

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

فيزياء
الحالة الصلبة
SOLID STATE PHYSICS

رقم التصنيف : 53.41
المؤلف ومن هو في حكمه : غازي ياسين القيسي
عنوان الكتاب : فيزياء الحالة الصلبة
رقم الإيداع : 2010/7/2536
الواصفات : فيزياء الجوامد / الفيزياء
بيانات النشر : عمان - دار المسيرة للنشر والتوزيع

تم إعداد بيانات الفهرسة والتصنيف الأولية من قبل دائرة المكتبة الوطنية

حقوق الطبع محفوظة للناسر

جميع حقوق الملكية الأدبية والفنية محفوظة لدار المسيرة للنشر والتوزيع عمان - الأردن
ويحظر طبع أو تصوير أو ترجمة أو إعادة تنضيد الكتاب كاملاً أو مجزأً أو تسجيله على اشرطة
كاسيت أو إدخاله على الكمبيوتر أو برمجته على إسطوانات ضوئية إلا بموافقة الناسر خطياً

Copyright © All rights reserved

No part of this publication may be translated,
reproduced, distributed in any form or by any means, or stored in a data
base or retrieval system, without the prior written permission of the publisher

الطبعة الأولى 2011م - 1432هـ


**دار
المسيرة**
للنشر والتوزيع والطباعة

عنوان الدار

الرئيسي : عمان - العبدلي - مقابل البنك العربي هاتف : 962 6 5627049 فاكس : 962 6 5627059
الفرع : عمان - ساحة المسجد الحسيني - سوق البتراء هاتف : 962 6 4640950 فاكس : 962 6 4617640
صندوق بريد 7218 عمان - 11118 الأردن

E-mail: Info@massira.jo . Website: www.massira.jo

فيزياء الحالة الصلبة SOLID STATE PHYSICS

الدكتور
غازي ياسين القيسي
دكتوراه المملكة المتحدة - جامعة ريدينك
Phd. Reading University U.K



قَالَ تَعَالَى: ﴿وَمَا تَكُونُ فِي شَأْنٍ وَمَا تَتْلُوا مِنْهُ مِنْ قُرْآنٍ وَلَا تَعْمَلُونَ مِنْ عَمَلٍ إِلَّا كُنَّا عَلَيْكُمْ شُهُودًا إِذْ تُفِيضُونَ فِيهِ وَمَا يَعْزُبُ عَنْ رَبِّكَ مِنْ مِثْقَالِ ذَرَّةٍ فِي الْأَرْضِ وَلَا فِي السَّمَاءِ وَلَا أَصْغَرَ مِنْ ذَلِكَ وَلَا أَكْبَرَ إِلَّا فِي كِتَابٍ مُبِينٍ ﴿٦١﴾﴾

[يونس: 61]

الفهرس

تقديم 15

الفصل الاول

علم البلورات والبنية البلورية

1.1 الشبيكة الفضائية	19
1.2 التركيب البلوري	20
1.3 وحدة الخلية	21
1.4 نظام الاحداثيات في الهندسة البلورية	25
1.5 التماثل في البلورات	26
1.6 عناصر التماثل الانتقالي	32
1.7 شبائك برافرز	34
1.8 معاملات ميلر	42
1.9 معاملات الاتجاه في البلورة	47
1.10 المسافات البينية بين المستويات في البلورة	49
1.11 التعبئة المتماثلة	54
1.12 بعض التراكيب البلورية الانموذجية	55
تمارين عامة محلولة	68
اسئلة وتمارين عامة	74

الفصل الثاني

حيود الاشعة السينية في البلورات والشبيكة المقلوبة

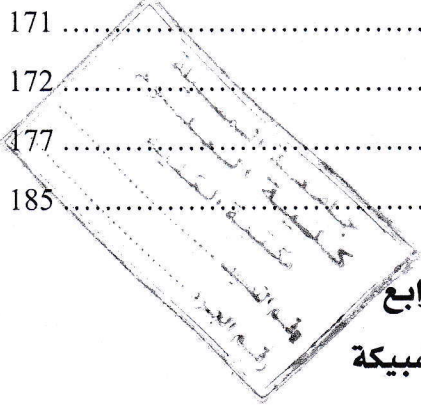
2.1 مقدمة	81
2.2 حيود البلورة	82
2.3 قانون براك	87
2.4 معادلات لاوي	92
2.5 الشبيكة المقلوبة	105
2.6 البناء الهندسي لايوالد - الصيغ الاتجاهية لمعادلات الحيود	112
2.7 مناطق برليون	114
2.8 الطرق العملية للحيود في البلورات	123
تمارين عامة محلولة	130
اسئلة وتمارين عامة	141

الفصل الثالث

قوى الترابط وتصنيف المواد الصلبة

3.1 تبويب خصائص الجوامد	147
3.2 طبيعة قوى الترابط في البلورات	148
3.3 طاقة الترابط	151
3.4 البلورات الايونية	153
3.5 قيمة ثابت مادلك	157
3.6 البلورات التساهمية	159
3.7 بلورات الغازات الحاملة	161
3.8 البلورات المعدنية	168

171	3.9 بلورات الرابطة الهيدروجينية
172	3.10 الانضغاطية الاديباتية (كاظمة الحرارة)
177	تمارين عامة محلولة
185	اسئلة وتمارين عامة



الفصل الرابع

حركات الشبكة

189	4.1 الاهتزازات المرنة في وسط مستمر
195	4.2 الانماط الطبيعية للاهتزاز في وسط مستمر طول محدود
196	4.3 نموذج البلورة الزنبركي
197	4.4 حركية سلسلة ذرات متماثلة
205	4.5 انماط الاهتزاز في شبكة ببعد واحد ذات طول محدود
208	4.6 حركات سلسلة نوعين من الذرات
212	4.7 حالات خاصة في حل مسألة الشبكة ثنائية الذرة
218	4.8 تأثير m و M على طيف التردد
220	4.9 حركية شبكة ببعدين
223	4.10 تهيج اهتزاز شبكة بلورة ايونية بوساطة الضوء
227	4.11 الاهتزازات المتموضعة في شبكة بلورة مشوبة
230	4.12 تكميم اهتزازات الشبكة : الفونونات
232	4.13 كمية حركة الفونون
233	4.14 قواعد الاختيار لمتجه - موجة وكمية الحركة
234	4.15 التشتت غير المرن للفوتونات بوساطة فونونات ملطفة
236	4.16 طيف الفونونات في الجوامد
240	تمارين عامة محلولة

