

الدكتور. عقيل عزيز داخل

١١١

الدكتور. عقيل عزيز داخل

# مقدمة في فيزياء الجسم الصلب

الجزء الأول - القسم الأول

مقدمة في فيزياء الجسم  
الصلب



ديوان المطبوعات الجامعية



السعر: 69,00 دج

2797

ديوان المطبوعات الجامعية

رقم النشر: 2984.02.1

## توطئة الكتاب

يهدف هذا الكتاب الى صياغة المبادئ الأساسية لفيزياء الحالة الصلبة ضمن البرامج المطبقة في أغلب الجامعات العربية . لقد حاولنا جهد الامكان تبسيط مواضيعه وجعله كتابا منهجيا في دراسة الحالة الصلبة بعيدا عن كونه "أنسكلوبيدي" الطابع . فهو مخصص أساسا للمبتدئين في دراسة هذا الموضوع، حيث لم تستخدم فيه الرياضيات المتقدمة . ولكنه يجمع بين الأساليب النظرية والعملية . ويحسب أن لا يخفى بأنه ، وكأي كتاب من نوعه ، يحتاج الى معلومات في الميكانيك الكهربية، الاحصاء، الأمواج، الذرية ومبادئ ميكانيك الكم (غير أننا تطرقنا بتفصيل بسيط الى هذه المواضيع كل في حينه) . لذلك فهو يدرّس في السنة الثالثة الجامعية وقد يكون مفيدا أيضا لطلبة السنة الرابعة . والكتاب يعتبر تمهيدا للدراسات اللاحقة المعقدة في ميدان الحالة الصلبة .

تتنوع الأساليب الرياضية لمواضيع الكتاب حسب المسألة المطروحة، فبعضها درست بالأسلوب التقليدي والأخرى بالأسلوب الكوانتي، وعلى العموم استعملت وبكثرة المعادلات التفاضلية ورياضيات الممتدات والمصفوفات .

أما من ناحية الوحدات فقد اعتمد أساسا النظام الدولي ( SI ) .

ولقد أرتأينا اعطاء الأهمية لموضوع التركيب البلوري وعلم البلورات بدون الغرق في التفاصيل "الجيولوجية" - علما أن هذا الشيء لا يراعى في بعض كتب هذا المجال ويشار عادة الى مراجعته في كتب علم البلورات .

و درست كذلك وتعمق كبير "آلة قياس" الجسم الصلب - الأشعة السينية . كما أعتبر اهتماما بالغا لمفهوم الشبكة المعكوسة ومنطقة بريليون المهمة في هذا المجال .

تتسلسل المواد مألوف ومتبع عادة، ولكنه لا يشتمل على كل الأسئلة المتعلقة بخواص الجسم الصلب. ونظرا لكثرة مواضيعه ارتأينا تجزئته الى جزئين بحيث تختص مواضيع الجزء الأول بخواص الجسم الصلب الميكانيكية والحرارية، بينما تشتمل مواضيع الجزء الثاني أساسا على الخواص الكهربائية والمغناطيسية.

ولقد أكثر من التمرينات المحلولة لغرض تثبيت المعلومات وتعميق الفهم ولقد روعي بالتمرينات التي تتبع كل فصل أن تكون متعلقة بمحتواه وقد تكون امتدادا له أو تطبيقا حسابيا.

روعي تنوع مراجع الكتاب (إنكليزية، روسية، فرنسية وعربية). وعلى الخصوص المصادر القياسية مثل كتل ( Kittel )، و دكر ( Dekker ) وأشكروفت ( Ashcroft ) وكذلك مجموعة المصادر الأخرى المدرجة في الكتاب.

أتقدم بشكري الجزيل الى منتسبي معهد الفيزياء بجامعة قسنطينة لما أبدوه من روح المساعدة.

الدكتور

عقيل عزيز

قسنطينة

في 28 سبتمبر 1987

## المحتويات

### التوطئة

#### الفصل الأول: الشبكة البلورية

- 1 ..... 1 - الشبكة البلورية
- 7 ..... 2 - الخلية الأساسية
- 12 ..... 3 - الشبكة البلورية المكعبة
- 17 ..... 4 - خلية فيكنر زايتس
- 20 ..... 5 - العبوة المتراسة المكعبة والسداسية
- 26 ..... 6 - التركيبات البلورية للعناصر
- 30 ..... 7 - التركيبات البلورية لبعض المركبات
- 34 ..... تمرينات الفصل الأول

#### الفصل الثاني: الاتجاهات البلورية والشبكة المعكوسة

- 49 ..... 1 - قرائن فيس
- 51 ..... 2 - قرائن ملر
- 58 ..... 3 - الشبكة المعكوسة
- 62 ..... 4 - خواص الشبكة المعكوسة
- 73 ..... 5 - أمثلة: تجديد الشبكة المعكوسة ومنطقة بريليون
- 77 ..... تمرينات الفصل الثاني

#### الفصل الثالث: تصنيف شبكات برافي

- 102 ..... 1 - عمليات التناظر
- 111 ..... 2 - تناظر الشبكات البلورية
- 116 ..... 3 - تصنيف الشبكات البلورية

265	ب - قوة التناافر بين الذرات .....
268	ج - معادلة ليونارد - جونز .....
270	د - طاقة الربط .....
273	هـ - الانضغاطية .....
277	3 - البلورات الأيونية .....
280	أ - طاقة مدلونك .....
284	ب - طاقة الربط .....
286	ج - معامل المرونة الحجمية .....
290	4 - البلورات التساهمية .....
299	5 - الأصرة الأيونية - التساهمية .....
301	6 - الأصرة المعدنية .....
306	7 - الأصرة الهيدروجينية .....
309	8 - مناقشة أنواع الأواصر المختلفة .....
312	تمرينات الفصل الخامس .....
	الفصل السادس: خواص مرونة البلورات .....
347	1 - ممتد الاجهاد .....
354	2 - ممتد التشوه .....
361	3 - قانون هوك .....
367	4 - طاقة المرونة .....
369	5 - معاملات مرونة البلورات المكعبة .....
377	6 - موجات المرونة في البلورات .....
386	تمرينات الفصل السادس .....

126	4 - تصنيف التركيب البلوري .....
130	تمرينات الفصل الثالث .....
	الفصل الرابع: انعراج الأشعة السينية في البلورات
143	1 - الأشعة المستخدمة لدراسة البلورات .....
147	2 - انتاج الأشعة السينية .....
155	3 - أمتصاص الأشعة السينية .....
161	4 - أنعراج الأشعة السينية - شروط براغ .....
165	5 - أنعراج الأشعة السينية - تفسير لاوي .....
171	6 - تكافؤ شروط براغ وشروط لاوي .....
172	7 - بناء أيوالد .....
175	8 - عامل البنية .....
184	9 - عامل التشثت الذري .....
187	10 - تأثير درجة الحرارة على شدة أنعكاس براغ .....
191	11 - الطرق التجريبية لانعراج الأشعة السينية .....
193	أ - طريقة لاوي .....
197	ب - طريقة البلورة الدوارة .....
201	ج - طريقة المسحوق .....
216	تمرينات الفصل الرابع .....
	الفصل الخامس: الأواصر (الروابط) البلورية
259	1 - مقدمة .....
262	2 - البلورات الجزيئية .....
262	أ - قوة فان - دير - والز .....

## الفصل السابع: اهتزازات الشبكة البلورية

421	1 - تذبذب ذرات البلورات.....
424	2 - التقريب التوافقي (الهارموني) .....
428	3 - نموذج البعد الواحد للشبكة البلورية الاحادية الذرة .....
444	4 - نموذج البعد الواحد لشبكة برفاي الثنائية الذرة .....
455	5 - الأنماط الطبيعية لشبكة برفاي الاحادية الذرة .....
454	6 - الانماط الطبيعية لشبكة برفاي ذات قاعدة .....
466	7 - تكميم اهتزازات الشبكة البلورية .....
480	تمرينات الفصل السابع .....
	الفصل الثامن: الخواص الحرارية للشبكة البلورية
543	1 - السعة الحرارية .....
546	2 - نموذج آينشتين التقريبي .....
548	3 - نظرية ديبي .....
551	4 - مقارنة نماذج آينشتين وديبي .....
559	5 - الاهتزازات اللا توافقية للشبكة البلورية .....
563	6 - التمدد الحراري .....
567	7 - الناقلية الحرارية .....
575	8 - المقاومة الحرارية للشبكة البلورية .....
583	تمرينات الفصل الثامن .....
623	المصطلحات .....

## الفصل الأول

### الشبكة البلورية



تصنف المواد الصلبة عموما الى صنفين، مواد بلورية كالمعادن وأغلب

المركبات الكيميائية والسبائك ومواد صلبة لا بلورية كالزجاج والشمع والقطر . كما أن بعض المواد السائلة والغازية عند تجمدها تتحول الى مواد بلورية كالثلج والغازات الخاملة .

والشكل الخارجي للبلورة المواد البلورية تتميز بسطحها المستوي

الملساء التي تسمى وجوه البلورة . ويختلف مظهر بلورات المواد المختلفة باختلاف أشكال وجوهها أو باختلاف الزوايا بين هذه الوجوه وبالتالى باختلاف تناظرها وتماثلها .

والمظهر الخارجي للبلورة يعكس طبيعة التراكيب الداخلية أو وحدات

البناء الداخلية التي كونت البلورة؛ ويمكن تصور هذه الحقيقة بالـصورة التالية: لو رتبنا مجموعة معينة من الطابوق (كل طابوقة لها شكل متوازي المستطيلات) على بعضها البعض لتكون منها أشكالا مختلفة قد تكون بهيئة متوازي مستطيلات كهيئة الطابوقة الواحدة وقد تكون غير ذلك تماما . ولذلك فعند قولنا بأن التركيب الخارجي للبلورة يعكس طبيعة وحدات البناء الداخلية المكونة لها لا نعني أن هذه العلاقة مباشرة بل يمكن أن تستنتج، وهذا الاستنتاج قد يكون سهلا وقد 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 ( Crystal lattice ): التركيب الداخلي

لكافة بلورات المواد هو عبارة عن توزيع فضائي للذرات أو الجزيئات أو تجمعاتهما . فالذرة الواحدة أو الجزيئة الواحدة أو التجمع الذري

التركيب البلوري ذرة أو جزيئة أو تجمع ذري أو تجمع جزيئي). فلو استبدلنا كل قاعدة P بنقطة نسميها عقدة لحصلنا على الشكل (1 - 1) الذي يصور التوزيع الأصلي للتركيب البلوري (الطراز). وبالامكان اختيار مواقع العقد في أي مكان حول وجوار الحرف P - القاعدة بحيث أن كل العقد تقع في أماكن متشابهة بالنسبة لعناصر الطراز. ان التوزيع العقدي في الشكل (1 - 1) يسمى بالشبكة البلورية. ونفس الكلام أعلاه ينطبق على التركيب البلوري في الأبعاد الثلاثة ( في الفضاء). ومما جاء نستنتج المعادلة المنطقية التالية :

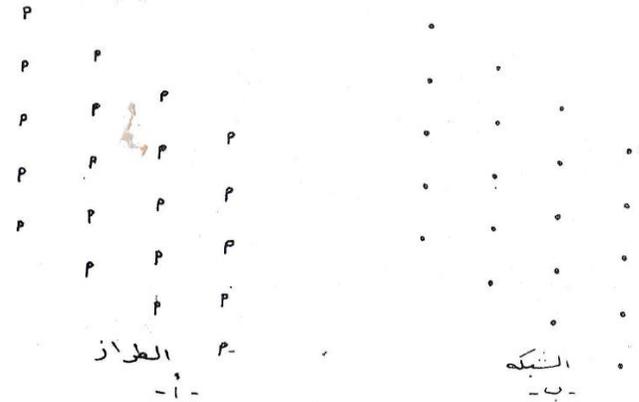
$$\text{الشبكة} + \text{القاعدة} = \text{التركيب البلوري} \quad (1 - 1)$$

وهذه المعادلة المنطقية موضحة في الشكل (1 - 2). ونذكر أن القواعد في التركيب البلوري متماثلة مع بعضها تماما سواء في تركيبها وعدد الذرات فيها وفي اتجاهات وضع ذراتها وقواعد شبكات أغلب المصممان



شكل (1 - 2)

أو التجمع الجزيئي عند تكراره في الفضاء يكون طرازاً (\*) نطلق عليه التركيب البلوري. ان وحدة الطراز التي عند تكرارها في الفضاء تكون الطراز كله نطلق عليها اسم القاعدة أو الأساس (Basis). والقاعدة تختلف حسب نوع البلورات فقد تكون ذرة واحدة فقط أو جزيئة مفردة وقد تكون تجمع ذري أو تجمع جزيئي. أن تكرار القاعدة في الفضاء ليس عشوائيا بل يتم وفق قوانين طبيعية معينة هي قوانين تناظر البلورات. وأهم قانون تناظر ينطبق على كل أنواع البلورات هو التناظر الانسحابي (Translation) ولمعرفة مثل هذا التناظر ندرس البلورة (أو الطراز) ببعدين كما في الشكل (1 - 1)، حيث عنصر الطراز أو القاعدة هو الحرف P (الذي يقابل في



شكل (1 - 1)

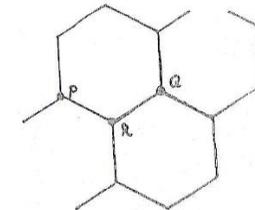
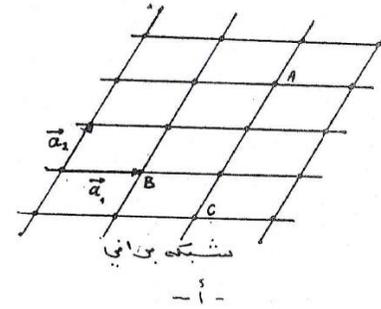
(\*) لو رسمنا وردة على ورقة ثم أرحنا هذا الرسم بمقدار معين لكي يعيد نفسه في أماكن مختلفة على الورقة، فبنشأ رسماً مكوناً من مجموعة كبيرة من الورد موزعة بشكل منتظم وناشيء عن إزاحة الورد الأصلية. نسمي هذا الرسم بالطراز والورد الواحدة بعنصر الطراز.

