الدكتور عقيل عزيز داخل

أستاذ مساعد في جامعة قسنطينة

تمرينات محلولة
في
فيزياء الجسم الصلب

SOLVED PROBLEMS
IN
SOLID STATE PHYSICS

Dr/ AKIL AZIZ DAKHIL

ديوان المطبوعات الجامعية

الساحة المركزية - بن عكنون - الجزائر

© ديوان المطبوعات الجامعية : 05 - 90
Codification : 1.02.3201

توطئـــة

أصبح موضوع فيزياء الجسم الصلب اختصاصاً واسعاً ومتنوعاً، لذلك تركزّ الكتب المنشورة بصورة أساسية على أجزاء من هذا الاختصاص. هذا الكلام لا ينطبق فقط على الكتب النظرية بل والتطبيقية أيضا. لذلك يُفتَقَر كثيراً الى كتب عبارة عن مسائل محلولة (أو غير محلولة) لفيزياء الجسم الصلب بشكل عام، والتي تعتبر ضرورية وأساسية للطلبة المبتدئين بدراسة هذا الاختصاص. أما عن وجود كتب خاصة بتمرينات محلولة، من مثل هذا الكتاب، فقليل جدا نذكر منها:

1. J. CAZAUX ((INITIATION A'LA PHYSQUE-SOLIDE - EXCERICES COMMENTES)) IN FRENCH.
2. H.J. GOLSMITH ((PROPLEMS IN SOLID STA TE PHYSICS)) IN ENGLISH.

وكذلك كتاب H.M. ROSENBERG ((THE SOLID STATE)) الذي صدرت حلول تمريناته منفصلةً عنه.

لهذا جاء هذا الكتاب الذي يتفق مع البرنامج الجامعي المألوف وقد جمعت تمريناته من مصادر مختلفة، وقد أدخل على بعضها تحوير كما ابتكر جزءاً آخر. ولقد روعيت الدقة العلمية والتأني في اعطاء الحلول الصحيحة. أرجو مخلصا أن يكون هذا الكتاب التطبيقي نافعا، لذلك أتوقع وأرحب بالانتقادات.

الدكتور
عقيل عزيز داخل
1988.08.30

المحتويات

229 SOLVED PROBLEMS

الفصل الأول
الشبكة البلورية

تذكير: باستبدال ذرات الجسم الصلب أو جزيئاته أو تجمعاتها بعقد تتكون الشبكة البلورية. وكل ما يستعاض عنه بعقدة يسمّى قاعدة التركيب البلوري، اذن:

التركيب البلوري = الشبكة + القاعدة (1_1)

ونميز من الشبكات البلورية شبكة برافي التي تحدد كل عقدها بشعاع الانسحاب الأساسي :

ـ التناظر الانسحابي ـ $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ (2_1)

حيث n_i ـ أرقام صحيحة اختيارية، $\vec{a}_i$ ـ أشعة الانسحاب الأساسية التي تؤلف من فضاء الشبكة البلورية أصغر متوازي سطوح يستطيع بتكراره توليد البنية البلورية ويسمّى بالخلية الأساسية: أبعادها الأساسية (a, b, c) وزواياها الأساسية (α, β, γ). وبالامكان دائما اختيار خلية أساسية (تحقق التناظر الانسحابي، تنتمي لها عقدة واحدة، حجمها أصغر من جميع الاختيارات الأخرى)؛ ولكن قد يحدث أن تناظرها لا يماثل تناظر كل الشبكة التي هي جزء منها. لذلك ولاسباب متعلقة بالتناظر نكون متعاملين مع متوازي سطوح مختار من الشبكة ولكنه يحتوي على عقد ليس فقط عند زواياه الركنية بل وبداخله أو على وجوهه بحيث يتماثل تناظره مع تناظر كل الشبكة الذي هو جزء منها ـ نسمي متوازي السطوح هذا بالخلية الأولية (غير الاساسية). ولكن بالامكان الاستعاضة عن عقدتين أو أكثر بعقدة واحدة ((مركبة)) لتتحول الخلية الاولية الى أساسية.

عمليات التناظر: تتميز الشبكات البلورية بعمليات تناظر محددة نذكر أهمها: التناظر الدوراني: ويقاس بالدرجة $n = 2\pi/\theta$ حيث $n = 1,2,3,4,6$ و θ ـ أقل زاوية دوران للشبكة البلورية حول محور (يسمّى محور التناظر الدوراني، رمزه C_n) لكي تنطبق على نفسها ثانية.
التناظر المرآتي: بالانعكاس خلال مستوي بلوري يرمز له بالرمز m.
التناظر الانقلابي: وهو عملية تناظر انعكاس خلال نقطة تسمّى مركز الانقلاب (i) بحيث تتماثل النقطتان $\vec{r}$ و $-\vec{r}$ (مركز المحاور).

عمليات التناظر المركبة: تستنتج من تراكب العمليات أعلاه وتسمّى زمرة نقطية والتي عند جمعها مع عملية التناظر الانسحابي نحصل على الزمرة الكاملة. وطبقا للزمرة النقطية نميز سبعة فئات بلورية ولكن على أساس الزمرة الكاملة نميز (14) نوعا مختلفا لشبكات برافي: ثلاثية الميل (أساسية)، أحادية الميل (أساسية وممركزة القاعدة)، المعينية المستقيمة (أساسية، ممركزة القاعدة، ممركزة الجسم، ممركزة الوجوه)، الرباعية (أساسية، ممركزة الجسم)، المكعبة (أساسية p، ممركزة الجسم BCC، ممركزة الوجوه FCC)، الثلاثية المتساوية الاحرف (أساسية)، السداسية (أساسية).

أمثلة:

* البوتاسيوم K^{19} : لو استبدلت كل ذرة بعقدة لظهرت شبكته BCC ـ برافية ثابتها $a = 5,23\,\mathring{A}$.

