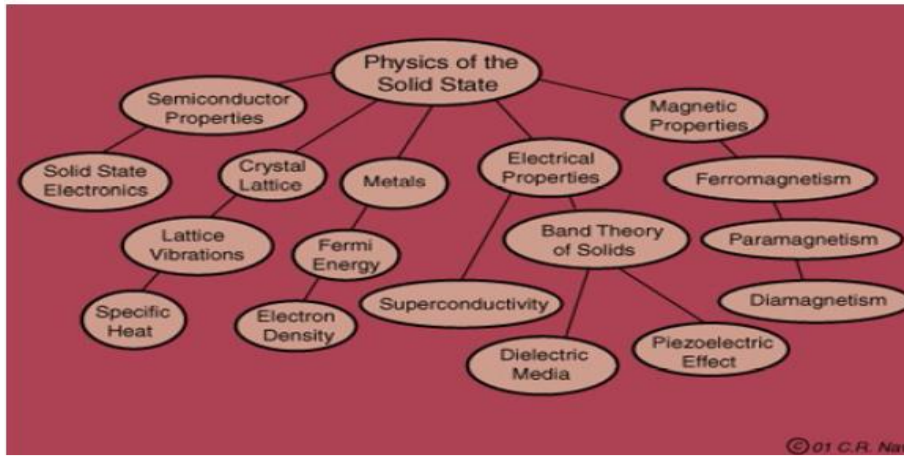


الفصل الاول: التركيب البلوري crystal structure

1- مقدمه

فيزياء الجوامد أو فيزياء الحالة الصلبة هو أكبر فروع علم فيزياء المواد المكثفة. وهو علم يهتم بدراسة المواد الجامدة، والمواد الصلبة، من خلال أساليب مثل ميكانيكا الكم، وعلم البلورات، الكهرومغناطيسية، وعلم السبائك. فيزياء الجوامد تفسر كيف أن الكثير من خصائص المواد الصلبة يمكن أن تكون نتاج لخصائص تركيبها الذري. بذلك يمكن اعتبار فيزياء الجوامد تشكل الأساس النظري لعلم المواد، فضلاً على أن لها تطبيقات مباشرة، على سبيل المثال في تكنولوجيا الترانزستورات وأشباه الموصلات. وان هذا الفرع تشعب بشكل كبير ليشمل العديد من الفروع كما في الشكل



2- المواد المتبلورة والمواد الغير متبلورة: Crystalline and Amorphous materials

العناصر ومركباتها الكيميائية توجد عادة في الطبيعة في ثلاث حالات (صلبة - سائلة - غازية) ، وتكون المادة صلبة أو في حالتها الصلبة عند عدم تغير شكلها وحجمها مع الزمن عند ثبوت درجة حرارتها وبذلك تتباين هي والمادة السائلة ذات الحجم الثابت والشكل المتغير او المادة الغازية التي ليس لها حجم او شكل ثابت عند ثبوت درجة الحرارة.

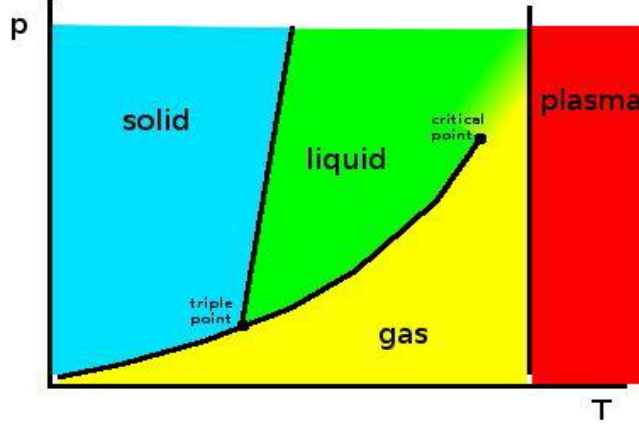
ان المسافات البينية بين الذرات المتجاورة في المواد الصلبة أو السائلة تكون بضعة انكسترومات اي بحدود (10^{28} - 10^{29}) ذرة / م³ بينما تكون الكثافة حوالي (3×10^{25}) جزيئة / م³ للمواد الغازية ويقابل ذلك معدل مسافة بين الجزيئات الذي يكون حوالي 30 أنكستروم (3×10^{-10} م) عند درجة حرارة الغرفة وتحت الضغط الجوي الاعتيادي.

تمثل حالات المادة الثلاث درجات من الانتظام وتمتلك كل درجة منها مدى معيناً لقيم طاقة التماسك او الترابط (Binding Energy) ففي الحالة الصلبة تكون طاقات الترابط بين الذرات او الجزيئات ذات اهمية كبرى إذ تتحول المادة من حالة صلبة الى سائلة او غازية اذا كان معدل الطاقة الحركية لكل جزيئة اعلى من طاقة الترابط. ويسلك السائل نفس السلوك عندما يتحول الى غاز حيث يكون معدل الطلاقة الحركية عاليا مقارنة بطاقة الترابط للتغلب على اواصر فانديرفالس التي تكون حوالي (0.01) الكترون فولت لكل جزيئة او أصرة .

وفضلا عن الحالات الثلاثة يمكن ان تمتلك المادة شكلا اخرًا تظهر به تسمى

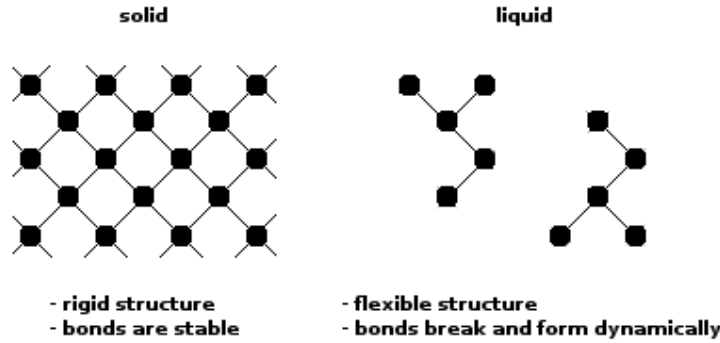
البلازما (Plasma) أو الحالة الرابعة للمادة : وهي عبارة عن غاز متاين ينتج في التفريغ الكهربائي حيث تتعدى الطاقة الحركية لكل دقيقة من البلازما جهد التاين للذرات الذي يتراوح بين (1-30) الكترون

فولت لكل دقيقة مشحونة. ويبين الشكل (1-1) حالات المادة (صلبة - سائلة - غازية - بلازما) وفقاً لمخطط الطور والترابط بين الحالات وفقاً لتغيرات الضغط ودرجة الحرارة، وتصنف الحالة الصلبة والسائلة تحت مسمى المادة المكثفة (condensed matter) وتتميز بقوة الترابط بين ذراتها أو جزيئاتها ومقاومتها للانضغاط.



الشكل (1-1)

لذا يمكن القول بأن معدل الطاقة الحركية للجزيئة او الدقيقة المشحونة هو المسؤول عن تحديد الحالة التي تظهر فيها المادة ، هذا يعني ظهور حالة خامسة للمادة تظهر بشكل دقائق نووية ذات طاقة عالية قد تبلغ (8) ميكا الكترون فولت (1 ميكا = 10^6). ويبين الشكل: (1-2) البنية الصلبة والبنية السائلة



الشكل: (1-2) البنية الصلبة (solid) والبنية السائلة (liquid)

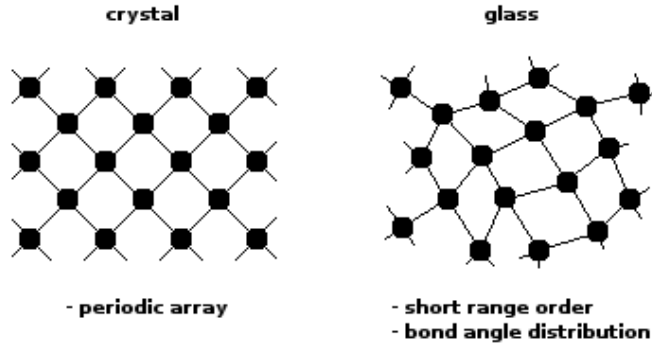
ويمكن تصنيف المواد الصلبة إلى نوعين رئيسيين هما:

أ- المواد الصلبة المتبلورة (Crystalline Solids)

وهي المواد الصلبة التي تحوي صفوفًا من الذرات المتجمعة والمرتببة بشكل دوري مكونة تشكيلة ثلاثية الأبعاد ولهذا السبب تمتلك نوعًا من التماثل (Symmetry) ويمكن اعتبار تركيبها ناتجًا من تكرار نموذج او خلية الوحدة (Unit cell) الثلاثية الأبعاد.

ب- المواد الصلبة غير المتبلورة (Non crystalline Solids): وتضم المواد الصلبة التي تتخذ ذراتها أو جزيئاتها توزيعاً عشوائياً وبغير نظام مكونة تشكيلة معقدة بحيث لا يمكن اعتبار تركيبها تكراراً

لاي خلية وحدة، وتوصف هذه المواد الصلبة اللابلورية أيضاً بأنها" لا شكلية أوأمورفية" (Amorphous) بمعنى أنها لا تتخذ شكلاً مميزاً كما توصف بأنها زجاجية (Vitreous Glassy) نظراً لانها تتشابه مع الزجاج في عشوائية ترتيب الذرات انظر الشكل(1-3)



الشكل: (1-3) البنية البلورية (crystal) والبنية الزجاجية (glass)

هناك بعض العناصر والمركبات بصيغة المواد الصلبة المتبلورة و المواد الصلبة الغير المتبلورة مثل الجرمانيوم والسيليكون واكاسيد البورون والسبب في ذلك يعود الى طريقة تحضير هذه المواد أو كيفية تكونها فعندما تتاح الفرصة للذرات لكي ترتب نفسها وتصبح طاقتها اقل مايمكن ان تكون عليه ينتج عنها مادة بلورية وعندما لا تتاح الفرصة للذرات لكي ترتب نفسها تتجمع عشوائيا وتكون طاقتها اكبر من تلك الذرات المتجمعة بنظام فينتج عنها مادة صلبة غيربلورية او غير دورية. مثال ذلك الكربون " الزجاجي " الناتج من عملية التحلل عند درجات حرارة منخفضة، وبعض البوليمرات التي تتكون من عدد كبير جداً من الجزيئات غير المتناسقة. وفي حالات أخرى لا تتاح الفرصة لنمو بلورات من سوائل عالية اللزوجة عند تبريدها بسرعة، حيث يؤدي التبريد الفائق Supercooling إلى تجميد السائل بنفس النمط غير الدوري لترتيب جزيئاته. لكن مثل هذه المواد " الزجاجية" يمكنها اكتساب الحالة البلورية بصورة كلية أو جزئية، عن طريق معالجتها " حرارياً بعملية تسمى " التلدين " أو " التخمير " Annealing وهي عملية تسخين، يعقبه تبريد بمعدلات بطيئة منتظمة.

ويمكن التمييز عمليا بين المواد الصلبة المتبلورة والمواد الصلبة الغير المتبلورة بثلاث معايير هي :

- 1- تنصهر المواد الصلبة الغير المتبلورة من خلال مدى معين لدرجات الحرارة الذي يكون عادة بضع درجات ، بينما المواد الصلبة المتبلورة تنصهر فجأة عند درجة حرارة معينة يمكن قياسها بخطأ تجريبي لايزيد على $0.01 \pm$ درجة.
- 2- تكوّن المواد الغير المتبلورة تشكيلة منتشرة ومتبعثرة عند حيود الاشعة السينية منها وهذه التشكيلة عبارة عن سلسلة من الحلقات المتحدة المركز. بينما تكون هذه التشكيلة للمواد المتبلورة عبارة عن بقع (sport) متميزة منفصلة بعضها عن بعض وذات تماثل معين.
- 3- تكون جميع المواد الصلبة المتبلورة متباينة الخواص الاتجاهية (Antisotropic) وبدرجات متفاوتة اي ان بعض صفاتها المميزة تعتمد على الاتجاه التي تقاس معه تلك الصفات بالنسبة الى محاور البلورة. بينما تكون المواد الصلبة الغير المتبلورة متماثلة الخواص الاتجاهية (Isotropic) اي لا يظهر للاتجاه تأثير على خواصها.

** في هذا المنهج كل كلمة صلب او مادة صلبة هي مواد صلبة متبلورة او بلورية.

3- الصيغة البلورية للمواد الصلبة The Crystalline form of solids

معظم المواد الصلبة هي مواد متبلورة اساسا ولكن البلورات التي تتكون منها هذه المواد تكون غير مثالية او غير تامة (Imperfect) . ان لهذه البلورات عيوبها الداخلية فهي مشوهة ومتكسرة الى اجزاء بسبب قوى تؤثر فيها بعض اجزائها في الاجزاء المجاورة. كما ان الحجم الصغير للبلورة يؤدي الى ظهور انواع من العيوب حيث ان طبقاتها الخارجية تختلف عن طبقاتها الداخلية وان هذه العيوب وغيرها يجب ان تؤخذ بعين الاعتبار عند دراسة خواص البلورات الحقيقية (Real crystal) ، لذا لا بد من دراسة خواص البلورات المثالية (Perfect crystal) فعند دراسة ومعرفة التركيب المثالي فقط يمكن مناقشة طبيعة العيوب بدقة.