2

عبارة عن ذرة واحدة، ولكن قاعدة شبكة المواد البيوكيميائية والعضوية قد تتكون من آلاف الذرات.

وفي أغلب حالات وصف التركيب البلوري للجسم الصلب نكون متعاملين مع ما يسمى بشبكة برافي، وهذه الشبكة تتمتع باحدى الخاصيتين المتكافئتين التاليتين:

1 - شبكة برافي هي تركيب دوري لا نهائي يتكون من عقد منفصلة موزعة في فضاء الشبكة بأسلوب منتظم. فلو أخذنا عقدة معينة وعرفنا أنها محاطة ببقية عقد الشبكة بتوزيع فضائي معين فاننا 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. ولمزيد من فهم هذا التعريف لشبكة برافي نأخذ الشكل (1 - 3) الذي يمثل شبكتين مختلفتين. نلاحظ في الشكل (1 - 3) أن كل



شكل (1 - 3)

عقدة من عقد الشبكة يضمها العقد A و B و C متماثلة تماما من ناحية التوزيع الفضائي لبقية العقد حولها، لذلك فالشبكة (1 - 3) هي شبكة برافي. ولكن الأمر يختلف لو درسنا الشبكة المتمثلة في الشكل (1 - 3) أو شبكة " خلايا النحل ". فمثلا تكون العقدتان P و Q متماثلتان من ناحية التوزيع الفضائي لبقية العقد حولهما ولكنهما يختلفان من هذه الناحية عن العقدة R. معنى هذا أن الشكل (1 - 3) لا يصور شبكة برافي.

2 - شبكة برافي تتمتع بإمكانية تحديد كل عقدها باستخدام شعاع الانسحاب  $\vec{R}$ . ولمعرفة هذا الشعاع نعتبر أي من عقد شبكة برافي كمرکز للمحاور ونختار ثلاثة أشعة  $\vec{a}_1$  و  $\vec{a}_2$  و  $\vec{a}_3$  (غير واقعة كلها في مستوى واحد) فان شعاع الانسحاب  $\vec{R}$ :

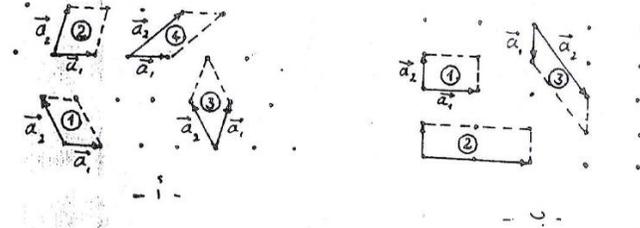
$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad (2 - 1)$$

حيث  $n_1, n_2, n_3$  - أرقام صحيحة (موجبة وسالبة) اختيارية. وهذا الشعاع  $\vec{R}$  يحدد كل عقد شبكة برافي. وكما يبدو من المعادلة التعريفية (2 - 1) فان شعاع الانسحاب يمثل عائلة كبيرة من الأشعة حسب قيم  $n_1, n_2, n_3$  كما وأنه يعتمد على الأشعة  $\vec{a}_1$  و  $\vec{a}_2$  و  $\vec{a}_3$  التي تختلف باختلاف أنواع شبكات برافي للبلورات المختلفة. ويمكن تصور بناء كل الشبكة اعتبارا من اراحة إحدى عقدها بكل احتمالات الشعاع  $\vec{R}$ . وطالما أن القواعد متماثلة تماما لذلك نقول بأن كل تركيب بلوري متناظر انسحابيا. ونستطيع تطبيق المعادلة (1 - 2) على شبكة برافي الموضحة في الشكل (1 - 3). نختار  $\vec{a}_1$  و  $\vec{a}_2$  ونحسب مواقع النقاط  $\vec{R}_A$  و  $\vec{R}_B$  و  $\vec{R}_C$  لنجد:

$$\vec{R}_A = 2\vec{a}_1 + 2\vec{a}_2, \quad \vec{R}_B = \vec{a}_1, \quad \vec{R}_C = 2\vec{a}_1 - \vec{a}_2$$

وتسمى الأشعة  $\vec{a}_1$  و  $\vec{a}_2$  و  $\vec{a}_3$  بأشعة الانسحاب الأساسية (Primitive Translation Vectors). ونذكر عدم وجود طريقة

مفردة لتحديد أشعة الانسحاب الأساسية لشبكة معينة من شبكات برافاي:



شكل (1 - 4)

في الحقيقة توجد مجموعة ضخمة من الاختيارات الغير المتكافئة لاختيار أشعة الانسحاب الأساسية. وهذا موضح في الشكل (1 - 4) لشبكة برافاي ببعدين (اللتسيط). ولكننا نستطيع اختيار أشعة الانسحاب الأساسية  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  وهي التي تولد فيما بينها إحصاف متوازي سطوح (Parallelepiped) يستطيع بنكراره توليد البنية البلورية ويحمل نفس تناظر كل الشبكة.

فتناظر الشبكة (1 - 4 ب) رباعي أي أن الشبكة تنطبق على نفسها (عند كل دوران بمسواها  $90^\circ$  مرة). يمر من احدى العقد أربعة مرات بالدورة الواحدة لذلك نتوقع أن أشعة الانسحاب الأساسية هي  $\vec{a}_1^*$  و  $\vec{a}_2^*$  في المربع (1) الامغر من أي مربع آخر.

وأخيرا نتطرق الى ما يسمى بالكثافة العقدية السطحية وهي عدد العقد في وحدة السطوح لشبكة مستوية (\*). ففي الشبكات المستوية الغير متوازئية تكون الكثافة العقدية فيها غير متساوية (الآ اذا كانت متناظرة بعملية مسن عمليات التناظر التي سندرسها لاحقا). أما للشبكات المتوازئية فالكثافة واحدة. في البلورات تكون الوجوه بمثابة شبكات مستوية. وعند تنمية البلورة فان سرعة نمو الوجوه البلورية مرتبط بصفة تباين المناحي أو عدم تماثل الخواص في جميع الاتجاهات (Anisotropy). ولقد وجد برافاي (1863-1811 Bravais) أن الوجوه ذات الكثافة العقدية الكبيرة تنمو بسرعة أقل من الوجوه ذات الكثافة العقدية الأصغر، أو تتغلف البلورات بالوجوه ذات الكثافة العقدية العظمى أو ذات سرعة النمو البطيئة. وللكثافة العقدية وبالتالى سرعة النمو علاقة وثيقة بتناظر الشبكات التي سترها لاحقا.

## 2 - الخلية الأساسية

ان أشعة الانتقال الأساسية  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  تحدد من الشبكة البلورية متوازي سطوح أبعادها  $a$  و  $b$  و  $c$  وزواياها  $\alpha$  بين الضلعين ( $b$  و  $c$ ) و  $\beta$  بين الضلعين ( $a$  و  $c$ ) و  $\gamma$  بين الضلعين ( $a$  و  $b$ ) كما في الشكل (1 - 15). ونسمي متوازي السطوح هذا والذي يحوي عند زواياه الركنية فقط عقدا بالخلية

(\*) الشبكة المستوية - ببعدين - هي مستوي مار من نقاط الشبكة الفضائية بالأبعاد الثلاثة.

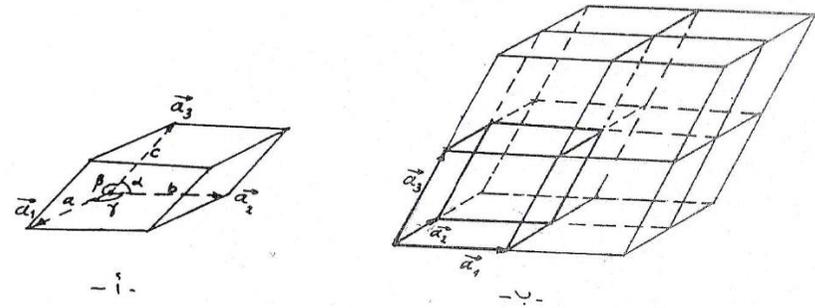
ذكرنا سابقاً عدم وجود طريقة مفردة لتحديد أشعة الانسحاب الأساسية لذلك فلا يوجد أسلوب منفرد لاختيار الخلية الأساسية ولكن يفضل التعامل مع الخلية الأساسية التي لها تناظر يشابه تناظر كل الشبكة (\*\*\*) (سنرى ذلك). ونذكر بأن حجم الخلية الأساسية:

$$v = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)| \quad (3-1)$$

واحدًا لجميع الاختيارات الممكنة. فعلا، فطالما ينسب للخلية الأساسية عقدة واحدة فقط (\*\*\*)، ولو فرضنا بأن  $n$  هي الكثافة الحجمية لعقد الشبكة و  $v$  هو حجم الخلية الأساسية فان  $n \cdot v = 1$  أو أن  $v = \frac{1}{n}$  أي أن حجم الخلية الأساسية لا يعتمد على أسلوب اختيارها.

ونذكر أنه بالإمكان دائماً اختيار خلية أساسية (تحقق التناظر الانسحابي، 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 نكون أحيانا ولأسباب متعلقة بالتناظر (كما سنرى لاحقا) متعاملين مع متوازي سطوح مختار من الشبكة ولكنه يحتوي على عقد ليس فقط عند زواياه الركنية (كما هو الحال للخلية الأساسية) بل وبداخله. أو على وجوهه، بحيث أن تناظر يماثل تناظر كل الشبكة التي هو جزء منها. عندئذ نسمي متوازي السطوح هذا بالخلية الأولية غير الأساسية (أو ببساطة بالخلية الأولية). إذن نختار الخلية الأولى بحيث تحقق التناظر الانسحابي وبحيث أن تناظرها يماثل تناظر كل الشبكة (ولكن ليس كل خلية أولية تتمتع بتناظر الشبكة فالمسألة هي مسألة اختيار).

(\*) وعند عدم وجود مثل هذه الخلية الأساسية عندئذ يفضل التعامل مع الخلية الأولية الغير أساسية والتي لها نفس تناظر الشبكة.  
(\*\*) مثلا، العقد الثمانية للخلية الأساسية الموضحة في الشكل (5-1) تشترك مع ثمانية خلايا أساسية متجاورة. لذلك ينسب للخلية الواحدة  $8 \times \frac{1}{8} = 1$  عقدة.



شكل (1 - 5)

الأساسية ( Primitive Cell ) - ونسمي  $a, b, c$  بأبعاد الخلية الأساسية أو متحولات أو ثوابت الشبكة ( Lattice Parameters ) والزوايا  $\alpha, \beta, \gamma$  تسمى بالزوايا الأساسية. ويمكن بناء كل الشبكة البلورية بعملية نقل الخلية الأساسية باتجاه أحرفها  $\vec{a}_1$  و  $\vec{a}_2$  و  $\vec{a}_3$  وبخطوات ملائمة تساوي على التوالي  $a$  و  $b$  و  $c$ . معنى هذا أن الشبكة البلورية متناظرة بالنسبة لعملية الانسحاب في الفضاء للخلية الأساسية. وهذا التناظر هو حالة أساسية وحمية للحصول على الشبكات البلورية وبدونها لا تتكون لدينا شبكة بلورية أو لا نحصل على تركيب بلوري. والشكل (1 - 5) يوضح كيفية بناء كل الشبكة بعملية نقل الخلية الأساسية باتجاه أحرفها. وعملية النقل هذه محددة بالمعادلة (1 - 2) وهي تصور لعملية رزم الخلايا الأساسية على بعضها بدون ترك فراغ وبدون تداخلها مع بعضها. وهكذا فلتحديد وتصنيف شبكة بلورية ما تجب معرفة ثوابت خليتها الأساسية  $(a, b, c, \alpha, \beta, \gamma)$ .

عقد في وسط كل من وجوهها الستة وتسمى مركزية الوجوه Fc (أي Face - Centered). وعدد عقد الشبكة التي تتبع الخلية الأولية bc يساوي  $2(1 + \frac{1}{8} \times 8) = 2$  وذلك لأن العقد الثمانية عند الزوايا الركنية مشتركة مع ثمانية خلايا متجاورة. أما عدد عقد الشبكة التي تتبع الخلية الأولية Fc فيساوي  $4(1 + \frac{1}{8} \times 8 + \frac{1}{2} \times 6) = 4$  وذلك لأن كل عقدة من العقد الستة عند الوجوه، مشتركة مع خليتين متجاورتين.

