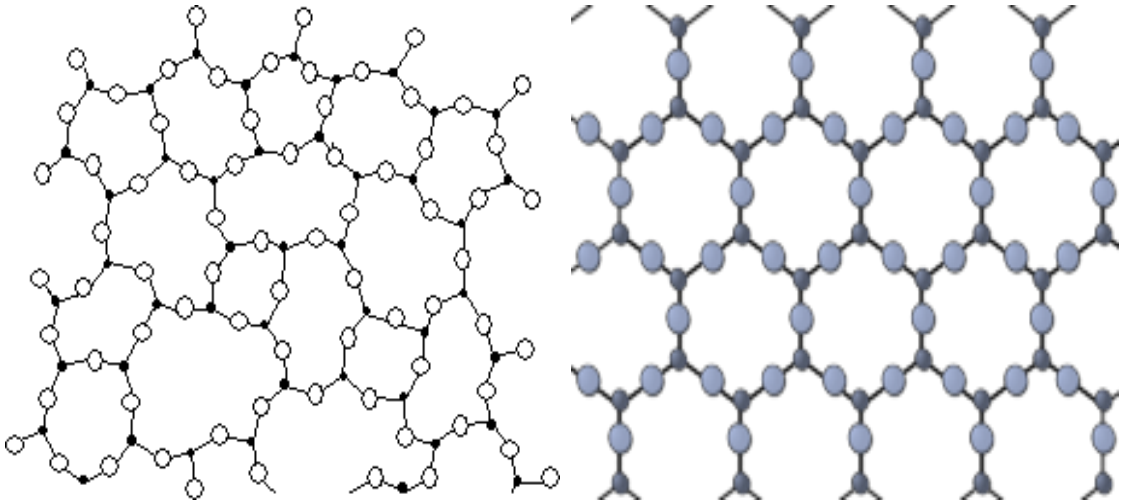
الفصل الأول: الشبكة البلورية و التركيب البلوري

مقدمة

تتكون المادة في حالاتها الثلاث المعروفة، الغازية و السائلة و الغازية، من ذرات أو جزيئات دائمة الحركة. و يعزي وجود المادة في إحدى هذه الحالات إلى طبيعة و حدود التأثيرات المتبادلة بين ذراتها و جزيئاتها. و يمكن تمييز كل حالة عن الأخرى فيزيائيا بالنظر في خاصية السريان أو التدفق حيث تكون المادة في حالتيها الغازية و السائلة قابلة للانسياب و التشكل بشكل الاناء الذي توضع فيه، بينما تفقد المادة الغازية أو السائلة قدرتها على التدفق عندما تتحول إلى الحالة الصلبة بعد تبريدها، و تتخذ شكلا و حجما ثابتين.

تصنف المواد الصلبة عموما الى صنفين (الشكل 1)، مواد بلورية (الشكل 1–أ) كالمعادن و أغلب المركبات الكيميائية و السبائك و مواد صلبة لا بلورية (الشكل 1–ب) كالزجاج و الشمع و البوليمرات. كما أن بعض المواد السائلة و الغازية عند تجمدها تتحول الى مواد بلورية كالثلج و الغازات الخاملة.



(ب)　　(أ)

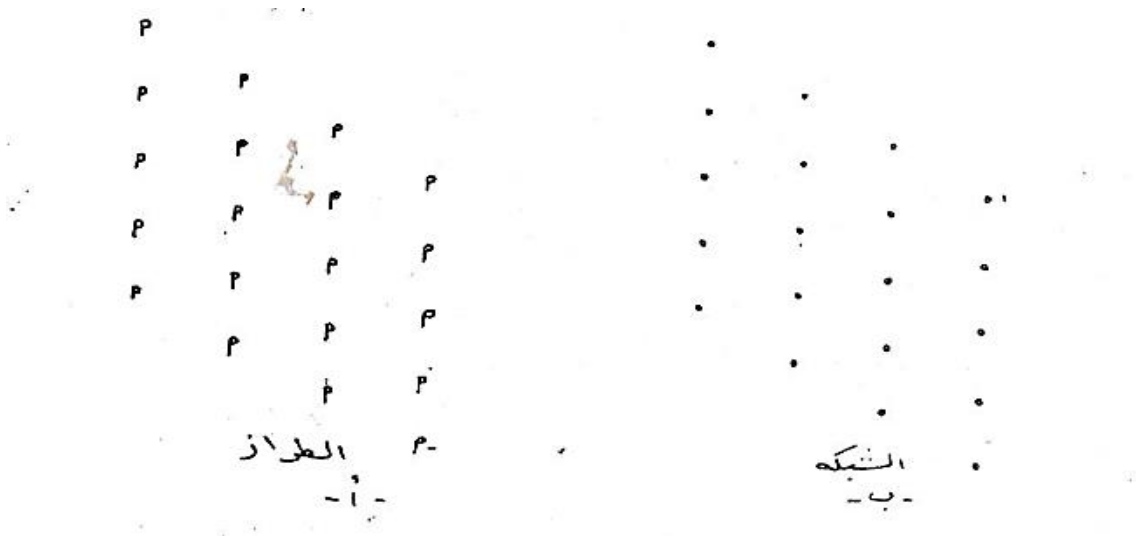
الشكل1: (أ) مادة متبلورة (ب) مادة غير متبلورة

و الشكل الخارجي لبلورة المواد البلورية يتميز بسطوحه المستوية الملساء التي تسمى وجوه البلورة. و يختلف مظهر بلورات المواد المختلفة باختلاف أشكال وجوهها أو بإختلاف الزوايا بين هذه الوجوه و بالتالي باختلاف تناظرها و تماثلها.

و المظهر الخارجي للبلورة يعكس طبيعة التراكيب الداخلية او وحدات البناء الداخلية التي كونت البلورة. و يمكن تصور هذه الحقيقة بالصورة التالية: لو رتبت مجموعة معينة من الطابوق (كل طابوقة لها شكل متوازي المستطيلات) على بعضها البعض لتكون منها أشكالا مختلفة قد تكون بهيئة متوازي المستطيلات كهيئة الطابوقة الواحدة و قد تكون غير ذلك تماما. و لذلك فعند قولنا بأن التركيب الخارجي للبلورة يعكس طبيعة وحدات البناء الداخلية المكونة لها لا نعني أن هذه العلاقة مباشرة بل يمكن أن نستنتج، و هذا الاستنتاج قد يكون سهلا و قد يكون معقدا. كما وأن عدم انتظام أشكال البلورات الناتج عن الظروف العفوية التي حدثت فيها عملية تنميتها أو بناءها يعقد تعيين طبيعة وحداتها الداخلية المكونة لها. في الوقت الحاضر تستخدم الأشعة السينية لتحديد الوحدات الداخلية للبلورات.

1- الشبكة البلورية:

التركيب الداخلي لكافة بلورات المواد هو عبارة عن توزيع فضائي للذرات أو الجزيئات أو تجمعاتهما. فالذرة الواحدة أو الجزيئة الواحدة أو التجمع الذري أو التجمع الجزيئي عند تكراره في الفضاء يكون طرازا نطلق عليه التركيب البلوري. إن وحدة الطراز التي عند تكرارها في الفضاء تكون الطراز كله نطلق عليها اسم القاعدة أو الأساس (Basis). و القاعدة تختلف حسب نوع البلورات فقد تكون ذرة واحدة فقط أو جزيئة مفردة و قد تكون تجمع ذري أو تجمع جزيئي. أن تكرار القاعدة في الفضاء ليس عشوائيا بل يتم وفق قوانين طبيعية معينة هي قوانين تناظر البلورات. و أهم قانون تناظر ينطبق على كل أنواع البلورات هو التناظر الإنسحابي (Translation) و لمعرفة مثل هذا التناظر ندرس البلورة (أو الطراز) ببعدين كما في الشكل 2-أ، حيث عنصر الطراز أو القاعدة هو الحرف p(الذي يقابل في التركيب البلوري ذرة أو جزيئة أو تجمع ذري أو تجمع جزيئي).