ان فكرة البلورة المثالية لا تقارن بفكرة الغاز المثالي غير ان فكرة الغاز المثالي تعد نقطة البداية من اجل فهم خواص الغازات الحقيقية وتبنى على غرارها فكرة فكرة البلورة المثالية لفهم خواص البلورات الحقيقية.

وفيما يلي الفرق بين البلورة المثالية والغاز المثالي

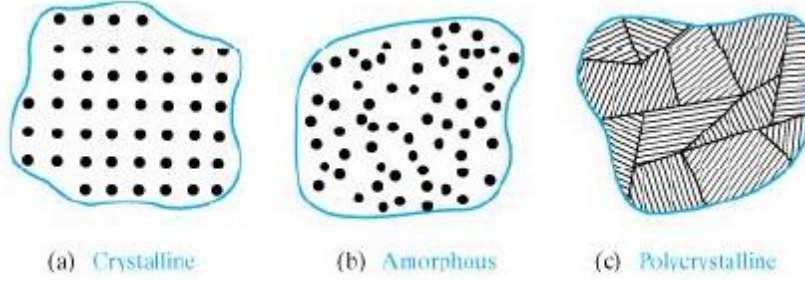
الغاز المثالي	البلورة المثالية
1- يمتلك صفة العشوائية	1- يمكن وصفها بالدورية المنتظمة الثلاثية الابعاد حيث ان المجاميع المتماثلة من الذرات تكرر نفسها عند فواصل او فسخ متساوية تماما اي تمتلك صفة النظامية.
2-يوصف الغاز المثالي بأنه دقائق متماثلة متناهية في الصغر لا تربط بعضها ببعض قوى ولا تحتل مواقع ثابتة في الفضاء ولكن لها سرع عشوائية وكبيرة.	2- البلورة المثالية هي مجاميع متماثلة من الذرات ذات حجوم محددة مترابطة بعضها مع بعض بقوى متبادلة عند مواقع ثابتة في الفضاء وهي ساكنة.
3-الطاقة الداخلية للغاز المثالي تكون حركية.	3- الطاقة الداخلية للبلورة المثالية تكون كامنة
4-يخضع الغاز المثالي لقوانين الميكانيك الاحصائي للدقائق المتحركة والمتجمعة عشوائيا وليس له علاقة بقوانين علم الهندسة .	4- تخضع البلورة المثالية لقوانين علم الهندسة للدقائق الساكنة المرتبة بصورة دورية ولا تخضع للعشوائية وقوانينها.
5-الغازات المثالية جميعها متشابهة الصفات (عدا تباينها في كتل دقائقها).	5- البلورات المثالية يمكن ان تمتلك تشكيلات هائلة من التنظيمات او الترتيبات الدورية.
6-للغازات الحقيقية نستعمل غالبا نمودجا واقعيا نفترض فيه ان ذرات الغاز لها حجم صغير محدد وليس متناهية في الصغر كالنقاط وكذلك قوى التجاذب المشتركة ضعيفة وليست معدومة بين تلك الذرات.	6- للبلورات الحقيقية نفترض ان ذرات البلورة غير ساكنة بل تتذبذب حول مواقع اتزانها ، لذا فالبلورات الحقيقية جميعها تكون غير مثالية بسبب حجم جزيئاتها ،لذا فان اهمال حركة ذرات البلورة واعتبار متوسط موقع اهتزاز الذرة مركزا للذرة اذا كانت ساكنة هو تقريب مقنع تماما

هناك نوعان اساسيان من البلورات الحقيقية:

1- البلورة الاحادية (Single Crystal) حيث تمتد دورية التشكيلة او النموذج البلوري الثلاثي الابعاد خلال البلورة بأكملها.

2- البلورة المتعددة التبلور (Polycrystalline Crystal) حيث لا تمتد دورية النموذج البلوري خلال البلورة بأكملها وانما تتغير دوريتها عند الحدود الحبيبية (Grain –Boundaries) .

من الصعب الحصول على بلورة وحيدة لكل المركب لان تنمية البلورة يحتاج إلى زمن طويل جدا وغالبا ما نحصل على مركب متعدد التبلور (polycrystalline) الشكل (1-4)



الشكل: (1-4) حالات التبلور

الكثير من خصائص المواد تتأثر ببنيتها البلورية. هذه البنية يمكن دراستها عن طريق مجموعة من تقنيات البلورات، مثل الأشعة السينية، والحيود النيوتروني، والحيود الإلكتروني والشكل (1-5) يبين تشكيلة شديدة التلاصق علم بلورية



الشكل (1-5)

3- التركيب البلوري Crystal Structure:

تتكون البلورة من عدد كبير جدا من وحدات او خلايا متشابهة على شكل متوازي السطوح تكرر نفسها بصورة دورية منتظمة . ففي البلورات البسيطة التركيب كالذهب والفضة والنحاس تحتوي كل خلية من خلاياها ذرة واحدة فقط وفي البلورات المعقدة تحتوي الخلية الواحد اكثر من ذره او جزيئة من نوع واحد أو من أنواع متعددة قد تصل الى مئة الف ذره في بعض البلورات البروتينية.

ان دراسة التركيب البلوري يعني معرفة شكل ومواصفات خلية الوحدة للبلوره وما تحويه هذه الخلية من ذرات من حيث النوع والعدد والموقع وطريقة ارتباط بعضها مع بعض .

يستخدم في لغة علم البلورات عدد من المفاهيم والمصطلحات التي تساعد على وصف وتحليل التركيب البلوري الداخلي للمادة . وسنقدم هنا بعض التعريفات الأساسية لأهم المفاهيم والمصطلحات البلورية.

1-الشبيكة البلورية: crystal Lattice

هي نوع من التمثيل الرياضي لنمط ترتيب الوحدة البنائية الاساسية للمادة البلورية. ويتم هذا التمثيل بعدد لانهائي من النقاط الهندسية المرتبة ترتيبا شبيكيا متوازيا يتميز بالتماثل والتكرار المنتظم (الدورية) في الفراغ. اي ان كل نقطة شبكية تمثل موقع ذره او ايونا او جزيئة او مجموعة من الايونات او مجموعة من الجزيئات لينتج ترتيب منتظم من النقاط. اما في الابعاد الثلاثية فيطلق على هذا الترتيب بالشبيكة الفراغية (الفضائية) (Space lattice) ، هذا يعني ان

فكرة الشكبيه الفضائية هي فكرة رياضية مجردة يقصد بها مجموعة من النقاط المرتبة بنظام ما وتعيد نفسها بصورة دورية في الفضاء ، هذا يعني ان اي تجمع للنقاط حول نقطة ما من نقاط الشبيكة يكون مماثلا للتجمع حول اية نقطة اخرى من نقاط الشبيكة .

هناك نوعين من الشبائك البلورية الأولى تسمى الشبكة البرافيزية (Bravais lattice) نسبة الى برافس مبتكر هذه الفكرة عام 1848م.تكون فيها جميع الذرات في البلورة من نفس النوع والثانية الشبكة غير البرافيزية وغالبا ما تكون مزيج من شبكتين أو أكثر من النوع الأول متداخلة مع بعضها البعض وتسمى بالشبيكة المقلوبة .

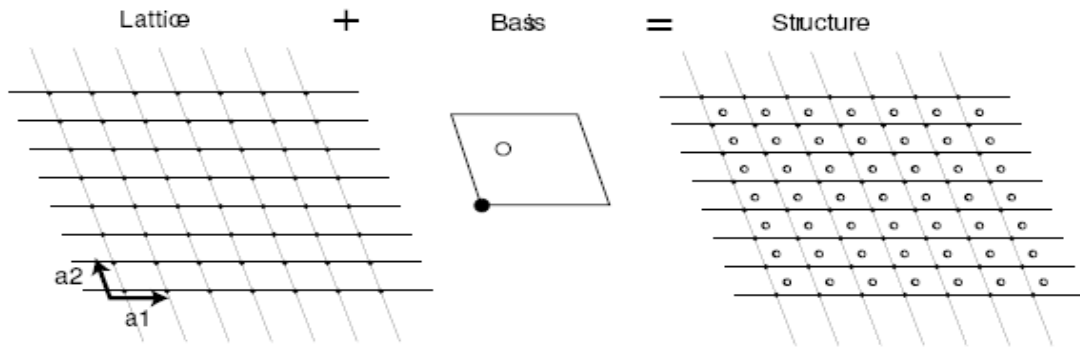
2- الأساس: basis

عبارة عن ايون أو ذرة أو جزيئه أو مجموعة من الذرات ترافق (تلتصق) مع كل نقطة من نقاط الشبيكة لتشكل هيئة معينة ، ويلعب الاساس دورا مهما في البناء البلوري حيث يجب ان يكون الأساس متماثلا في البنية والترتيب والاتجاه. تتراوح عدد الذرات في الاساس من ذره الى 10^5 ذره. ان الاساس يعيد نفسه في الفضاء ليكون البلوره

3-التركيب البلوري : crystal structure

يتكون التركيب البلوري بإضافة الوحدة البنائية الأساسية أو (القاعدة) لكل نقطة من نقاط الشبيكة، فتكون العلاقة المنطقية هي:

الشبيكة الفراغية + الوحدات الأساسية (القواعد) = التركيب البلوري



4- المتجهات الانتقالية في البلورة (crystal translation vectors)

يمكن تمثيل مواضع الذرات المرتبة في الفضاء الثلاثي الأبعاد بالنسبة لبعضها البعض بتمثيلها بثلاثة متجهات انتقالية أساسية \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} ، حيث يقع المتجه الانتقالي \vec{a} على امتداد المحور x، \vec{b} على امتداد المحور y، \vec{c} على امتداد المحور z، وهذه المتجهات غير متساوية عموماً وغير واقعة في مستوى واحد وإذا أجرينا انسحاباً متساوياً لأي من المتجهات السابقة فإن نقطة تلاقي المتجهات ستقع على نقطة أخرى لها نفس صفات الخلية الأولى وبالتالي لا يتغير شيء في البنية البلورية. وفي البنية المكعبة فإن المتجهات الأساسية متساوية وتشكل المتجهات الأولية فيما بينها أصغر متوازي سطوح يستطيع توليد البنية البلورية (شبكة + قاعدة).

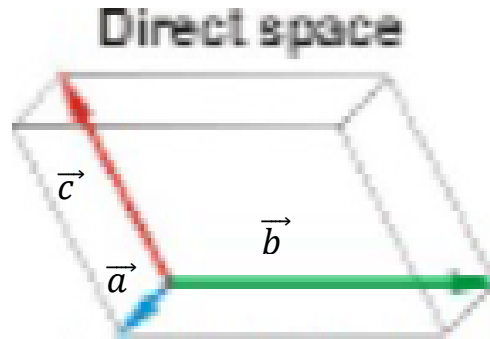
ويسمى المتجه الذي يصل بين أي موقعين في الشبكة بحيث تبدو الذرات المحيطة بهذين الموقعين متماثلة بالمتجه (المؤثر) الانتقالي ويرمز له بالحرف \vec{T} ويعطى بالمعادلة:

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

وتمثل n_1, n_2, n_3 أعداداً صحيحة اختيارية تعتمد على موضع النقطة الشبكية.

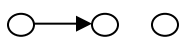
تتركب البلورة المثالية من وحدات بنائية أساسية مرتبة على شبكة بلورية فراغية (ثلاثية الأبعاد) بحيث يبدو هذا الترتيب عند النظر إليه من نقطة شبكية ذات متجه موضع \vec{r} هو نفسه عند النظر إليه من نقطة أخرى \vec{r}' طبقاً للمعادلة:

$$\vec{r}' = \vec{r} + \vec{T} \quad \dots \dots \dots (1-2)$$



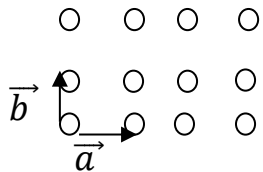
ان مجموعة النقاط \vec{r}' هي التي تحدد مواقع نقاط الشبكة او المواقع المتماثلة داخل البلورة بالنسبة لنقطة او موقع ما مثل \vec{r} ولهذا يعد المؤثر الانتقالي احد مؤثرات التماثل البلوري.

أ- المتجهات الانتقالية في شبكة واحدة (بعد واحد):



$$\vec{T} = n \vec{a}$$

ب- المتجهات الانتقالية في شبكة مستوية (بعدين):



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

ج- المتجهات الانتقالية في شبكة فراغية (ثلاثية الأبعاد):

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

وتعرف الشبكة ومحاورها الانتقالية بأنها أولية (primitive) اذا كانت اي نقطتين في الشبكة تخضع للعلاقة

$$\vec{r}' = \vec{r} + n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c} \dots \dots \dots (1-3)$$

وبأختيارات مناسبة للاعداد الصحيحة n_1, n_2, n_3 . أما اذا كانت نقاط شبكة ما لاتخضع جميعها للعلاقة (1-3) فهي شبكة غير أولية (non-primitive) والمحاور التي تحددها غير أولية .

تكون المحاور الاولية للشبكة اشكالا لمتوازي السطوح تسمى خلية وحدة أولية (primitive unit cell) أما المحاور غير الاولية للشبكة فتكون خلية وحدة غير أولية (non-primitive unit cell).