* البيريليوم Be^{4} : لو استبدلت كل ذرة بعقدة لظهر التركيب سداسي متراص HCP ـ شبكة ليست برافية، ولو أستبدلت كل عقدتين بالاحداثيات (000)، $(\frac{2}{3}\frac{1}{3}\frac{1}{2})$ بعقدة "مركبة" لظهر التركيب سداسي أساسي ـ شبكة برافية.

* السيليكون Si^{14} : لو استبدلت كل ذرة بعقدة لظهرت شبكته من نوع الماس ـ ليست برافية، وعند استبدال كل عقدتين بالاحداثيات (000)، $(\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4})$ بعقدة واحدة لظهر التركيب FCC ـ برافية.

* ملح الطعام $NaCl$: وهو تركيب مكعب من نوع خاص تتبادل فيه أيونات Na^{+} و Cl^{-} المواقع بحيث يحاط بكل أيون Na^{+} (Cl^{-}) ستة أيونات Cl^{-} (Na^{+}). وباستبدال كل أيونين $Na^{+}(000)$ و $Cl^{-}(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ بعقدة لظهرت الشبكة FCC.

* كبريتيد الزنك ZnS : تركيب مكعب من نوع الماس بحيث يحاط بكل أيون Zn^{+} (S^{-}) أربعة أيونات مخالفة S^{-} (Zn^{+}).

* كلوريد السيزيوم ($CsCl$): تركيب مكعب بحيث يحاط بكل أيون Cs^{+} (Cl^{-}) ثمانية أيونات مخالفة Cl^{-} (Cs^{+}). وباستخدام قاعدة متكونة من أيونين $Cs^{+}(000)$ و $Cl^{-}(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ نحصل على تركيب مكعب أساسي ـ بسيط sc.

تعيّن المستويات البلورية بقرائن ملر (hkl) وهي مقلوبات لمقاطع المستوي للمحاور البلورية المحددة للخلية الاولية . معادلة المستوي هي:

$$(hkl): hx + ky + lz = m \quad (m = 0, 1, 2, \dots) \qquad (3\_1)$$

حيث ($x\, y\, z$) المحاور البلورية ، وفي المعادلة تقاس x ، y ، z بوحدات a ، b ، c (ثوابت الخلية الاولية) على التوالي. أما الاتجاهات فتحدد بقرائن فيس [$u\, v\, w$] . فالشعاع $\vec{\rho}$ هو:

$$\vec{\rho}[uvw] : \vec{\rho} = ua\vec{i} + vb\vec{j} + wc\vec{k} \qquad (4\_1)$$

ولغرض دراسة التركيب البلوري والخواص الكهربائية والضوئية ...الخ للبلورات يستخدم مفهوم الشبكة المعكوسة ، شعاعها الأساسي $\vec{G}$ يتحلل الى الأشعة الأساسية $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ _ فضاء الشبكة المعكوسة :

حيث: $\vec{G}(hkl) = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3}{v}, \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1}{v}, \quad \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2}{v} \qquad (5\_1)$$

و $|\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)| = v$ _ حجم الخلية الأساسية . وبأسلوب معين يمكن اختيار خلية أساسية في فضاء الشبكة المعكوسة تسمّى منطقة بريليون الاولى (تقابل خلية فيكنر _ زايتس في فضاء الشبكة المباشرة).

والشعاع ($\vec{G}(hkl)$) عمودي على المستوي (hkl)، وقيمه ($\vec{G}(hkl)$) تتناسب عكسيا مع الفاصلة بين المستويات البلورية المتوازية (hkl) أي :

$$|\vec{G}(hkl)| = 2\pi / d_{hkl} \qquad (6\_1)$$

مثال: تحديد معكوس الشبكة FCC : أعتباراً من الاشعة الاساسية :

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{j} + \vec{k}), \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{k} + \vec{i}), \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j}) \quad , v = a^3/4 .$$

حيث a _ طول ضلع المكعب FCC ، $\vec{i}\,\vec{j}\,\vec{k}$ _ أشعة الوحدة المنطبقة على أحرفه ، اذن:

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

وهي الأشعة الأساسية التي تشكل فضاء الشبكة المعكوسة التي عقدها بالاحداثيات (hkl) تحدّد بالشعاع $\vec{G}$. حجم الخلية الأساسية للشبكة المعكوسة $|\vec{b}_1 \cdot \vec{b}_2 \wedge \vec{b}_3| = 4(2\pi/a)^3 = v_R$. والأشعة $\vec{b}_i$ أعلاه

لها نفس هيئة الأشعة الأساسية للشبكة المباشرة BCC . معنى هذا أن معكوس الشبكة FCC هو الشبكة BCC ثابتها (طول ضلع خليتها الاولية - المكعب $4\pi / a$). وشعاع الانسحاب الأساسي للشبكة المعكوسة $\vec{G}$ هو:

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{a}\left[(-h+k+\ell)\vec{i} + (h-k+\ell)\vec{j} + (h+k-\ell)\vec{k}\right]$$

وأصغر الأشعة $\vec{G}$ هي $\frac{2\pi}{a}(\pm\vec{i} \pm\vec{j} \pm\vec{k})$ عددها ثمانية تحدد أساساً منطقة بريليون الاولى - حجمها v_R . وشكل منطقة بريليون هو نفس شكل خلية فيكنر - زايتس للشبكة المباشرة BCC أي ثماني وجوه مشذب له ثمانية وجوه عبارة عن مسدسات منتظمة عمودية ومن منتصف الأشعة $\frac{2\pi}{a}(\pm\vec{i} \pm\vec{j} \pm\vec{k})$ وستة وجوه مربعة الشكل عمودية ومنصفة للاشعة $\pm(\vec{b}_1 + \vec{b}_2)$ ، $\pm(\vec{b}_1 + \vec{b}_3)$ ، $\pm(\vec{b}_2 + \vec{b}_3)$.