أحداثيات أي عقدة من عقد الشبكة  $(x_j, y_j, z_j)$  على اعتبار إحدى عقد الشبكة مركزا للمحاور تساوي:

$$x_j = pa, \quad y_j = qb, \quad z_j = rc \quad (4 = 1)$$

وتكتب الأحداثيات بالصورة  $(p, q, r)$ . وتكون  $p$  و  $q$  و  $r$  أعداد صحيحة إذا اعتبرنا الشبكة "المجزأة" إلى خلايا أساسية أبعاد الواحد منها  $a$  و  $b$  و  $c$ ، وإذا "جزأت" الشبكة إلى خلايا أولية غير أساسية فإن  $p$  و  $q$  و  $r$  لا يشترط فيها أن تكون أعداد صحيحة بل قد تكون كسورا أو أجزاء من أبعاد الخليئة الأولية غير الأساسية  $a$  و  $b$  و  $c$ . فمثلا أحداثيات العقدة المركزية في الشكل (1-6) هي  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ . فمئات أحداثيات العقد الستة في مراكز وجوه الشكل (1-6) هي:

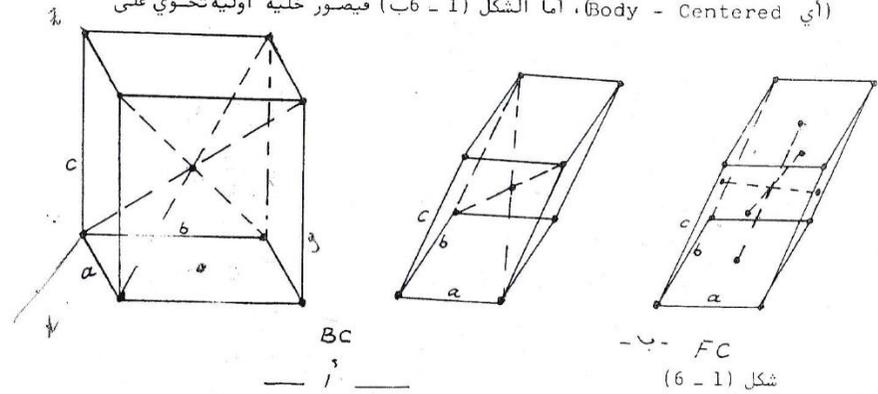
$$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}), (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1), (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}), (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}), (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0), (1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}), (\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$$

أما إذا وجدت خلية أساسية لها نفس تناظر الشبكة فهي التي نختارها دائما طالما أن حجمها هو أصغر من حجم الخلية الأولية.

ولو عدنا إلى الشكل (1-4) لوجدنا بأن الخلية 2 غير أساسية (تتبعها عقدتان) بينما 1 و 3 أساسيتان (تنتمي لكل منهما عقدة) ولكننا نختار التعامل مع 1 كونها أساسية ولها نفس تناظر كل الشبكة. وخلافاً للشكل (1-4) كلها أساسية (ولها نفس المساحة طبعاً) ولها نفس تناظر الشبكة الشائقي (تنطبق على نفسها مرتين بالدورة الواحدة).

أبعاد الخلية الأولية يرمز لها أيضاً بالرموز  $a$  و  $b$  و  $c$ ، ولكن لا تنطبق أشعة الانتقال الأساسية  $\vec{a}_1$  و  $\vec{a}_2$  و  $\vec{a}_3$  على حافات الخلية الأولية غير الأساسية (فلو حدث ذلك فليس من الممكن استخدام المعادلة (1-2) لتحديد كل عقد الشبكة). لذلك نشير لأحرف الخلية الأولية بالرموز المحورية  $Ox$  و  $Oy$  و  $Oz$  (التي ليس من الشروط أن تكون متعامدة). وتؤكد أن حجم أي خلية أولية غير أساسية أكبر دائماً من حجم الخلية الأساسية التابعة لنفس الشبكة.

والشكل (1-6) يبين نوعين من الخلايا الأولية الغير أساسية: في الشكل (1-6) تحوي الخلية الأولية على عقدة وسطها لذلك نسميها مركزية الجسم bc (أي Body - Centered). أما الشكل (1-6) فيصور خلية أولية تحوي على

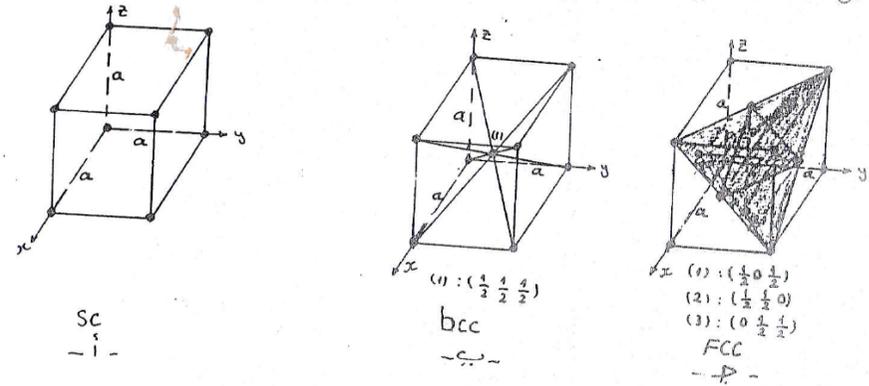


وهي الشبكة التي خليتها الأولية عبارة عن مكعب (أو أن تناظر الشبكة هو نفس تناظر المكعب). وتوجد ثلاثة أنواع من هذه الشبكات:

أ - الشبكة المكعبة البسيطة (Simple Cubic) Sc: ويرمز لها بالرمز (P). وهي التي خليتها الأولية بهيئة مكعب يحتوي فقط على عقد عند زواياه الركنية الثمانية، أي أن المكعب هو خلية أساسية.

ب - الشبكة المكعبة الممركزة الجسم bcc: ويرمز لها بالرمز (I) وخليتها الأولية عبارة عن مكعب يحوي على عقدة وسطه بالإضافة للعقد الثمانية عند زواياه الركنية.

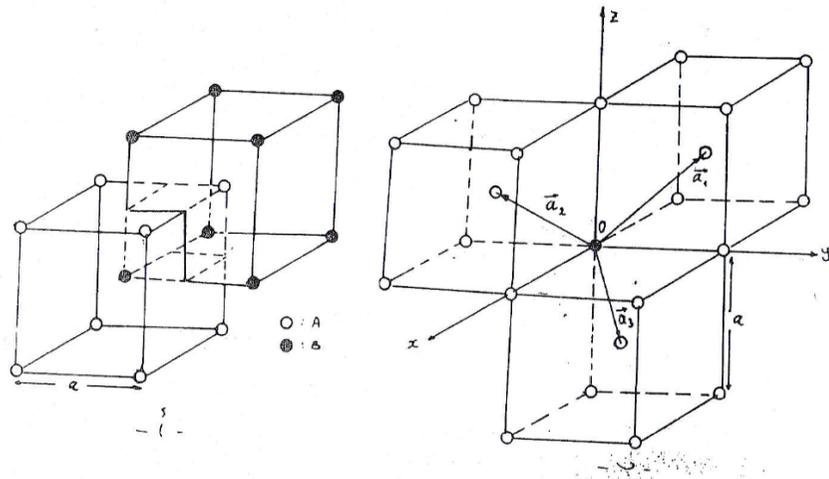
ج - الشبكة المكعبة الممركزة الوجوه FCC: ويرمز لها بالرمز (F) وخليتها الأولية عبارة عن مكعب يحوي على عقدة وسط كل سطح من سطوحه الستة بالإضافة الى المقعد عند الزوايا الركنية. وهذا كله موضح في الشكل (1 - 7)



شكل (1 - 7)

وتأتي أهمية دراسة الشبكات المكعبة (F و I) بشكل خاص لأن أغلب عناصر الجدول الدوري تتبلور مكونة شبكة بلورية مكعبة حيث تقع ذرة واحدة أو أيون واحد (قاعدة) في كل عقدة من عقد الشبكة. مع العلم أن الشبكات المكعبة البسيطة قليلة جدا. فمن العناصر الكيماوية في الظروف الطبيعية يتبلور بالصورة P هو فقط البوليونيوم  $P_{81}$  ذو الطور -  $\alpha$ .

ندرس أولا الشبكة (I) bcc: وهذه الشبكة يمكن تصورها عند ما نضيف الى الشبكة المكعبة البسيطة التي عقدها A في الشكل (1 - 8) شبكة مكعبة بسيطة



شكل (1 - 8)

والأشعة الأساسية  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  تكون الخلية الأساسية كما في الشكل (1 - 9) وهي بصورة مشور سداسي (Rhombohedral) طول ضلعه:

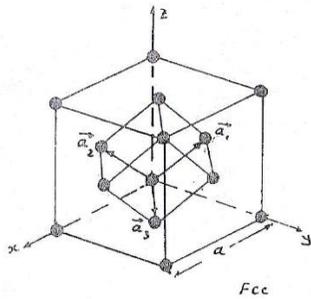
$$|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = |\vec{a}_3| = \frac{a}{2} \sqrt{3},$$

وزاويته الوجيهة تحسب من المعادلة التالية:  $\cos \theta = \frac{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2}{|\vec{a}_1| |\vec{a}_2|} = -1/3$  وتساوي  $109^\circ 28'$ . حجم الخلية الأساسية يساوي:

$$(7-1) \quad \nu = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)| = \frac{a^3}{2}$$

وهذا متوقع ( $\nu < a^3$ ) وذلك لأن حجم الخلية الأساسية أقل دائما من حجم الخلية الأولية الغير أساسية ( $a^3$ ). ويمكن استنتاج ذلك منطقيا: ينتسب للخلية الأولية (المكعب) عقدتان، لذلك فالحجم المخصص لعقدة واحدة يساوي  $\frac{a^3}{2}$  وهو نفس حجم الخلية الأساسية (لأنه ينتسب للخلية الأساسية عقدة واحدة).

وللحصول على الشبكة المكعبة الممركزة الوجوه (Fcc) يجب إضافة عقدة شبكة في وسط كل وجه من وجوه الخلايا الأولية للشبكة المكعبة البسيطة. وأشعة



شكل (1 - 7)

$$(8-1) \quad \vec{a}_1 = \frac{a}{2} (\vec{j} + \vec{k}), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2} (\vec{k} + \vec{i}), \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2} (\vec{i} + \vec{j})$$

هذه الأشعة الأساسية تكون الخلية الأساسية كما في الشكل (1 - 10) حيث تبدو

أخرى عقدها B بحيث تصح العقد B مراكز لمكعبات الشبكة ذات العقد A. وهكذا فإن كل من الذرات A أو B تشغل زوايا مكعب وتقع في وسط مكعبات أخرى وذلك في نفس الوقت. أي أن كل العقد (سواء A أو B) متماثلة تماما من ناحية التوزيع الفضائي لما يحيط بكل واحدة من عقد؛ ومعنى هذا أن الشبكة bcc هي شبكة برفي.

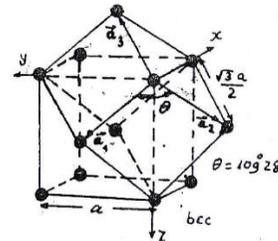
والآن نقوم بمعرفه أشعة الانسحاب الأساسية  $\vec{a}_1$  و  $\vec{a}_2$  و  $\vec{a}_3$  للشبكة bcc بدلالة الأشعة الغير الأساسية للشبكة المكعبة البسيطة وهي الأشعة  $\vec{a}_i, \vec{a}_j, \vec{a}_k$  التي تحدد أحرف المكعب الذي طول ضلعه a. كما في الشكل (1 - 8 ب). نختار الأشعة الأساسية بالصورة التالية (علما أنه توجد اختيارات أخرى):

$$(5-1) \quad \vec{a}_1 = \frac{a}{2} (\vec{j} + \vec{k} - \vec{i}), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2} (\vec{k} + \vec{i} - \vec{j}), \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2} (\vec{i} + \vec{j} - \vec{k})$$

حيث a - طول حرف المكعب. وهذه الأشعة أساسية، تحدد كل عقد الشبكة bcc. فطبقا للمعادلة (1 - 2) نحدد الشعاع  $\vec{R}$  الذي يعين كل عقد الشبكة:

$$(6-1) \quad \vec{R} = \frac{a}{2} (-n_1 + n_2 + n_3) \vec{i} + \frac{a}{2} (n_1 - n_2 + n_3) \vec{j} + \frac{a}{2} (n_1 + n_2 - n_3) \vec{k}$$

حيث  $n_1, n_2, n_3$  أعداد صحيحة اختيارية.



شكل (1 - 9)

بصورة متوازي سطوح، له ستة وجوه وكل وجه بصورة متوازي أضلاع. حجم الخلية الأساسية ( $\tau = \frac{a^3}{4}$ ) يساوي ربع حجم الخلية الأولية الغير أساسية - المكعب. مما جاء أعلاه نلاحظ أن الخلايا الأساسية للشبكات المكعبة fcc و bcc لا تملك تناظر المكعب أو أن تناظرها " أقل" من تناظر المكعب. وطالما أن تناظر المكعب هو نفس تناظر كل الشبكة المكعبة سواء كانت fcc أو bcc لذلك يتم التعامل عادة مع الخلايا الأولية الغير أساسية وهي مكعبة الشكل.