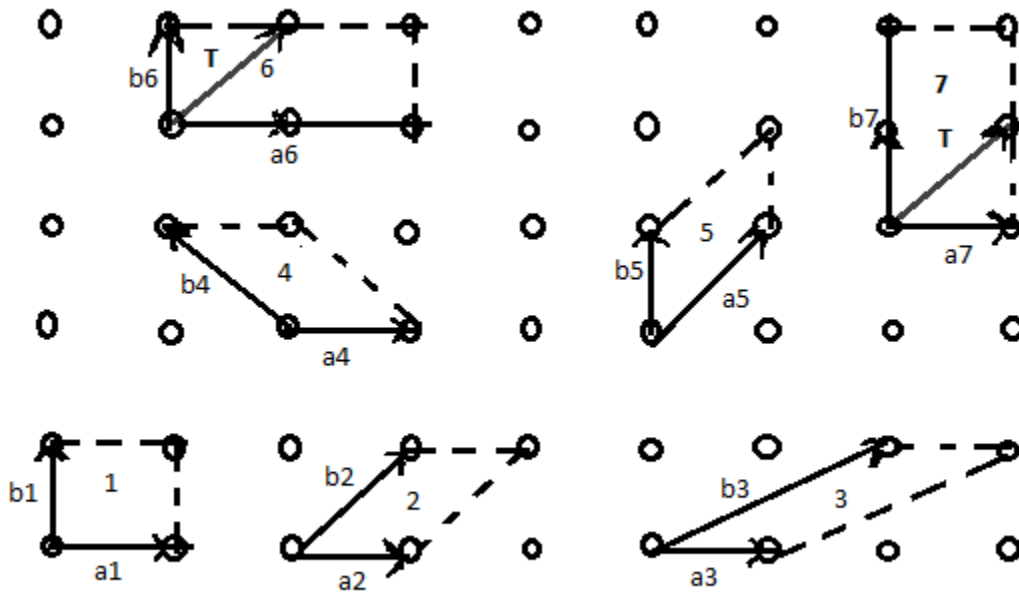
اي ان أية شبكة يمكن اعتبارها أولية او غير أولية تبعا لطريقة اختيارنا للمحاور التي تحددها كما في الشكل (1-6) لشبكة مستوية (في بعدين) حيث ازواج المتجهات من (a_1, b_1) الى (a_5, b_5) هي

محاور انتقالية أولية والخلية الحاصلة من كل زوج من هذه المحاور هي متوازي اضلاع يمثل خلية وحدة أولية. بينما ازواج المتجهات (a_6, b_6) و (a_7, b_7) ليست محاور انتقالية أولية إذ لايمكن دائما تشكيل

المؤثر الانتقالي \vec{T} من اعداد صحيحة من كل زوج من هذه المحاور ولذلك كانت الخلية الحاصلة من هذين الزوجين من المحاور هي خلية وحدة غير أولية.

ان خلية الوحدة الاولية لشبكة معينة تكون ذات مساحة ثابتة بغض النظر عن طررق اختيار محاورها، اي ان الخلايا من رقم (1) الى الرقم (5) تكون متساوية بالمساحة وتختلف عن مساحة كل من الخليتين رقم

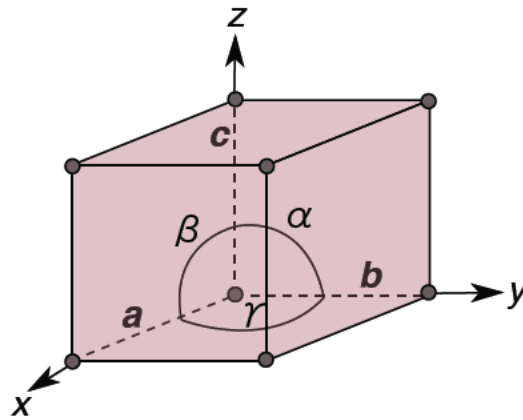
(6) و(7) غير الاوليتين. ان ما ذكر عن شبكة في فضاء ثنائي الابعاد ينطبق على شبكة في فضاء ثلاثي الابعاد حيث تكون خلية الوحدة الاولية وغير الاولية على شكل متوازي سطوح.



شكل (1-6)

5- وحدة الخلية : Unit Cell

تعرف وحدة البناء (وحدة الخلية) بأنها اصغر وحدة في الشبكة الفراغية, وهي الوحدة التي بتكرارها في الاتجاهات الثلاثة ينتج عنها بلورة كبيرة من المادة الصلبة والتي لها نفس تماثل وحدة الخلية. في الشبكة ذات البعدين (المستوية) يكون شكل وحدة الخلية متوازي أضلاع، اما في الشبكة ذات ثلاث ابعاد (الشبكة الفراغية او الفضائية) فيكون شكل وحدة الخلية متوازي سطوح (مستطيلات). وفي حالة البلورات الحقيقية الممثلة بشبكة فراغية (ثلاثة الأبعاد) تحدد " خلية الوحدة "بمتوازي السطوح المجسم ذي المتجهات الثلاثة \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} , والزوايا المحصورة بين المتجهات هي بيتا (β) وتمثل الزاوية المحصورة بين \vec{a} و \vec{c} والزاوية الفا (α) وهي الزاوية المحصورة بين \vec{b} و \vec{c} والزاوية كما (γ) وهي الزاوية المحصورة بين \vec{a} و \vec{b} وكما هو مبين في الشكل (1-7).



الشكل (1-7)

6- مساحة وحدة الخلية Area of unit cell

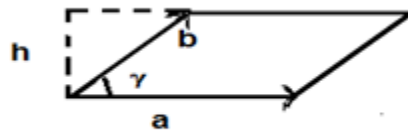
تحسب مساحة وحدة الخلية عادة في الشبكة ذات البعدين (المستوية) ، ويبين الشكل (1-8) رسماً توضيحياً لمتوازي الاضلاع. ان مساحة متوازي الاضلاع تساوي (القاعدة x الارتفاع)

$$\text{الارتفاع} = |\vec{b}| \sin \gamma$$

$$\text{المساحة} = |\vec{a}| |\vec{b}| \sin \gamma$$

ويمكن كتابة المساحة بصيغة المتجهات كما يلي:

$$\text{(Area)} = |\vec{a} \times \vec{b}| \quad \dots\dots\dots(1-4)$$



الشكل (1-8)

7- حجم وحدة الخلية Volume of unit cell

يحسب حجم وحدة الخلية باستعمال الشبكة ذات الابعاد الثلاثة وان شكل وحدة الخلية يكون متوازي مستطيلات.

ان حجم متوازي المستطيلات المبين بالشكل (1-8) يساوي مساحة القاعدة X الارتفاع ويمكن كتابة حجم وحدة الخلية بصيغة رموز المتجهات وكما يلي

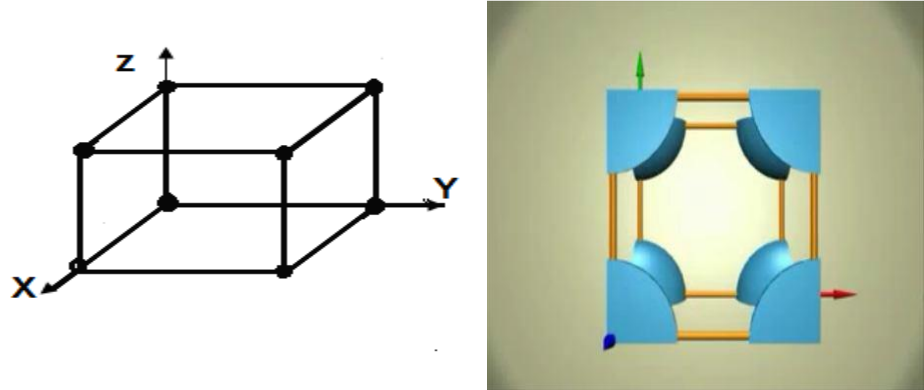
$$(Volume) = | \vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c} | \dots\dots\dots(1-5)$$

وتنقسم وحدة الخلية الى نوعين .

- أ- الخلية البدائية (الاولية) : primitive cell
- ب- الخلية غير البدائية (الغير اولية) non- primitive cell

أ- الخلية البدائية (الاولية) : primitive cell

يرمز لهذا النوع من الخلايا بالحرف (P) وهي ابسط انواع وحدة الخلايا وتكون على شكل متوازي مستطيلات . فعلى الرغم من وجود نقطة شبكية (ذرة) عند كل ركن من اركان الخلية الثمانية ، الا ان كل نقطة ركنية من هذه النقاط مشتركة بين ثماني خلايا اولية متجاورة لذا فان $(\frac{1}{8})$ النقطة يتبع الخلية الاولى الواحدة وبالتالي تسهم النقاط الواقعة عند الاركان الثمانية بما يساوي نقطة شبكية واحدة. اذن كل خلية اولية (بدائية) تحتوي على نقطة شبكية واحدة او ذرة واحدة ولذلك $(\frac{1}{8} \times 8 = 1)$ وكما مبين بالشكل (1-9).



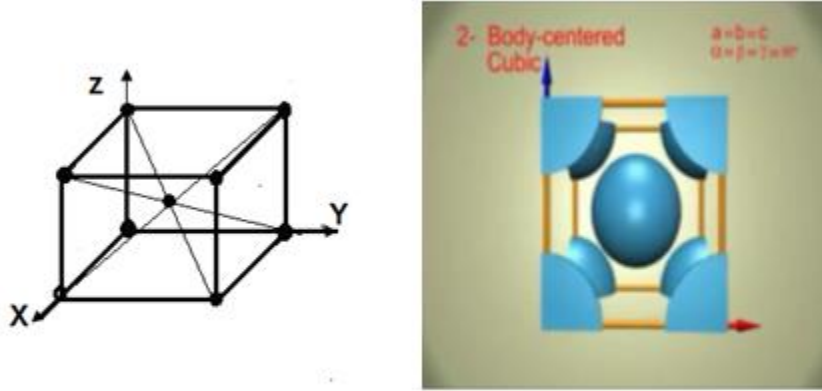
الشكل (1-9)

ب- الخلية غير البدائية (الغير اولية) non-primitive cell

يطلق على الخلية الغير أولية بالخلية المركبة وذلك لتداخل شبكتين او أكثر لتكوين شكل مركب اخر. وتحتوي على اكثر من نقطة شبكية في مواضع اخرى من الخلية فضلا عن النقاط الموجودة في اركانها الثمانية. وتوجد الخلية غير الاولية على ثلاثة انواع وهي :

1- خلية ممرزة الجسم Body centered cell

يرمز لهذة الخلية بالرمز (I). يحوي هذا النوع من الخلايا على نقطة شبكية واحدة في مركز الخلية بالاضافة الى وجود نقطة شبكية عند كل نقطة ركنية مشتركة بين ثماني خلايا أولية متجاورة وكما مبين بالشكل (1-10)، اذن كل خلية ممرزة الجسم تحتوي على نقطتي شبكية.

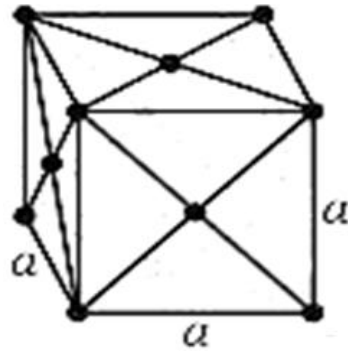


الشكل (1-10)

2- خلية ممرزة الاوجة Face centered cell

يرمز لهذة الخلية بالرمز (F). يحوي هذا النوع من الخلايا بالاضافة الى وجود نقطة شبكية عند نقطة ركنية مشتركة بين ثماني خلايا أولية متجاورة على نقطة شبكية عند مركز كل وجه من الاوجة المحيطة بجسم متوازي السطوح وحيث ان كل وجه يكون مشتركا بين خليتين متلاصقتين فعليه فان $(\frac{1}{2})$ النقطة يتبع الخلية الواحدة، وبالتالي تسهم النقاط الواقعة عند مركز كل وجه بما يساوي (3) نقاط شبكية $(3 = \frac{1}{2} \times 6)$. وكما مبين بالشكل (1-11). اذن كل خلية ممرزة الاوجة تحتوي على اربعة نقاط شبكية.

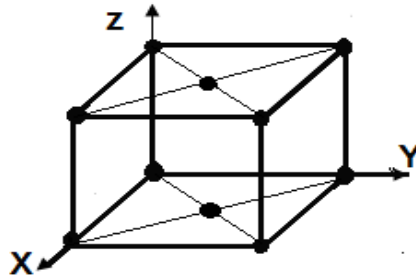
face-centred



الشكل (1-11)

3- خلية ممرزة الوجهين المتقابلين او القاعدة Base or End centered cell

يرمز لهذه الخلية بالرمز (C). يحوي هذا النوع من الخلايا بالاضافة الى وجود نقطة شبكية عند نقطة ركنية مشتركة بين ثماني خلايا أولية متجاورة على نقطة شبكية عند مركز وجهين متقابلين. وبما ان كل وجه مشترك بين خليتين متلاصقتين، فعليه فإن (1/2) النقطة يتبع الخلية الواحدة وبالتالي تسهم النقطتين الواقعتين عند مركز الوجهين المتقابلين بما يساوي نقطة شبكية واحدة ($1/2 \times 2 = 1$). أذن كل خلية ممرزة الوجهين المتقابلين تحتوي على نقطتي شبكية. وكما مبين بالشكل (1-12).