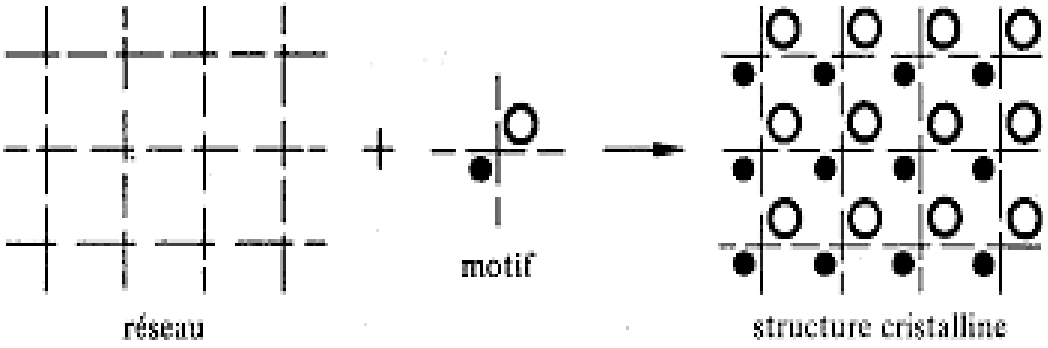


الشكل2: (أ) شبكة (ب) الطراز

فلو استبدلنا كل قاعدة p بنقطة نسميها عقدة لحصلنا على الشكل 2–ب الذي يصور التوزيع الاصلي للتركيب البلوري (أو الطراز).و بالإمكان اختيار مواقع العقد في أي مكان حول و جوار الحرف *p القاعدة بحيث أن كل العقد تقع في أماكن متشابهة بالنسبة لعناصر الطراز. ان التوزيع العقدي في الشكل 2–ب يسمى بالشبكة البلورية. ونفس الكلام أعلاه ينطبق على التركيب البلوري في الأبعاد الثلاثة (في الفضاء). و مما جاء نستنتج المعادلة المنطقية التالية:

الشبكة + القاعدة = التركيب البلوري.....1

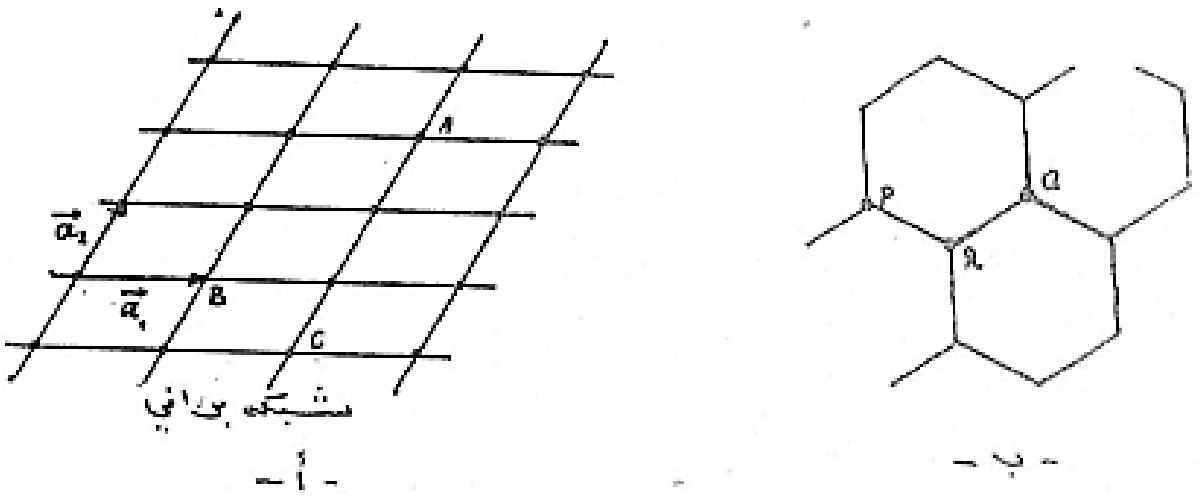
و هذه المعادلة المنطقية موضحة في الشكل 3. و نذكر أن القواعد في التركيب البلوري متماثلة مع بعضها تماما سواءا في تركيبها او عدد الذرات فيها او في اتجاهات وضع ذراتها.



الشكل3: تركيب بلوري

شبكة برافي: قاعدة شبكات أغلب المعادن عبارة عن ذرة واحدة، و لكن قاعدة شبكة المواد البيوكيمياوية و العضوية قد تتكون من آلاف الذرات. و في أغلب حالات وصف التركيب البلوري للجسم الصلب نكون متعاملين مع ما يسمى بشبكة برافي. و هذه الشبكة تتمتع باحدى الخاصيتين المتكافئتين التاليتين:

أ- شبكة برافي هي تركيب دوري لانهائي يتكون من عقد منفصلة موزعة في فضاء الشبكة بأسلوب منتظم. فلو أخذنا عقدة معينة و عرفنا أنها محاطة ببقية عقد الشبكة بتوزيع فضائي معين فإننا نلاحظ نفس الشيء يتكرر لو درسنا أية عقدة أخرى من عقد شبكة برافي. أي أن كل عقد الشبكة متماثلة تماما من ناحية التوزيع الفضائي لما يحيط بها من بقية عقد الشبكة. و لمزيد من فهم هذا التعريف لشبكة برافي نأخذ الشكل 4 الذي يمثل شبكتين مختلفتين.



الشكل 4: تركيب بلوري لشبكة برافية و لابرافية

نلاحظ في الشكل 4-ا أن كل عقدة من عقد الشبكة كمثال العقد A و B و C متماثلة تماما من ناحية التوزيع الفضائي لبقية العقد حولها، لذلك فالشبكة 4-ا هي شبكة برافي. و لكن الامر يختلف لو درسنا الشبكة المتمثلة في الشكل 4-ب أو شبكة 'خلايا النحل'. فمثلا تكون العقدتان p و Q متماثلاتان من ناحية التوزيع الفضائي لبقية العقد حولهما و لكنهما يختلفان من هذه الناحية عن العقدة R. معنى هذا أن الشكل 4-ب لايصور شبكة برافي.

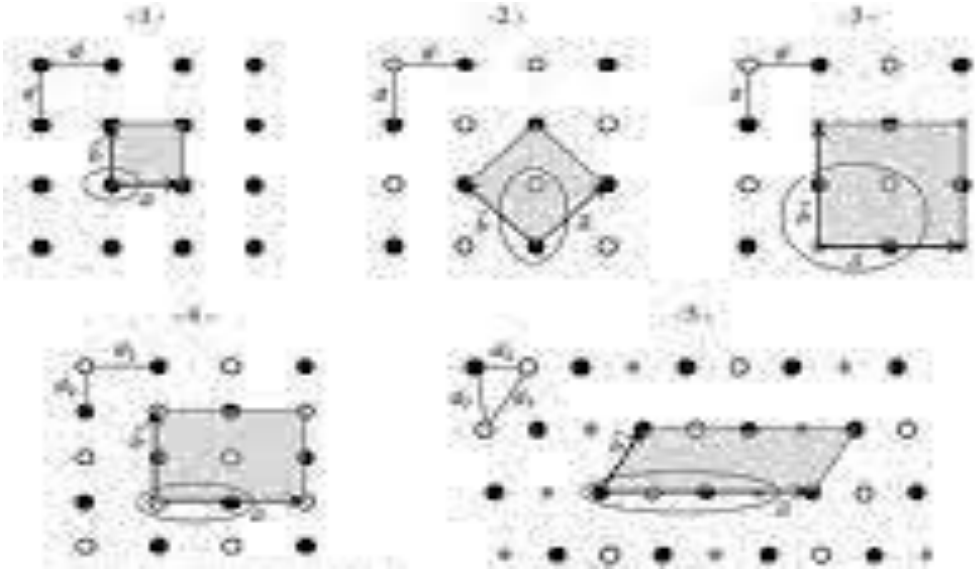
ب–شبكة برافي تتمتع بإمكانية تحديد كل عقدها باستخدام شعاع الانسحاب $\overrightarrow{R}$. و لمعرفة هذا الشعاع نعتبر أي من عقد شبكة برافي كمركز للمحاور و نختار ثلاثة أشعة $\overrightarrow{a_1}$ و $\overrightarrow{a_2}$ و $\overrightarrow{a_3}$ (غير واقعة كلها في مستوي واحد) فإن شعاع الانسحاب $\overrightarrow{R}$:

$$\overrightarrow{R} = n_1\overrightarrow{a_1} + n_2\overrightarrow{a_2} + n_3\overrightarrow{a_3} \quad \text{.....2}$$

حيث n_1 و n_2 و n_3 أرقام صحيحة (موجبة و سالبة) اختيارية. وهذا الشعاع $\overrightarrow{R}$ يحدد كل عقد شبكة برافي. و كما يبدو من المعادلة التعريفية 2 فإن شعاع الإنسحاب يمثل عائلة كبيرة من الأشعة حسب قيم n_1 و n_2 و n_3 كما و أنه يعتمد على الأشعة $\overrightarrow{a_1}$ و $\overrightarrow{a_2}$ و $\overrightarrow{a_3}$ التي تختلف باختلاف أنواع شبكات برافي للبلورات المختلفة. و يمكن تصور بناء كل الشبكة اعتبارا من ازاحة احدى عقدها بكل احتمالات الشعاع $\overrightarrow{R}$. و طالما أن القواعد متماثلة تماما لذلك نقول بأن كل تركيب بلوري متناظر انسحابيا. و نستطيع تطبيق المعادلة 2 على شبكة برافي الموضحة في الشكل 4–أ. نختار $\overrightarrow{a_1}$ و $\overrightarrow{a_2}$ و نحسب مواقع النقاط $\overrightarrow{R_A}$ و $\overrightarrow{R_B}$ و $\overrightarrow{R_C}$ لنجد:

$$\overrightarrow{R_C} = 2\overrightarrow{a_1} - \overrightarrow{a_2}\,, \quad \overrightarrow{R_B} = \overrightarrow{a_1}\,, \quad \overrightarrow{R_A} = 2\overrightarrow{a_1} + 2\overrightarrow{a_2}$$