تمرينات الفصل الأول ـ الشبكة البلورية

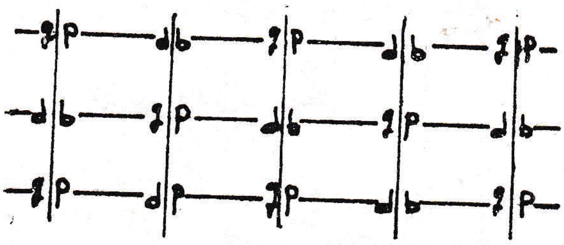
1 ـ وحدة التركيب البلوري للكالسيوم من النوع (fcc). عين ثابت الشبكة a وفاصلة الجوار الأقرب علما أن كثافة الكالسيوم $\rho = 1,55 \times 10^3$ كغم / متر^3.

الحل:

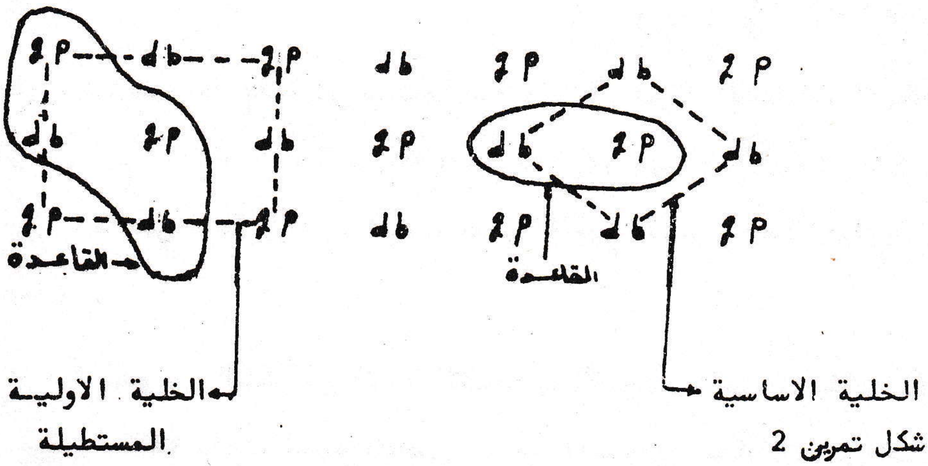
نستخدم العلاقة :
$$a^3 = n \,\frac{M}{N_a}\, \frac{1}{\rho}$$

حيث n عدد الذرات التابعة لخلية أولية (fcc)، M ـ الكتلة المولية للكالسيوم وتساوي 40,1 غم / مول، N_a ـ عدد أفوكادرو ويساوي $6,02 \times 10^{23}$ ذرة / مول. اذن $a = 5,56\,\mathring{A}$. وفاصلة الجوار الأقرب تستنتج من هندسة الخلية الاولية (fcc) وتساوي $R_o = \frac{a}{\sqrt{2}} = 3,93\,\mathring{A}$.

2 ـ خذ الطراز التالي :



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



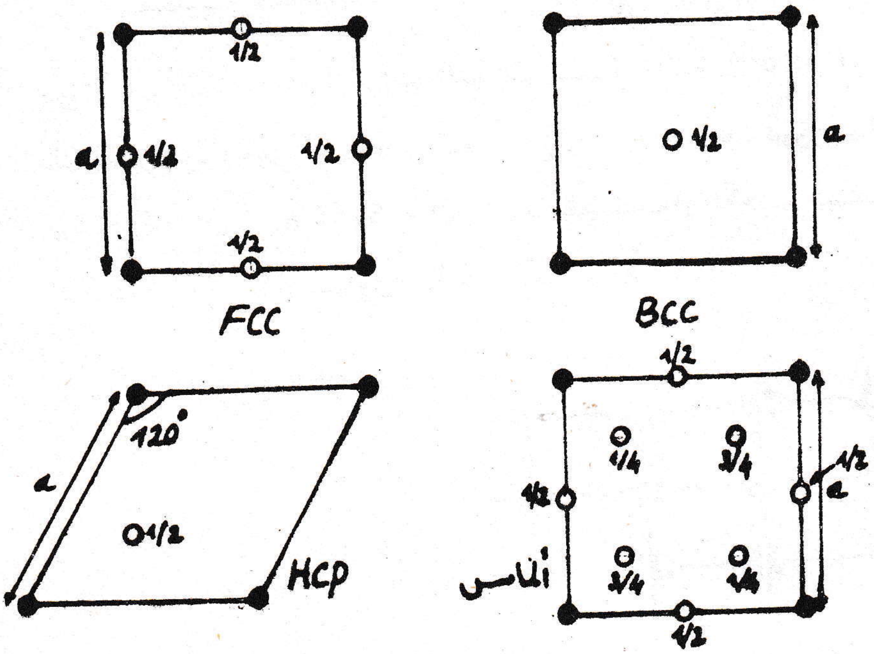
شكل تمرين 2

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

(أ) أسقط هذه التراكيب على مستوي موضّح أرتفاع مواقع الذرات عن مستوي الاسقاط بوحدة ثابت الشبكة a .

(ب) ما هي احداثيات العقد

الجواب:



شكل تمرين (3)

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

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: $\vec{a}_3 = \frac{3}{2}(\vec{i}+\vec{j}+\vec{k})$ ، $\vec{a}_2 = 3\vec{j}$ ، $\vec{a}_1 = 3\vec{i}$ حيث $(\vec{i},\vec{j},\vec{k})$ وحدة الأشعة الكارتيزية . ما هي شبكة برافي. أحسب حجم الخلية الاولية الاصطلاحية والخلية الاساسية .