الشكل (1-12)

8- الأنظمة البلورية: crystal systems

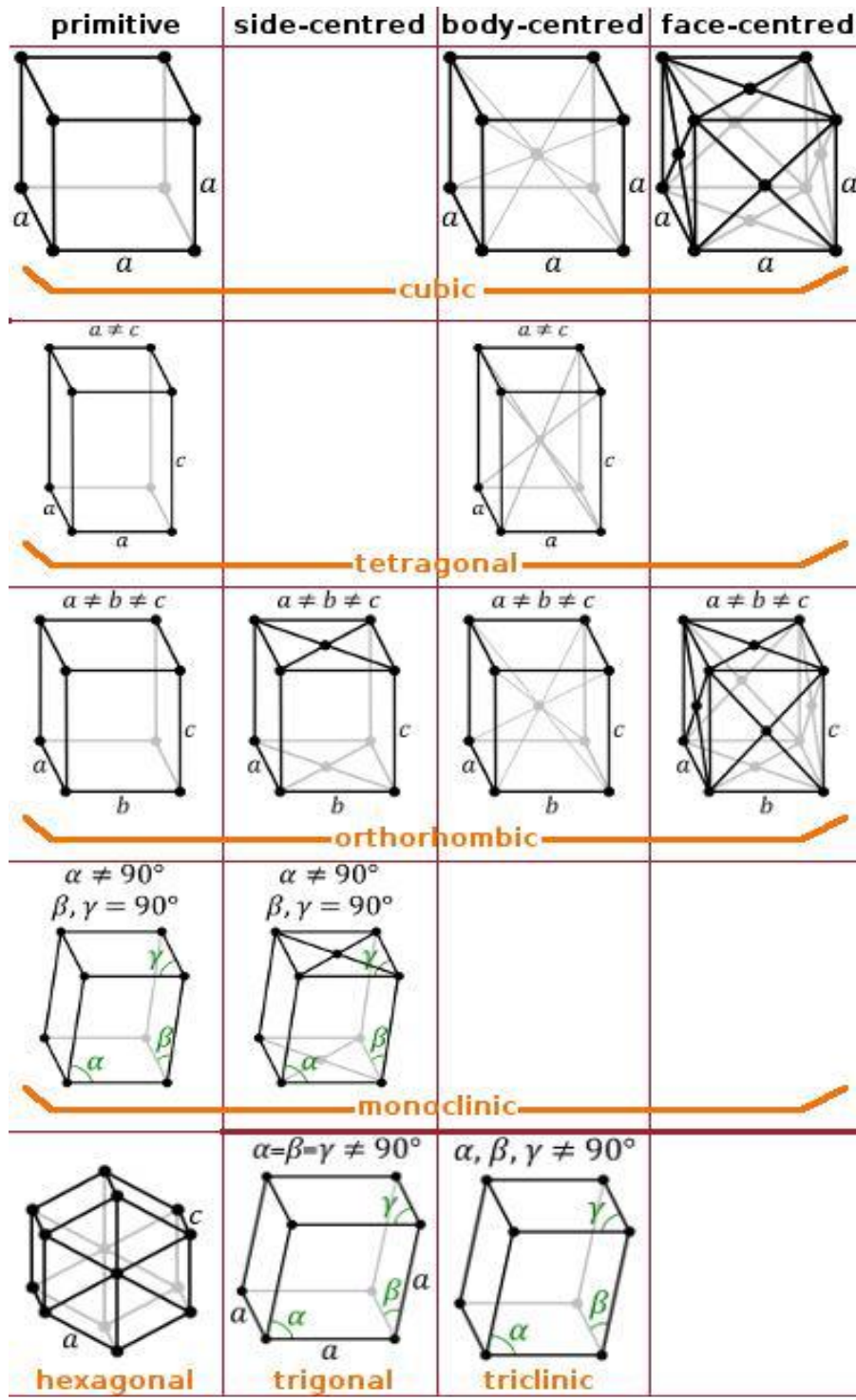
ينسب إلى عالم البلورات الفرنسي "برافيز" Bravais تصنيف الشبكات البلورية إلى أربع عشرة شبكية موزعة على سبعة أنظمة بلورية Crystal Systems (يوضحها الجدول (1-1) والشكل (1-13)). عدد شبكات برافيز الأربع عشرة والنظم البلورية السبعة محدود بعدد الطرق الممكنة لترتيب النقاط الشبكية بحيث تكون البيئة المحيطة بأي نقطة منها مماثلة تماماً للبيئة المحيطة بأية نقطة أخرى.

وتختلف شبكات برافيز الاربعة عشر عن بعضها من حيث :

- 1- شكل خلايا والتي تعتبر وحدة البناء الاساسية لكل بلورة ، كما تختلف وحدات الخلايا الصلبة في اطوال المحاور الثلاثة a,b,c وفي الزوايا المحصورة بينها α, β, γ .
- 2- انواع التماثل التي تمتلكها.

جدول (1-1) الشبكات البرافيزية الاربعة عشر

ت	النظام البلوري	شبكات برافيز	خصائص خلية الوحدة	حجم خلية الوحدة
1	ثلاثي الميل Triclinic	P	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	$abc (1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma)^{1/2}$
2	أحادي الميل Monoclinic	P, C	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	$abc \sin \beta$
3	معيني متعامد Orthorhombic	P, C, I, F	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ = \beta$	abc
4	رباعي قائم Tetragonal	P, I	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a^2 c$
5	مكعب Cubic	P, I, F	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	a^3
6	ثلاثي التماثل Trigonal	P	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$	$a^3 (1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha)^{1/2}$
7	سداسي Hexagonal	P	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	$a^2 c \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)$



الشكل (1-13) خلايا شبكات برافيز الاربعة عشرة

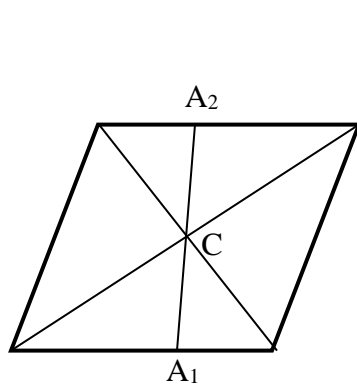
9- التماثل (التناظر) البلوري Crystal symmetry

إن التماثل البلوري هو تكرار أو تطابق أجزاء شكل ما حول مستو أو مستقيم أو نقطة للتماثل ، فالدائره تكون متماثلة (تكرر أو تعيد نفسها) حول اي قطر لها والكرة تكون متماثلة حول اكبر مستوي دائري لها . اما الشكل الذي لايمتلك صفة التكرار ولا يمتلك تطابقا في اجزائه فقد يكون شكل عدم التماثل او عدم التناظر (asymmetry) ، ان التماثل البلوري يعتمد على عاملين هما عنصر التماثل وعملية التماثل.

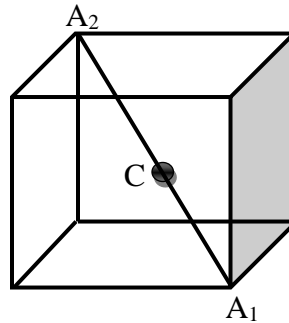
1- عنصر التماثل Symmetry Element وهو المحور او المستوي الذي تجري حوله عملية التماثل ، وفي الاشكال المتماثلة يمكن ان تتوافر العناصر التماثلية التالية:

أ- مركز التماثل Center of symmetry

وهو نقطة داخل شكل بلوري إذا مر مستقيم ما من خلالها فانه سيقابل نقطة مشابهة تماما على الجزء المقابل وعلى مسافة مساوية ويرمز له بالرمز C كما في النماذج في الشكل (1-14)

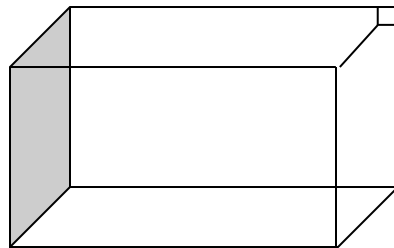


$$A_1C=A_2C$$



$$A_1C=A_2C$$

شكل(1-14) مركز التماثل في الأجسام البلورية



لا يوجد مركز تماثل لهذا الشكل

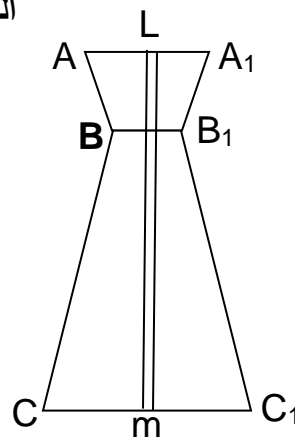
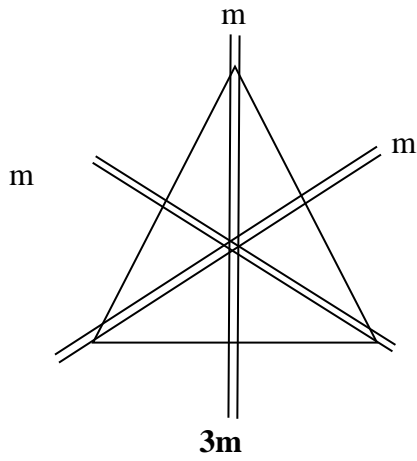
ب - مستوى التماثل Plane of symmetry

يطلق على مستوى التماثل بالمرآة المستوية ويعرف بأنه عبارة عن مستوي وهمي يقسم الجسم او البلوره إلى نصفين متساويين ومتشابهين بحيث يكون احد النصفين صورة مرآة للنصف الآخر ويرمز له (m) وتبين النماذج في الشكل (1-15) صورة لمستوي التماثل.

أ.د. نجاته احمد دحام

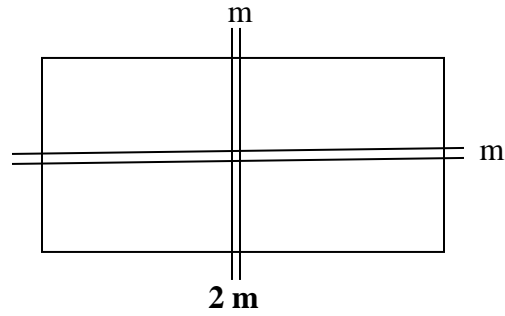
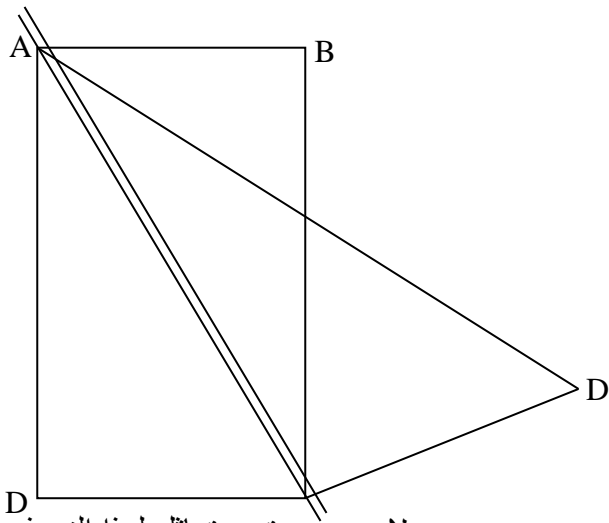
المرحلة الثالثة

الفصل الاول: التركيب البلوري

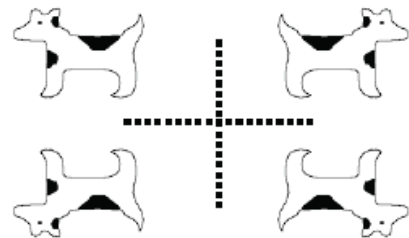
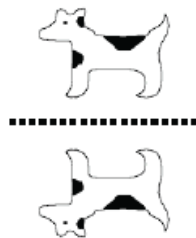
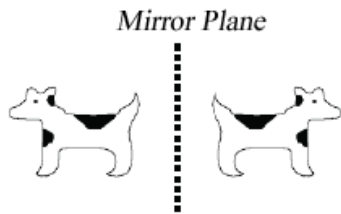


$$AL = A_1L$$

$$CM = CM_1$$



لا يوجد مستوى تماثل لهذا النموذج



شكل (1-15) مستوى التماثل في الأجسام البلورية

ج- محور التماثل Axis symmetry

عبارة عن مستقيم إذا ما دار الشكل حوله بزواوية معينة حل الشكل محل نفسه. ان اصغر زاوية يدورها الشكل حول محور التماثل كي يحل الشكل محل نفسه تدعى بزواوية الدوران α حيث:

$$\alpha=360/n$$

حيث n تمثل درجة محور التماثل وهي عدد مرات إحلال الشكل محل نفسه عند دورانه حول محور التماثل زاوية 360° .

يقال لمحور التماثل ألدوراني بأنه أحادي التماثل **one-fold axis** إذا كان تكرار الشكل مرة واحدة في الدورة الواحدة الكاملة أي 360° ويعبر عنه L_1 وهكذا بالنسبة إلى محور التماثل L_2 إذا كان تكرار الشكل مرتين في الدورة الكاملة و L_3 و L_4 ثم L_6 .