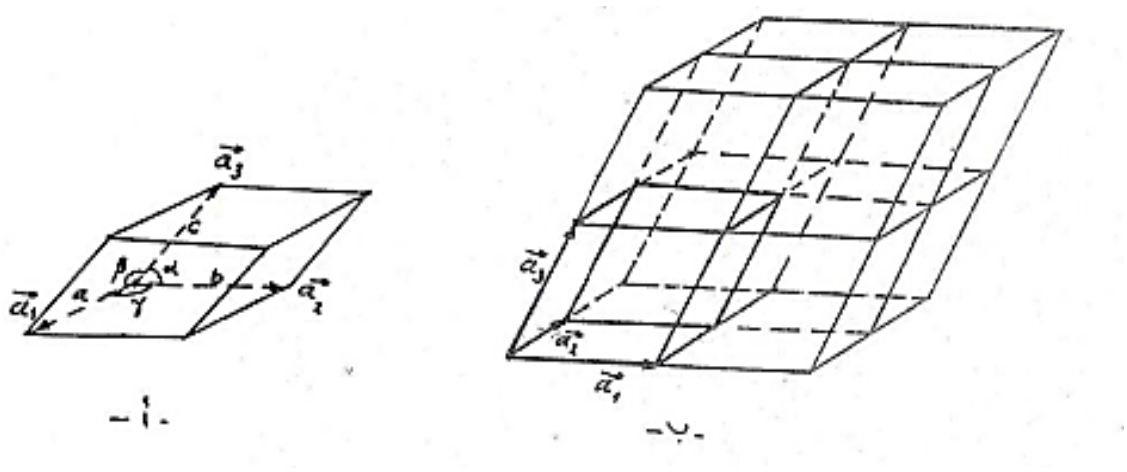
و تسمى الأشعة $\overrightarrow{a_1}$ و $\overrightarrow{a_2}$ و $\overrightarrow{a_3}$ بأشعة الانسحاب الأساسية (Primitive Translation Vectors). و نذكر عدم وجود طريقة مفردة لتحديد أشعة الإنسحاب الأساسية لشبكة معينة من شبكات برافي، في الحقيقة توجد مجموعة ضخمة من الاختيارات الغير المتكافئة لاختيار أشعة الانسحاب الاساسية. و هذا موضح في الشكل 5 لشبكة برافي ببعدين (للتبسيط). و لكننا نستطيع اختيار اشعة الانسحاب الاساسية الأشعة $\overrightarrow{a_1}$ و $\overrightarrow{a_2}$ و $\overrightarrow{a_3}$ و التي تؤلف فيما بينها أصغر متوازي سطوح (Parallelepiped) يستطيع بتكراره توليد البنية البلورية و يحمل نفس تناظر كل الشبكة.



الشكل 5: شبكة برافية في بعدين

2- الخلية الأساسية:

ان اشعة الانتقال الأساسية $\overrightarrow{a_1}$ و $\overrightarrow{a_2}$ و $\overrightarrow{a_3}$ تحدد من الشبكة البلورية متوازي سطوح أبعاده a و b و c و زواياه α بين الضلعين b و c ، β بين الضلعين a و c، γ بين الضلعين a و b كما هو موضح في الشكل 6-أ. و نسمي متوازي السطوح هذا و الذي يحوي عند زواياه الركنية فقط عقدا بالخلية الاساسية (Primitive Cell) و نسمي a و b و c بأبعاد الخلية الأساسية أو متحولات أو ثوابت الشبكة (Lattice Parameters) و الزوايا α و β و γ تسمى بالزوايا الأساسية. و يمكن بناء كل الشبكة البلورية بعملية نقل الخلية الأساسية باتجاه أحرفها $\overrightarrow{a_1}$ و $\overrightarrow{a_2}$ و $\overrightarrow{a_3}$ و بخطوات ملائمة تساوي على التوالي a و b و c. معنى هذا أن الشبكة البلورية متناظرة بالنسبة لعملية الانسحاب بالنسبة لعملية الانسحاب في الفضاء للخلية الأساسية. وهذا التناظر هو حالة أساسية وحتمية للحصول على الشبكات البلورية و بدونها لا تتكون لدينا شبكة بلورية أو لا نحصل على تركيب بلوري.



الشكل 6: ثوابت خلية أساسية في شبكة بلورية فراغية و كيفية بناءها في الفضاء

و الشكل 6–ب يوضح كيفية بناء كل الشبكة بعملية نقل الخلية الأساسية بإتجاه أحرفها. و عملية النقل هذه محددة بالمعادلة 2 وهي تصور كعملية رزم الخلايا الأساسية على بعضها بدون ترك فراغ و بدون تداخلها مع بعضها. و هكذا فلتحديد و تصنيف شبكة بلورة ما يجب معرفة ثوابت خليتها الأساسية a و b و c و α و β و γ.

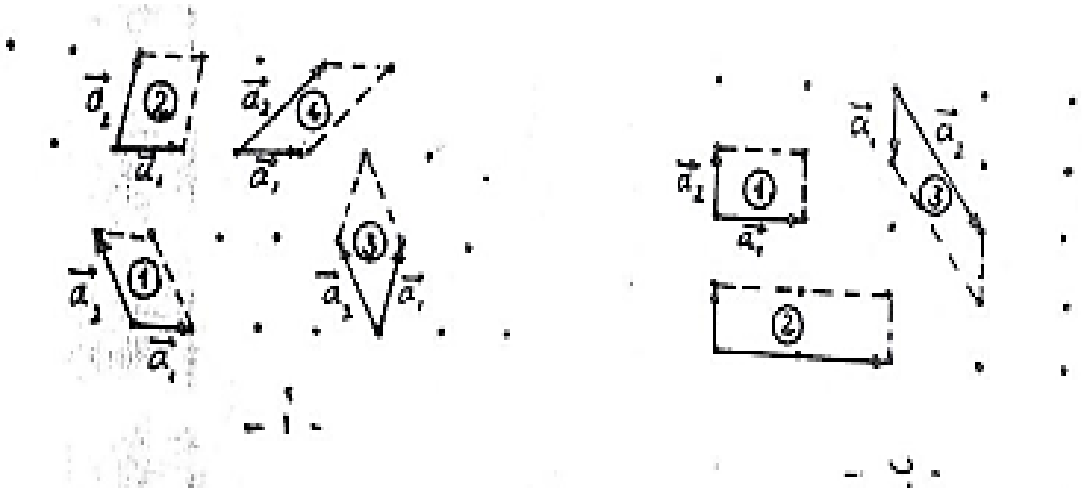
ذكرنا سابقا عدم وجود طريقة مفردة لتحديد أشعة الإنسحاب الأساسية لذلك فلا يوجد أسلوب منفرد لإختيار الخلية الأساسية و لكن يفضل التعامل مع الخلية الأساسية التي لها تناظر يشبه تناظر كل الشبكة. إن حجم الخلية الأساسية وحيد لجميع الاختيارات الممكنة طالما للخلية الأساسية عقدة واحدة فقط و يعبر عليه بالمعادلة 3:

$$V = |\overrightarrow{a_1}.(\overrightarrow{a_2}\wedge\overrightarrow{a_3})| \quad \ldots\ldots 3$$

و نذكر أنه بالإمكان دائما اختيار خلية أساسية تحقق التناظر الإنسحابي، تنتمي لها عقدة واحدة، حجمها أصغر ما يمكن من الاختيارات ولكن قد يحدث أحيانا أن تناظرها لا يماثل تناظر كل الشبكة التي هي جزء منها. لذلك نتعامل مع متوازي سطوح مختار من الشبكة و لكنه يحتوي على عقد ليس فقط عند زواياه الركنية كما هو الحال للخلية الأساسية بل و بداخله أو على وجوهه. بحيث أن تناظره يماثل تناظر كل الشبكة التي هو جزء منها. عندئذ نسمي متوازي السطوح هذا **بالخلية الاولية** غير

الأساسية. و عليه تختار الخلية الاولية بحيث تحقق التناظر الإنسحابي و تناظرها يماثل تناظر كل الشبكة. نذكر أن حجم الخلية الغير أساسية أي الاولية دائما أكبر من حجم الخلية الأساسية.

يمثل الشكل 7 جزء من شبكة بلورية في بعدين ما يمكن ملاحظته بأن الخلية 2 في الشكل 7-ب غير أساسية (تنتمي لها عقدتان) بينما الخليتان 1و3 أساسيتان (تنتمي لكل منهما عقدة) و لكننا نختار التعامل مع الخلية 1 لكونها أساسية و لها نفس تناظر كل الشبكة. و خلايا الشكل 7-أ كلها خلايا أساسية لها نفس المساحة و نفس تناظر الشبكة الثنائي (تنطبق على نفسها مرتين بالدورة الواحدة).



