عندما تقترب درجة الحرارة من الصفر المطلق.

2- كثافة الكترونات فرط التوصيل n_s عندما تقترب درجة الحرارة من الصفر المطلق

3- نسبة تركيز الكترونات فائقة التوصيل الى تركيز الكترونات التوصيل $\left(\frac{n_s}{n}\right)$

==========

س3) احسب قيمة المجال المغناطيسي B_C الحرج للرصاص عند 2.5 K و 5 K اذا علمت ان درجة الحرارة الحرجة تساوي T_c=7.19 K و اقصى قيمة للمجال المغناطيسي الحرج عند درجة الصفر المطلق $B_c(0) = B_O = 0.0803$.

==========

$$B_C = B_O \left[1 - \left(\frac{T}{T_C}\right)^2\right]$$

$$B_C = B_O \left[1 - \left(\frac{T}{T_C}\right)^2\right]$$