والجدول التالي (1 - 1) يحدد خواص الشبكة المكعبة - شبكة برفاي:

نوع الشبكة :	Sc (P)	bcc (I)	Fcc (F)
1 - حجم الخلية الأولية	$a^3$	$a^3$	$a^3$
2 - حجم الخلية الأساسية ( $\tau$ )	$a^3$	$a^3/2$	$a^3/4$
3 - عدد العقد التابعة لكل خلية أولية	1	2	4
4 - عدد عقد الشبكة لوحدة الحجم	$1/a^3$	$2/a^3$	$4/a^3$
5 - العدد التناسقي Z	6	8	12
6 - عدد العقد المجاورة للجوار المباشر	12	6	6
7 - المسافة بين أقرب عقدتين	$a$	$\frac{\sqrt{3}a}{2} = 0,86a$	$\frac{a}{\sqrt{2}} = 0,7a$

والعدد التناسقي أو عدد الجوار المباشر (Coordination Number) هو عدد أقرب عقد من عقد الشبكة بالنسبة لعقدة معينة. وبما أن كل عقد شبكة برفاي (Sc أو bcc أو Fcc) متماثلة من ناحية التوزيع الفضائي لما يحيط بكل عقد من بقية العقد لذلك فإن العدد التناسقي هو نفسه لكل عقد شبكة ما أو خاصة من خصائص تلك الشبكة.

وأخيرا نذكر الملاحظة التالية: عرفنا بأن التركيب البلوري (طبقا للمعادلة

المنطقية 1 - 1) هو شبكة مع قواعد متماثلة ونفس المنطق نستطيع أن نعتبر الشبكة الممركزة الجسم كشبكة مع قواعد عقدية: نعتبرها كشبكة مكعبة بسيطة مع قاعدة متكونة من عقدتين تحتلان المواقع ( $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ ) و ( $0, 0, 0$ ) - أنظر الشكل (1 - 7 ج). أما الشبكة الممركزة الوجوه فتعتبر كشبكة مكعبة بسيطة مع قاعدة متكونة من أربعة عقد تحتل المواقع:

$$(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}), (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}), (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0) \text{ و } (0, 0, 0)$$

وعلى هذا الأساس بالامكان اعتبار الأشعة المنطقية على أحرف المكعب

كأشعة أساسية للشبكات bcc و fcc :

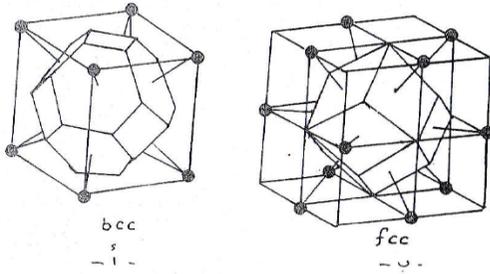
شبكة بسيطة + قاعدة عقدية = شبكة " معقدة "

#### 4 - خلية فيكنر زايتس (Wigner - Seitz Cell)

ذكرنا أن سبب دراستنا للخلايا الأولية غير الأساسية من دون الخلايا الأساسية (في بعض الحالات) هو تفضيلنا للتعامل مع الخلايا التي تناظرها يشابه تناظر كل الشبكة المدروسة. فمثلا للشبكة المكعبة الممركزة السطوح Fcc (Face - Centered Cubic) يتم التعامل مع خلية أولية غير أساسية مكعبة تحوي على عقد وسط كل سطوحها الستة وذلك لأن تناظر هذه الخلية الغير أساسية يشابه تناظر كل الشبكة المكعب بينما تكون الخلية الأساسية للشبكة Fcc بصورة متوازي سطوح مائل لا يملك تناظر الشبكة المكعب. ولكن أليس من الممكن اختيار خلية أساسية (حيث توجد طرق مختلفة غير متكافئة لاختيار الخلية الأساسية) بحيث يكون لها تناظر يشابه تناظر الشبكة التي هي جزء منها.

والجواب: نعم يوجد مثل هذا الاختيار، والخلية الأساسية المختارة تسمى خلية فيكنر - زايتس (\*). وتصميم هذه الخلية الموضحة في الشكل (1 - 11) يتم بالمص (\*). هذه أسماء علماء.

وجوه عبارة عن مسدسات منتظمة وستة وجوه مربعة الشكل . وكل وجه مسدس يكون عموديا ومن وسط المستقيم الواصل بين العقدة الواقعة وسط الخلية الأولية ، التي لها هيئة مكعب مركز الحجم ، والعقدة الموجودة عند الراوية المركزية للمكعب . والوجه المربع يكون عموديا ومن وسط المستقيم الواصل بين العقدة المركزية للمكعب المبدورس والعقدة المركزية للمكعب المجاور له احيث توجد ستة مكعبات مجاورة للمكعب المدروس) . نلاحظ انه اذا كانت الشبكة المدروسة



شكل (1- 12)

مكعبة التناظر فهذا لا يعني أن خلية فيكنر - زايتس يجب أن تكون مكعبة بل المطلوب أن يكون تناظر خلية فيكنر - زايتس يشابه تناظر المكعب . وحيث أن كل عملية تناظر للمكعب هي أيضا عملية تناظر لثمانى الوجوه المنتظم ( Octahedron ) والعكس بالعكس، لذلك طبيعيا أن تكون خلية فيكنر - زايتس للبلورة المكعبة bcc هي ثمانية وجوه مشذب بانتظام وتناظر .

أما خلية فيكنر - زايتس للبلورة المكعبة الممركزة السطوح fcc (وهي التي خليتها الأولية - غير الأساسية - عبارة عن مكعب يحوي على عقدة وسط كل من وجوهه الستة) فتكون بهيئة أشعشري معيني ( Rhombic dodecahedron ) أي له اثنا عشر سطحاً متشابهها بهيئة معين، كما هو واضح في الشكل (1- 12):

التالية : نأخذ أية عقدة من عقد الشبكة ونصلها بمستقيمات مع جميع العقد

المحيطة بها ثم نقيم مستويات عمودية على هذه

المستقيمات من منتصفاتها . بعد ذلك نختار

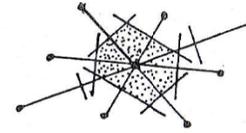
أصغر متعدد الوجوه المحدد بهذه

المستويات المقامة ويحوي في وسطه على

العقدة المختارة . وبذلك نحصل على خلية

أولية بأقل حجم ممكن وأساسية ولها تناظر

يشابه تناظر الشبكة ككل (\*) نسميها



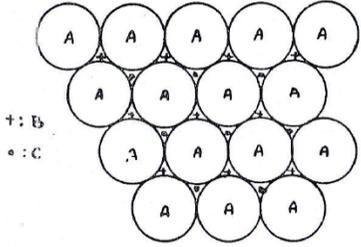
شكل (1 - 11)

خلية فيكنر - زايتس، وبواسطة هذه الخلايا يمكن املء كل فضاء الشبكة البلورية بدون فراغات بنفس أسلوب املء باختيارنا السابق للخلية الأساسية في الشكل (1 - 5). أي أنه عند ازاحة خلية فيكنر - زايتس بكل احتمالات شعاع الازاحة  $R$  الذي يحدد كل نقاط شبكة برافي المدروسة) فان هذه الخلية ستملأ كل فضاء الشبكة بدون تراكب مع بعضها وبدون ترك فواصل بين بعضها البعض . وطالما أن هذه الخلية تحتوي على عقدة واحدة لذلك فهي أساسية . كما أننا عند تصميمنا لها لم نحدد مسبقاً أية أشعة ثلاثية أساسية لذلك فهي متناظرة كتناظر شبكة برافي التي هي جزء منها أو نقول أن لها نفس تناظر شبكتها .

وخلية فيكنر - زايتس للشبكة البلورية المستوية موضحة في الشكل (1 - 11) وقد لوحظ أن شكل هذه الخلية هو دائما مسدس عدا الشبكة المستطيلة حيث تكون خليتها مستطيلة والشبكة المربعة تكون خليتها مربعة .

والشكل (1 - 12) يصور خلية فيكنر - زايتس للشبكة المكعبة الممركزة الحجم bcc ( Body - Centered Cubic ) . وتبدو هذه الخلية بهيئة ثمانية وجوه مشذب ( Truncated octahedron ) أي له ثمانية

(\*) معنى جملة (يشابه تناظر الشبكة) تفهم لاحقا في الفصل الثالث.



شكل (1 - 13)

وعند تعبئة الطبقة الثانية (B) من الكرات فوق الطبقة الاولى (A)، فإن كل كرة من الطبقة B ستقع في موقع تماس فيه ثلاثة كرات من الطبقة A، مثلا تقع مباشرة فوق الفجوات (بين الكرات A) المؤشر عليها بالاشارة (+) في الشكل (1 - 13). عندئذ تأخذ الطبقة الثالثة من الكرات (الطبقة C) أحد موقعين:

الأول : تشغل كرات الطبقة (C) - التي تقع فوق كرات الطبقة B - مواقعها تقع مباشرة فوق الفجوات (بين كرات الطبقة A) المؤشر عليها بالاشارة (.) في الشكل (1 - 13). عندئذ تشغل الطبقة الرابعة - التي تقع فوق كرات الطبقة C - مواقعها تقع مباشرة فوق كرات الطبقة A، لذلك نسمي الطبقة الرابعة بالطبقة A أيضا. ويكون توزيع الطبقات حسب هذه التعبئة بالصورة (.... ABCABC). وهذا الأسلوب في التعبئة يؤدي الى تكون تركيب شبكي مكعب (حيث العقدة هي مراكز الكرات) خليته الأولية مكعبة متمركزة الوجوه، والطبقات المدروسة تشغل المستويات العمودية على القطر الجسمي للمكعب (\*) كما في الشكل (1 - 14 أ). وهذه الخلية المكعبة تسمى بالعبوة المكعبة المتراسة

(\*) وهو الاتجاه [111]

في هذا الشكل لم تصور الخلية الأولية للشبكة، فالمكعب المصور المحيط بخليية فينكر - زايتس ليس خلية أولية. وكل وجه من الوجوه المتطابقة الأثنا عشر يكون عموديا على المستقيم الواصل بين العقدة الموجودة وسط خلية فينكر - زايتس وانعقد الأثنا عشر الموجودة وسط أضلاع المكعب المصور .

### 5 - العبوة المتراسة المكعبة والسداسية

ذكرنا بأنه لدراسة التركيبات البلورية للمواد، تستبدل الذرات أو تجمعاتها بعقد لتكون منها هيكل نظري هو شبكة برافي. ولكن هذا لا يعني اعتبار الذرات نقاطا عقدية وذلك لان لها حجما معينا وهي تملأ حجم الشبكة بحيث تبدو وكأنها متلامسة مع بعضها، وقد تندفع نحو بعضها لتتشوه أغلفتها الالكترونية الخارجية قليلا. لهذا فليدراسة تركيب البلورة يتعين توزيع الكثافة الالكترونية على حجم الشبكة.

والآن ندرس نموذجا نظريا للتركيب البلوري يحقق الغرض المنشود منه لكنه لا يجمل معنى فيزيائي مباشر، في هذا النموذج نفترض الذرات ككرات مصممة غير قابلة للانضغاط. ونقوم بتعبئة هذه الكرات المتشابهة (نصف قطر الكرة r) لامتلاء حجم معين كبير. لو اعتبرنا أن مراكز هذه الكرات المعبأة عقدا، لتشكلت لدينا شبكة. توجد ما لا نهاية له من الطرق لعملية تعبئة الكرات، ولكن ما يهمنا هي عملية التعبئة تلك التي تشكل فيها مراكز الكرات شبكة برافي أو شبكة تعتبر كشبكة برافي مع "قواعد" عقدية.

نقوم بالتعبئة بحيث أن الحجم المتروك بين الكرات أقل ما يمكن. ففي البداية نرتب مجموعة من الكرات لتكون منها طبقة متراسة نسميها الطبقة A كما في الشكل (1 - 13) بحيث أن كل كرة تتماس مع ستة كرات مجاورة.

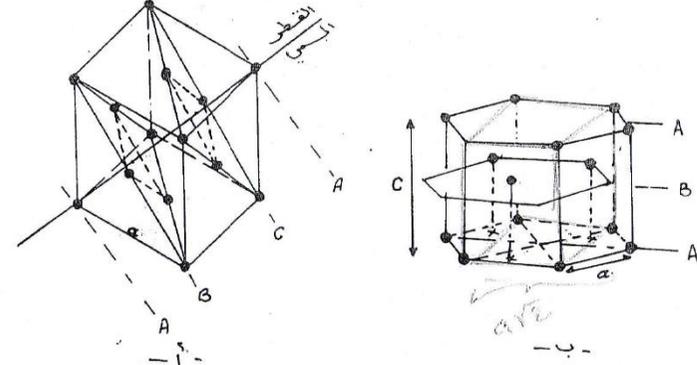
الثاني: تشغل كرات الطبقة الثالثة - التي تقع فوق كرات الطبقة الثانية  
 B- مواقعاً تقع مباشرة فوق كرات الطبقة A ، لذلك نسمي الطبقة الثالثة A  
 أيضا. وبالتالي نحصل على تتابع الطبقات الكروية التالي ( ABABA ... )  
 وهذه الصورة من التعبئة تؤدي الى تكوين تركيب شبكي ( العقد هي مراكز الكرات )  
 سداسي (\*) كما في الشكل ( 1 - 14 ب ) يسمى بالعبوة السداسية المتراسة hcp  
 ( hexagonal close - packed ) .