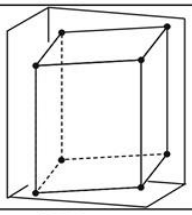
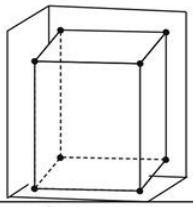
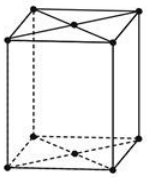
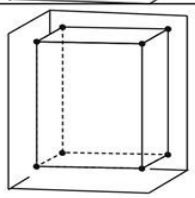
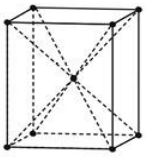
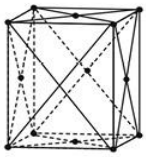
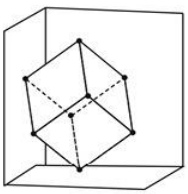
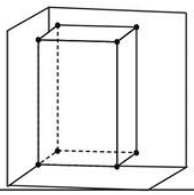
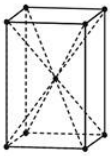
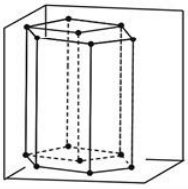
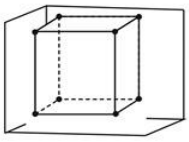
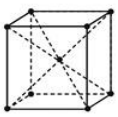
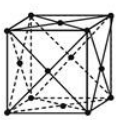
الشكل 7: جزء من شبكة بلورية في بعدين

3- الانظمة البلورية و الشبكات البرافية:

ينسب إلى عالم البلورات الفرنسي **أوغست برافيه Auguste Bravais** تصنيف الشبكات البلورية إلى **14 شبكة موزعة** على **7 أنظمة بلورية** يوضحها الجدول 1؛ إذ قدم عام 1849 في كتابه «البنى الشبكية البلُّورية» المسلَّمة التالية التي تُعدّ بحق أساس علم البلُّورات: «يكون ترتيب المادة حول نقطة ما في بلورة مشابهاً لأي نقطة في وسط غير مستمر وغير منتهٍ في الاتجاهات الثلاثة في فضاء من النقاط». نتج عن هذه المسلَّمة كل مفاهيم الشبكة البلُّورية ثلاثية الأبعاد وكل مسائل التناظر الناجمة عنها وعيّن الأنظمة البلورية الممكنة التي تسمى باسم شبكات برافيه. و تكون **شبكة برافيه بسيطة** إذا

كانت الذرات تشغل الزوايا فقط، و يرمز لها بالحرف P. و اذا كانت هناك ذرات إضافية تشغل مواضع خاصة فإنها تكون **ممركزة الجسم** I أو **ممركزة الاوجه** F أو **ممركزة القاعدة** C.

الجدول (1): شبكات برافيه.

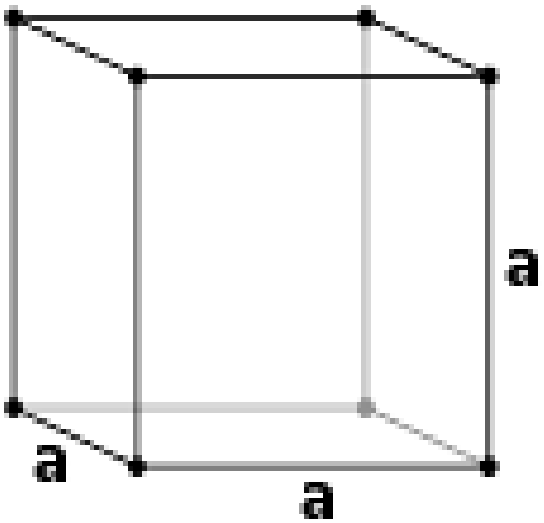
النظام البلوري System	شبكات بسيطة Primitive (P)	شبكات ممركزة القاعدتين Base-centred (C)	شبكات ممركزة الجسم Body-centred (I)	شبكات ممركزة الوجوه Face-centred (F)
ثلاثي الميل Triclinic $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^{\circ}$				
الوحيد الميل Monoclinic $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^{\circ} \neq \beta$				
المعيني القائم Orthorhombic $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^{\circ}$				
الثلاثي Trigonal Rhombohedral $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^{\circ}$				
الرباعي Teragonal $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^{\circ}$				
السداسي Hexagonal $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^{\circ}$ $\gamma = 120^{\circ}$				
المكعبي Cubic $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^{\circ}$				

4- الشبكة البلورية المكعبة:

و هي الشبكة التي خليتها الاولية عبارة عن مكعب. و يوجد من النظام المكعب ثلاثة أنواع شبكات مختلفة، وهي الشبكة **المكعبة البسيطة**، و الشبكة **المكعبة الممركزة الجسم** والشبكة **المكعبة الممركزة الوجوه.**

أ- **الشبكة المكعبة البسيطة SC:** يرمز لها بالرمز P، و هي التي خليتها الأولية تحتوي فقط على عقد عند زواياه الركنية الثمانية، أي أنها خلية أساسية. يعرف العدد الفعلي للعقد أو الذرات في الخلية على أنه عدد العقد داخل الخلية (أنظر الشكل 8) . مايمكن ملاحظته ان عقد الأركان نصيب كل خلية منها 1/8 وعليه فالعدد الفعلي للعقد في SC هو

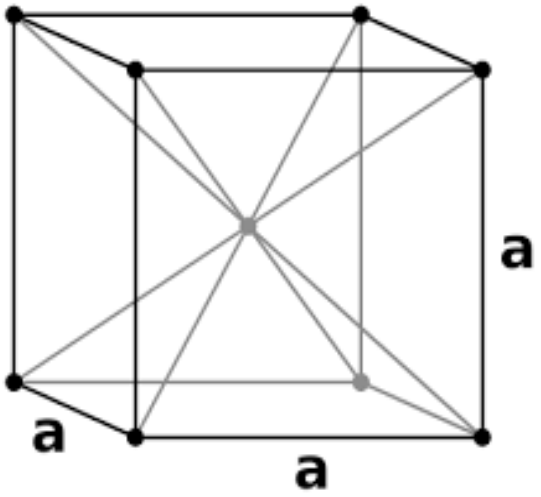
$$8 \times \frac{1}{8} = 1$$



الشكل 8: الشبكة المكعبة البسيطة

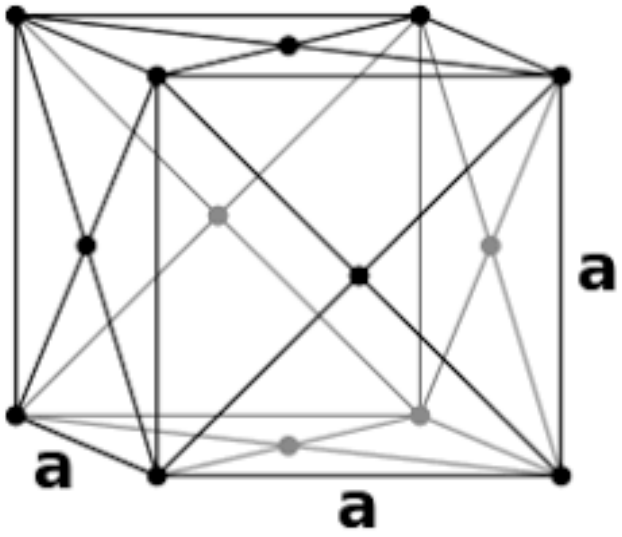
ب-**الشبكة المكعبة الممركزة الجسم BCC:** يرمز لها I، و هي التي خليتها الأولية تحتوي على عقد عند زواياه الركنية الثمانية بالإضافة إلى عقدة في وسطه (الشكل 9).مايمكن ملاحظته ان عقدة المركز

بكاملها داخل الخلية أما عقد الأركان نصيب كل خلية منها 1/8 وعليه فالعدد الفعلي للعقد في BCC هو $1 + 8 \times \frac{1}{8} = 2$.



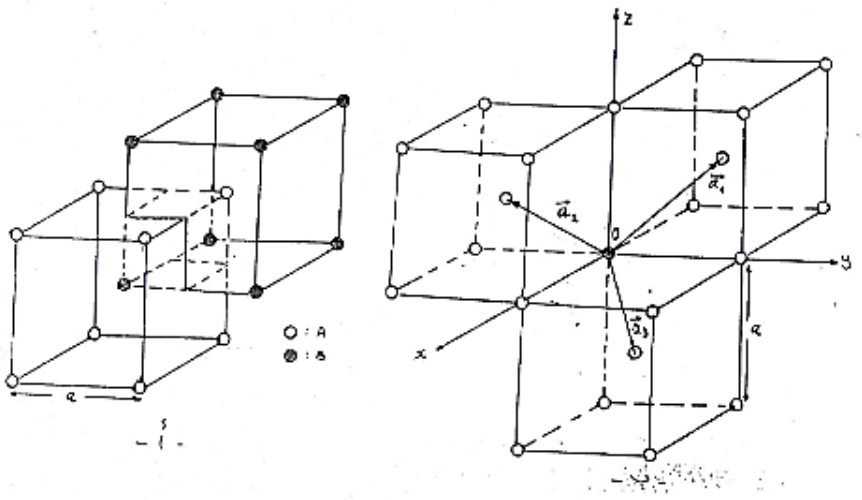
الشكل 9: الشبكة المكعبة الممركزة الجسم

ت- **الشبكة المكعبة الممركزة الوجوه FCC:** يرمز لها F، و خليتها الأولية تحتوي على عقد عند زواياه الركنية الثمانية بالإضافة إلى عقدة وسط كل سطح من سطوحه الستة (الشكل 10).مايمكن ملاحظته ان عقد الأركان نصيب كل خلية منها 1/8 و عقد مراكز الاوجه نصيب كل خلية منها 1/2 وعليه فالعدد الفعلي للعقد في FCC هو $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$.