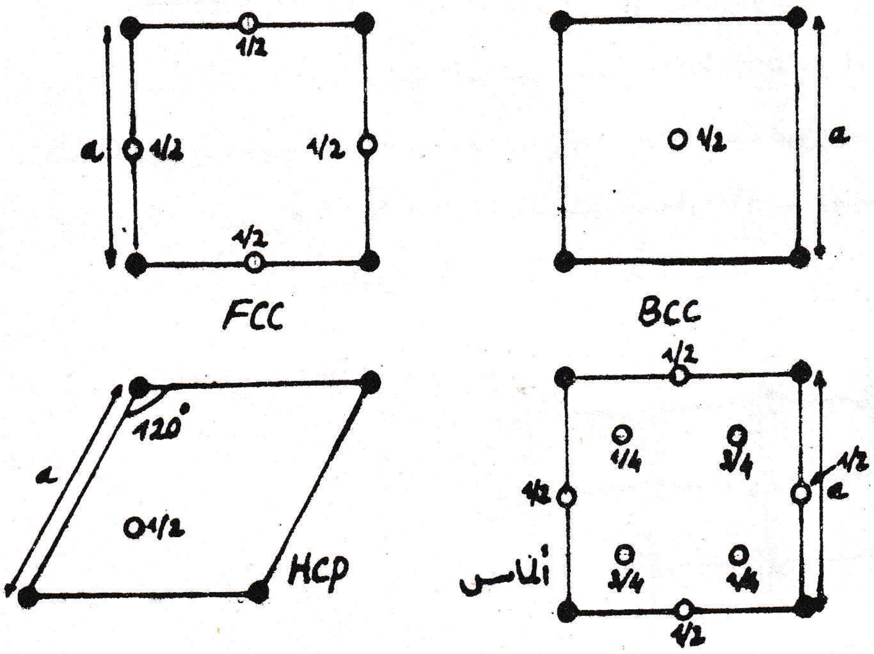
الحل: كما يبدو من الشكل أن أشعة الانسحاب الاساسية تكون الشبكة bcc بحيث تتشكل أي من عقدها بأخذ الجمع الخطي للاشعة الاساسية بمعاملات هي أعداد صحيحة .

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

(أ) أسقط هذه التراكيب على مستوي موضّحاً أرتفاع مواقع الذرات عن مستوي الاسقاط بوحدة ثابت الشبكة a .

(ب) ما هي احداثيات العقد

الجواب:



شكل تمرين (3)

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

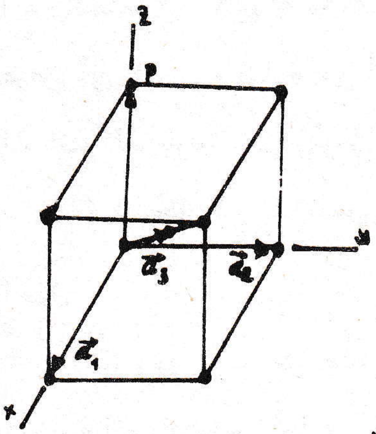
Fcc : $(0\,0\,0)$ ، $(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,0)$ ، $(0\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2})$ ، $(\frac{1}{2}\,0\,\frac{1}{2})$

Bcc : $(0\,0\,0)$ ، $(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2})$

Hcp : $(0\,0\,0)$ ، $(\frac{2}{3}\,\frac{1}{3}\,\frac{1}{2})$

4 ـ بلورة تنتسب لكل عقدة من شبكتها ذرة واحدة . أشعة الانسحاب الاساسية هي: $\vec{a}_1 = 3\vec{i}$ ، $\vec{a}_2 = 3\vec{j}$ ، $\vec{a}_3 = \frac{3}{2}(\vec{i}+\vec{j}+\vec{k})$ حيث $(\vec{i},\vec{j},\vec{k})$ وحدة الأشعة الكارتيزية . ما هي شبكة برافي. أحسب حجم الخلية الاولية الاصطلاحية والخلية الاساسية .

الحل: كما يبدو من الشكل أن أشعة الانسحاب الاساسية تكون الشبكة bcc بحيث تتشكل أي من عقدها بأخذ الجمع الخطي للاشعة الاساسية بمعاملات هي أعداد صحيحة .



فمثلا العقدة P هي: $\vec{a}_1 + \vec{a}_2 - 2\,\vec{a}_3$.
كما يمكن اختيار الأشعة الأساسية الثلاثة تربط العقدة "O" بثلاثة عقد وسط ثلاثة خلايا مكعبة اصطلاحية متجاورة.

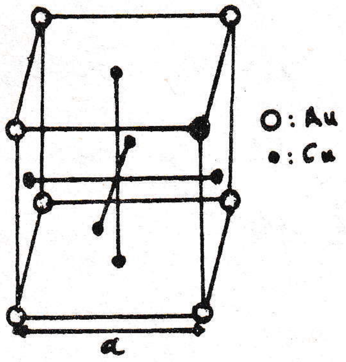
حجم الخلية الاصطلاحية هو
$3 \times 3 \times 3 = 27$.وحجم الخلية الاساسية
يساوي نصف حجم الاصطلاحية : $13{,}5$
وذلك الانتساب ذرتان للخلية الاصطلاحية (bcc).

شكل تمرين 4

5 ـ وحدة تركيب بلوري موضحة في الشكل المجاور، والمطلوب معرفة شبكة برافي وكتابه الصيغة الكيمياوية وحساب العدد التناسقي وفاصلة الجوار الأقرب.

الحل: لو أخذنا قاعدة متكونة من أربعة ذرات:

$Au\,(000)$، $Cu: (\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,0)$ و $(\frac{1}{2}\,0\,\frac{1}{2})\,(0\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2})$



فالشبكة الناتجة مكعبة بسيطة والتركيب الكيمياوي يستنتج 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

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

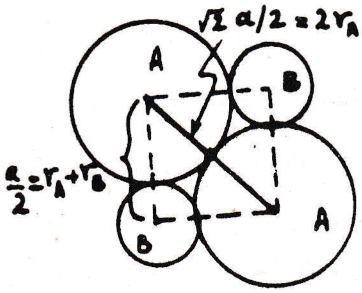
الحل:

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

$$r_A + r_B = a/2$$

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

أذن:



شكل تمرين 6

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

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

7 ـ بيّن بأن الشبكة المكعبة الممركزة 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 الممركزة الوجوه (fcc) يمكن أن تتجزأ الى أربعة شبكات فرعية مكعبة بسيطة.