249	اسئلة وتمارين عامة
-----	--------------------

الفصل الخامس

الخواص الحرارية للجوامد

253	5.1 سعة الفونون الحرارية
255	5.2 النظرية الكلاسيكية (قانون دولنج و بيتايت)
258	5.3 إنموذج اينشتين
264	5.4 إنموذج ديبي
274	5.5 التمدد الحراري للجوامد
278	5.6 معادلة حالة المواد الصلبة
281	5.7 علاقة جرونيزين
283	5.8 التوصيلية الحرارية للمواد الصلبة
285	5.9 نظرية التوصيلية الحرارية الفونونية للعوازل
287	5.10 تغير التوصيلية الحرارية مع درجة الحرارة
289	تمارين عامة محلولة
306	اسئلة وتمارين عامة

الفصل السادس

الاليكترونات الحرة في المعادن

311	6.1 إنموذج درود - لورينتز الكلاسيكي
312	6.2 انموذج الموجة الميكانيكية لسومرفيلد
314	6.3 اليكترون حر في صندوق
316	6.4 دالة توزيع فيرمي
318	6.5 كثافة المستويات الاليكترونية

320	6.6 معاملات الغاز الاليكتروني الحر عند الصفر المطلق
326	6.7 اعتماد طاقة فيرمي على درجة الحرارة
328	6.8 الحرارة النوعية الاليكترونية للمعادن
332	6.9 انموذج الاليكترون الحر والانبعث الاليكتروني
337	6.10 انموذج الاليكترون الحر والخواص البارامغناطيسية للمعادن القلوية
342	6.11 انموذج غاز الاليكترون الحر والتوصيلية الكهربائية
350	6.12 التوصيلية الحرارية في نظام الاليكترون الحر
351	6.13 قانون وايد مان - فرانز
353	6.14 التأثيرات الكهروحرارية في أنظمة الاليكترون الحر
355	6.15 تأثير هول
359	تمارين عامة محلولة
375	أسئلة وتمارين عامة

الفصل السابع

نظرية الحزم في الجوامد

379	7.1 جهد الشبكة الدوري
381	7.2 نظرية بلوخ
384	7.3 انموذج كرونج - بيني
389	7.4 تمثيل منحنى E بالضد من K في مخططات مناطق مختلفة
391	7.5 عدد المستويات في حزمة
392	7.6 حركية اليكترون بلوخ
398	7.7 الفجوات
401	7.8 نظرية الحركة البسيطة للاليكترونيات في مجال دوري
401	7.9 تقارب الاليكترون الحر

411	7.10 تقارب الاليكترون المشدود
417	7.11 منحنيات الطاقة الثابتة والسطوح
420	7.12 تداخل المنطقة المسموحة
423	7.13 تصنيف الجوامد الى عوازل واشباه موصلات ومعادن
428	تمارين عامة محلولة
435	اسئلة وتمارين عامة

الفصل الثامن

أشياء الموصلات

439	8.1 المقدمة
439	8.2 العوازل
442	8.3 اشياء الموصلات الذاتية أو النقية
447	8.4 اشياء الموصلات المشوبة أو غير النقية
452	8.5 تركيز الاليكترون والفجوة في اشياء الموصلات النقية
456	8.6 تركيز الاليكترون والفجوة في اشياء الموصلات غير النقية
461	8.7 التوصيلية الكهربائية لاشياء الموصلات
466	8.8 تأثير هول في اشياء الموصلات
467	8.9 الرنين السايكلوتروني
471	تمارين عامة محلولة
478	اسئلة وتمارين عامة

الفصل التاسع

أجهزة أشياء الموصلات

481	9.1 وصلة شبه الموصل الثنائية p-n
484	9.2 مقوم الوصلة الثنائية p-n

489	9.3 الترانزستور الاتصالي
493	9.4 الخلية الشمسية
494	9.5 تصنيع دايودات وترانزستورات الوصلة الثنائية
498	تمارين عامة محلولة
501	اسئلة وتمارين عامة

الفصل العاشر

العوازل

505	10.1 العوازل وجزيئاتها
507	10.2 استقطاب العوازل
509	10.3 ثنائي القطب الكهربائي
512	10.4 الازاحة الكهربائية والمتجهات الكهربائية الاخرى
515	10.5 الاستقطابية
526	10.6 المجال العياني
527	10.7 المجال الموضعي
530	10.8 علاقة كلاسوز - موسوتي
533	10.9 معادلة لابلاس
544	10.10 بعض الخواص الاخرى للعوازل
547	10.11 تاثير الكهربائية الاجهادية
548	10.12 الكهربائية الحديدوزية
551	10.13 كارثة الاستقطاب
553	تمارين عامة محلولة
563	اسئلة وتمارين عامة

الفصل الحادي عشر

الخواص المغناطيسية- النظرية الكلاسيكية

- 11.1 ثنائي القطب المغناطيسي وبعض الكميات المغناطيسية 567
- 11.2 نظرية لارمور في الحركة المدارية 570
- 11.3 انواع المواد المغناطيسية 571
- 11.4 نظرية لانجفين للدايامغناطيسية 575
- 11.5 نظرية لانجفين للبارامغناطيسية 577
- 11.6 نظرية الفيرومغناطيسية - قانون كيوري - ويس 581
- 11.7 مناطق الفيرومغناطيسية 586
- 11.8 الهسترة أو التخلف المغناطيسي 587
- 11.9 نظرية ويس للهسترة 591
- 11.10 الطريقة القذفية للحصول على منحنى B-H 592
- 11.11 ايجاد منحنى B-H بكشاف الاشعة الكاثودية 597
- 11.12 ايجاد التاثريه (القابلية المغناطيسية) بوساطة طريقة كوينكي 600
- تمارين عامة محلولة 604
- اسئلة وتمارين عامة 613