الشكل 10: الشبكة المكعبة الممركزة الوجوه

ندرس اولا الشبكة المكعبة الممركزة الجسم، يمكن تخيلها عندما نضيف الى الشبكة المكعبة البسيطة التي عقدها A كما هو موضح في الشكل 11 شبكة مكعبة بسيطة أخرى عقدها B بحيث تصبح العقد B مراكزا لمكعبات الشبكة ذات العقد A. و عليه يمكن أن تتشكل الشبكة BCC من شبكتين مكعبتين بسيطتين متداخلتين مع بعضهما البعض بحيث أن كل عقدة تكون زاويه ركنية لخلية الشبكة الأولى و في نفس الوقت تكون عقدة مركزية لخلية الشبكة الثانية. أي أن كل العقد متماثلة تماما من ناحية التوزيع الفضائي لما يحيط بكل واحدة من عقد، و معنى هذا أن الشبكة المكعبة الممركزة الجسم هي شبكة برافي.



الشكل 11: شبكة مكعبة ممركزة الجسم ومحاورها

لمعرفة أشعة الانسحاب الأساسية $\overrightarrow{a_1}$ و $\overrightarrow{a_2}$ و $\overrightarrow{a_3}$ للشبكة BCC بدلالة الاشعة غير الأساسية للشبكة SC $\overrightarrow{a_i}$ و $\overrightarrow{a_j}$ و $\overrightarrow{a_k}$، والمحددة لأحرف المكعب الذي طول ضلعه a كما يبينها الشكل 11-ب أعلاه. تختار الاشعة الاساسية كالتالي:

$$\overrightarrow{a_1} = \frac{a}{2}\left(\vec{k}+\vec{j}-\vec{i}\right)\text{ ،}\overrightarrow{a_2} = \frac{a}{2}\left(\vec{k}+\vec{i}-\vec{j}\right)\text{ ،}\overrightarrow{a_3} = \frac{a}{2}\left(\vec{i}+\vec{j}-\vec{k}\right)$$

تحدد هذه الأشعة الأساسية كل عقد الشبكة المكعبة الممركزة الجسم ، تعطى عبارة الشعاع $\vec{R}$ الذي يعين كل عقد الشبكة BCC بحيث n_1،n_2،n_3 أعداد صحيحة إختيارية:

$$\vec{R} = \frac{a}{2}(-n_1+n_2+n_3)\vec{i}+\frac{a}{2}(n_1-n_2+n_3)\vec{j}+\frac{a}{2}(n_1+n_2-n_3)\vec{k}$$

تكون الاشعة الاساسية في الفضاء خلية أساسية سداسية الوجوه طول ضلعها $\frac{\sqrt{3}}{2}a$ وزاويتها مساوية الى $109.28°$. حجم الخلية الاساسية يساوي الى:

$$V = |\overrightarrow{a_1}.(\overrightarrow{a_2}\wedge\overrightarrow{a_3})| = \frac{a^3}{2}$$

و هو أقل دائما من حجم الخلية الاولية الغير الأساسية $(V < a^3)$.

ندرس الشبكة المكعبة الممركزة الوجوه، يمكن تخيلها عندما نضيف الى الشبكة المكعبة البسيطة عقدة وسط كل وجه من وجوه خلاياها. لمعرفة أشعة الانسحاب الأساسية $\overrightarrow{a_1}$ و $\overrightarrow{a_2}$ و $\overrightarrow{a_3}$ للشبكة FCC بدلالة الاشعة الغير الأساسية للشبكة SC $\overrightarrow{a_i}$ و $\overrightarrow{a_j}$ و $\overrightarrow{a_k}$، والمحددة لأحرف المكعب الذي طول ضلعه a كما يبينها الشكل 12 أدناه. تختار الاشعة الاساسية و التي تكون الخلية الأساسية و التي تكون بصورة متوازي سطوح له ستة وجوه و كل وجه بصورة متوازي أضلاع كالتالي:

$$\overrightarrow{a_1} = \frac{a}{2}(\vec{k}+\vec{j})\ ،\overrightarrow{a_2} = \frac{a}{2}(\vec{k}+\vec{i})\ ،\overrightarrow{a_3} = \frac{a}{2}(\vec{i}+\vec{j})$$

حجم الخلية الاساسية يساوي الى:

$$V = |\overrightarrow{a_1}.(\overrightarrow{a_2}\wedge\overrightarrow{a_3})| = \frac{a^3}{4}$$

و هو يساوي ربع حجم الخلية الاولية غير الأساسية $(V < a^3)$. يلخص الجدول 2 أهم خصائص هذه الشبكات الثلاثة.

ملاحظة:

على غرار المعادلة:

شبكة + قاعدة = تركيب بلوري

نستطيع استخلاص معادلة اخرى:

شبكة بسيطة + قاعدة عقدية = شبكة معقدة

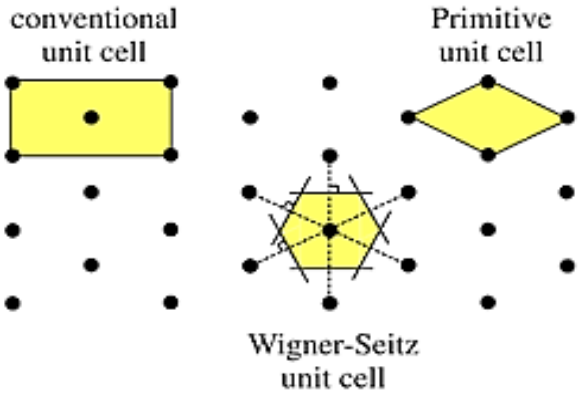
فالشبكة المكعبة الممركزة الجسم نعتبرها شبكة مكعبة بسيطة مع قاعدة متكونة من عقدتين تحتلان المواقع (0,0,0) و (1/2,1/2,1/2).

أما بالنسبة للشبكة المكعبة الممركزة الوجوه فهي تساوي شبكة مكعبة بسيطة مع قاعدة متكونة من أربع تحتل المواقع (0,0,0) و (1/2,0,1/2) و (0,1/2,1/2) و (1/2,1/2,0).

الجدول (2): خصائص الشبكات المكعبة– البرافيه

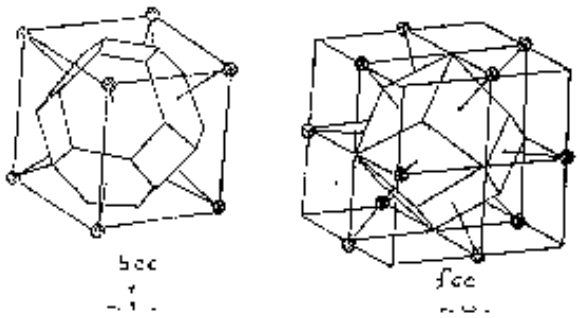
نوع الشبكة	SC	BCC	FCC
حجم الخلية الأولية (طول الضلع a)	a^3	a^3	a^3
حجم الخلية الأساسية	a^3	$\frac{a^3}{2}$	$\frac{a^3}{4}$
عدد العقد التابعة لكل خلية أولية	1	2	4
عدد عقد الشبكة لوحدة الحجم	$\frac{1}{a^3}$	$\frac{2}{a^3}$	$\frac{4}{a^3}$
العدد التناسقي او عدد الجوار المباشر Z	6	8	12
عدد العقد المجاورة للجوار المباشر	12	6	6
المسافة بين أقرب عقدتين	a	$\frac{a\sqrt{3}}{2}$	$\frac{a}{\sqrt{2}}$

5- خلية فيكنر زايتس (Wigner–Seitz Cell): خلية فيكنر زايتس هي خلية أساسية (حجمها يساوي أصغر حجم ممكن و تنتمي لها عقدة واحدة من عقد الشبكة)، تناظرها يماثل تناظر كل الشبكة. و لدراسة هذا الموضوع نأخذ شبكة بلورية مستوية أي شبكة ذات بعدين كما هو موضح في الشكل 12.