الحل:

ندرس أشعة الانتقال الاساسية للشبكة (bcc):

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

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 و n_3

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

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

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

1 ـ عند ما يكون:

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

حيث n ـ عدد صحيح فان:

$$-n_1+n_2+n_3 = 2(n-n_1) \text{ ; } n_1-n_2+n_3 = 2(n-n_2) \text{ ; } n_1+n_2-n_3 = 2(n-n_3)$$

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

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

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

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 – عدد صحيح فان:

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

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

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

$$\vec{R_2} = a(n_x+\tfrac{1}{2})\vec{i} + a(n_y+\tfrac{1}{2})\vec{j} + a(n_z+\tfrac{1}{2})\vec{k} \qquad (3)$$

وهذا الشعاع $\vec{R_2}$ 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 :

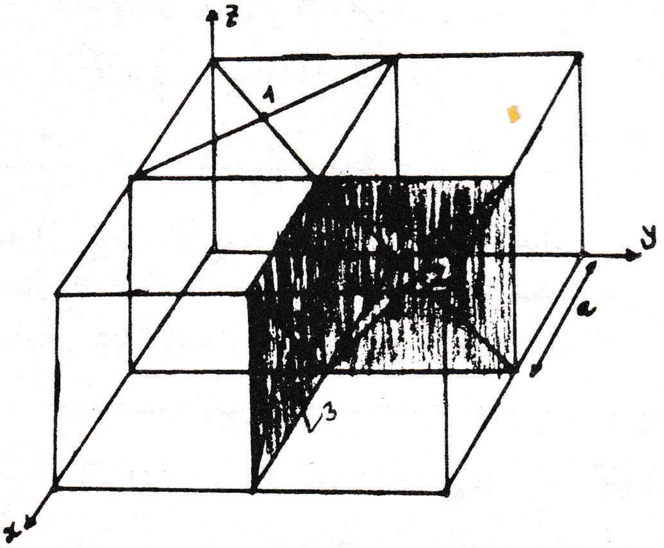
$$\vec{a_1} = \frac{a}{2}(\vec{i}+\vec{j}) \; ; \; \vec{a_2} = \frac{a}{2}(\vec{j}+\vec{k}) \; ; \; \vec{a_3} = \frac{a}{2}(\vec{i}+\vec{k})$$

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 أرقام صحيحة موجبة وسالبة ، يحدد كل عقد الشبكة (fcc):

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

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

عدد فردي (والاثنـان 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 يكـــون $n_1=2$ و $n_2=1$ و $n_3=0$ فان $\vec{R}$ 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 حـالات:



شكـل تمرين(7أ)

1 ـ عندما تكون كل الارقام n_1، n_2، n_3 زوجية (أو كلها فردية) فنحصـل علـى:

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

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

الشعاع $\vec{R}_1$ يحدد كل عقد الشبكة المكعبة البسيطة A التي عقدها متكونة من عقـد زوايا مكعبات الشبكة الأصليـة fcc .

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

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

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

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

والشعاع $\vec{R_2}$ يحدد كل عقد الشبكة المكعبة البسيطة B التي عقدها متكونة من عقد مراكز وجوه مكعبات الشبكة الاصلية 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 $\frac{n_1+n_3}{2} = n_{31}$ ، $\frac{n_1+n_2}{2} = n_{32} + \frac{1}{2}$ ، $\frac{n_2+n_3}{2} = n_{33} + \frac{1}{2}$

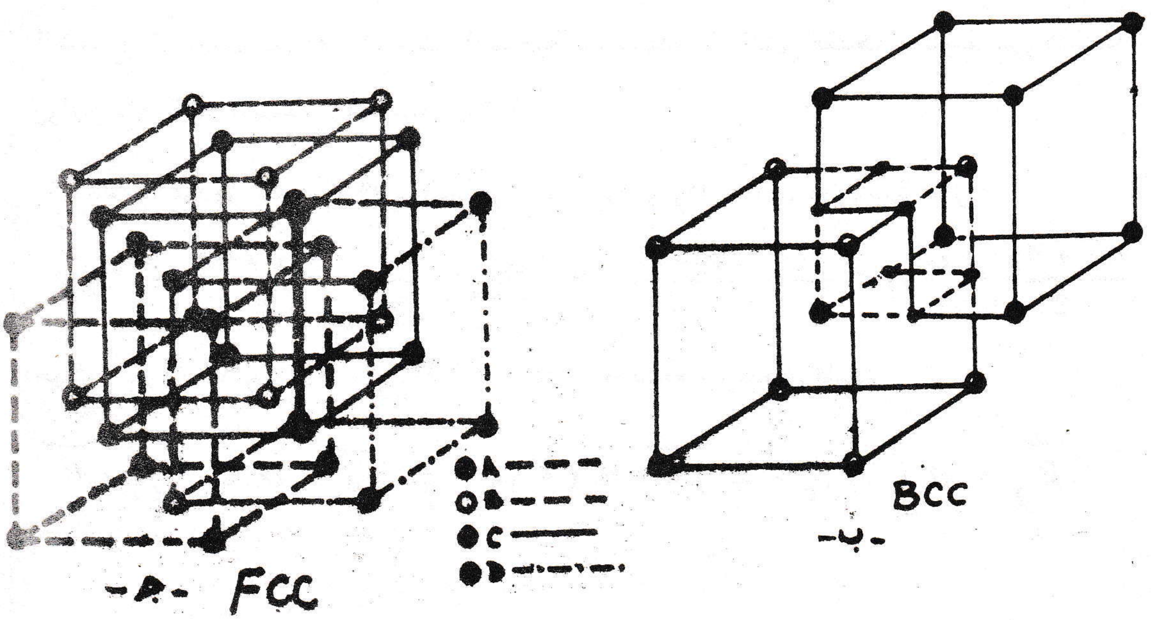
علما أن n_{31} و n_{32} و n_{33} هي أعداد صحيحة . والشعاع $\vec{R_3}$ يحدد كل عقد الشبكة المكعبة البسيطة C التي عقدها متكونة من عقد مراكز وجوه مكعبات الشبكة الأصلية Fcc الموازية للمستوي (y - z).