الفصل الثاني عشر

الخواص المغناطيسية- النظرية الكمية

- 12.1 تناقضات في النظرية الكلاسيكية 617
- 12.2 نظرية الدايامغناطيسية 618
- 12.3 العزم المغناطيسي الكلي لذرة 622
- 12.4 النسبة الجيرومغناطيسية 629

630	12.5 نظرية البارامغناطيسية
638	12.6 بارامغناطيسية البلورات الايونية
641	12.7 نظرية الفيرومغناطيسية (المغناطيسية الحديدوزية)
647	10.8 التفاعل التبادلي بين الايونات البارامغناطيسية
651	10.9 طاقة عدم تجانس الاتجاه البلورية
653	12.10 جدار بلوخ
655	12.11 أصل الحالة الفيرومغناطيسية
658	12.12 أصل النطاقات
659	12.13 ضديد الفيرومغناطيسية
660	12.14 نموذج الشبيكتين الثانويتين أو نظرية المجال الجزيئية لضديد الفيرومغناطيسية
667	12.15 الفيرومغناطيسية - الفيريت (معدن حديدي) والعقيق
670	12.16 نظرية المجال الجزيئية للفيرومغناطيسية
673	12.17 الامواج المغزلية
677	12.18 تكميم الامواج المغزلية - الامواج الدوارة
679	12.19 التهيج الحراري للامواج الدوارة - قانون $T^{3/2}$ لبلوخ
682	تمارين عامة محلولة
692	أسئلة وتمارين عامة
696	المراجع

تقديم

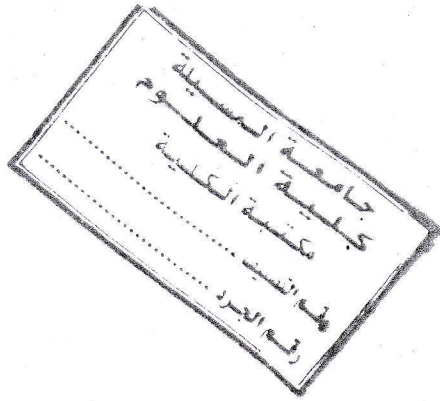
يوفر كتاب فيزياء الحالة الصلبة الجامعي هذا استعراضا شاملا للمفاهيم النظرية والعملية لعلم المواد. سيجد الطالب فائدة كبيرة في مجموعة التمارين المحولة في نهاية كل فصل من فصول الكتاب.

تناولت الفصول الأول والثاني والثالث الهندسة البلورية ودراسة البنية التركيبية لها مع قوى الترابط فيها. أما الفصلين الرابع والخامس فتم فيهما استعراض حركية الشبكة والخواص الحرارية للمواد الصلبة. وفي الفصلين السادس والسابع تم دراسة نظريات الإليكترون الحر في المعادن مع دراسة الجهد الدوري للشبيكة. أما الفصلين الثامن والتاسع فتناولنا فيها بالتفصيل أشباه الموصلات والأجهزة الإليكترونية المصنعة منها. ولغرض إعطاء العوازل الاهتمام المطلوب فلقد خصص لها الفصل العاشر معالجا خواصها الفيزيائية. وأخيرا تناول الفصلين الحادي عشر والثاني عشر الخواص المغناطيسية للمواد الصلبة من وجهتي النظر الكلاسيكية والكمية.

أمل أن يلي هذا الكتاب حاجة طلبة البكالوريوس وكذلك طلبة الدراسات العليا للمفاهيم الأساسية لفيزياء الحالة الصلبة التي اعتمدنا في جمعها وإعدادها على عدد من الإصدارات العالمية في مجال هذا التخصص، ويبقى كل جهد لا يخلو من ملاحظة هنا أو هناك ومن المكارم أن تصلنا هذه الملاحظات.

والله ولي التوفيق

المؤلف



الفصل الاول

علم البلورات والبنية البلورية Crystallography and Crystal structure

- 1.1 الشبكة الفضائية
- 1.2 التركيب البلوري
- 1.3 وحدة الخلية
- 1.4 نظام الاحداثيات في الهندسة البلورية
- 1.5 التماثل في البلورات
- 1.6 عناصر التماثل الانتقالي
- 1.7 شبائك برافرز
- 1.8 معاملات ميلر
- 1.9 معاملات الاتجاه في البلورة
- 1.10 المسافات البينية بين المستويات في البلورة
- 1.11 التعبئة المتماثلة
- 1.12 بعض التراكيب البلورية الانموزجية
- تمارين عامة محلولة
- اسئلة وتمارين عامة

الفصل الاول

علم البلورات والبنية البلورية

1.1 الشبكة الفضائية Space Lattice

تختلف الحالة البلورية للمواد عن الحالات الاخرى (الغازية والسائلة وغير المتبلورة) بان ذراتها تكون ذات ترتيب منظم ومتماثل يسمى شبكة البلورة. وتتميز الشبكة بتكرارية فضائية أو بتمائل انتقالي.

تشكل البلورة المثالية من خلال التكرار اللانهائي المنتظم في فضاء من وحدات تركيبية متماثلة. وبسبب النظامية في التشكيل الدوري يكون محيط جميع النقاط متماثلاً في شبكة معينة. فلو ان مشاهدا وضع عند أي نقطة A انتقل الى أي نقطة أخرى B سوف لا يتمكن من تحسس أي تغيير في المحيط. بعبارة أخرى يبدو تشكيل جميع نقاط الشبكة نفسه بأي طريقة ينظر إليها من أي نقطة $\vec{r}$ مثلما ينظر لها من النقطة:

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

إذ ان n_1 و n_2 و n_3 أعداد صحيحة اعتباطية وان $\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$ هي متجهات الانتقال الأساسية.