الشكل 12: خلية فيكنر زايتس في بعدين

و لتصميم هذه الخلية الموضحة في الشكل 12 ، نأخذ أية عقدة من عقد الشبكة و نصلها بمستقيمات مع جيرانها أي العقد المحيطة بها ثم نقيم مستويات عمودية على هذه المستقيمات في أنصافها. بعد ذلك نختار أصغر حجم فضائي متعدد الوجوه تكونه هذه المستويات نسميه خلية فيكنر زايتس. نلاحظ من الشكل 12 أن شكل هذه الخلية هو دائما مسدس ماعدا في الشبكة المستطيلة تكون خليتها مستطيلة و الشبكة المربعة تكون خليتها مربعة. في الشبكة المكعبة الممركزة الجسم تكون خلية فيكنر–زايتس بهيئة ثماني وجوه مشذب (الشكل13–أ) أي له ثمانية وجوه عبارة عن مسدسات منتظمة و ستة وجوه مربعة الشكل، أما خلية فيكنر–زايتس للشبكة المكعبة الممركزة الوجوه فتكون بهيئة إثني عشري معيني أي له إثنا عشر سطحا متشابها بهيئة معين كما هو موضح في الشكل 13–ب.



الشكل 13: خلية فيكنر زايتس للشبكتين المكعبة الممركزة الجسم و الممركزة الوجوه

ملاحظة: حجم خلية فيكنر زايتس هو حجم أي خلية أساسية بأي إختيار آخر لذلك فهو يساوي

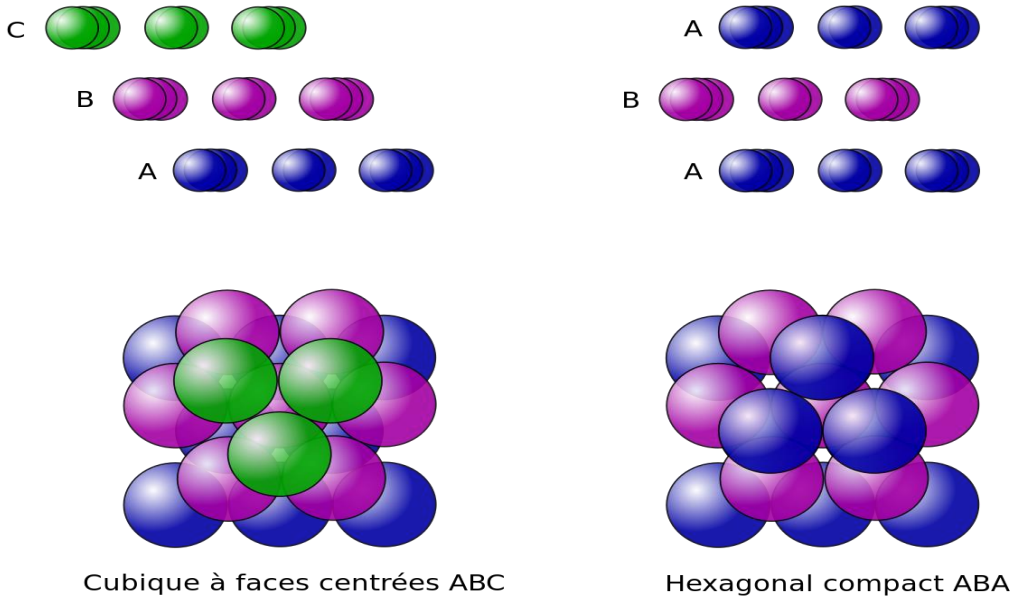
$$V = |\overrightarrow{a_1}.(\overrightarrow{a_2}\wedge\overrightarrow{a_3})|$$

6- العبوة المتراصة (الكثيفة) المكعبة و السداسية:

إذا إفترضنا الذرات في هذا النموذج على أنها كرات مصمتة متماثلة و غير قابلة للانضغاط، و اعتبرنا أن مراكز هذه الكرات المعبأة عقدا تشكل شبكة، فإنه توجد مالانهاية من الطرق لتعبئتها لإملاء حجم معين كبير. و لكن مايهمنا في عملية التعبئة و التي تشكل فيها مراكز الكرات شبكة برافي أو شبكة كشبكة برافي مع قواعد عقدية هو التعبئة المتراصة. بحيث توجد طريقتان للتعبئة بحيث يكون حجم الفراغات المحصورة بينها أقل مايمكن. و في كلتا الطريقين نبدأ برص الطبقة الأولى **A** بحيث تلامس كل ذرة أو كرة ست ذرات مجاورة، ثم توضع الطبقة **B** فوق الأولى بنفس الكيفية، بشرط أن تلامس أي كرة فيها ثلاث كرات في الطبقة الأولى، أي تكون كل كرة في الطبقة **B** فوق أحد الفجوات في الطبقة **A**. و الآن لإضافة الطبقة الثالثة **C** نجد أن هناك احتمالين كما يبينها الشكل 14 أدناه:

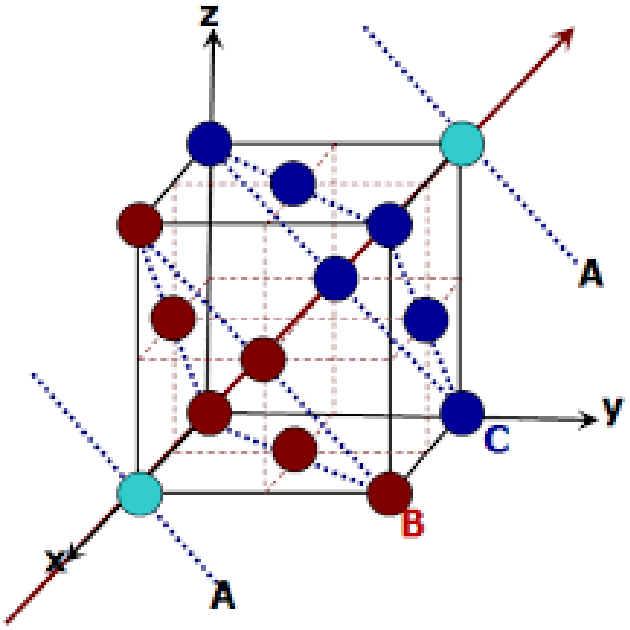
أولا: توضع كرات الطبقة **C** فوق الفجوات الموجودة في كل من الطبقتين **A** و **B** فتكون الطبقة الرابعة فوق الطبقة **A** تماما و نحصل على الترتيب الفراغي **...ABC ABC**، و هذا يؤدي إلى تشكل شبكة مكعبة متراصة عقدها هي مراكز الكرات و خليتها الأولية هي شبكة مكعبة ممركزة الوجوه (**Cubique a faces centrées**)، و من أمثلته: النحاس و الفضة و الذهب و النيكل.

ثانيا: توضع كرات الطبقة الثالثة فوق كرات الطبقة الأولى تماما، فيكون الترتيب الفراغي في الطبقات على هيئة **...AB AB**، و هذا يؤدي إلى تشكل شبكة سداسية متراصة تسمى بالعبوة السداسية المتراصة (**Hexagonal compact**)، و من أمثلته: الزنك و الكاديوم و المغنزيوم.



الشكل 14: الشكل الحقيقي لتوزيع الذرات بنموذج الكرات المصمتة للشبكة المكعبة الممركزة الوجوه و الشبكة سداسية

ملاحظة: يتم البناء ..ABC ABC فتتشكل خلية مكعبة متمركزة الوجوه تسمى بالعبوة المكعبة المتراصة إتجاه ترتيب الكرات على بعضها هو إتجاه القطر الجسمي للمكعب كما في الشكل 15.



الشكل 15: إتجاه ترتيب الكرات في التعبئة المتراصة المكعبة

7- كثافة التعبئة:

تعرف كثافة التعبئة على أنها نسبة الحجم المشغول من قبل الكرات إلى حجم المكعب و نسميه τ . فكيف تحسب كثافة التعبئة لكل من النظام البلوري المكعب المتمركز الوجوه و السداسي؟

نفترض أن الذرات عبارة عن كرات صلبة متساوية القطر (2r) و متماسكة، أي متلاصقة الرص و عليه فإن.

كثافة التعبئة = العدد الفعلي للذرات في الخلية*حجم الذرة/الحجم الكلي للخلية

و جدنا سابقا أن العدد الفعلي للذرات في شبكة المكعبة الممركزة الوجوه يقدر ب 4 ذرات أو عقد، أما حجم الذرة = $\frac{4\pi r^3}{3}$، حجم الخلية هو a^3. و لكن لكي نحسب كثافة التعبئة يجب أن نجد علاقة بين نصف القطر r و ثابت الشبكة a.

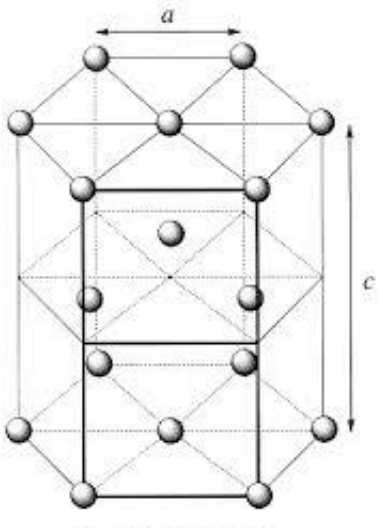
من الشكل 15 نجد أن العلاقة بين نصف القطر و ثابت الشبكة هي $4r = a\sqrt{2}$ و عليه فإن $r = \frac{a\sqrt{2}}{4}$. بالتعويض في العلاقة السابقة نجد:

$$\tau_{FCC} = \frac{1}{a^3} \times 4 \times \frac{4}{3}\pi\left(\frac{a\sqrt{2}}{4}\right)^3 = 0.74$$

أي أن الكرات تشغل 74% من حجم الخلية المكعبة.