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_{41} ، n_{42} ، n_{43} - أعداد صحيحة . والشعاع $\vec{R_4}$ يحدد كل عقد الشبكة المكعبة البسيط D التي عقدها متكونة من عقد مراكز وجوه مكعبات الشبكة الأصلية Fcc الموازية للمستوي (x - Z).

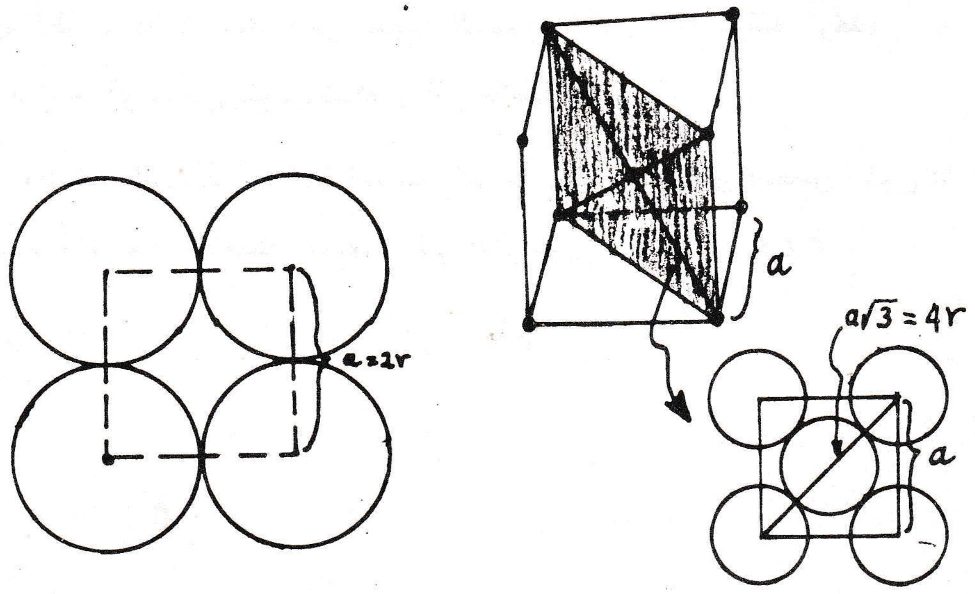
معنى هذا أن الشبكة الاصلية Fcc المحددة بالشعاع $\vec{R}$ يمكن أن تتجزأ الى أربعة شبكات فرعية A و B و C و D ، كلها مكعبة بسيطة لانها تحدد بالأشعة $\vec{R_1}$ و $\vec{R_2}$ و $\vec{R_3}$ و $\vec{R_4}$ ذوات الهيئة التي تعين الشبكات المكعبة البسيطة.



شكل
تمرين (7)

8 ـ أحسب كثافة التعبئة للبلورة المكعبة البسيطة والمكعبة الممركزة الحجم .

الحل: نأخذ كريات مصمتة 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 ـ



ـ أ ـ

ـ ب ـ

شكل تمرين 8

مكعب كرية 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 الاولية ـ 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 ممركز الحجم خليته الاولية مكعبة ممركزة الحجم كما في الشكل ب، حيث صورنا كيف تشغل الكرات المستوى القطري للمكعب. ويتضح أن $a\sqrt{3} = 4r$. وتتسب لكل خلية أولية - مكعب كرتان $(8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2)$. والحجم المشغول من قبل الكريتين يساوي $2 \times \frac{4}{3} \pi r^3 = 0,68\ a^3$. أي أن معامل التعبئة يساوي 0,68.

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

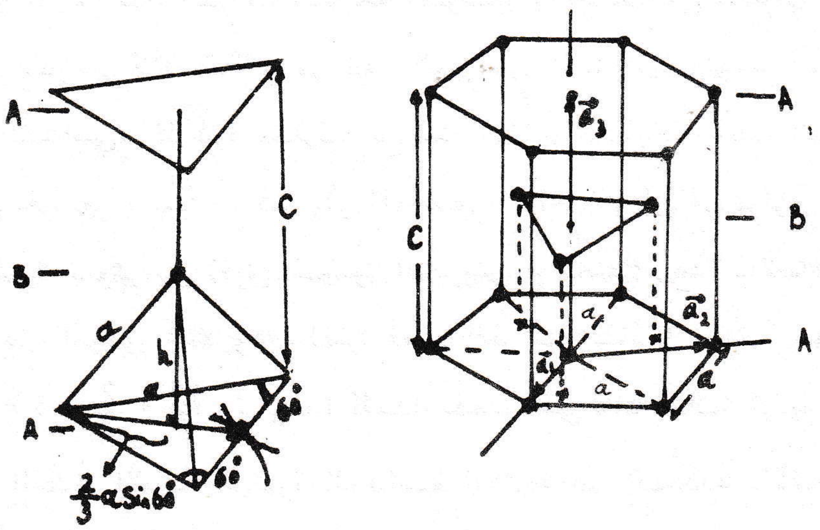
9 ـ أحسب كثافة التعبئة (t) للتركيبين البلوريين التاليين:

أ ـ الماس ب ـ 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 ـ شبكة برافي للماس مكعبة ممركزة الوجوه (fcc) قاعدتها تتكون من ذرتين أحداثياتهما (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:

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



شكل تمرين (9)