ويسمى المتجه الذي يربط هذه المتجهات الثلاث بالمؤثر الانتقالي:

$$\vec{T} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c} \dots\dots\dots 1-2$$

وهذا المؤثر الانتقالي يربط أي موقعين في البلورة بحيث تبدو جميع الذرات المحيطة بهذين الموقعين متماثلة، أي أن:

$$\vec{r}' = \vec{r} + \vec{T}$$

ان مجموعة النقاط $\vec{r}'$ هي التي تحدد المواقع المتماثلة داخل البلورة بالنسبة لنقطة الشبكة $\vec{r}$. ولهذا يعتبر المؤثر الانتقالي أحد مؤثرات التماثل البلوري التي ستطرق إليها لاحقاً مع بقية مؤثرات التماثل البلوري.

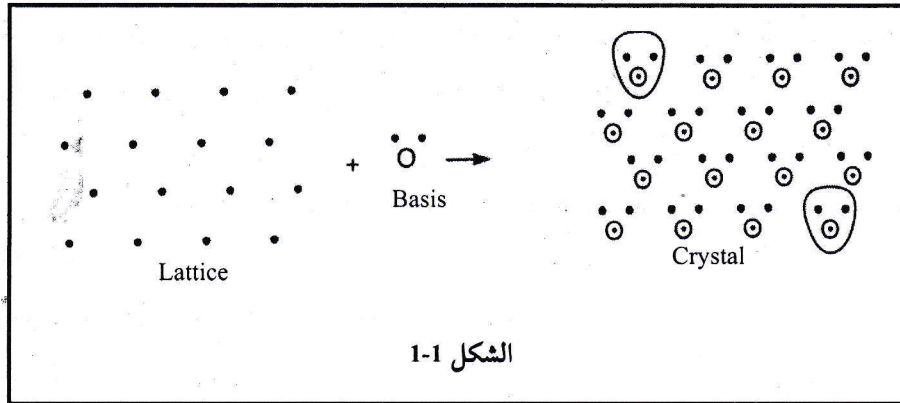
وتعرف الشبكة ومحاورها الانتقالية بانها شبكة أولية اذا خضعت أي نقطتين فيها للعلاقة 1-1 وتشكل المحاور الاولى لهذه الشبكة اشكالا لمتوازيات سطوح تسمى وحدة الخلية الاولى، اما اذا لم تخضع نقاط الشبكة ما للعلاقة 1-1 فتدعى بالشبكة غير الاولى وتكون المحاور التي تحددها محاور غير اولية وتشكل وحدة خلية غير اولية.

1.2 التركيب البلوري Crystal Structure

تختلف الشبكة والبلورة بدلالة ان الشبكة ما هي إلا فكرة رياضية مجردة يقصد بها مجموعة من النقاط المرتبة بنظام وتعيد نفسها بصورة دورية في الفضاء، بينما البلورة هي جسم فيزيائي حقيقي. ويمكن تحويل الشبكة الفضائية الى بلورة عندما تصاحب كل نقطة شبكة بتركيب فيزيائي معين مثل ذرة او جزيئة ويسمى هذا التركيب الفيزيائي بالاساس والعلاقة المنطقية هي:

$$\text{Lattice} + \text{basis} \rightarrow \text{Crystal structure}$$

وهذه العلاقة المنطقية يوضحها الشكل 1-1:

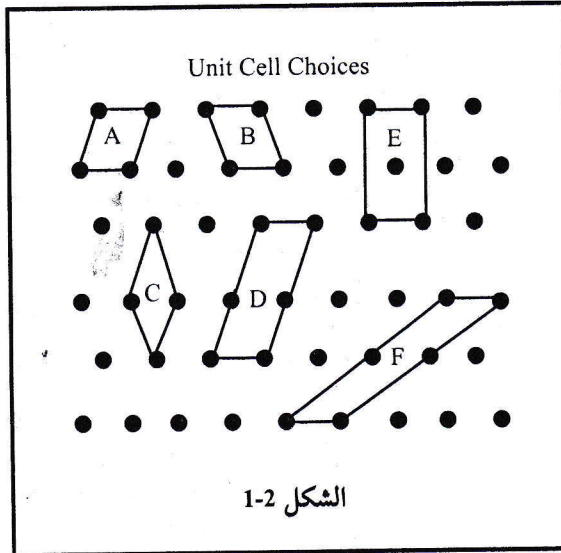


ربما يتكون الاساس من ذرة منفردة مثلما في المعادن والغازات الحاملة ومن ايونين مثلما في البلورات الايونية وصولا الى حوالي 100 ذرة او جزيئة كما في البلورات غير العضوية او محدود 1000 ذرة أو جزيئة كما في بلورات البروتين.

1.3 وحدة الخلية Unit Cell

وحدة الخلية هي منطقة الشبكة التي تعرف بوساطة ثلاث متجهات $\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$ التي عندما تنتقل بوساطة أي مضاعفات عددية صحيحة من هذه المتجهات فإنها ستنتج منطقة مشابهة من البلورة. تحتوي كل وحدة خلية تمثيلا تاما من وحدة النمط (التكرارية الدورية المنتظمة التي تبني البلورة منها، مثل لبنات بناء الجدار). ويكون كافيا ان علمت خواص وحدة الخلية ان تعرف البلورة.

يمكن اختيار وحدة الخلية بطرق لا نهائية في عددها، فان اختيار وحدة الخلية التقليدية هي مسألة ملائمة. يمكن تحديد شكل وأبعاد وحدة الخلية بوساطة تجارب حيود الأشعة السينية. تكون وحدة الخلية ثلاثية الأبعاد اذا كانت البلورة جسما ثلاثي الأبعاد، وفي العموم تكون متوازي سطوح. ويتم اختيار متوازي السطوح بأقصر الأبعاد واصغر حجم $\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}$ ليكون وحدة الخلية.