بالنسبة لكثافة التعبئة في العبوة السداسية المتراصة فهي مساوية لكثافة التعبئة في العبوة المكعبة الممركزة الوجوه (أي 74% من حجم الخلية السداسية). و من نموذج الكرات يجب أن تكون النسبة بين ارتفاع الخلية الموشورية السداسية C لهذه الشبكة (المسافة بين أقرب طبقتين متشابهتين) و طول ضلع قاعدتها a (الشكل 16) مساوية إلى:

$$\frac{c}{a} = \left(\frac{8}{3}\right)^{1/2} = 1.63$$



الشكل 16: خلية موشورية سداسية

و يمكن تصور البناء البلوري hcp الموضحة في الشكل 16 أو17، بأنه يتألف من ثلاثة خلايا أولية (غير أساسية) متشابهة للشبكة hcp، و لكن شبكة التركيب المتكونة من عقد مراكز الذرات أو الكرات لا تمثل شبكة برافية و ذلك لأنها تختلف عن بعضها من ناحية التوزيع الفضائي لما يحيط بكل عقدة من بقية العقد، و لكن يمكن أن نعبر عن الشبكة hcp كشبكة برافية مع قواعد عقدية و كل قاعدة متكونة من عقدتين (0,0,0) و (3/2,1/3,1/2) ليصبح لدينا شبكة سداسية بسيطة. و لعمل ذلك نأخذ الاشعة الأساسية $\overrightarrow{a_1}$ و $\overrightarrow{a_2}$ و $\overrightarrow{a_3}$ كأشعة أساسية كما يبينها الشكل 18 أدناه حيث

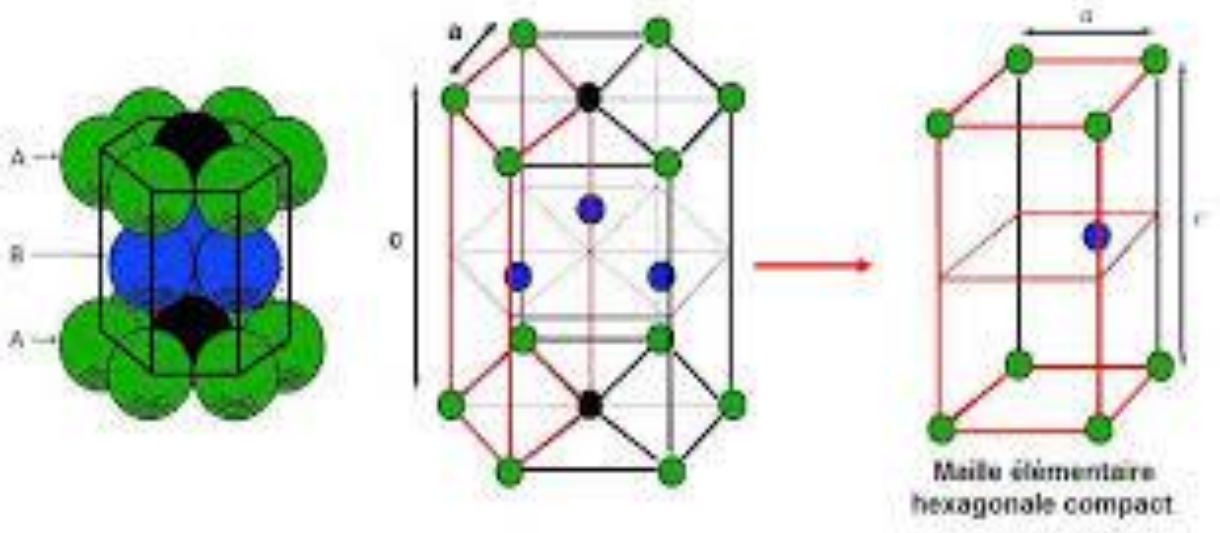
$$\overrightarrow{a_3} = c\vec{k} \text{ ،} \overrightarrow{a_2} = \frac{\sqrt{3}a}{2}\vec{j} - \frac{a}{2}\vec{i} \text{ ،} \overrightarrow{a_1} = a\vec{i}$$

وحجم الخلية الأساسية يساوي:

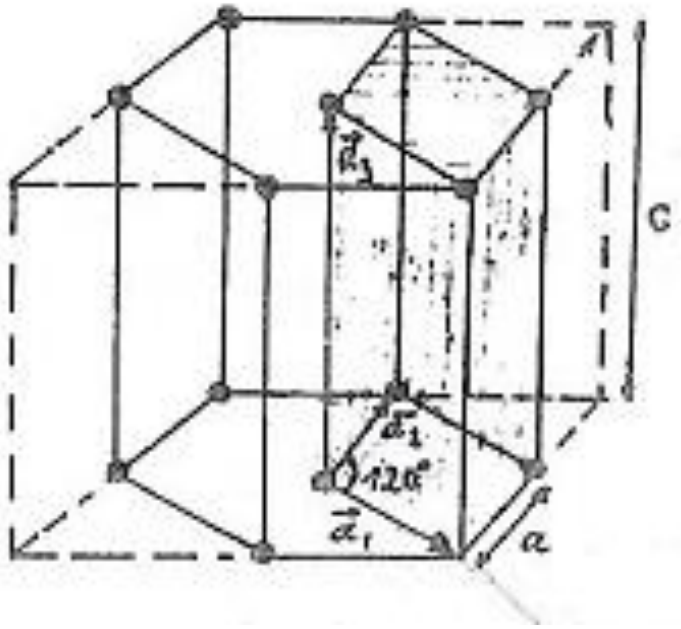
$$V = |\overrightarrow{a_1}.(\overrightarrow{a_2}\wedge\overrightarrow{a_3})| = \frac{\sqrt{3}a^2c}{2} = \sqrt{2}a^3$$

نذكر أن التركيب البلوري لكثير من المعادن يتحول من FCC إلى HCP عند درجة حرارة معينة، و قد يكون ناتجا عن تقارب طاقة التكوين او الربط لذرة ما في كلا التركيبان البلوريان.

ملاحظة: لا يعتبر أسلوبا التعبئة في الشبكتين المكعبة الممركزة الوجوه و السداسية كثيفة التكديس الأسلوبان الوحيدان للتعبئة بل توجد أساليب أخرى نتحصل بها على شبكة مكعبة بسيطة تقدر كثافة تعبئتها 52% و شبكة مكعبة ممركزة الجسم كثافة تعبئتها تقدر ب 68% .



الشكل 17: الشكل الحقيقي و الشكل المبسط لخلية موشورية سداسية



الشكل 18: ثوابت الخلية الأساسية في شبكة بلورية سداسية

8- التركيبات البلورية للعناصر:

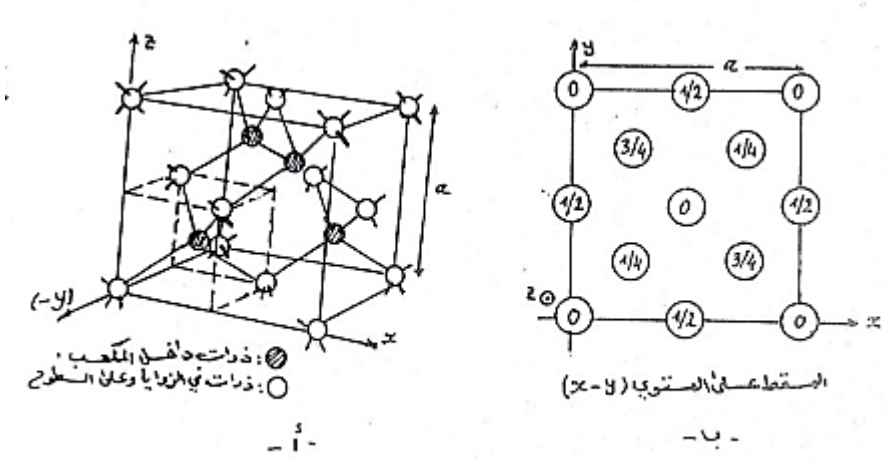
تتبلور معظم العناصر الكيمياوية بشبكات غير معقدة، فيوجد حوالي 20 عنصرا يتبلور مكونا شبكة مكعبة ممركزة السطوح قاعدتها ذرة واحدة. كمثال على ذلك: الألمنيوم، النحاس، الرصاص. كما يوجد حوالي 14 عنصرا يتبلور مكونا شبكة مكعبة ممركزة الجسم، كمثال على ذلك: الحديد، تنغستن، تانتالوم. و يوجد أيضا حوالي 27 عنصرا يتبلور بالتركيب **HCP** كمثال على هذه العناصر: المغنزيوم و الزنك و زركونيوم.