كثافة التعبئة في هذه الحالة هي نفسها كما في الحالة الأولى ، وتساوي  
 0,74 . ومن نموذج الكرات هذا يجب أن تكون النسبة بين ارتفاع الخلية الموشورية  
 السداسية ( C ) لهذه الشبكة [ المسافة بين أقرب طبقتين متشابهتين ] وطول ضلع  
 قاعدتها ( a ) مساوية الى :

$$(9 - 1) \quad \frac{c}{a} = \left( \frac{8}{3} \right)^{1/2} = 1,63 (**)$$

ولكن هذه النسبة هي في الحالة المثالية وذلك لأن استنتاجها اعتمد على فرضية  
 النموذج الذي يفترض فيه أن الذرات مشابهة لكرات ممتدة وغير قابلة للانضغاط  
 وهي متساوية مع بعضها تماما . وهذه الفرضيات غير واقعية لذلك نرى اختلافاً  
 عن قيمة هذه النسبة للعناصر التي تتبلور بالصورة hcp ، ولكن - على العموم -  
 يكون هذا الاختلاف صغيراً .

والخلية الموشورية السداسية الموضحة في الشكل ( 1 - 14 ب ) أو الشكل  
 ( 1 - 15 أ ) تمثل ثلاثة خلايا أولية ( غير أساسية ) متشابهة للشبكة hcp .  
 فالخلية الأولية هي الجزء المضلل في الشكل ( 1 - 15 أ ) . ولكن شبكة التركيب hcp  
 المتكونة من عقد مراكز الكرات ( أو الذرات ) لا تمثل شبكة برافي وذلك لأنها  
 تختلف عن بعضها من ناحية التوزيع الفضائي لما يحيط بكل عقدة من بقية العقد  
 (\*) تناظر كل الشبكة سداسي  $n = 6$   
 (\*\* البرهان في أسئلة هذا الفصل .



شكل ( 1 - 14 )

(Cubic Close - packed) ، حيث نلاحظ أن الكرة التي مركزها منطبق على  
 مركز وجه من وجوه المكعب تمس الكرات التي تقع مراكزها عند زوايا ذلك الوجه .  
 لذلك فإن قطر الوجه المربع  $a\sqrt{2}$  ( حيث  $a$  - طول ضلع المكعب ) يساوي  $4r$   
 أو أن  $a = \frac{\sqrt{2}}{4} \cdot 4r$  . ولكل خلية أولية مكعبة تنتسب أربعة كرات فقط (\*)  
 $4 \times \frac{4}{3} \pi r^3 = 0,74 a^3$  ( حجمها يساوي :  $4 = \frac{1}{2} \times 6 + \frac{1}{8} \times 8$  )  
 معنى هذا أن الحجم المشغول من قبل الكرات والذي نسميه كثافة التعبئة  $\gamma$   
 يساوي 0,74 : أي أن الكرات تشغل 74 % من حجم العبوة أو من حجم الخلية  
 المكعبة .

(\*) لأن الكرات الثمانية عند زوايا المكعب مشتركة لثمانية مكعبات متجاورة أما  
 كل كره من الكرات الستة في وسط وجه المكعب فهي مشتركة لمكعبين متجاورين

$$(10 - 1) \vec{a}_1 = a\vec{i} ; \vec{a}_2 = \frac{\sqrt{3}a}{2}\vec{j} - \frac{a}{2}\vec{i} ; \vec{a}_3 = c\vec{k}$$

وحجم الخلية الأساسية يساوي :

$$(11 - 1) v = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)| = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c = \sqrt{2} a^3$$

وحيث استخدمنا المتساوية (9 - 1) .

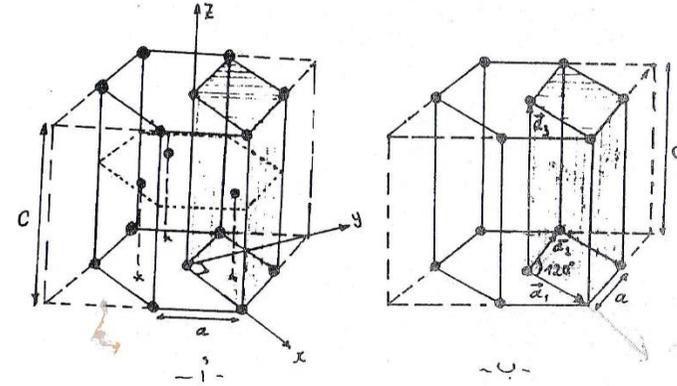
نذكر أن التركيب البلوري لكثير من المعادن يتحول من  $fcc$  الى  $hcp$  عند درجة حرارة معينة . وقد يكون هذا ناتجا عن تقارب طاقة التكوين (أو الربط ) لذرة ما في كلا التركيبان البلوريان .

ان أسلوب التعبئة أعلاه  $fcc$  و  $hcp$  ليسا الأسلوبان الوحيدان للتعبئة بل توجد أساليب أخرى يستحصل منها على شبكة مكعبة بسيطة حيث كثافة التعبئة  $\tau = 0,52$  وشبكة مكعبة مركزية الحجم حيث  $\tau = 0,68$  \* . وهذه النتائج تبين أن حدوث الشبكات  $fcc$  ،  $hcp$  و  $bcc$  هي أكثر احتمالا (من وجهة نظر كثافة التعبئة) من حدوث الشبكة المكعبة البسيطة ، وهذا يُفسر عدم استطاعة أي معدن تكوين شبكة مكعبة بسيطة .

وبالإضافة الى العيوتان الكثيفتان السابقتا الذكر ، يضاف في الطبيعة عيوت كثيفة من نوع آخر كالعبوة ذات ترتيب الطبقات الذرية التالي :  
(..... ABACABAC) حيث هكذا تتبلور العناصر الترابيية النادرة (rare - earths ) .

\* راجع أسئلة هذا الفصل .

وكذلك لا يمكن ضبط الشعاع  $\bar{R}$  بالصورة (1 - 2) بحيث يمكنه أن يعين كل عقد الشبكة . ولكن يمكن أن نمر عن الشبكة  $hcp$  كشبكة برفاي مع قواعد عقدية ، وكل قاعدة متكونة من عقدتين . ولعمل ذلك نأخذ الأشعة  $\vec{a}_1$  ،  $\vec{a}_2$  ،  $\vec{a}_3$  كأشعة



شكل (1 - 15)

أساسية بحيث أن الزاوية بين  $\vec{a}_1$  و  $\vec{a}_2$  تساوي  $120^\circ$  (حيث  $|\vec{a}_1| = a$  ،  $|\vec{a}_2| = b$  ،  $|\vec{a}_3| = c$  :  $a = b \neq c$ ) والشعاع  $\vec{a}_3$  عمودي على المستوي المتكون بالشعاعين  $\vec{a}_1$  و  $\vec{a}_2$  . وحسب هذه الأشعة " الاحداثيية " الأساسية فان القاعدة تتكون من العقدتين (0,0,0) و  $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2})$  . ومن هذه القواعد العقدية تتشكل شبكة برفاي للشبكة  $hcp$  وهي شبكة سداسية بسيطة ، خليتها الأساسية هي الخلية المثلثة في الشكل (1 - 15 ب) . ويمكننا " تحليل " الأشعة الأساسية  $\vec{a}_1$  ،  $\vec{a}_2$  ،  $\vec{a}_3$  بدلالة الاحداثيات الكارتيزية الموضحة في الرسم (1 - 15 أ) :

6 - التركيبات البلورية للعناصر:

ويوجد حوالي 28 عنصرا يتبلور بالتركيب hcp ، والجدول التالي يثبت بعض هذه العناصر:

جدول (1 - 4) بعض العناصر hcp :

العنصر	(Å)a	(Å)c	العنصر	(Å)a	(Å)c
Be	2,29	3,58	La	3,75	6,07
Cd	2,98	5,62	Mg	3,21	5,21
α-Co	2,51	4,07	Sc	3,31	5,27
Er	3,56	5,59	Tb	3,60	5,69
Gd	3,64	5,78	Y	3,65	5,73
*He	3,57	5,83	Zn	2,66	4,95
Ho	3,58	5,62	Zr	2,23	5,15

ونذكر بأن البلورات ذات التركيب المكعب البسيط قليلة جدا، فمن العناصر بالظروف الطبيعية يتبلور فقط الطور - α للبولونيوم مشكلا بلورة ذرية مكعبة بسيطة.

وبالإضافة إلى ما جاء أعلاه، توجد بعض العناصر التي تتبلور بصورة الماس (Diamond). والماس هو كربون متبلور والخلية الأولية للتركيب البلوري للماس مكعبة تحوي على 8 ذرات في الأحداثيات التالية:

$$\text{○} \quad (0, 0, 0), (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}), (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}), (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$$

$$\text{●} \quad (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}), (\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}), (\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}), (\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4})$$

كما في الشكل (1 - 16 أ). والشكل (1 - 16 ب) يمثل مسقط لذرات الخلية الأولية على وجه الخلية الأولية (y - x) وتبين الأرقام المؤشرة في الرسم إلى موقع الذرات باتجاه المحور Z وذلك بوحدات ثابت الخلية α .

\* عند 2 درجة كالفن.

تتبلور معظم العناصر الكيميائية بشبكات غير معقدة، فيوجد حوالي عشرون (20) عنصرا يتبلور مكونا شبكة مكعبة ممركرة السطوح (fcc) (قاعدتها ذرة واحدة) كالعناصر المثبتة في الجدول التالي:

جدول (1 - 2) بعض العناصر fcc :

العنصر	(Å)a	العنصر	(Å)a
**Ar	5,26	Ac	5,30
Al	4,05	Ni	3,52
Ca	5,58	Pb	4,95
Cu	3,61	Pt	3,92

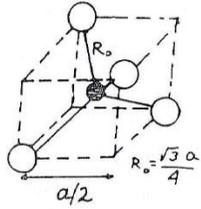
وفي بلورات حوالي (14) عنصرا (معدنا) تكوّن الذرات شبكة برفافي مكعبة ممركرة الجسم bcc ، كالعناصر المثبتة في الجدول التالي:

جدول (1 - 3) بعض العناصر bcc :

العنصر	(Å)a	العنصر	(Å)a
Cr	2,88	Ta	3,31
Mo	3,15	V	3,02
Fe	2,87	W	3,16
Nb	3,30	Ba	5,02

\* هو انكستروم = 10<sup>-10</sup> متر

\*\* - الأركون يتبلور في درجات حرارة منخفضة، حوالي 4,2 كالفن.



الى أخرى لذلك نقول بأن الشبكة لا تمثل شبكة برفاي.  
ونذكر بأن الخلية الاولى المكعبة للماس لا تنتسب  
الى مجموعات التعبئة الكثيفة  
(close - packed) لان كثافة التعبئة  
تبلغ فقط 0,34 \*

الشبكة الذرية أو شبكة التركيب البلوري

للماس يمكن تصورها كشبكة برفاي مع قواعد ذرية:

شكل (1 - 16 ج)

شبكة برفاي هي مكعبة متمركزة السطوح ومع كل عقدة ترتبط قاعدة متكونة من ذرتين

متشابهتين أحداثياتهما (0,0,0) و  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ .

والعناصر التي بلوراتها تأخذ هيئة الماس هي:

جدول (1 - 5):

C الكاربون (الماس)	: $a = 3,57$ أنستروم
Si السليكون	: $a = 5,43$ أنستروم
Ge الجرمانسيوم	: $a = 5,66$ أنستروم
$\alpha$ -Sn القصدير	: $a = 6,49$ أنستروم

حيث  $a$  - طول ضلع الخلية الاولى المكعبة الموضحة في الشكل (1 - 16).

وكافة شبكات العناصر التي سبق وصفها تتمتع بما يسمى بالطابع الذري اذ

لا يمكن فصل جزيئات منفردة منها ولكن بعض العناصر تتبلور في شبكات جزيئية

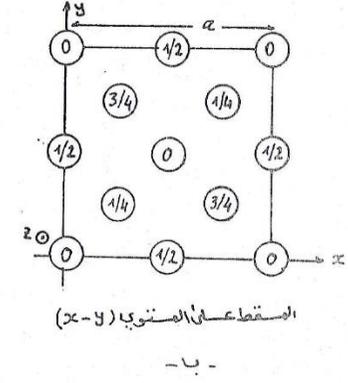
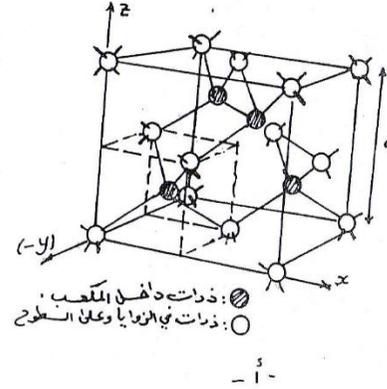
فالهيدروجين والنيتروجين والاكسجين والعناصر الهالوجينية (F, Cl, Br, I)

تشكل شبكات بلورية كما لو كانت متكونة من جزيئات ثنائية الذرة، أي من

از واج من الذرات تتعد فيها الذرتان عن بعضهما بمسافة أقرب بكثير من

ابتعادهما عن الاز واج الاخرى.

\* أنظر أسئلة الفصل.