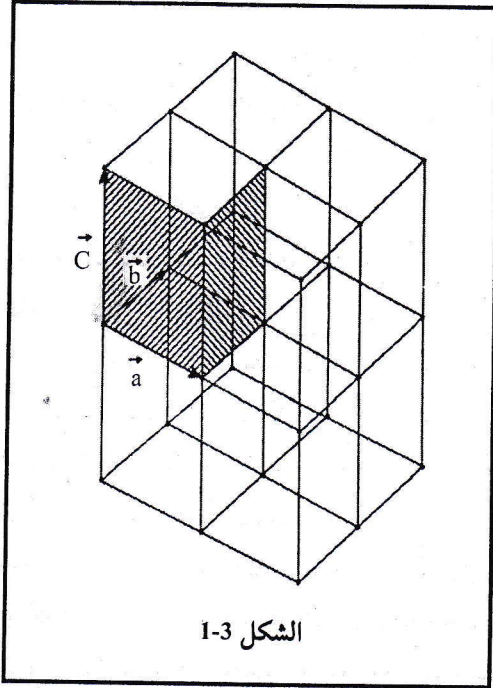
الشكل 1-2

وربما تكون وحدة الخلية أولية كما في الخلايا A و B و C أو غير أولية كما في D و E و F. ان وحدة الخلية التي تمتلك ذرات أو نقاط شبكة عند زواياها الثمانية فقط وكل زاوية تشترك مع ثمان خلايا (وبذلك يكون فقط 1/8 الذرة أو النقطة يخص كل خلية) وبالمتوسط تحتوي كل وحدة خلية ذرة أو نقطة شبكة واحدة فقط تدعى بوحدة الخلية الأولية Primitive unit cell.

ويكون احيانا من المناسب اكثر ان تستعمل خلية ذات حجم اكبر، وبذلك تحتوي اكثر من نقطة شبكة أو ذرة ومثل هكذا وحدة خلية تدعى بوحدة الخلية غير الأولية non-Primitive unit cell. ويوضح الشكل 1.2 فكرة وحدة الخلية لبلورة ببعدين بينما يوضح الشكل 1.3 وحدة خلية حقيقية لبلورة مكعبة.

ربما يكون هنالك 100 تركيب لوحدة الخلية تم تعريفها، ولكن هنالك اكثر من مليون صلب متبلور، ومن هنا ندرك ان هنالك العديد من المواد المتبلورة لها تركيب وحدة الخلية نفسه ومثل هذه المواد الصلبة تدعى بالمواد متشابهة التبلور isomorphic. وتعد العديد من العناصر المعدنية متشابهة في تركيبها البلوري لانها تمتلك تركيب وحدة الخلية نفسه.

تحتوي وحدة الخلية على الاقل على ذرة واحدة من كل نوع من الانواع المكونة للبلورة. ولما كانت الذرات المختلفة لا تتميز فقط من خلال خواصها الكيميائية ولكن كذلك من ترتيبها في الخلية، وحتى في البلورة المكونة من عنصر نقي يمكن ان يكون هنالك اكثر من نوع من الذرات. لو ان وحدة الخلية تكونت فقط من نوع واحد من الذرات فهي تدعى باحادية الذرة monoatomic unit cell وعداها تدعى بمتعدد الذرات polyatomic unit cell. وتسمى الشبكة احادية الذرة كذلك بالشبكة البسيطة والاخرى تسمى بالمركبة. يحتوي ملح الطعام على نوعين من الذرات وهو مثال لشبكة البلورة متعددة الذرات.



الشكل 1-3

ان الفرق بين الشبائك البسيطة والمركبة يقود الى خواص فيزيائية مختلفة. على سبيل المثال تمتلك اهتزازات الشبكة ثنائية الذرة هياكل مختلفة تتميزها عن اهتزازات الشبكة احادية الذرة مثما سنلاحظ ذلك في الفصل الرابع.

علينا ان نركز ان وحدة خلية البلورة نظم من خلال تعريفها جميع عناصر التماثل الانتقالي للبلورة. ومن خلال رسم وحدة الخلية يمكننا بناء كامل البلورة. ولكن ربما لا يكون ضروريا ان تكون وحدة الخلية متماثلة بالنسبة للدورانات والانعكاسات مثلما يمكن ذلك للبلورة. فسوف نرى امكانية امتلاك الشبكة محور تماثل سداسي الثنية بينما وحدة الخلية لا تمتلك ذلك.

ان وحدة الخلية الاولى لشبيكة معينة تكون ذات مساحة ثابتة بغض النظر عن طرق اختيار محاورها، فالخلايا A و B و C في الشكل 1-2 متساوية بالمساحة وان اختلفت اشكالها.

يعرف حجم وحدة الخلية الاولى بدلالة محاورها الانتقالية الاولى كما يأتي:

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

وكذلك يحسب حجم وحدة الخلية غير الاولى بذات العلاقة اعلاه.
وعند التعامل مع الشبائك المستوية فالمساحة لها تعطى بالعلاقة:

$$A = |\vec{a} \times \vec{b}|$$

مثال 1-1

اذا كانت مساحة وحدة الخلية الاولى B في الشكل 1-2 هي $A_1 = |\vec{a} \times \vec{b}|$ ومساحة خلية اولية اخرى فيه هي $A_2 = |\vec{a} \times \vec{b}'|$ وكانت $\vec{b}' = 3\vec{a} + \vec{b}$ للشبيكة الاخرى. أثبت ان مساحة وحدة الخلية الاولى B تكون مساوية لمساحة وحدة الخلية الاولى الاخرى التي تختلف عنها في الشكل؟

الحل:

نعوض عن $\vec{b}'$ في مساحة الخلية الاولى A_2 لتتحقق من انها ستساوي مساحة الخلية $A_1 = |\vec{a} \times \vec{b}|$.

$$A_2 = |\vec{a} \times (3\vec{a} + \vec{b})|$$

ولما كان $\vec{a} \times \vec{a} = 0$ و $\vec{a} \times \vec{b} \neq 0$ فان:

$$A_2 = |\vec{a} \times \vec{b}| = A_1$$

وهو المطلوب.