و نذكر بأن البلورات ذات الشبكة المكعبة البسيطة قليل جدا، فنجد بالظروف الطبيعية يتبلور فقط الطور α للبولونيوم مشكلا بلورة ذرية مكعبة بسيطة.

بالاضافة الى ماسبق، توجد بعض العناصر التي تتبلور بصورة الماس (**Diamond**). و الماس هو كربون متبلور و خليته الأولية مكعبة تحوي على 8 ذرات في الاحداثيات التالية:

- **(0,0,0),(0,1/2,1/2), (1/2,0,1/2), (1/2,1/2,0)**
- **(1/4,1/4,1/4),(1/4,3/4,3/4), (3/4,1/4,3/4), (3/4,3/4,1/4)**

كما في الشكل 19-أ. و الشكل 19-ب يمثل مسقط لذرات الخلية الأولية على وجه الخلية الأولية (**x-y**) و تبين الأرقام المؤشرة في الرسم إلى موقع الذرات بإتجاه المحور **z** و ذلك بوحدات ثابت الخلية **a**.



-أ- -ب-

الشكل 19: بنية ماسية

الشبكة الذرية أو شبكة التركيب البلوري للماس يمكن تصورها كشبكة برافي مع قواعد ذرية: شبكة برافي هي مكعبة ممركزة السطوح و مع كل عقدة ترتبط قاعدة متكونة من ذرتين متشابهتين إحداثيتهما عقدتين (0,0,0) و (1/4,1/4,1/4).

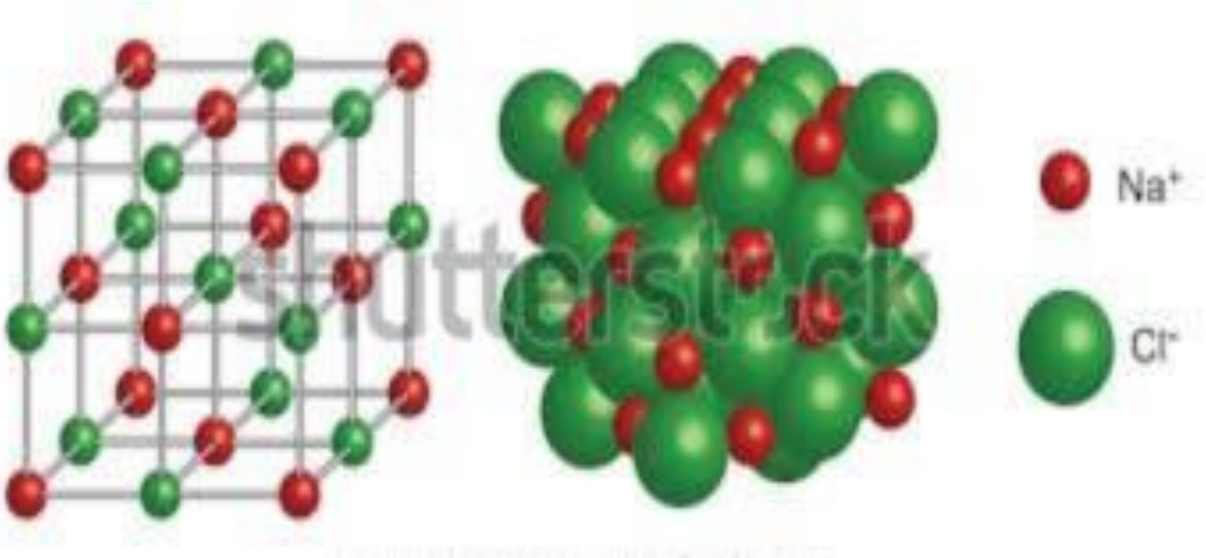
8- التركيبات البلورية لبعض المركبات:

8-أ- بلورة ملح الطعام- كلوريد الصوديوم NaCl: ينتمي إلى النظام البلوري المكعب المتمركز الوجوه، بحيث كل أيون Na^+ يكون محاطا بستة أيونات Cl^- و العكس صحيح كما هو موضح في الشكل 20. يحتوي المكعب الأولي للشبكة البلورية المكعبة على أربع جزيئات من NaCl إحداثيات أيوناتها هي:

Na^+ : **(0,0,0),(0,1/2,1/2), (1/2,0,1/2), (1/2,1/2,0)**

Cl^- : **(1/2,1/2,1/2),(1/2,0,0), (0,1/2,0), (0,0,1/2)**

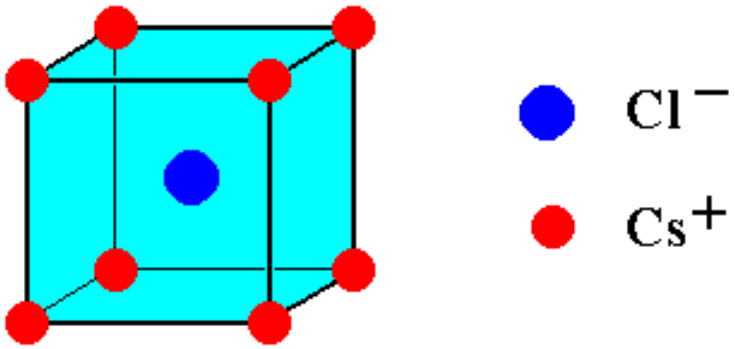
أما شبكة برافي لملح الطعام فهي مكعبة ممركزة الوجوه و يرتبط مع كل قاعدة متكونة من أيونين: الصوديوم Na^+ بالاحداثيات (0,0,0) و الكلور Cl^- بالاحداثيات (1/2,1/2,1/2).



الشكل 20: الشبكة البلورية لكلوريد الصوديوم

8-ب- بلورة كلوريد السيزيوم CsCl: ينتمي إلى النظام البلوري المكعب المتمركز الجسم، بحيث تشغل أيونات السيزيوم Cs^+ أركان المكعب احداثياتها **(0,0,0)** ، بينما أيون Cl^- يشغل مركز جسم المكعب بالاحداثيات **(1/2,1/2,1/2)**. بحيث كل أيون Cs^+ يكون محاطا بثمانية أيونات Cl^- و العكس صحيح كما هو موضح في الشكل 21.

أما شبكة برافي فهي مكعبة بسيطة ترتبط فيها مع كل قاعدة متكونة من أيونين: السيزيوم بالاحداثيات (0,0,0) و الكلور Cl^- بالاحداثيات (1/2,1/2,1/2).



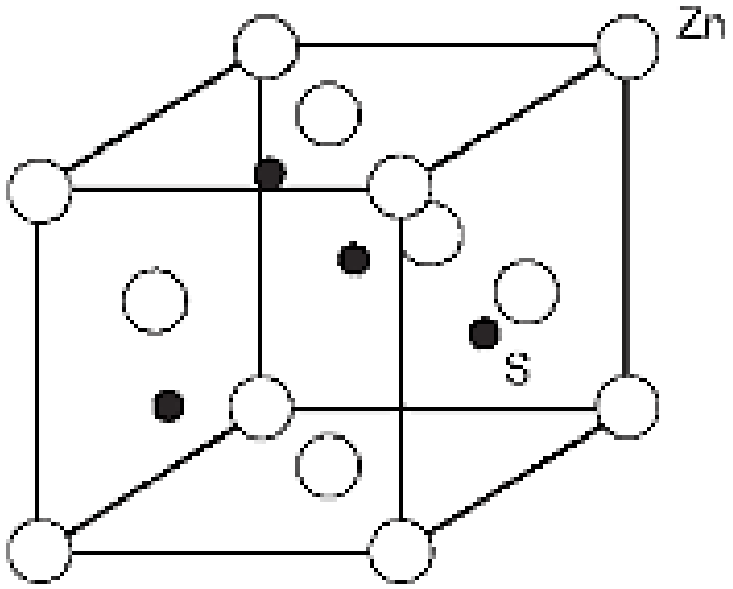
الشكل 21: الشبكة البلورية لكلوريد السيزيوم

8-ج- بلورة كبريتيد الزنك ZnS: ان التركيب البلوري لكبريتيد الزنك ينتج من التركيب البلوري للماس بحيث أن ذرات **Zn** تشغل المواقع (0,0,0),(1/2,1/2,0), (1/2,0,1/2), (0,1/2,1/2) و تشكل شبكة مكعبة ممركزة الوجوه، و كل ذرة **Zn** محاطة بأربع **S**. و ذرات الكبريت تشغل المواقع:

(3/4,3/4,1/4),(1/4,3/4,3/4),(3/4,1/4,3/4),(1/4,1/4,1/4)

و تشكل أيضا شبكة مكعبة ممركزة الوجوه و متداخلة مع شبكة الزنك و كل ذرة **S** محاطة بأربع ذرات **Zn**. و الشكل 22 يبين الشبكة البلورية لكبريتيد الزنك.

أما شبكة برافي فهي مكعبة ممركزة الوجوه قاعدتها متكونة من ذرتي: الزنك بالاحداثيات (0,0,0) و الكبريت بالاحداثيات (1/4,1/4,1/4).



الشكل 22: الشبكة البلورية لكبريتيد الزنك