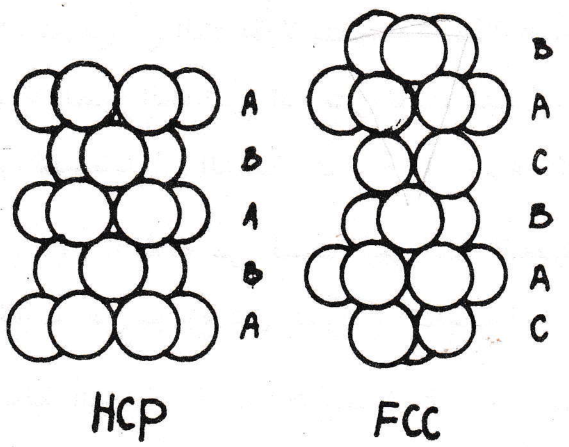
ب ـ عند تركيب العبوة السداسية الكثيفة حصلنا على طبقات كروية (ذرية) حسب التسلسل التالي $(ABAB\ldots\ldots)$ حيث كل كرية (ذرة) من الطبقة B تمس ثلاثة كريات من الطبقة A؛ أي أن مراكز الكريات الثلاثة من الطبقة A ومركز الكرية من B تشكل هرم ثلاثي كل أحرفه متساوية وتساوي قطر كرية واحدة $2r = a$ وارتفاعه $h = C/2$ (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 الاضلاع $(\frac{2}{3} a \sin 60^\circ ، a ، h)$ 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 المدروس وفوقه و تحته . كما وأن للموشور الواحد ذرتان في مركزي قاعدتيه كل واحدة تشترك بموشورين (فوق الموشور المدروس أو تحته). هذا بالاضافة الى ثلاثة ذرات داخل الموشور المدروس. لذلك فعدد الذرات التابعة لموشور سداسي واحد هي: $\frac{12}{6} + \frac{2}{2} + 3 = 6$ ؛ وهذا العدد يقسم على ثلاثة خلايا أولية : من الشكل يتضح أن الخلية الاولية للبلورة السداسية الكثيفة هي المحددة بالأشعة $\vec{a}_1$ و $\vec{a}_2$ و $\vec{a}_3$. لذلك فعدد الذرات التابعة للخلية الاولية من البلورة السداسية الكثيفة (hcp) هي $\frac{6}{3} = 2$ (انظر الملاحظة في آخر السؤال). الموشور الواحد الثلاثي (أي نصف االخلية الاولية) حجمه يساوي $\frac{\sqrt{3}}{4}\, a^2 c$ وحجم الخلية الاولية 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:

$$t = \frac{2 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{\sqrt{2}\, a^3} = \pi \sqrt{2} / 6 = 0,74 \qquad \text{و} \quad (2r = a)$$

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 : $ABC\,ABC\ldots$ و hcp : $ABAB\ldots$ وهذا موضح في الشكل :



شكل تمرين 9

وكثافة التعبئة للتركيبين fcc و hcp هي أكبر كثافة تعبئة بالنسبة للتركيب المكعب المركز 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 مصمتة 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، وللمنغنيز Mn تساوي الى 1,623 وللكوبلت Co تساوي 1,622 وهي قريبة للقيمة النظرية.

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

10 ـ عند درجة الحرارة $23\,°K$ تقريبا يتحول التركيب البلوري للصوديوم Na_{11} من الطور المكعب المركز الحجم (bcc) الى الطور السداسي الكثيف التعبئة (hcp). نفرض أن الكثافة لا تتغير عند هذا التحول الطوري . أحسب ثابت الشبكة a_h للطور السداسي اذا كان ثابت شبكة الطور المكعب $a_c = 4,23\ \text{Å}$ انكستروم، مفترضا أن النسبة (c/a) لا تختلف كثيرا عن القيمة النظرية .

الحل: نعرف الكثافة من النسبة بين كتلة الخلية الاولية وحجمها، حيث كتلة الخلية الاولية هي مجموع كتل الذرات التابعة لها .

في حالة التركيب (bcc) حيث $n = 2$ تساوي كتلة الخلية الاولية الى $2\,m_{Na}$ حيث m_{Na} ـ كتلة ذرة الصوديوم و n ـ عدد الذرات التابعة لخلية أولية واحدة . اذن $\rho = \frac{2\,m_{Na}}{a_c^3}$. (انظر السؤال الاول من هذا الفصل .

حيث $m_{Na} = \frac{M}{N_a}$ ، M هي الكتلة الذرية ـ المولية).

وفي حالة التركيب (hcp) تساوي كتلة الخلية الاولية الى $2\,m_{Na}$ وحجم الخلية الاولية يساوي $\sqrt{2}\ a_h^3 = \frac{\sqrt{3}}{2}\,a^2 c$ لان النسبة النظرية $(c/a) = \sqrt{\frac{8}{3}}$ تكون صحيحة ضمن فرضية السؤال. اذن $\rho = \frac{2\,m_{Na}}{\sqrt{2}\ a_h^3}$ ومنه نجد:

$$a_h = a_c \cdot 2^{-1/6} \simeq 0,89\,a_c = 3,76$$ انكستروم

11 ـ التركيب البلوري للفضة FCC وكثافتها $\rho = 10,5$ غم/سم3. فاذا كان العدد الكتلي $M = 107,87$ فما هو ثابت الشبكة a، فاصلة الجوار الأقرب R، الفاصلة بين سطوح التعبئة الكثيفة على اعتبار الذرات كراةً وقدر نصف قطر الذرة r.

الحل: تركيز الذرات n_{at} يساوي:

$$n_{at} = \frac{\rho N_{av}}{M} = \frac{4}{a^3} \; ; \; a = 4,09\,\mathring{A} \quad , R = \frac{\sqrt{2}\,a}{2} = 2,9\,\mathring{A}$$

نحسب القفزة في الاتجاه [111] ـ أتجاه التعبئة ... $ABCA$ باتجاه قطر المكعب الاصطلاحي ـ أي $\sqrt{3}\,a/3 = 2,36\,\mathring{A}$،

$$\sqrt{2}\,a = 4r \quad \text{و} \quad r = R/2 = 1,45\,\mathring{A}$$

12 ـ فاصلة الجوار الأقرب للماس $R = 1,55\mathring{A}$، ما هي كثافته ρ اذا كان العدد الكتلي للكربون 12.