شكل (1 - 16)

وشبكة الماس ليست شبكة برفاي (أعد ما تستبدل كل ذرة بعقدة)، ويمكن تصورها

مركبة من شبكتين  $f_{cc}$  متداخلتين ببعضهما: ذرات الشبكة I هي  $\circ$  وذرات

الشبكة II هي  $\bullet$  كما في الشكل (1 - 16). وهاتان الشبكتان مزاحمتان

بالنسبة لبعضهما باتجاه القطر الجسمي للشبكة المكعبة بمقدار ربع القطر

الفضائي للمكعب. ونتيجة لذلك فان كل ذرة من ذرات الماس تكون محاطة بأربعة

ذرات مجاورة وعلى مسافات متساوية منها وواقعة في رؤوس شكل رباعي السطوح

كما في الشكل (1 - 16 ج). وبالتالي يساوي العدد التناسقي للتركيب الالماسي

أربعة ( $Z = 4$ ). ولكن التوزيع الفضائي للذرات المحاطة بذرة ما يختلف من ذرة

7 - التركيبات البلورية لبعض المركبات :

أدرج في الجدول (1 - 6) بعض المركبات الكيميائية التي تتبلور بالصورة  $NaCl$ .

| المركب (البلورة) $\alpha$ (Å) |
|-------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|
| 5,55                          | AgCl                          | 4,02                          | LiF                           |
| 5,20                          | MgS                           | 5,64                          | NaCl                          |
| 5,91                          | CaSe                          | 5,35                          | KF                            |
| 6,39                          | BaS                           | 5,64                          | RbF                           |
| 4,21                          | MgO                           | 4,62                          | NaF                           |

ب - بلورة كلوريد السيزيوم  $CsCl$  :

الشكل (1 - 18) يصور وحدة التركيب البلوري المكعب لكلوريد السيزيوم حيث يلاحظ أنها مكعبة ثابتها  $a = 4,12 \text{ Å}$ . وهذا المكعب يحوي على أيونات  $Cs^+$

الأحاديث  $(0,0,0)$  وأيون  $Cl^-$  بالأحاديث  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$  ويحيط بكل أيون من نوع معين

ثمانية أيونات من النوع الآخر ( $Z = 8$ ). أما

شبكة براهي لكلوريد السيزيوم فهي مكعبة

بسيطة ترتبط فيها مع كل عقدة قاعدة

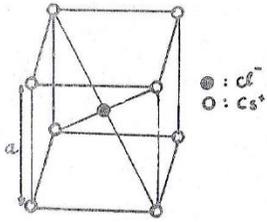
متكونة من أيونين: السيزيوم  $Cs^+$

بالأحاديث  $(0,0,0)$  والكلور  $Cl^-$

بالأحاديث  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ . وفي

الجدول (1 - 7) تذكر بعض المركبات

التي تتبلور بالصورة  $CsCl$  :



شكل (1 - 18)

تذكر في هذا البند التركيبات البلورية البسيطة لبعض المركبات الشائعة :

أ - بلورة ملح الطعام - كلوريد الصوديوم  $NaCl$  : ان وحدة (خلية)

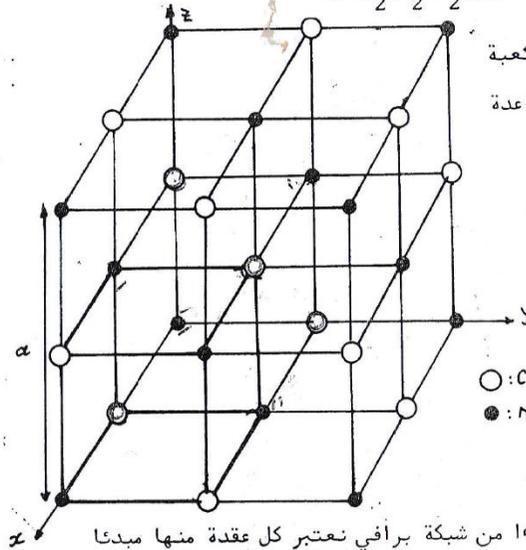
التركيب البلوري لمخ الطعام موضحة في الشكل (1 - 17)، فهي مكعبة ثابتها

$a = 5,64 \text{ Å}$  بحيث أن كل أيون  $Na^+$  يكون محاطا بشكل متناظر بستة أيونات كلور  $Cl^-$  والعكس بالعكس ( $Z = 6$ ). والمكعب الأولي للشبكة البلورية المكعبة

يحتوي على أربعة جزيئات  $NaCl$  أيوناتها تحتل المواقع التالية :

$$Na^+ : (0,0,0), (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0), (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}), (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$$

$$Cl^- : (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}), (0, 0, \frac{1}{2}), (0, \frac{1}{2}, 0), (\frac{1}{2}, 0, 0)$$



أما شبكة براهي لمخ الطعام فهي مكعبة

مركزة الوجوه ويرتبط مع كل عقدة قاعدة

متكونة من أيونين: الصوديوم  $Na^+$

بالأحاديث  $(0,0,0)$  والكلور  $Cl^-$

بالأحاديث  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$  \*

بوحداث ثابت الشبكة  $a$ .

شكل (1 - 17)

\* عند توضيح التركيب البلوري ابتداءً من شبكة براهي نعتبر كل عقدة منها مبداً

للمحاور. ففي حالة  $NaCl$  : نرسم الشبكة  $fcc$  ونضع في كل عقدة

أيون  $Na^+$  ونجعلها مركزاً للمحاور الذي على أساسه نحدد الموقع  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

الذي سيجتله أيون  $Cl^-$  وهكذا نستمر لكل العقد فنحصل من الشبكة  $fcc$

على الشكل (1 - 17). وعلى العموم، أحاديث القاعدة تكون محسوبة بالنسبة

للعقدة التي تعوض عنها.

جدول (1 - 7)

البلورة	$\alpha$ (Å)	البلورة	$\alpha$ (Å)
CsCl	4,12	TlCl	3,83
CsBr	4,29	TlBr	3,97
CsI	4,57	TlI	4,20

ج - بلورة كبريتيد الزنك (Zinc blende) ZnS:

ان التركيب البلوري لكبريتيد الزنك ينتج من التركيب البلوري للماس بحيث أن ذرات الخارصين Zn تشغل المواقع: (0,0,0) و (0, 1/2, 1/2) و (1/2, 0, 1/2) و (1/2, 1/2, 0) وتشكل شبكة مكعبة ممرزة الوجوه، وكل ذرة Zn محاطة بأربعة ذرات كبريت S. وذرات الكبريت S تشغل المواقع: (1/4, 1/4, 1/4) و (3/4, 1/4, 3/4) و (1/4, 3/4, 3/4) و (3/4, 3/4, 1/4) وتشكل أيضا شبكة مكعبة ممرزة الوجوه ومتوازية مع شبكة الخارصين وكل ذرة S محاطة بأربعة ذرات Zn. والشكل (1 - 16) يمكن أن يمثل مكعب الشبكة البلورية لكبريتيد الزنك بحيث أن الذرات  $\odot$  هي ذرات الكبريت؛ وكالماس تكون شبكة برفاسي لكبريتيد الزنك مكعبة ممرزة الوجوه قاعدتها ذراتان:

$$S \left( \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4} \right), Zn (000)$$

وفي الجدول التالي (1 - 8) تذكر بعض المركبات التي تتبلور بالصورة ZnS:

البلورة	$\alpha$ (Å)	البلورة	$\alpha$ (Å)
CuCl	5,41	CdS	5,82
AgI	6,47	HgSe	6,08
BeSe	5,07	AlSb	5,62
ZnS	5,41	GaAs	5,65
ZnTe	6,09	SiC	4,35

والميزة الرئيسية للشبكات الآتفة الذكر هي " استحالة " فصل مجموعات منفردة من الذرات أي فصل جزيئات المركب. إذ أن مثل هذه البلورة تكون بكاملها بمثابة جزيء واحد كبير للغاية. والتوزيع الالكتروني في مثل هذه الشبكات تكون كثافته أكبر في المتوسط حول بعض النوى الذرية وتكون أقل حول البعض الآخر (وذلك بالنسبة للكثافة حول الذرة الحرة المتعادلة). لذلك يمكن وصف هذه الشبكات باعتبارها متكونة من أيونات وتسمى بالشبكات الأيونية، فتتكون شبكة NaCl مثلا من أيونات  $Na^+$  وأيونات  $Cl^-$ .

وتوجد شبكات لمركبات كيميائية يمكن فيها تمييز بعض الجزيئات كمجموعات من الذرات قريبة جدا من بعضها البعض كالبلورات العضوية. ولكن تصنيف البلورات الى جزيئية وذرية عملية اصطلاحية قد تتخلله حالات وسطية مختلفة؛ فمثلا بلورة  $CdI_2$ : في هذا التركيب البلوري تلتصق وبشكل قريب جدا طبقتين من ذرات اليود I مع طبقة واحدة من ذرات الكاديوم Cd، وهذه الطبقات الثلاث تكون قريبة جدا من بعضها وتبتعد عن مثيلاتها بمسافة أكبر. ورغم أن هذا يذكرنا بالتكوين الجزيئي لهذه المادة إلا أن فصل الجزيئات منفردة داخل كل طبقة هي عملية " يستحيل " تحقيقها.

ملاحظة: تشكل ذرات الكربون عند تبلورها تركيبان بلوريان الماس والكرافيت (سداسي بسيط) يختلفان بالخواص الفيزيائية. الماس: صلب جدا، شفاف، كثافته 3,5 غم سم<sup>-3</sup>، عازل جيد. الكرافيت: لين جدا، أسود، كثافته 2,1 غم سم<sup>-3</sup>، موصل للكهربائية. فالتركيب البلوري المختلف لنفس المادة يعطي خواص مختلفة، هذه الخاصية تسمى تعددية الأشكال (Polymorphism). وهذه الخاصية توجد أيضا عند تغير التركيب البلوري للمواد بسبب الضغط ودرجة الحرارة. فللقصدير Sn طوران: الطور  $\beta$ : يوجد بدرجة أعلى من 13°C، أبيض، معدن، شبكة رباعية ممرزة الجسم، كثافته 7,3 غم سم<sup>-3</sup>. الطور  $\alpha$ : يصمد حتى درجة حرارة 13°C، رمادي، شبه ناقل، الماسي، كثافته 5,8 غم سم<sup>-3</sup>.

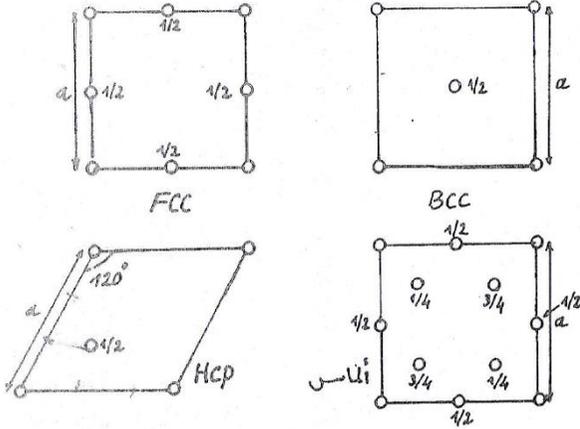
3 - أعتبر التراكيب المكعبة ( fcc ، bcc ، الماس ) و hcp

(أ) أسقط هذه التراكيب على مستوى موضع ارتفاع مواقع الذرات عن مستوي

الاسقاط بوحدة ثابت الشبكة  $a$

(ب) ما هي احداثيات العقد

الجواب:



شكل تمرين (3)

الماس:  $(000)$ ,  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ ,  $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ,  $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ ,  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ ,  $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$ ,  $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$ ,  $(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})$

FCC :  $(000)$ ,  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ ,  $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ,  $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$

BCC :  $(000)$ ,  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

HCP :  $(000)$ ,  $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2})$

4 - بلورة تنتسب لكل عقدة من شبكتها ذرة واحدة. أشعة الانسحاب الاساسية هي:

الكارتيزية. ما هي شبكة برافي. أحسب حجم الخلية الاولية والخلية

الاساسية.

الحل: كما يبدو من الشكل أن أشعة الانسحاب الاساسية تكون الشبكة bcc بحيث

تشكل أي من عقدها بأخذ الجمع الخطي للأشعة الاساسية بمعاملات هي أعداد صحيحة.

تمرينات الفصل الأول

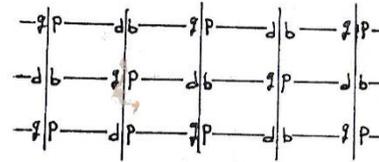
1 - وحدة التركيب البلوري للكالسيوم من النوع ( fcc ). عين ثابت الشبكة  $a$  وفاصلة الجوار الأقرب علما أن كثافة الكالسيوم  $\rho = 1,55 \times 10^3$  كغم / متر<sup>3</sup>.

الحل:

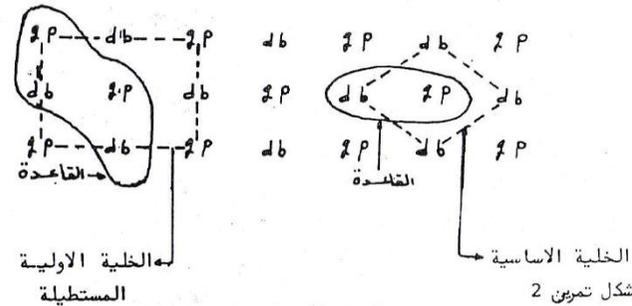
$$a^3 = n \frac{M}{N_A \rho} \quad \text{نستخدم العلاقة:}$$

حيث  $n$  عدد الذرات التابعة لخلية أولية ( fcc ) ،  $M$  - الكتلة المولية للكالسيوم وتساوي 40,1 غم / مول ،  $N_A$  - عدد أفوكادرو ويساوي  $6,02 \times 10^{23}$  ذرة / مول. إذن  $a = 5,56 \text{ \AA}$  . وفاصلة الجوار الأقرب تستنتج من هندسة الخلية الأولية ( fcc ) وتساوي  $R_0 = \frac{a}{\sqrt{2}} = 3,93 \text{ \AA}$ .