ولقد تمكن الباحثون من إثبات ان المحاور الدورانية L_5 و L_7 و L_8 لا وجود لها في البلورات حيث انه لا يتفق والترتيب الذري في النظم البلورية المختلفة، وكذلك فان الاشكال المستطيلة والمثلثة والمربعة والمسدسة المنتظمة تستطيع ان تملأ اي حيز من دون ترك اي فراغ بها او حصول تراكب (**overlapping**) بعضها مع بعض بينما الاشكال الخماسية والسباعية وغيرها لايمكنها عمل ذلك وان ترك الفراغ بين وحدات البناء البلوري يؤدي الى عدم انتظام دورية البناء البلوري في فضاء ثلاثي الأبعاد ولهذا السبب يجب ان تكون المحاور الدورانية المناسبة المسموحة لاية بلورة ضمن الانواع الخمسة الموضحة بالاشكال التالية

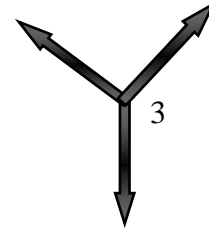
$$n=360/\alpha= 360/ 360=1 \text{ or } L_1 \quad (\text{One-fold axis})$$



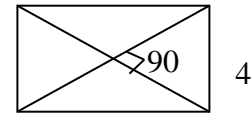
$$n=360/\alpha= 360/ 180=2 \text{ or } L_2 \quad (\text{Two-fold axis})$$

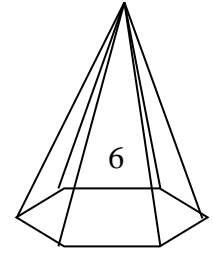


$$n=360/\alpha= 360/ 120=3 \text{ or } L_3 \quad (\text{Three-fold axis})$$

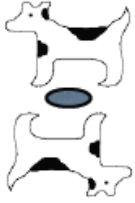


$$n=360/\alpha= 360/ 90=4 \text{ or } L_4 \quad (\text{Four-fold axis})$$





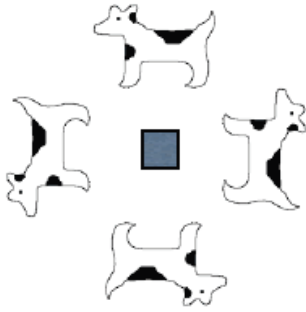
$$n=360/\alpha= 360/ 60=6 \quad \text{or } L_6 \quad (\text{Six-fold axis})$$



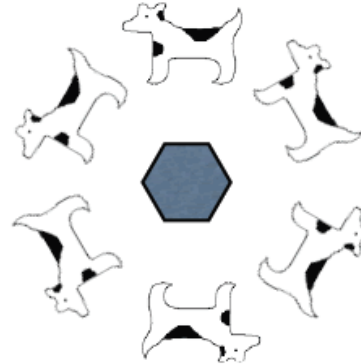
2 fold
'Diad'



3 fold
'Triad'



4 fold
'Tetrad'



6 fold
'Hexad'

د- محور التماثل الانقلابي inversion axis of symmetry

عبارة عن مستقيم إذا ما دار الشكل حوله بزاوية معينة وانعكست بأن واحد خلال نقطة معينة عليه لحل الشكل محل نفسه .

اذن من التعريف يتضح ان هذا العنصر التماثلي له عملية واحدة ذات مرحلتين متعاقبتين تبدأ بمرحلة التدوير ولا يعود الجسم الى وضعة الاصلي ولكن يعقب ذلك مرحلة الانقلاب وعند الانتهاء منها نحصل على التماثل او التكرار اي عودة الجسم الى وضعه الاصلي.

يميز محور التماثل الانقلابي بوضع علامة (-) فوق رمز محور الدوران المناسب . فعندما يقال محور التماثل الانقلابي من النوع الثاني يعبر عنه ب (2) ويقال محور انقلابي احادي (1) و محور انقلابي ثلاثي (2) و محور انقلابي رباعي (4) و محور انقلابي السداسي (6) ولا يوجد محور انقلابي خماسي.

2- عمليات التناظر symmetry operation

هي عمليات بإجرائها يعود البناء البلوري إلى وضعه الأصلي و عملية الانتقال تحت تأثير المؤثر R هي ليست العملية الوحيدة التي تتميز بها البلورة بل هناك عمليات أخرى وهي :

- ا- عملية الدوران **Rotation operation**
 ب- عملية الانعكاس **Reflection operation**
 ج- عملية الانقلاب **Inversion operation**

ويمكن تطبيق العمليات الثلاثة الأخيرة في وقت واحد عند نقطة معينة لوحدة البلورة وبذلك تعود البلورة إلى وصفها الأصلي وتسمى هذه العملية بالعملية النقطية (point operation)

10 - مميزات شبائك مكعبة

يلاحظ من الجدول (1-1) ان نظام المكعب للبلورات يتضمن ثلاث انواع من الشبائك أولها أساسي (أولي) P ويدعى المكعب البسيط (simple cubic) ويكتب مختصرا (SC) ، والثاني متمركز الجسم ا ويدعى بالمكعب المتمركز الجسم (Body-Centered Cubic) ويكتب مختصرا (BCC) ، والثالث متمركز الوجه F ويدعى بالمكعب المتمركز الوجه (Face-Centered Cubic) ويكتب مختصرا (FCC). ان كلا من BCC و FCC هي شبائك غير أولية بدليل احتواء خلية الوحدة الاعتيادية على اكثر من نقطة شبكية واحدة. ويمكن حساب المتجهات الانتقالية و ثم خلية الوحدة الاولى لكل من BCC و FCC بالطرق الاتية:

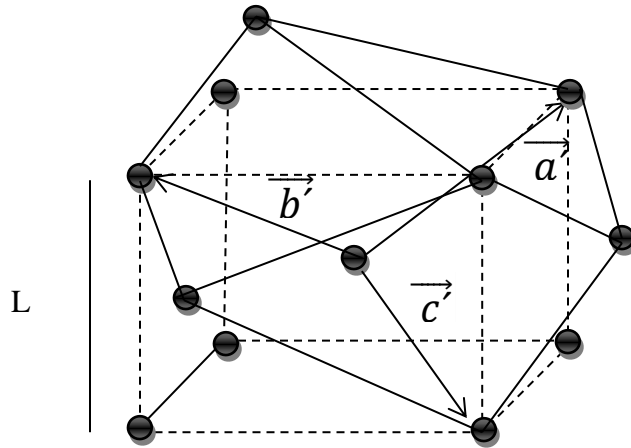
1- المكعب المتمركز الجسم BCC

ارسم ثلاثة متجهات صادرة عن نقطة شبكية في مركز المكعب واعتبرها نقطة الاصل ، بحيث تنتهي بثلاث نقاط واقعة عند اركان المكعب كما في الشكل (1-16). أكمل معيني الاوجة لتحصل على خلية الوحدة الاولى ذات المتجهات الاولى:

$$\begin{aligned}\vec{a}' &= \frac{L}{2} (\vec{X} + \vec{Y} - \vec{Z}) \\ \vec{b}' &= \frac{L}{2} (\vec{Y} + \vec{Z} - \vec{X}) \\ \vec{c}' &= \frac{L}{2} (\vec{Z} + \vec{X} - \vec{Y})\end{aligned} \quad \dots\dots\dots(1-6)$$

حيث L يمثل طول ضلع الخلية الاعتيادية ، \vec{X} ، \vec{Y} ، \vec{Z} تمثل وحدة متجهات باتجاه X ، Y ، Z على التوالي.

ان خلية الوحدة الاولى معينة الاوجه طول ضلعها $(\frac{\sqrt{3}}{2} L)$ ومحاورها \vec{a}' ، \vec{b}' ، \vec{c}' تحدث بعضها مع بعض زاوية مقدارها 109° تقريبا.



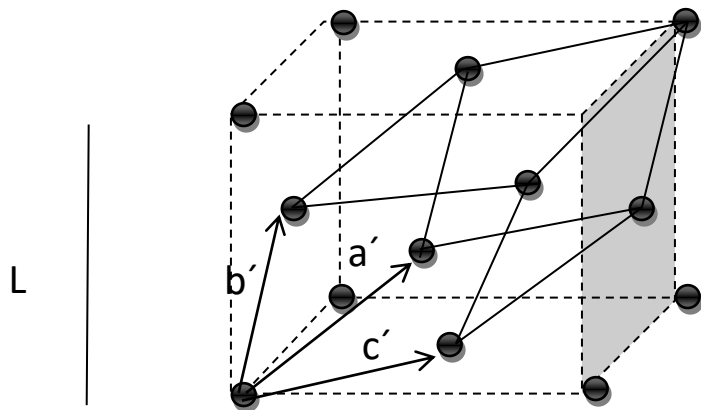
شكل (1-16)
خلية وحدة أولية
في شبكة BCC

2- مكعب متمركز الوجه FCC

ارسم ثلاثة متجهات صادرة عن نقطة شبكة في احد اركان المكعب واعتبرها نقطة الاصل، بحيث تنتهي بنقاط الشبكة الواقعة في مراكز الوجة القريبة من نقطة الاصل اي الملتقية في نقطة الاصل كما في الشكل (1-17). أكمل معيني الوجة لتحصل على خلية الوحدة الاولى ذات المتجهات الاولى:

$$\begin{aligned} \vec{a}' &= \frac{L}{2} (\vec{X} + \vec{Y}) \\ \vec{b}' &= \frac{L}{2} (\vec{Y} + \vec{Z}) \\ \vec{c}' &= \frac{L}{2} (\vec{Z} + \vec{X}) \end{aligned} \quad \dots\dots\dots(1-7)$$

وهذا يعني ان طول ضلع الخلية الاولى هو $(\frac{L}{\sqrt{2}})$ ومحاورها تحدث بعضها مع بعض زاوية مقدارها 60° .



شكل (1-17)
خلية وحدة أولية في
شبكة FCC

والجدول (1-2) يبين خصائص الشبكات المكعبة وهي المكعب البسيط (Sc) والمكعب الممرکز الجسم (bcc) والمكعب الممرکز الأوجه (Fcc)

المكعب متمرکز الوجة Fcc	المكعب متمرکز الجسم bcc	المكعب البسيط sc	الخاصية
a^3	a^3	a^3	حجم وحدة الخلية
4	2	1	عدد نقاط الشبكة لكل وحدة خلية
$4/a^3$	$2/a^3$	$1/a^3$	عدد نقاط الشبكة لكل وحدة حجم
$\frac{a^3}{4}$	$\frac{a^3}{2}$	a^3	حجم الخلية الاولية
12	8	6	عدد النقاط المجاورة لنقطة ما من الدرجة الاولى
$\frac{a}{\sqrt{2}}$	$a\frac{\sqrt{3}}{2}$	a	المسافة بين نقطتين متجاورتين من الدرجة الاولى
6	6	12	عدد النقاط المجاورة لنقطة ما من الدرجة الثانية
a	a	$a\sqrt{2}$	المسافة بين نقطتين متجاورتين من الدرجة الثانية
0.74	0.68	0.52	نسبة الملء

تتفاوت الانواع الثلاثة للشبائك المكعبة في نسبة الملء (filling fraction) او نسبة الرص (packing fraction).

تعرف نسبة الملء (الرص) بأنه أكبر نسبة من الحجم الذي يمكن أن تشغله الذرات الموجودة في خلية الوحدة .

$$\text{نسبة الملء (P.F)} = \frac{\text{حجم الذرات في الخلية}}{\text{حجم الخلية}} = \frac{\text{حجم الذرة الواحدة} \times \text{عدد الذرات المكونة للاساس}}{\text{حجم الخلية}} \quad (1-8)$$

فإذا كان عدد الذرات في خلية الوحدة n ، وحجم كل ذرة V ونصف قطرها r ، وطول ضلع المكعب a فان

$$P.F = \frac{n \times V}{a^3} \quad \dots\dots\dots(1-9)$$

$$V = \frac{4}{3} \pi r^3 \quad \text{حيث ان الحجم يعطى بالعلاقة } r^3$$

لغرض حساب نسبة الملاء نفترض أن الذرات عبارة عن كرات صلبة متساوية القطر ومتماسكة، أي متلاصقة الرص (متجاورة جدا أي في حالة تماس) أي ان اقصر مسافة بين نقطتي شبكية تمثل قطر الذرة عندما تترافق ذرة واحدة نقطة شبكية. وعندما تترافق ذرتان نقطة شبكية واحدة كما في بلورة الماس أو أيونات كما هو الحال في بلورة كلوريد الصوديوم تمثل اقصر مسافة بين ذرتين (أويونين) قطر الذرة.

مثال

احسب نسبة الملاء لبلورة الباريوم علما ان شبكية بلورة الباريوم شبكية مكعبة متمركزة الجسم (BCC).

الجواب

ان عدد نقاط الشبكية لكل خلية اعتيادية = 2 وتترافق كل نقطة شبكية ذرة واحدة، لذلك يكون عدد الذرات في الخلية الاعتيادية = 2

ان اقصر مسافة بين ذرتين (مسافة الجوار الاول) = نصف قطر المكعب ($\frac{\sqrt{3}}{2} L$) ويساوي قطر الذرة

$$\text{الواحدة } (2r) \text{ اي } [2r = (\frac{\sqrt{3}}{2}) L] \text{ اذن}$$

$$P.F = \frac{n \times V}{a^3}$$

$$P.F = \frac{4}{3} \pi r^3 \left(\frac{2}{L^3}\right)$$

$$\therefore P.F = \frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{3}}{4} L\right)^3 \times \left(\frac{2}{L^3}\right) \quad \text{where } 2r = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right) L \rightarrow r = \left(\frac{\sqrt{3}}{4}\right) L$$

$$P.F = 0.68$$

H.w

احسب نسبة الملاء للشبكية FCC وللشبكية المكعبة SC.