الحل:

$$R = \frac{\sqrt{3}a}{4} \; \text{و} \; a = 3,57\,\mathring{A} \quad , \; \rho = \frac{8(M/N_{av.})}{a^3} = 3,5\ gm\ cm^{-3}$$

13 ـ التركيب البلوري للكادميوم سداسي كثيف HCP : $a = 2,97\,\mathring{A}$ ، $c = 5,61\,\mathring{A}$ أحسب كثافة الكاديوم، الكتلة المولية $M = 112,4$.

الحل: حجم الخلية الأولية ($v = \frac{\sqrt{3}}{2}\,a^2 c = 42,85\,\mathring{A}^3$).
ينتسب للخلية الاولية ذرتان (الموشور السداسي عبارة عن ثلاثة خلايا أولية) أذن:

$$\rho = \frac{2M/N_{av}}{v} = \frac{2\times112,4/6\times10^{23}}{42,85\times10^{-24}} = 8,74\ gm\ cm^{-3}$$

14 ـ كيف تتغير كثافة الحديد عند انتقاله من الطور α ($BCC, a = 2,86\,\mathring{A}$) الى الطور γ ($FCC, a = 3,56\,\mathring{A}$).

الحل:
$$\rho_\alpha = \frac{2M/N_{av}}{(2,86)^3} \; \text{و} \; \rho_\beta = \frac{4M/N_{av}}{(3,56)^6} \; \text{و} \; \frac{\rho_\alpha}{\rho_\beta} = 0,96$$

أي أنه عند الانتقال من الطور α الى β تزداد الكثافة بمقدار 4٪.

15 - استخرج علاقة عامة لحساب الفواصل بين المستويات البلورية ($hk\ell$) في الفئات البلورية المختلفة.

الحل: نبدأ بالعلاقة التالية $d^2_{hk\ell} = 4\pi^2/|G(hk\ell)|^2$

حيث:

$$|G|^2 = h^2\,\vec{b}_1\cdot\vec{b}_2 + k^2\,\vec{b}_2\cdot\vec{b}_2 + \ell^2\,\vec{b}_3\cdot\vec{b}_3 + 2hk\,\vec{b}_1\cdot\vec{b}_2 + 2h\ell\,\vec{b}_1\cdot\vec{b}_3 + 2k\ell\,\vec{b}_2\cdot\vec{b}_3$$

والآن نعتبر الخلية الاولية المحددة بمحاور الانسحاب الأساسية (اذا كانت الخلية غير أساسية، نعتبرها أساسية مع قاعدة عقدية فهذا لا يؤثر على حساب الفاصلة). وباستعمال العلاقة بين $\vec{b}_i$ و $\vec{a}_j$ نجد:

$$d^{-2}_{hk\ell} = \frac{1}{v^2}\Big\{h^2|\vec{a}_2\wedge\vec{a}_3|^2 + k^2|\vec{a}_3\wedge\vec{a}_1|^2 + \ell^2|\vec{a}_1\wedge\vec{a}_2|^2 + 2hk(\vec{a}_2\wedge\vec{a}_3)\cdot(\vec{a}_3\wedge\vec{a}_1) + 2k\ell(\vec{a}_3\wedge\vec{a}_1)\cdot(\vec{a}_1\wedge\vec{a}_2) + 2h\ell(\vec{a}_1\wedge\vec{a}_2)\cdot(\vec{a}_2\wedge\vec{a}_3)\Big\}$$

وحجم الخلية الاولية (المعتبرة أساسية) v هو:

$$v^2 = |\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\wedge\vec{a}_3)|^2 = \begin{vmatrix} \vec{a}_1\cdot\vec{a}_1 & \vec{a}_1\cdot\vec{a}_2 & \vec{a}_1\cdot\vec{a}_3 \\ \vec{a}_2\cdot\vec{a}_1 & \vec{a}_2\cdot\vec{a}_2 & \vec{a}_2\cdot\vec{a}_3 \\ \vec{a}_3\cdot\vec{a}_1 & \vec{a}_3\cdot\vec{a}_2 & \vec{a}_3\cdot\vec{a}_3 \end{vmatrix}$$

$$v^2 = a^2b^2c^2\,(1 + 2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma - \cos^2\alpha - \cos^2\beta - \cos^2\gamma)$$

حيث α هي الزاوية بين ($\vec{a}_2$ و $\vec{a}_3$)، β بين ($\vec{a}_3$ ، $\vec{a}_1$)، γ بين ($\vec{a}_2$ ، $\vec{a}_1$). ومن قوانين التحليل الشعاعي:

$$(\vec{a}_i\wedge\vec{a}_j)\cdot(\vec{a}_j\wedge\vec{a}_k) = (\vec{a}_i\cdot\vec{a}_j)(\vec{a}_j\cdot\vec{a}_k) - (\vec{a}_i\cdot\vec{a}_k)\,a_j^2 =$$
$$= a_i\,a_j^2\,a_k\,(\cos\alpha_{ij}\cos\alpha_{jk} - \cos\alpha_{ik})$$

حيث α_{ij} هي الزاوية بين ($\vec{a}_i$ و $\vec{a}_j$). نجد أخيراً:

$$d^{-2}_{hk\ell} = \frac{a^2b^2c^2}{v^2}\Big\{\frac{h^2\sin^2\alpha}{a^2} + \frac{k^2\sin^2\beta}{b^2} + \frac{\ell^2\sin^2\gamma}{c^2} + \frac{2hk}{ab}(\cos\alpha\cos\beta - \cos\gamma) + \frac{2k\ell}{bc}(\cos\beta\cos\gamma - \cos\alpha) + \frac{2\ell h}{ac}(\cos\alpha\cos\gamma - \cos\beta)\Big\}$$

وهذه هي العلاقة العامة والتي تصح للفئة الثلاثية الميل.