2 - خذ الطراز التالي:



حدد: (أ) الخلية الاولية المستطيلة (ب) الخلية الأساسية (ج) القواعد في كلا الحالتين.



6 - العنصران A و B يشكلان بلورة AB ذات التركيب البلوري من النوع Cl<sub>2</sub>.  
نفرض أن الذرات عبارة عن كرات مصمتة أنصاف أقطارها  $r_A$  و  $r_B$ . يتبين بأن  
الذرات الموجودة على رؤوس المكعب الواحد (طول ضلعه  $\frac{a}{2}$  حيث  $a$  - ثابت  
الشبكة) لا يمكن أن تتلامس إذا كان  $r_A / r_B > (\sqrt{2}+1)$

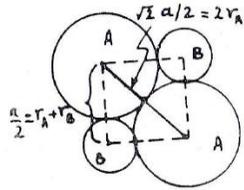
الحل:

نأخذ وجه واحد من هذا المكعب،  
ونأخذ حالة التماس كما في الشكل:

$$r_A + r_B = a/2$$

$$2r_A = \sqrt{2} a/2$$

اذن:



شكل تمرين 6

$$r_A = \frac{\sqrt{2} a}{4}, r_B = \frac{2-\sqrt{2}}{4} a, \frac{r_A}{r_B} = \sqrt{2}+1$$

وإذا كانت  $\frac{r_A}{r_B} > \sqrt{2}+1$  عندئذ  $r_B < \frac{r_A}{\sqrt{2}+1}$

نأخذ مثلثا من الشكل:

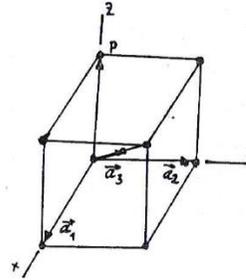
$$2(r_A + r_B)^2 < 2\left(r_A + \frac{r_A}{\sqrt{2}+1}\right)^2$$

$$< 4r_A^2$$

وبالتالي لا يكون المثلث قائما أي أن الوجه لا يكون مربعا والهيكل الكلي لا يكون

مكعبا. ولكي يحتفظ بالشكل المكعب يجب أن لا يكون  $\frac{r_A}{r_B} > (\sqrt{2}+1)$ . وإذا

كان  $\frac{r_A}{r_B} > (\sqrt{2}+1)$  عندئذ يجب أن لا تتلامس الكرات الأربعة.



شكل تمرين 4

5 - وحدة تركيب بلوري موضحة في الشكل المجاور، والمطلوب معرفة شبكة برافسي  
وكتابه الصيغة الكيمائية وحساب العدد التناسقي وفاصلة الجوار الأقرب.

الحصل: لو أخذنا قاعدة متكونة من أربعة ذرات:

$$Au(000) \cup Cu: \left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0\right), \left(\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}\right), \left(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)$$

فالشبكة الناتجة مكعبة بسيطة والتركيب

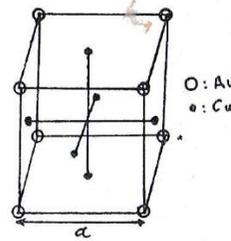
الكيمائي ينتج من وحدة التركيب

البلوري:  $AuCu_3$ . كل ذرة Cu

محاطة بأربعة ذرات Au، وكل

ذرة Au محاطة بثمانية ذرات Cu.

فاصلة الجوار الأقرب هي  $\frac{\sqrt{2} a}{2}$ .



شكل تمرين 5

حيث  $n_x = n - n_1$  = عدد صحيح ... الخ. الشعاع  $\vec{R}_1$  يعني كل عقد شبكة معينة بسيطة ولتكن A. عقد الشبكة A متكونة من العقد الموجودة عند زوايا مكعبات (خلايا) الشبكة الاصلية (bcc).

2 - عندما يكون:

$$n_1 + n_2 + n_3 = 2n + 1 = \text{عدد فردي}$$

حيث  $n_1$  - عدد صحيح فان:

$$-n_1 + n_2 + n_3 = 2(n - n_1) + 1 = 2n_x + 1; \quad n_1 - n_2 + n_3 = 2(n - n_2) + 1 = 2n_y + 1$$

$$n_1 + n_2 - n_3 = 2(n - n_3) + 1 = 2n_z + 1$$

والشعاع  $\vec{R}$  يأخذ الهيئة التالية:

$$(3) \quad \vec{R}_z = a(n_x + \frac{1}{2})\vec{i} + a(n_y + \frac{1}{2})\vec{j} + a(n_z + \frac{1}{2})\vec{k}$$

وهذا الشعاع  $\vec{R}_z$  يحدد كل عقد شبكة مكعبة بسيطة ولتكن B. عقد الشبكة B متكونة من العقد الموجودة عند مراكز مكعبات (خلايا) الشبكة الاصلية (bcc). معنى هذا أن الشبكة الاصلية (bcc) يمكن أن تتجزأ الى شبكتين فرعيتين A و B مكعبتين بسيطتين.

والآن ندرس أشعة الانتقال الاساسية للشبكة fcc:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j}); \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{j} + \vec{k}); \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{k})$$

ان شعاع الانتقال  $\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$  حيث  $n_1, n_2, n_3$  ارقام صحيحة موجبة وسالبة، يحدد كل عقد الشبكة (fcc):

$$(4) \quad \vec{R} = \frac{a}{2}(n_1 + n_3)\vec{i} + \frac{a}{2}(n_1 + n_2)\vec{j} + \frac{a}{2}(n_2 + n_3)\vec{k}$$

ونلاحظ بأنه عندما تكون  $n_1, n_2, n_3$  كلها أعداد زوجية (مثلاً  $n_1 = n_2 = n_3 = 2$ ) أو كلها أعداد فردية (مثلاً  $n_1 = n_2 = n_3 = 1$ ) فإن الشعاع  $\vec{R}$  يشير الى العقد الموجودة عند زوايا المكعبات (انظر الشكل). وعندما يكون أحد الأرقام  $n_1, n_2, n_3$  عدد زوجي (والأثنان المتبقيان فرديان) أو أن يكون أحد الأرقام  $n_1, n_2, n_3$

7 - بين بأن الشبكة المكعبة الممرزة الجسم (bcc) يمكن أن تتجزأ الى شبكتين فرعيتين (Sublattice) مكعبتين بسيطتين A و B بحيث أنه لا يوجد زوج واحد من العقد المتجاورة تماما (أي أقرب الجيران) من الشبكة الاصلية (bcc) يتبع للشبكة الفرعية A (أو للشبكة الفرعية B). ثم بين أن الشبكة المكعبة الممرزة الوجوه (fcc) يمكن أن تتجزأ الى أربعة شبكات فرعية مكعبة بسيطة.

الحل:

ندرس أشعة الانتقال الاساسية للشبكة (bcc):

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}), \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k})$$

ان شعاع الانتقال  $\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$  حيث  $n_1, n_2, n_3$

ارقام صحيحة موجبة وسالبة، يحدد كل عقد الشبكة (bcc):

$$(1) \quad \vec{R} = \frac{a}{2}(-n_1 + n_2 + n_3)\vec{i} + \frac{a}{2}(n_1 - n_2 + n_3)\vec{j} + \frac{a}{2}(n_1 + n_2 - n_3)\vec{k}$$

ونلاحظ بأنه عندما يكون  $n_1 + n_2 + n_3 = \text{عدد فردي}$  (مثلاً  $n_1 = n_2 = n_3 = 1$ ) فإن الشعاع  $\vec{R}$  يشير الى عقد مراكز المكعبات، وعندما يكون  $n_1 + n_2 + n_3 = \text{عدد زوجي}$  (مثلاً  $n_1 = n_2 = n_3 = 2$ ) فإن الشعاع  $\vec{R}$  يشير الى العقد الموجودة عند زوايا المكعبات. لذلك نميز حالتين هما:

1 - عند ما يكون:

$$n_1 + n_2 + n_3 = 2n = \text{عدد زوجي}$$

حيث  $n$  - عدد صحيح فان:

$$-n_1 + n_2 + n_3 = 2(n - n_1); \quad n_1 - n_2 + n_3 = 2(n - n_2); \quad n_1 + n_2 - n_3 = 2(n - n_3)$$

والشعاع  $\vec{R}$  يأخذ الهيئة التالية:

$$\vec{R}_1 = a(n - n_1)\vec{i} + a(n - n_2)\vec{j} + a(n - n_3)\vec{k}$$

$$(2) \quad \vec{R}_1 = a n_x \vec{i} + a n_y \vec{j} + a n_z \vec{k}$$

عدد فردي (والاثنان المتبقيان عددان زوجيان) فان  $\vec{R}$

يشير الى العقد الموجودة وسط وجوه

المكعبات (الخلايا)؛ فمثلا عندما

يكون  $n_1=1$  و  $n_2=2$  و  $n_3=0$

فان  $\vec{R}$  يشير الى العقدة 1

في الشكل، وعندما يكون

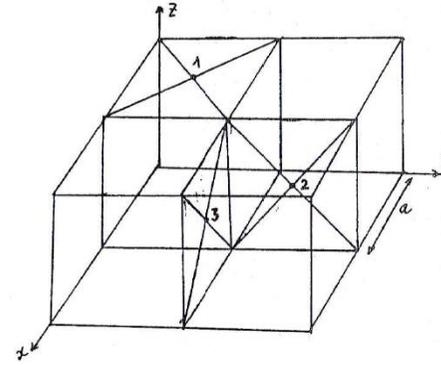
فان  $n_1=2$  و  $n_2=1$  و  $n_3=0$

$\vec{R}$  يشير الى العقدة (2)، وعندما

يكون  $n_1=2$  و  $n_2=0$  و  $n_3=1$

فان  $\vec{R}$  يشير الى العقدة (3)،

وهكذا. لذلك نميز 4 حالات:



شكل تمرين (17)

1 - عندما تكون كل الارقام  $n_1, n_2, n_3$  زوجية (أو كلها فردية) فنحصل

على:

$$\vec{R}_1 = \alpha n_{11} \vec{i} + \alpha n_{12} \vec{j} + \alpha n_{13} \vec{k}$$

حيث  $n_{13} = \frac{n_2+n_3}{2}$ ،  $n_{12} = \frac{n_1+n_2}{2}$ ،  $n_{11} = \frac{n_1+n_3}{2}$ ، أعداد صحيحة.

الشعاع  $\vec{R}_1$  يحدد كل عقد الشبكة المكعبة البسيطة A التي عقدها متكونة من عقد

زوايا مكعبات الشبكة الأصلية FCC.

2 - عندما يكون  $n_1$  عدد فردي،  $n_2$  و  $n_3$  أعداد زوجية فان:

$$\frac{n_1+n_3}{2} = n_{21} + \frac{1}{2} \text{ و } \frac{n_1+n_2}{2} = n_{22} + \frac{1}{2} \text{ و } \frac{n_2+n_3}{2} = n_{23}$$

حيث  $n_{23}$ ،  $n_{22}$ ،  $n_{21}$  أعداد صحيحة، ونحصل على:

$$\vec{R}_2 = a \left( n_{21} + \frac{1}{2} \right) \vec{i} + a \left( n_{22} + \frac{1}{2} \right) \vec{j} + a n_{23} \vec{k}$$

والشعاع  $\vec{R}_2$  يحدد كل عقد الشبكة المكعبة البسيطة B التي عقدها متكونة من عقد مراكز وجوه مكعبات الشبكة الأصلية FCC كالعقدة (1) أي الموازية للمستوي (x-y).

3 - عندما يكون  $n_2$  فردي و  $n_1$  و  $n_3$  أعداد زوجية فان:

$$\vec{R}_3 = n_{31} a \vec{i} + \left( n_{32} + \frac{1}{2} \right) a \vec{j} + \left( n_{33} + \frac{1}{2} \right) a \vec{k}$$

حيث  $\frac{n_2+n_3}{2} = n_{33} + \frac{1}{2}$ ،  $\frac{n_1+n_2}{2} = n_{32} + \frac{1}{2}$ ،  $\frac{n_1+n_3}{2} = n_{31}$

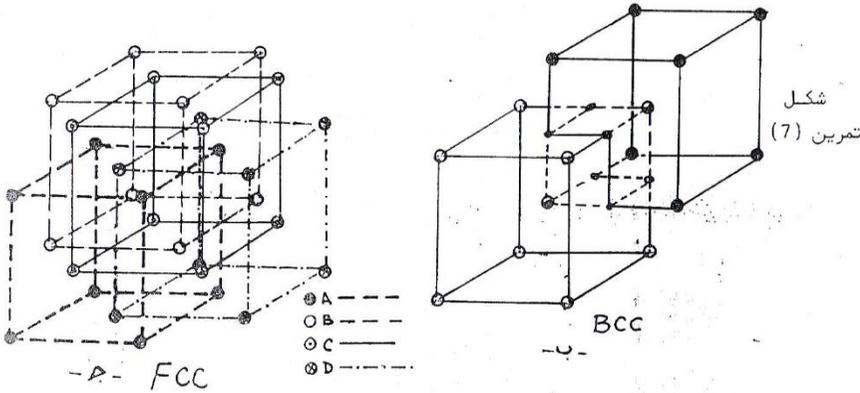
علما أن  $n_{31}$  و  $n_{32}$  و  $n_{33}$  هي أعداد صحيحة. والشعاع  $\vec{R}_3$  يحدد كل عقد الشبكة المكعبة البسيطة C التي عقدها متكونة من عقد مراكز وجوه مكعبات الشبكة الأصلية FCC الموازية للمستوي (y-z).