مثال

احسب مسافة الجوار الاول لشبكية BCC

الجواب

$$(AB)^2 = (AC)^2 + (CB)^2$$

$$(CB)^2 = L^2 + L^2 = 2 L^2$$

$$(r + 2r + r)^2 = L^2 + 2 L^2$$

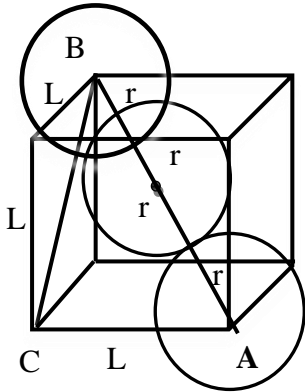
$$(4r)^2 = 3 L^2$$

$$16r^2 = 3 L^2$$

بأخذ الجذر للطرفين

$$4r = \sqrt{3} L$$

$$2r = \frac{\sqrt{3} L}{2}$$



H.w

احسب مسافة الجوار الاول للشبيكة مكعبة متمركزة الوجه FCC وللشبيكة المكعبة SC .

مثال

اوجد حجم خلية الوحدة الاولية لشبيكة BCC

الجواب

$$\vec{a}' = \frac{L}{2} (\vec{X} + \vec{Y} - \vec{Z})$$

$$\vec{b}' = \frac{L}{2} (\vec{Y} + \vec{Z} - \vec{X}) \dots\dots\dots(1-6)$$

$$\vec{c}' = \frac{L}{2} (\vec{Z} + \vec{X} - \vec{Y})$$

$$\vec{a}' \times \vec{b}' = \frac{L}{2} (\vec{X} + \vec{Y} - \vec{Z}) \times \frac{L}{2} (\vec{Y} + \vec{Z} - \vec{X})$$

$$\vec{a}' \times \vec{b}' = \frac{L^2}{4} (\vec{Z} - \vec{Y} - 0 + 0 + \vec{X} + \vec{Z} + \vec{X} + 0 + \vec{Y})$$

$$\vec{a}' \times \vec{b}' = \frac{L^2}{4} (2\vec{X} + 2\vec{Z})$$

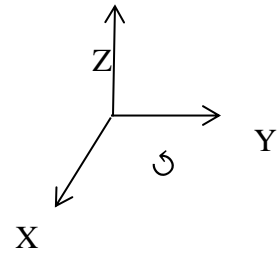
$$\vec{a}' \times \vec{b}' = \frac{L^2}{2} (\vec{X} + \vec{Z})$$

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

$$V = \frac{L^2}{2} (\vec{X} + \vec{Z}) \cdot \frac{L}{2} (\vec{Z} + \vec{X} - \vec{Y})$$

$$V = \frac{L^3}{4} (0+1-0+1+0-0)$$

$$V = \frac{L^3}{2}$$



H.W

اوجد حجم خلية الوحدة الاولية لشبيكة FCC

H.W

يتبلور الحديد بترتيب ذري مكعبي متمركز الجسم (bcc) ، احسب مقدار ثابت

الشبيكة Lattice Constant (طول ضلع خلية الوحدة a) علماً بأن:

كثافة الحديد $\rho = 7.94 \text{ g/cm}^3$ ووزنه الذري (w) = 55.85

وعدد أفوكادرو = 6.02×10^{23} .

11-المستويات البلورية ومعاملاتها (crystal planes and their indicis)

معاملات ميلر طريقة رياضية وصفية لتوجه المستوي البلوري أو مجموعة المستويات البلورية ضمن الشبكة البلورية المتعلقة بخلية الوحدة والتي ابتكرها العالم ميلر William Hallows Miller. هذه المعاملات مفيدة لفهم العديد من الظواهر في علم المواد وخصوصا البلورات المفردة وشكل البنية الماكروية microstructure من خلال حيود أشعة السينية، والعيوب البلورية وحركتها التي تحدد الخواص الميكانيكية للمادة.

لوصف الحالة الفيزيائية للبلورات يجب تحديد مواضع واتجاه المستويات البلورية التي تتحدد من اجل أي مستوي بلوري بواسطة ثلاثة نقاط ليست على استقامة واحدة يتحدد من خلالها إحداثيات المستوي البلوري شرط وقوع النقاط على المحاور البلورية.

يمكننا تحديد ما سبق بأن نختار جملة محاور إحداثية تنطبق وتتفق في الاتجاه مع أضلاع الخلية البدائية بحيث يقع مبدأ هذه المحاور على إحدى نقاط الشبكة البلورية حيث تتقاطع أضلاع الخلية البدائية. من وجهة نظر البنية البلورية يمكن تحديد وضع المستوي البلوري واتجاهه بواسطة اصطلاح يستعمل لوصف المستويات البلورية والاتجاهات في البلورة يسمى بمعاملات ميلر وهي مفيدة جدا في اصطلاح الشبكة المقلوبة كما سنرى فيما بعد. لغرض تمثيل المستويات البلورية وإيجاد اتجاهاتها وجدت عدة طرق ومن أهمها طريقة التقاطع وطريقة ميلر.

a- طريقة التقاطع Intercepts method

وفيها يمثل أي مستوى في البلورة بنسب أطوال تقاطع هذا المستوى مع المحاور الثلاثة الأساسية

$$x, y, z$$

مثال: إذا كانت نقاط تقاطع المستوى مع الإحداثيات هي 4,0,0 و 0,1,0 و 0,0,2 بالنسبة للمتجهات المحورية ونقطة أصل ما. فمن الممكن تحديد المستوى بنقاط التقاطع 4,1,2

b- طريقة ميلر Miller method

لقد وجد العالم الانكليزي ميلر في عام 1800 أن من المفيد تحديد ميل المستويات بمعاملات وكما

يأتي:

1. نحدد تقاطع المستوي البلوري مع المحاور الثلاثة (\vec{X} , \vec{Y} , \vec{Z}) ونعبر عن إحداثياتها كأعداد بواسطة أطوال المتجهات الأولية للشبكة البلورية \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} .
2. نأخذ مقلوب تلك الأعداد ثم نوجد المقامات بأصغر الأعداد الصحيحة بشرط أن يكون القاسم المشترك الأكبر بينها يساوي الواحد فتكون تلك الأعداد هي معاملات ميلر وتوضع النتيجة بين قوسين على الشكل (hkl) حيث الرموز بين القوسين هي الإحداثيات الجديدة وفق قواعد ميلر. وإذا قطع المستوى أحد الإحداثيات في الجهة السالبة، فإن الطول المقطوع يكون سالباً وتوضع علامة (-) فوق معامل ميلر المناظر، مثلا إذا قطع المحور Y بالاتجاه السالب تكون قيمة k سالبة وتكتب معاملات ميلر بالشكل (h \bar{k} l) إذا كان أحد الأطوال المقطوعة لانهاية في طوله، أي أن المستوى يوازي أحد المحاور، فإن معامل ميلر المناظر يساوي صفراً، مثلا ان السطح موازيا للمحور Z اي يقطع المحور Z في المالا نهائية عندئذ تكون قيمة l تساوي صفرا وتكتب معاملات ميلر بالشكل (h k 0).

مثال

$$x=3a, y=2b, z=1c$$

$$x/a=3, y/b=2, z/c=1$$

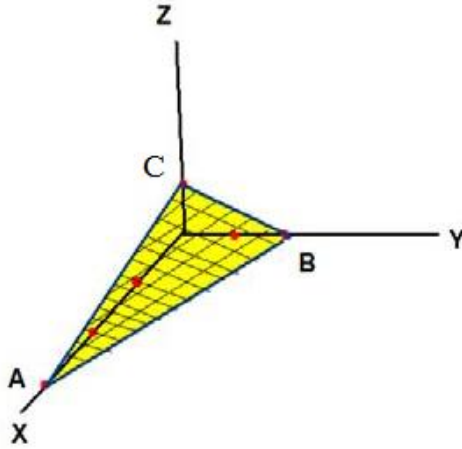
$$\frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{1}{1}$$

$$\frac{2}{6}, \frac{3}{6}, \frac{6}{6}$$

وبالتالي فان مقلوب (التقاطعات) الأعداد هو

وبتوحيد المقامات حيث المقام المشترك (6) نجد

ومنه فان الأعداد 2 و 3 و 6 هي معاملات ميلر ونكتب $h=2, k=3, l=6$ وبشكل مختصر (236) أنظر الأشكال المختلفة حيث يتبين عليها معاملات معاملات ميلر

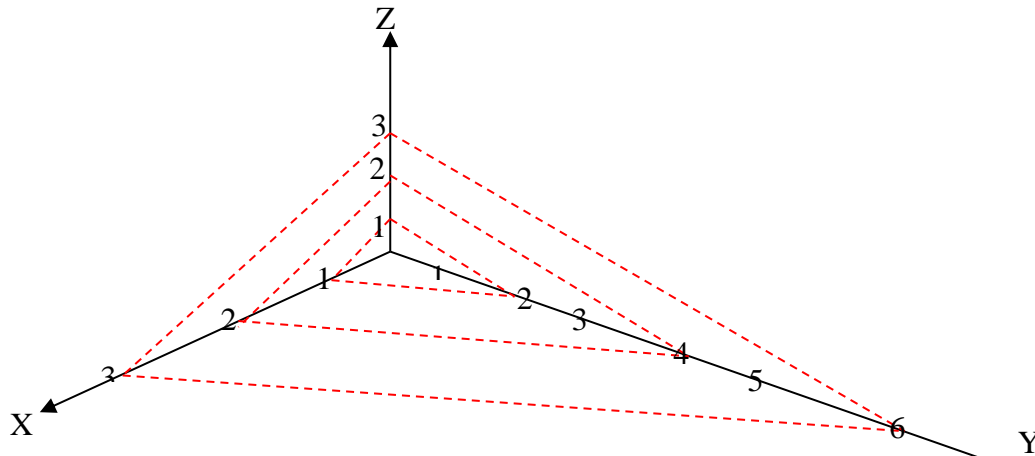


$$1,2,1 \rightarrow 1,1/2,1 \rightarrow (2,1,2) \rightarrow (2 \ 1 \ 2)$$

$$2,4,2 \rightarrow 1/2,1/4,1/2 \rightarrow (2,1,2) \rightarrow (2 \ 1 \ 2)$$

$$3,6,3 \rightarrow 1/3,1/6,1/3 \rightarrow (2,1,2) \rightarrow (2 \ 1 \ 2)$$

إن هذا يعني أن المستويات الثلاثة المرسومة يرجعان إلى نفس المجموعة وان معاملات ميلر ترمز إلى مستوى واحد أو مجموعة من المستويات المتوازية. اي ان معاملات ميلر لسطح لاتعني بالضرورة سطحا منفردا بل قد تعني مجموعة من السطوح المتوازية المتساوية الفسخ توصف جميعها بمعاملات ميلر



ان المعنى الحقيقي لمعاملات ميلر $(h \ k \ l)$ هو ان السطح يقطع المحور x الى h من الاجزاء والمحور y الى k من الاجزاء والمحور z الى l من الاجزاء. وعند معرفة معاملات ميلر

لاي سطح يمكننا معرفة التقاطعات التي يحدثها ذلك السطح مع المحاور البلورية و ثم موقع وتوجيه هذا السطح داخل البلورة.

تعيين موقع المستويات داخل البلورات المكعبة

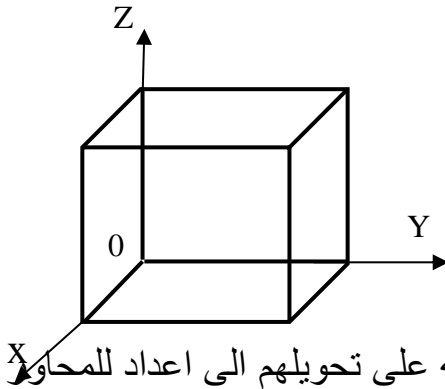
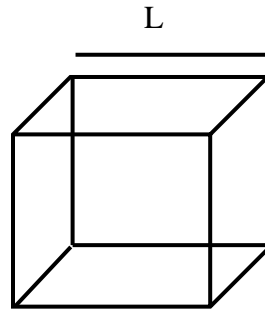
يتم تعيين المستويات في البلورات المكعبة بنفس الطريقة المذكوره انف مضافا اليها نقطة اخرى وهي تحديد طول ضلع وحدة الخلية.

مثال

ارسم المستوي (1 1 1) في بلورة مكعبة الشكل.