مثال 1-2

أثبت ان مساحة وحدة الخلية غير الاولى F هي مضاعفات عديدة صحيحة من مساحة الخلية الاولى B في الشكل 1-2؟

الحل:

إذا كانت مساحة وحدة الخلية الاولى $A_1 = |\vec{a} \times \vec{b}|$ وكانت مساحة الخلية غير الاولى $A_2 = |\vec{a} \times \vec{b}'|$ وكانت $\vec{b}' = 2\vec{b}$.

نعوض عن $\vec{b}'$ في مساحة الخلية غير الاولى A_2 لتتحقق من انها تساوي ضعف مساحة الخلية A_1 .

$$A_2 = |\vec{a} \times (2\vec{b})| = 2 |\vec{a} \times \vec{b}| = 2A_1$$

وهو المطلوب.

خلية وينر - سيز Wigner-Seits

وهي بناء هندسي يساعد في دراسة المواد البلورية. وتعرف بانها الخلية الاقرب الى نقطة شبكية عن اية نقاط شبكية اخرى وهي خلية اولية (الشكل 1-4) وتسمى في الشبكية المقلوبة بمنطقة برليون الاولى.

ويتم تعيين هذه الخلية من خلال:

اولاً: اختيار نقطة شبكية معينة كنقطة أصل.

ثانياً: رسم خطوط تربط نقطة الشبكية هذه الى جميع نقاط الشبكية المجاورة لها.

ثالثاً: نرسم عند المنتصف وعمودياً على هذه الخطوط خطوط جديدة (او مستويات في الابعاد الثلاثة).

رابعاً: ان اصغر حجم محصور في هذه الطريقة يمثل خلية وينر-سيز الاولى.

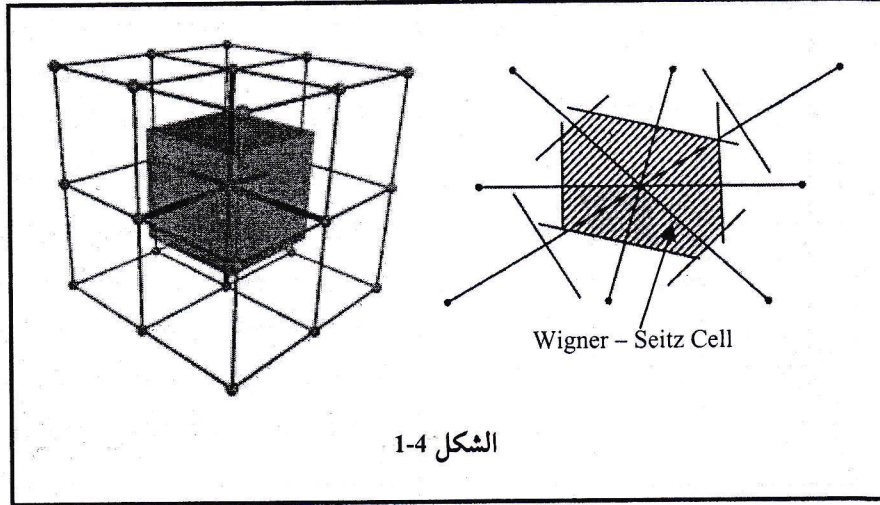
تسم خلية وينر - سيز بالسماوات التالية:

• تكون جميع خلايا وينر - سيز المصاحبة لنقاط الشبكية متماثلة بالحجم والشكل والتوجيه.

• عندما تتجاوز فهي تملأ كامل الفراغ.

• تكون خلية وينر - سيز متعدد الواجه polyhedron.

• تمتلك تماثل نقطة كامل لنقطة شبكيته.

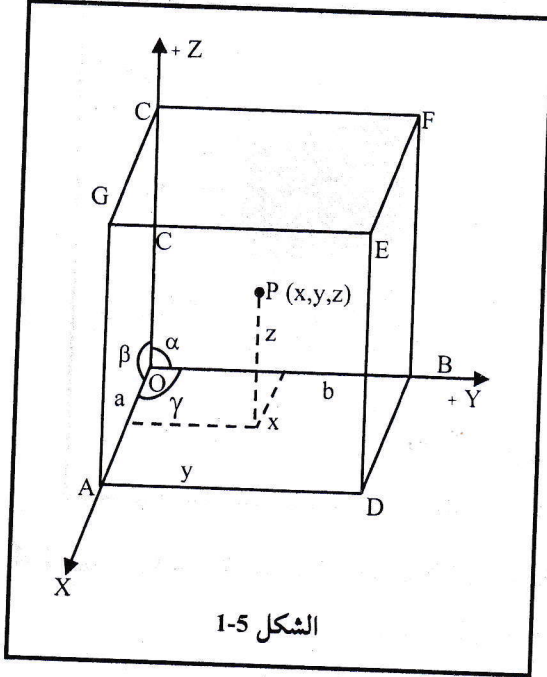


الشكل 1-4

1.4 نظام الاحداثيات في الهندسة البلورية

Co-ordinate system in crystallography

لمجرد اختيار وحدة الخلية فان أضلاعها (أي متجهاتها $\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$) توفر لنا إطار العمل المرجعي، والذي هو محاور الاحداثيات المتعامدة، وان الأطوال a و b و c تمثل أطوال المحاور. دعونا نأخذ مثال وحدة خلية متوازي سطوح مستطيلة يوضحها الشكل 1-5. ان أي نقطة شبكية يمكن ان تكون نقطة أصل النظام المرجعي. وفي الشكل المعروض فأي ركن من اركان وحدة الخلية يمكن ان يأخذ كنقطة أصل. وهنا أخذنا نظام احداثيات من اليمين فإذا تم تدوير اتجاه الاحداثي X الموجب نحو اتجاه الاحداثي Y الموجب خلال زاوية $< 180^\circ$ فان مسمار لولبي أيمن سيتحرك الى الأمام باتجاه الاحداثي Z الموجب. وتمثل الأطوال OA و OB و OC الأطوال المحورية a و b و c حسب الترتيب. وعرفت الزوايا بين المحاور المختلفة بـ α و β و γ بحيث تكون الزاوية α معاكسة للمحور X . وان المستويات $OBFC$ و $OCGA$ و $OADB$ تكون متعامدة مع $\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$ على التعاقب وتسمى اوجه A و B و C .