4 - عندما يكون  $n_3$  عدد فردي و  $n_1$  و  $n_2$  أعداد زوجية فان:

$$\vec{R}_4 = \left( n_{41} + \frac{1}{2} \right) a \vec{i} + n_{42} a \vec{j} + \left( n_{43} + \frac{1}{2} \right) a \vec{k}$$

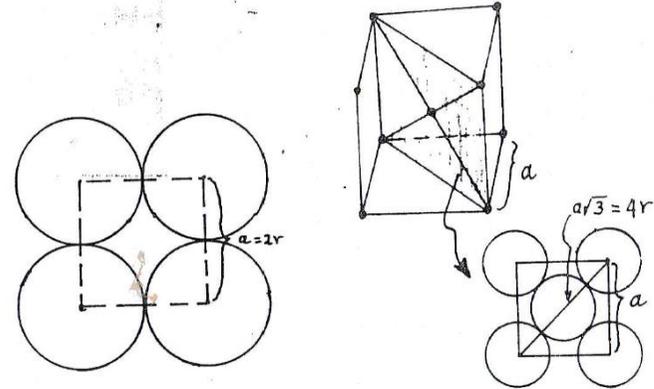
حيث  $n_{43}$ ،  $n_{42}$ ،  $n_{41}$  أعداد صحيحة. والشعاع  $\vec{R}_4$  يحدد كل عقد الشبكة المكعبة البسيطة D التي عقدها متكونة من عقد مراكز وجوه مكعبات الشبكة الأصلية FCC الموازية للمستوي (x-z).

معنى هذا أن الشبكة الأصلية FCC المحددة بالشعاع  $\vec{R}$  يمكن أن تتجزأ الى أربعة شبكات فرعية A و B و C و D؛ كلها مكعبة بسيطة لأنها تحدد بالأشعة  $\vec{R}_1$  و  $\vec{R}_2$  و  $\vec{R}_3$  و  $\vec{R}_4$  ذوات الهيئة التي تعين الشبكات المكعبة البسيطة.



شكل تمرين (7)

8 - أحسب كثافة التعبئة للبلورة المكعبة البسيطة والمكعبة الممرزة الحجم .  
 الحل: نأخذ كريات ممتدة متماثلة وغير قابلة للانضغاط، ونرتبها للحصول أولا  
 على " بلورة " مكعبة بسيطة . نفرض أن نصف قطر الكرة الواحدة  $r$  . ونفرض أن  
 طول ضلع الخلية المكعبة للتركيب المكعب البسيط هو  $a$  . عندئذ يكون  $a = 2r$   
 كما في الشكل أ، الذي يبين وجها واحدا جانبيا من وجوه المكعب وتنتسب لكل خلية -



- أ -

- ب -

شكل تمرين 8

مكعب-كروية واحدة لأن الكريات الثمان عند زوايا المكعب الواحد تشترك مع ثمانية  
 مكعبات متجاورة  $(8 \times \frac{1}{8} = 1)$  . حجم الكرة الواحدة يساوي  $\frac{4}{3} \pi r^3 = 0,52 a^3$   
 حيث  $a^3$  هو حجم الخلية الأولية - المكعب . معنى هذا أن الكرات تشغل فقط  
 52% من حجم الشبكة . وكثافة التعبئة تساوي 0,52 .

والآن نقوم بتعبئة الكريات للحصول على تركيب بلوري مكعب ممرز الحجم  
 خليته الأولية مكعبة ممرزة الحجم كما في الشكل ب، حيث صورنا كيف تشغل الكرات  
 المستوى القطري للمكعب . ويتضح أن  $a\sqrt{3} = 4r$  . وتنتسب لكل خلية أولية -  
 مكعب كرتان  $(8 \times \frac{1}{8} + 2 = 2)$  . والحجم المشغول من قبل الكريتين يساوي  
 $\frac{4}{3} \pi r^3 = 0,68 a^3$  . أي أن معامل التعبئة يساوي 0,68 .

ومن هذا يتضح أن حدوث الشبكة المكعبة الممرزة الحجم أكثر احتمالا ( من  
 وجهة نظر كثافة التعبئة ) من حدوث الشبكة المكعبة البسيطة . وهذا يفسر عدم  
 استطاعة أي معدن تكوين شبكة برفاي مكعبة بسيطة .

وكثافة التعبئة 0,68 ليست أكبر ما يمكن بل يمكن الحصول على كثافة  
 تعبئة أكثر عند التعبئة للحصول على التركيبين  $fcc$  و  $hcp$  .

9 - أحسب كثافة التعبئة (ε) للتركيب البلوريين التاليين:

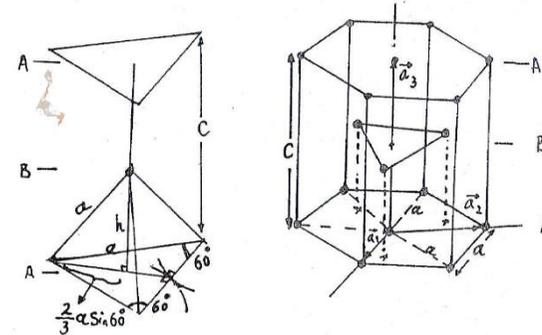
أ - الماس ب - العبوة السداسية الكثيفة (hcp) مبينا القيمة النظرية (المثالية) للنسبة c/a .

الحل: نأخذ كريات متماثلة مصمتة نصف قطر الواحدة r (تمثل ذرة واحدة) ونعبيء:

أ - شبكة برفاي للماس مكعبة ممرزة الوجوه (fcc) قاعدتها تتكون من ذرتين أحداشيتهما (000) و  $(\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4})$ ، اذن  $2r = \frac{\sqrt{3}}{4} a$  لكل مكعب اصطلاحي

من تركيب الماس تتبع 8 ذرات. وكثافة التعبئة تساوي اذن:

$$\epsilon = \frac{8 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3} = \frac{8\pi \sqrt{3}}{16} = 0.34$$



شكل تمرين (9)

ب - عند تركيب العبوة السداسية الكثيفة حصلنا على طبقات كروية (ذرية)

حسب التسلسل التالي (ABAB... .) حيث كل كرية (ذرة) من الطبقة B تمس

ثلاثة كريات من الطبقة A؛ أي أن مراكز الكريات الثلاثة من الطبقة A ومركز الكرية

من B تشكل هرم ثلاثي كل أحرفه متساوية وتساوي قطر كرية واحدة  $2r = a$

وارتفاعه  $h = \frac{c}{2}$  (الشكل) ارتفاع قاعدة (مثلث) الهرم يساوي  $a \sin 60^\circ$ ؛

وخط الارتفاع هذا يلتقي مع العمود h (ارتفاع الهرم) في النقطة التي تبعد عن

رأس المثلث (قاعدة الهرم) بالمقدار  $\frac{2}{3} (a \sin 60^\circ)$ . وبتطبيق نظرية

فيثاغورس على المثلث ذو الأضلاع  $(\frac{2}{3} a \sin 60^\circ, a, h)$  نحصل على قيمة h:

$$h = \sqrt{\frac{2}{3}} a \quad ; \quad c = 2h = \sqrt{\frac{8}{3}} a = 1.633 a$$

والآن ندرس عدد الذرات التابعة لموشور واحد سداسي (الشكل) من التركيب

البلوري. فندرس ثلاثة طبقات من هذه المواشير السداسية. توجد 12 ذرة في زوايا

الموشور السداسي، وكل ذرة مشتركة مع ستة مواشير متشابهة جنب الموشور

المدرّوس وفوقه وتحتّه. كما وأن للموشور الواحد ذرتان في مركزي قاعدتيه كل

واحدة تشترك بموشورين (فوق الموشور المدرّوس أو تحتّه). هذا بالإضافة إلى ثلاثة

ذرات داخل الموشور المدرّوس. لذلك فعدد الذرات التابعة لموشور سداسي واحد

هي:  $6 = 3 + \frac{2}{2} + \frac{12}{6}$ ؛ وهذا العدد يقسم على ثلاثة خلايا أولية؛ من الشكل

يتضح أن الخلية الأولية للبلورة السداسية الكثيفة هي المحددة بالأشعة

$\vec{a}_1$  و  $\vec{a}_2$  و  $\vec{a}_3$ . لذلك فعدد الذرات التابعة للخلية الأولية من البلورة السداسية

الكثيفة (hcp) هي  $2 = \frac{6}{3}$  (انظر الملاحظة في آخر السؤال). الموشور الواحد

الثلاثي (أي نصف الخلية الأولية) حجمه يساوي  $\frac{\sqrt{3}}{4} a^2 c$  وحجم الخلية الأولية

للبلورة السداسية الكثيفة يساوي  $V = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c$ ، وحيث أن  $c = \sqrt{\frac{8}{3}} a$

اذن  $V = \sqrt{2} a^3$ . وكثافة التعبئة تساوي:

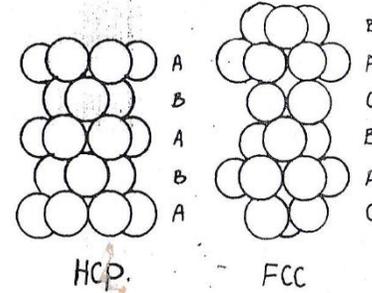
ملاحظة: في حالة التركيب السداسي البسيط حيث لا توجد ثلاثة ذرات داخل الموشور السداسي (الذي يمثل ثلاثة خلايا أولية) عندئذ تعتبر الخلية الأولية أساسية، وعدد الذرات التابعة للخلية الأساسية يجب أن يساوي واحد، وفعلا فعدد الذرات التابعة للخلية الأولية الأساسية يساوي:  $1 = \left(\frac{12}{6} + \frac{2}{2}\right) / 3$ .

10 - عند درجة الحرارة  $23^\circ \text{K}$  تقريبا يتحول التركيب البلوري للصدويوم  $\text{Na}_{11}$  من الطور المكعب الممرکز الحجم (bcc) الى الطور السداسي الكثيف التعبئة (hcp). نرض أن الكثافة لا تتغير عند هذا التحول الطوري. أحسب ثابت الشبكة  $a_h$  للطور السداسي اذا كان ثابت شبكة الطور المكعب  $a_c = 4,23 \text{ \AA}$  أنكستروم، مفترضا أن النسبة  $(c/a)$  لا تختلف كثيرا عن القيمة النظرية. الحل: نعرف الكثافة من النسبة بين كتلة الخلية الأولية وحجمها، حيث كتلة الخلية الأولية هي مجموع كتل الذرات التابعة لها.

في حالة التركيب (bcc) حيث  $n = 2$  تساوي كتلة الخلية الأولية السلي  $2M_{Na}$  حيث  $M_{Na}$  - كتلة ذرة الصوديوم و  $n$  - عدد الذرات التابعة لخلية أولية واحدة. اذن  $\rho = \frac{2M_{Na}}{a_c^3}$ . (انظر السؤال الاول من هذا الفصل حيث  $M_{Na} = \frac{M}{N_A}$ ،  $M$  هي الكتلة الذرية - المولية).

وفي حالة التركيب (hcp) تساوي كتلة الخلية الأولية الى  $2M_{Na}$  وحجم الخلية الأولية يساوي  $\sqrt{3} a_h^3 = \frac{\sqrt{3}}{2} a_c^2 c$  لان النسبة النظرية  $c/a_h = \sqrt{\frac{8}{3}}$  تكون صحيحة ضمن فرضية السؤال. اذن  $\rho = \frac{2M_{Na}}{\sqrt{3} a_h^3}$  ومنه نجد:  $a_h = a_c \cdot 3^{-1/6} \simeq 0,8 a_c = 3,38$  أنكستروم

$t = \frac{2 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{\sqrt{2} a^3} = \pi \sqrt{2} / 6 = 0,74$  و  $(2V = a)$  حيث يلاحظ أن كثافة التعبئة للتركيبين (fcc) و (hcp) متساوية (0,74)، وهذه حقيقة لان الفرق بين التركيبين هو فقط في تسلسل الطبقات أو أسلوب التعبئة: fcc: ABCABC... و hcp: ABAB... وهذا موضح في الشكل:



شكل تمرين 9

وكثافة التعبئة للتركيبين fcc و hcp هي أكبر كثافة تعبئة بالنسبة للتركيب المكعب الممرکز الجسم ( $t = 0,68$ ) وبالنسبة للتركيب المكعب البسيط ( $t = 0,524$ ) وبالنسبة لتركيب الالماس ( $t = 0,34$ ).

أما بالنسبة للنسبة  $\frac{c}{a} = 1,633$  فتعتبر هذه القيمة مثالية أو نظرية وذلك لان استنتاج هذه النسبة اعتمد على فرضنا بأن الذرات هي كرات ممتدة غير قابلة للانضغاط (أي لا تتداخل مع بعضها) وهي متماسة مع بعضها تماما، وهذه الفرضية غير واقعية لذلك نرى اختلافا عن هذه النسبة، فمثلا للزنك  $Zn$  تساوي النسبة الى 1,86، وللمغنيز  $Mg$  تساوي الى 1,623 وللكوبلت  $Co$  تساوي 1,622 وهي قريبة للقيمة النظرية.