الحل

1. ارسم مكعب وحدد طول ضلعه فليكن مقداره وحده واحدة كما في الشكل



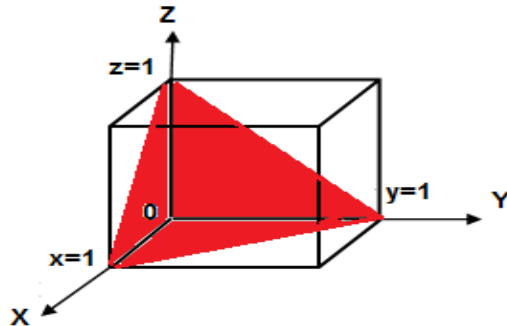
2. عين المحاور الثلاثة x,y,z وعين نقطة الاصل

3. خذ مقلوب معاملات ميلر وضع بينهما فارزه للدلالة على تحويلهم الى اعداد للمحاور الكارتيزية

$$\frac{1}{1} \quad \frac{1}{1} \quad \frac{1}{1}$$

$$X=1, y=1, z=1$$

4. عين النقاط على المحاور المرسومه داخل المكعب ثم اوصل النقاط الثلاثة ثم ظلل الشكل الناتج لتحصل على المستوي المطلوب.



مثال

ارسم المستوي (110) داخل بلورة مكعبة

الحل

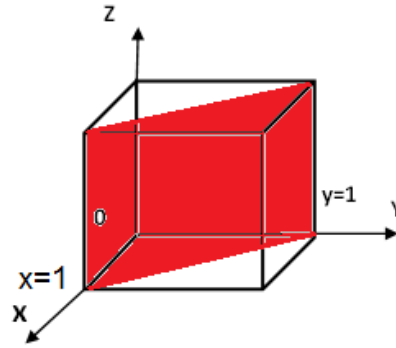
نستخدم الخطوات (1,2) بالمثل السابق

ان مقلوب معاملات ميلر هي

$$\frac{1}{1}, \frac{1}{1}, \frac{1}{0}$$

$$X=1, y=1, z=\infty$$

اي ان المستوي يقطع المحور x عند $x=1$
والمحور y عند $y=1$ ويوازي المحور z ويقطعه
بالمالانهاية



مثال

ارسم المستوي $(0\bar{1}\bar{1})$ داخل بلورة مكعبة

الحل

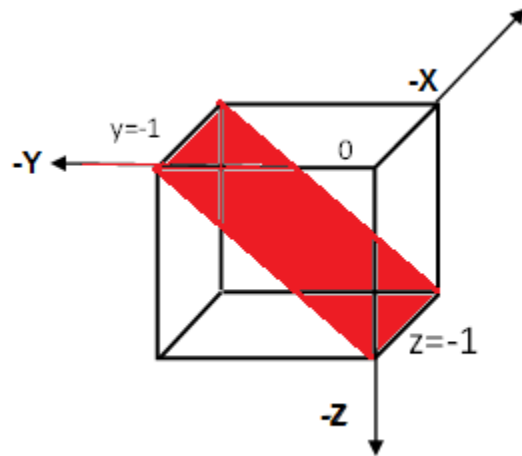
نستخدم الخطوات (1,2) بالمثل السابق

ان مقلوب معاملات ميلر هي

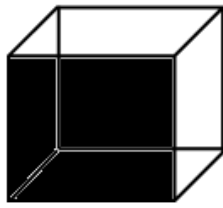
$$\frac{1}{0}, \frac{1}{\bar{1}}, \frac{1}{\bar{1}}$$

$$X=\infty, y=-1, z=-1$$

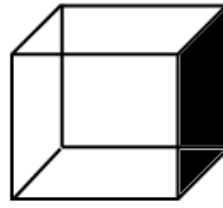
اي ان المستوي يقطع المحور y عند $y=-1$ والمحور z
عند $z=-1$ ويوازي المحور x ويقطعه بالمالانهاية



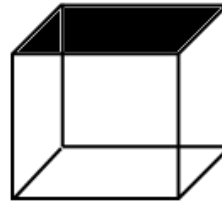
ان أوجة المكعب الستة



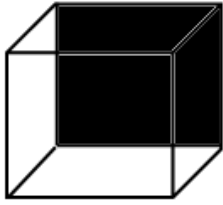
(100)



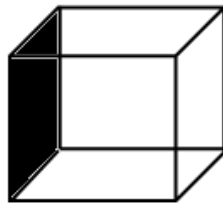
(010)



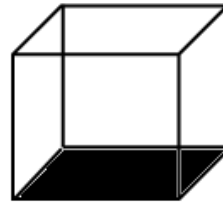
(001)



($\bar{1}00$)



(0 $\bar{1}0$)



(00 $\bar{1}$)

ويرمز لعائلة أسرة (مجموعة) المستويات المتكافئة بالتمائل، على سبيل الاختصار هكذا $\{hkl\}$ ففي البلورة المكعبة تضم عائلة المستويات $\{100\}$ كل أوجه المكعب $(0\bar{1}0)$, $(00\bar{1})$, (100) , (010) , (001) , $(\bar{1}00)$.

H.W

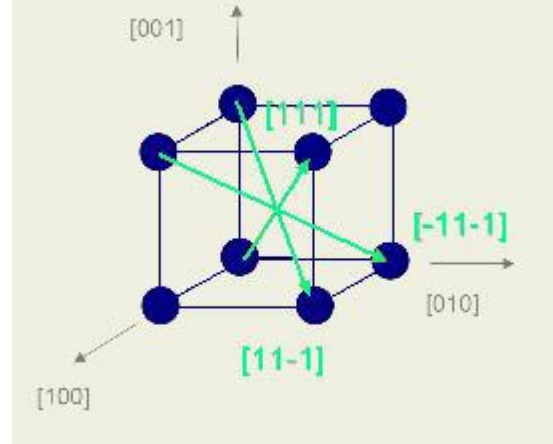
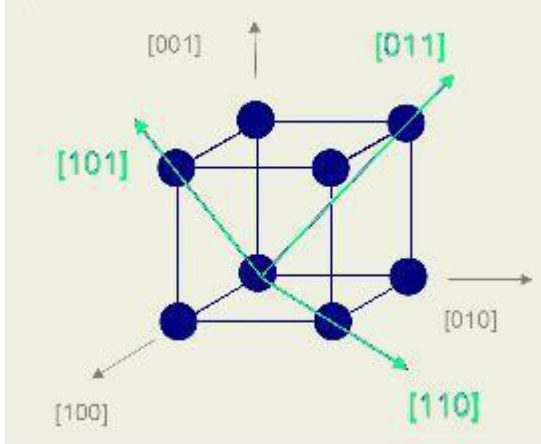
ارسم المستويات التالية:

$(\bar{1}22)$, $(11\bar{1})$, (020) , (120) , $(0\bar{1}0)$

12-الاتجاهات البلورية crystal direction

تستخدم إحداثيات مماثلة لإحداثيات ميلر لتحديد الاتجاهات داخل البلورة، وهي أيضاً أعداد صحيحة لا يوجد بينها قاسم مشترك، وتتناسب مع المركبات الأساسية لمتجه له الاتجاه المطلوب، وتكتب بين قوسين مربعين على الصورة $[u v w]$ في حالة البلورة المكعبة الاتجاه الموجب للمحور X هو $[100]$ والاتجاه Y هو $[010]$ والاتجاه Z هو $[001]$ ويرمز لمجموعة الاتجاهات المتكافئة على الصورة $\langle u v w \rangle$. فعائلة الاتجاهات المتكافئة $\langle 011 \rangle$ تضم الاتجاهات:

$[011]$, $[101]$, $[110]$, $[0\bar{1}\bar{1}]$, $[\bar{1}0\bar{1}]$, $[\bar{1}\bar{1}0]$



12- نطاق المستويات *Zones of planes*

يسمى اتجاه ما في بلورة بمحور المنطقة او النطاق او القطاع (Zone-axis). ان محور النطاق يمثل اتجاها مشتركا على طول تقاطع مجموعة من السطوح، ويقال للسطوح المتقاطعة بان لها اتجاه مشترك واحد او محور نطاق واحد وانها تنتمي الى النطاق نفسه. ويعبر عن محور النطاق بشكل $[u v w]$ ، حيث ان u, v, w تحدد متجه t (مقاسا من نقطة اصل البلورة) وفق المعادلة الاتجاهية

$$\vec{t} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} \quad \dots\dots\dots(1-10)$$

ان معاملات ميلر $(h k l)$ للسطح المنتمي الى نطاق معاملات محوره $[u v w]$ يجب ان تخضع للعلاقة الجبرية:

$$hu + kv + lw = 0 \quad \dots\dots\dots(1-11)$$

وهذا يعني ان اس سطح $(h k l)$ يحوي الاتجاه $[u v w]$ اذ تحققت المعادلة (1-11).

يمكن حساب معاملات محور النطاق $[u v w]$ لسطحين متقاطعين مثل $(h_1 k_1 l_1)$ و $(h_2 k_2 l_2)$ كما يأتي

$$\begin{aligned} u &= k_1l_2 - k_2l_1 \\ v &= l_1h_2 - l_2h_1 \\ w &= h_1k_2 - h_2k_1 \end{aligned} \quad \dots\dots\dots(1-12)$$

ويمكن استخدام المعادلة (1-13) لحساب معاملات ميلر (hkl) للسطح الذي يحوي الاتجاهين $[u_1v_1w_1]$ و $[u_2v_2w_2]$ وفقا للعلاقات الاتية:

$$\begin{aligned} h &= v_1w_2 - v_2w_1 \\ k &= w_1u_2 - w_2u_1 \\ l &= u_1v_2 - u_2v_1 \end{aligned} \quad \dots\dots\dots(1-13)$$

فالسطح الذي يحوي الاتجاهين $[110]$ و $[211]$ هو $(1 \bar{1} 1)$

$$\begin{aligned} h &= (1 \times 1) - (0) = 1 \\ k &= (0) - (1 \times 1) = -1 \\ l &= (1 \times 1) - (2 \times 1) = -1 \end{aligned}$$

13- الزاوية بين مستويين *Angle between planes*

لايجاد الزاوية (θ) بين مستويين، يجب معرفة معاملات ميلر لكل مستوي منتمي الى نطاق له معاملات

متجه محور النطاق $[uvw]$ ولايجاد العلاقة الرياضية نرسم للمستوي الاول \vec{A} والمستوي الثاني \vec{B}

$$\vec{A} = h_1 \vec{u}_1 + k_1 \vec{v}_1 + l_1 \vec{w}_1$$

$$\vec{B} = h_2 \vec{u}_2 + k_2 \vec{v}_2 + l_2 \vec{w}_2$$

و بتطبيق العلاقة الرياضية التالية

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = |A||B| \cos \theta$$

$$\cos \theta = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)}} \dots \dots \dots (1 - 14)$$

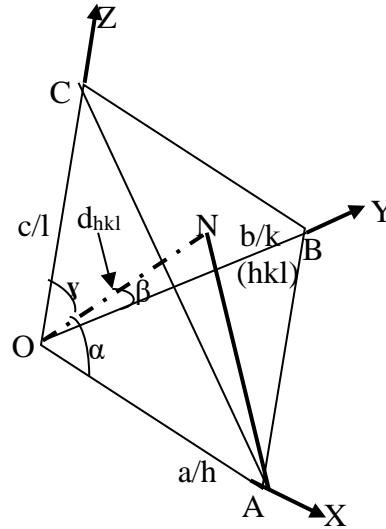
مثال أحسب الزاوية بين المستويين (100) و (010)

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

بالتعويض نجد أن $\theta = \cos^{-1} 0 \Rightarrow \theta = 90$

14-المسافة البينية بين المستويات Inter planer distance

ان البلورة متكونة من عدد من المستويات يفصل بعضها عن بعض مسافة بينية يرمز لها بالرمز (d_{hkl}) . يمكن حساب المسافة البينية بين المستويات التي لها نفس معاملات ميلر ، ان معاملات ميلر للمستوي (hkl) المبين بالشكل (1-18) هي



الشكل (1-18)

بما ان المحاور متعامدة فيكون المثلث ONA قائم الزاوية ،وان المسافة الفاصلة بين نقطة الاصل والمستوي (abc) هي :

$$ON = OA \cos \alpha$$

حيث ان α, γ, β هي الزوايا التي يصنعها العمود ON مع الاتجاهات X, Y, Z على الترتيب. ونسب تقاطع المستوي او السطح مع المحاور الرئيسييه هي $\frac{a}{h}, \frac{b}{k}, \frac{c}{l}$.

$$ON = d_{hkl}$$

$$\therefore d_{hkl} = OA \cos \alpha$$

$$OA = \frac{a}{h} \text{ وبما أن}$$

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

$$\therefore \cos^2 \alpha = \frac{h^2}{a^2} d^2_{hkl}$$

وكذلك نجد في المثلثين ONB, ONC ان

$$(OB = \frac{b}{k}) \cos^2 \beta = \frac{k^2}{b^2} d^2_{hkl}$$

$$(OC = \frac{c}{l}) \cos^2 \gamma = \frac{l^2}{c^2} d^2_{hkl}$$

$$+\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1$$

وبما أن

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

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

ففي حالة النظام المكعبي تكون $a=b=c=a$ وهو طول ضلع المكعب ويطلق عليه ايضا ثابت الشبكة (lattice constant)

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

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

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \dots\dots\dots(1- 15)$$

مثال جد المسافة البينية للمستويات في البلورة المكعبة للمستوي (100) اذا علمت ان ثابت الشبكة يساوي (4\AA)