الشكل 1-5

والان يمكن تعريف أي نقطة في البلورة بالعودة الى هذه المحاور المتعامدة. فبالنسبة لنقطة مثل نقطة $P(x, y, z)$ لا يتم التعبير عن المسافات x و y و z بدلالة المسافات المترية الاعتيادية ولكن يتم التعبير عنها ككسور من a و b و c على التعاقب. لنأخذ مثال على ذلك: لتكن $a = 6.4 \text{ \AA}$ و $b = 4.8 \text{ \AA}$ و $c = 8.2 \text{ \AA}$ ، فاذا كانت $x = 1.6 \text{ \AA}$ و $y = 2.4 \text{ \AA}$ و $z = 4.1 \text{ \AA}$ ، فيتم التعبير عن احداثيات النقطة P على انها $\frac{a}{4}, \frac{b}{2}, \frac{c}{2}$. وللتبسيط يتم إسقاط a و b و c ويكون التعبير عن احداثيات النقطة P كما يأتي $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$.

ومن خاصية الشبكة نستنتج، اذا كان هناك نقطة معينة مثل P في وحدة خلية فان هناك نقاط متماثلة مشابهة موجودة في كل وحدة خلية. وبدلالة نظام الاحداثيات بالنسبة لنقطة x, y, z هنالك نقاط مشابهة عند $x \pm n, y \pm n, z \pm n$ ، اذن n هو أي عدد صحيح. لذلك في حالة نقطة مثل نقطة P تقع النقاط المتماثلة عند $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{5}{4}$ ، $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$ ، $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{4}$ الخ. وجدير بالإشارة الى ان هذه النتائج تكون صحيحة ليس فقط للأنظمة المستطيلة ولكن لأي قيمة للزوايا α و β و γ أو أي نسبة $c:b:a$.

1.5 التماثل في البلورات Symmetry in Crystals

يلعب التماثل دورا مهما في دراسة التركيب البلوري. وفي حياتنا الاعتيادية يمثل التماثل المرآوي اول انطباع لنا عن التماثل. فاجسامنا تمتلك الى حد ما تماثل مرآوي فيه يتمثل النصف الايسر للجسم مع النصف الايمن فيما لو مرت مرآة عبر المحور المركزي لجسمنا. وكذلك نلاحظ امتلاك بناء بعض البيوت هذا التناظر المرآوي بحيث لو مرت مرآة

في وسط الجدار الفاصل بين البيتين لوجدنا ان البيت على هذا الجانب من المرآة يماثل ذلك الذي على الجانب الاخر من المرآة.

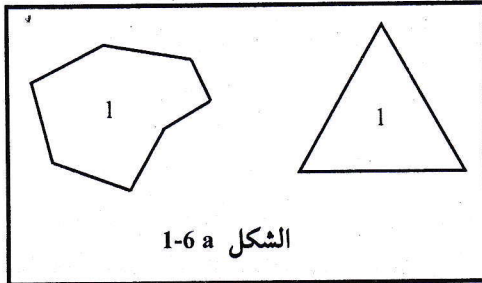
ان نظامية ترتيب الذرات في بلورة تجعل شكلها يظهر انواعاً من التماثل وان عناصر هذه التماثلات او التماثل يتم وصفها بوساطة مؤثرات معينة. وبذلك فان مؤثر التناظر هو تحول ينجز على جسم يتركه دونما تغيير. وان عناصر التماثل المختارة عموماً لتعيين الانواع المختلفة من الانظمة البلورية هي ما يلي:

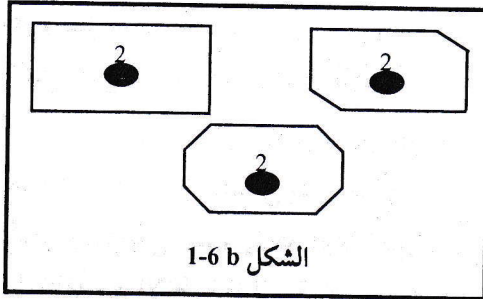
1. محاور الدوران Rotation axis

تمتلك الاجسام الصلبة المنتظمة بعض المحاور التي عندما تعطى تدويراً معيناً حوله يبقى الجسم في موضع مطابق، ويسمى محور الدوران هذا بمحور تماثل. على سبيل المثال، اذا قمت بتدوير مكعب خلال زاوية 90° عن موضعه الاصلي حول خط شاقولي (موازي لحافات التقاطع) يمر خلال مركز الوجه الافقي فسوف لن نتمكن من تمييزه عن موضعه الاصلي. ان كل دوران بزاوية $\pi/2$ تجعل الشكل في تطابق ذاتي او في موضع مطابق. ولما كانت هنالك اربع مواضع مطابقة في دورة واحدة تامة فان هذا يسمى محاور تماثل رباعي الثنية (الطية). ويمكن لنا ان نعمم هذه النتيجة، فاذا جلب دوران بزاوية $2\pi/n$ حول محور معين شكلاً في موضع مطابق لموضعه الاصلي فان هذا المحور يسمى محاور تماثل n -ثنية. وسنستعرض انواع محاور التماثل الدوراني الممكنة في البلورات:

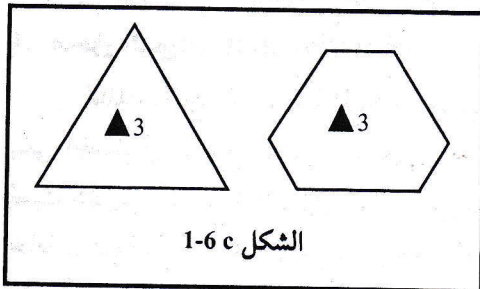
أ. محور التماثل الدوراني ذي الثنية الواحدة: ان الجسم الذي يستلزم دوران بزاوية 360° ($n=1$) لكي يعيد نفسه لموضعه الاصلي لا يمتلك تماثل دورانى ولكن لانه يعيد

نفسه مرة واحدة كل 360° يقال انه يمتلك محاور تماثل دورانى ذي ثنية واحدة وهذا المحور محور عام وان كل بلورة تمتلك عدداً لا نهائياً من هذا المحور الشكل 1-6 a.