الحل

باستخدام المعادلة (1-15) نجد أن

$$d_{hkl} = d_{100} = \frac{4}{\sqrt{1+0+0}}$$

$$d_{100} = 4\text{\AA}$$

H.W

س/ اشتق علاقة بين d_{hkl} ومحاور الشبكة الحقيقية لكل من الأنظمة التالية :

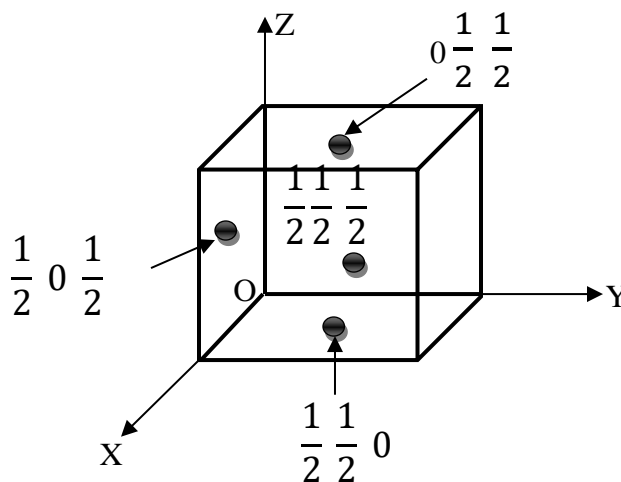
أ- المعيني القائم

ب- الرباعي القائم

15 - موقع في خلية الوحدة / position in the unit cell

ان مواضع النقط داخل خلية الوحدة فيتم تحديدها بدلالة إحداثيات الشبكة X,Y,Z حيث كل محور من هذه المحاور يمتلك جزء من الاتجاهات الاساسية $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ للبلورة. يؤخذ موقع نقطة الأصل دائماً عند ركن خلية الوحدة، ويعبر عن الموضع بالاحداثيات 0 0 0، بينما احداثيات النقطة الواقعة في ركن الخلية المقابل البعيد عن نقطة الاصل 111. ان احداثيات النقطة الموجودة داخل خلية ممرزة الجسم (BCC) هي $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ ، اما إحداثيات النقاط الموجودة في اوجه خلية ممرزة الوجه (FCC) هي مراكز الأوجه هي : $0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$ كما في الشكل (1-19). لقد اصطلح على كتابة الكميات الدالة على موقع نقطة بغير استعمال اي نوع من الاقواس او الاشارات

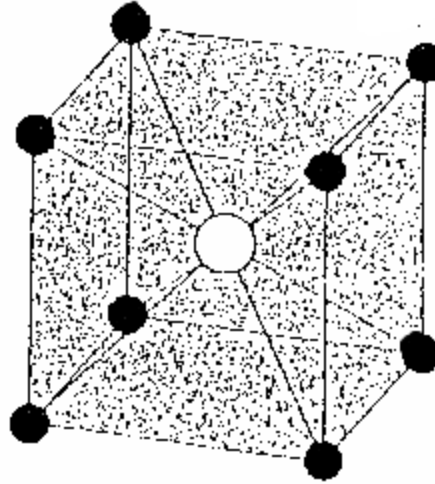
الشكل (1-19)



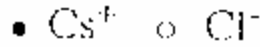
16- تراكيب بلورية بسيطة simple crystal structure

(أ) كلوريد السيزيوم Cs Cl

تنتمي إلى النظام البلوري المكعب متمركز الجسم (BCC) طول ضلعها 4.11 \AA ، بينما الاساس مكون من ايونين هما ايون Cs^+ وايون Cl^- المسافة بينهما بقدر نصف قطر خلية الوحدة المكعبة كما في الشكل (1-20). تشغل أيونات السيزيوم Cs^+ أركان خلية الوحدة، أي النقاط 000، بينما يشغل أيون الكلور Cl^- مركز جسم المكعب $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ ، وفي الحقيقة ان ايونات Cs تحتل جميع مواقع نقاط الشبكة الموجودة في رؤوس الخلية المكعبة ولكن جميع هذه الايونات الثمانية تعادل ايونا واحدا وبذلك يكون هناك ايونان في الخلية الواحدة احدهما Cs والآخر Cl اي جزيئة واحدة من كلوريد السيزيوم لكل خلية وحده



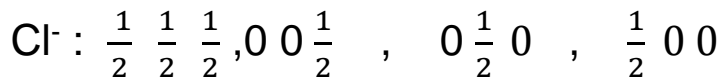
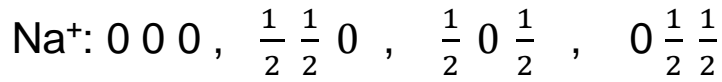
شكل (1-20):



بلورة كلوريد السيزيوم

(ب) كلوريد الصوديوم NaCl

ينتمي إلى النظام البلوري المكعب المتمركز الوجوه طول ضلع الخلية 5.63 \AA ، أي أن الخلية الاعتيادية الواحدة تحوي أربع نقاط شبكية يرافق كل نقطة منها أساس مكون من أيونين أحدهما Na^+ والآخر Cl^- تفصلهما مسافة قدرها نصف قطر خلية الوحدة المكعبة ولذلك تضم خلية الوحدة الاعتيادية أربعة جزيئات من كلوريد الصوديوم. وتوزع أيونات Na^+ و Cl^- على المواقع الآتية:



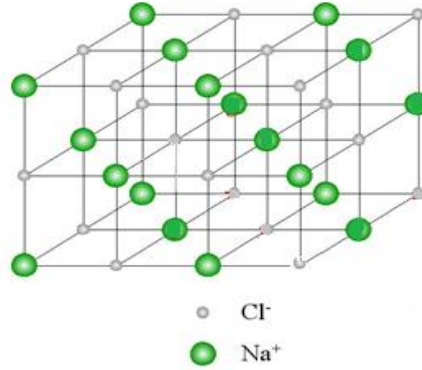
أي أن أيونات Na تحتل رؤوس الخلية المكعبة الثمانية ومراكز أوجهها الستة بينما تحتل أيونات Cl مركز الخلية ومنتصفات اضلاعها الاثني عشر حيث أن كل أيون يقع في منتصف ضلع الخلية، يكون مشاركا لأربع خلايا متجاورة وبذلك تكون مساهمته بمقدار $\frac{1}{4}$ أيون. فعندما

نقول أن أيون Cl موجود في $\frac{1}{2} 0 0$ مثلا يعني ضمنا وجود أربعة أيونات Cl في المواقع

$\frac{1}{2} 0 0, \frac{1}{2} 1 0, \frac{1}{2} 0 1, \frac{1}{2} 1 1$ $\frac{1}{2} 0 0$ وتعاذل جميعها أيونا واحدا وكأنه موجود في $\frac{1}{2} 0 0$ ،

الشكل (1-21) يبين خلية وحدة اعتيادية لبلورة كلوريد الصوديوم ويتضح أن كل أيون يكون

محاطا بستة ايونات مخالفة له وتعتبر جارا اول لذلك الايون (وعليه يكون العدد التناسقي ل NaCl يساوي 6) ، وهناك امثلة عديدة على هذا التركيب مثل كلوريد البوتاسيوم KCl وكبريتات الرصاص PbS .



الشكل (1-20)

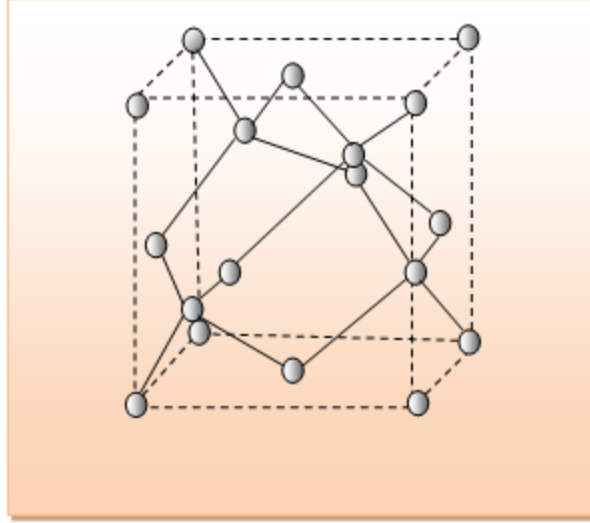
(ج) التركيب البلوري للألماس:

ينتمي إلى النظام المكعب متمركز الأوجه (FCC) طول ضلع الخلية 3.56 \AA والوحدة البنائية الأساسية (القاعدة) المرافقة لكل نقطة شبكية تتكون من ذرتي كربون إحداثياتهما هي $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$ و $0, 0, 0$ ويحيط بكل ذرة أربع ذرات هي أقرب جيرانها (عدد التناسق)، وتحتوي وحدة الخلية ثماني ذرات كربون مواقع ذراتها في وحدة الخلية هي:

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

$$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}$$

ويعتبر التركيب الماسي فارغاً نسبياً، حيث إن نسبة الملء تقدر بنسبة 0.34 فقط. ويمكن اعتبار التركيب الماسي مكوناً من شبكتين فرعيتين من نوع المكعب متمركز الأوجه، ثم تداخلت هاتان الشبكتان الفرعيتان بإزاحة مقدارها $\frac{1}{4}$ طول قطر المكعب. ويبين الشكل (1-22) وحدة خلية الألماس.



الشكل (1-22) وحدة خلية الالماس

(د) تركيب الرص المتلاصق (close-packed structures):

بفرض أن ذرات المادة تشبه كرات والسؤال الذي يطرح نفسه كيف يمكن ترتيب هذه الكرات فضائياً بحيث يكون الفراغ بينها أقل ما يمكن تشير الدراسات أن هناك طريقتين:

الطريقة الأولى : تؤدي إلى تركيب ذو بنية مكعبية تسمى بنية المكعب متلاصق الرص (ccp) (cubic close packed)

الطريقة الثانية :تؤدي إلى تركيب ذو بنية سداسية تسمى التركيب السداسي متلاصق الرص (hcp) (Hexagonal close packed)

وفي كلتا الطريقتين نبدأ برص الطبقة الأولى A بحيث تلامس كل ذرة (كرة) ست ذرات أخرى تحيط بها، ثم توضع الطبقة الثانية B فوق الأولى بنفس الكيفية، بشرط أن تلامس أي ذرة فيها ثلاث ذرات في الطبقة الأولى، أي تكون كل ذرة في الطبقة B فوق أحد الفجوات في الطبقة A .

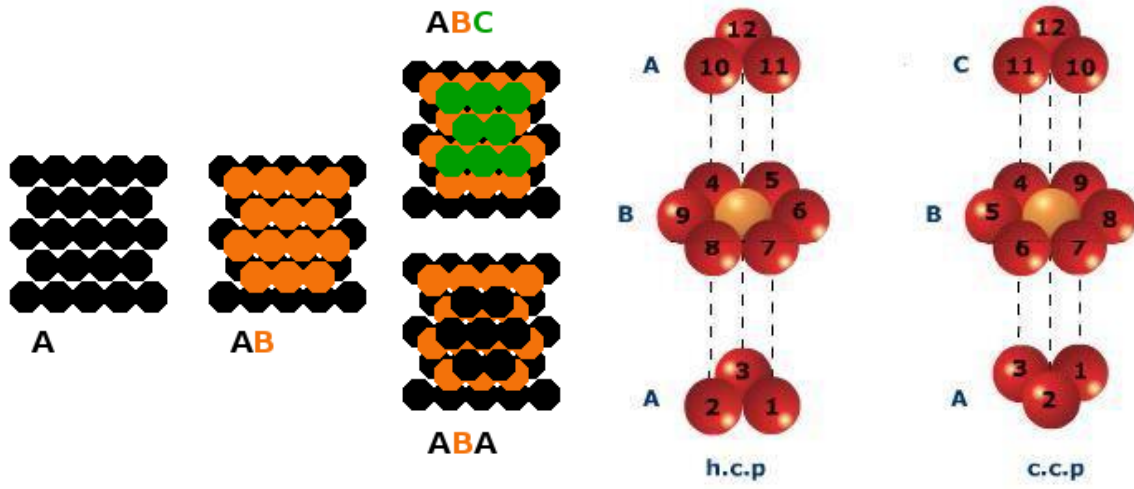
والآن، لإضافة الطبقة الثالثة C نجد أن هناك احتمالين كما في شكل (1-23)

أولاً: توضع ذرات الطبقة C فوق الفجوات الموجودة في كل من الطبقتين A, B فتكون الطبقة الثالثة فوق الطبقة A تماماً ونحصل على الترتيب الفراغي... ABC ABC... هذا يؤدي إلى التركيب المكعب متمركز الوجوه أي بنية المكعب متلاصق الرص (ccp) .

وهو متلاصق الرص بعد تناسق =12 ، ومن أمثلته :النحاس والفضة والذهب والنيكل.

ثانياً: توضع ذرات الطبقة الثالثة فوق ذرات الطبقة الأولى تماماً، فيكون الترتيب الذري في الطبقات على هيئة... ABAB... وهذا يعطي التركيب السداسي متلاصق الرص (hcp) ويتميز بعدد تناسق =12 ومن

أمثلته :الزنك والكاديوم والمغنسيوم . ويعزى لخاصية الرص المتلاصق أن معظم الفلزات تميل إلى أن تتبلور بترتيب ذري تكعيبي أو سداسي.



الشكل (1-23)