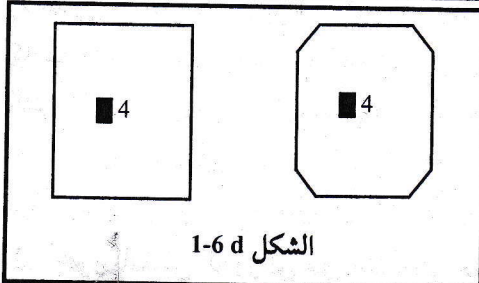




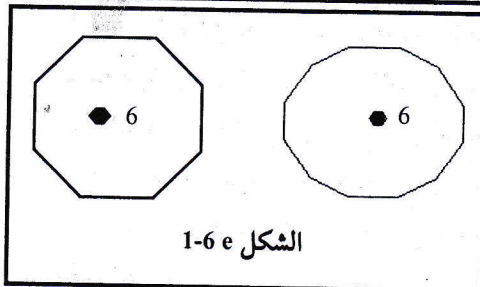
ب. محور التماثل الدوراني ثنائي الشية: اذا ظهر جسم متماثلاً بعد تدويره بزاوية 180° ($n = 2$) فيقال انه يمتلك محور دوران ثنائي الشية $(360 / 180 = 2)$. الشكل 1-6 b.



ج. محور تماثل دورانى ثلاثى الشية: الاجسام التي تعيد نفسها بعد دوران بزاوية 120° ، يقال انها تمتلك محور تماثل دورانى ثلاثى الشية $(360 / 120 = 3)$ وانها تعيد نفسها ثلاث مرات خلال 360° . الشكل 1-6 c.



د. محور تماثل دورانى رباعى الشية: اذا أعاد أي جسم نفسه خلال زاوية 90° من الدوران فانه سيعيد نفسه اربع مرات خلال 360° . الشكل 1-6 d.

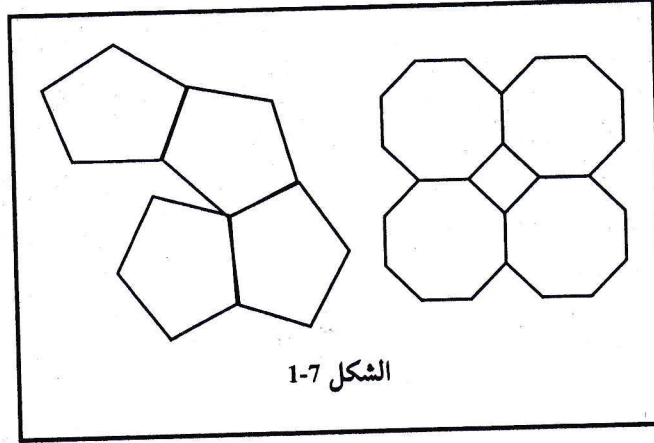


هـ. محور تماثل دورانى سداسى الشية: إذا تسبب دوران بزاوية 60° حول محور ما الجسم لان يعيد نفسه، فانه بذلك يمتلك محور تماثل دورانى سداسى الشية $(360 / 60 = 6)$. الشكل 1-6 e.

وبالرغم مما يبدو امتلاك الاجسام الصلبة محاور دوران خماسية او سباعية او

ثمانية او اكثر، إلا ان ذلك ليس ممكناً في البلورات، والسبب يعود الى ان البلورة ليست فقط جسماً صلباً وانما جسم صلب تترتب فيه الذرات دورياً بثلاثة ابعاد، وان هذه التكرارية المتماثلة للوحدة تحصل فقط عندما نأخذ محاور دوران الشية الواحدة وثنائى الشية وثلاثى الشية ورباعى وسداسى الشية. ومثلما ترى في الشكل 1-7، اذا حاولنا جمع اجسام ذات خمس

ثنيات او ثمانية ثنيات فاننا لن نتمكن من جمعها بطريقة تملأ الفراغ تماماً، وانما سنجد حصول فراغ بينها أو حصول تداخل بعضها مع بعض.

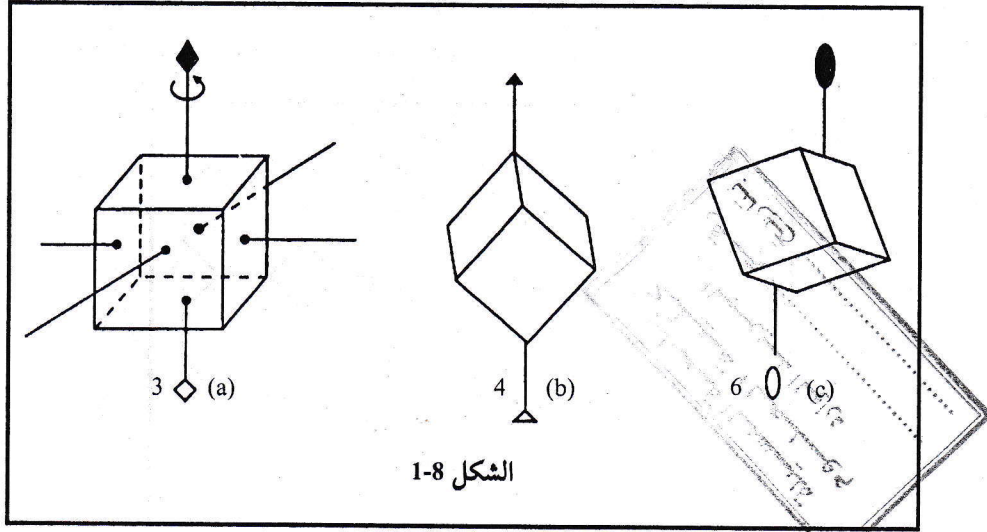


والجدول 1-1 يلخص انواع محاور التماثل الدوراني الممكنة في البلورات:

الجدول 1-1

Name	Alias	Rotation	Symble
monad	One- fold	360	● (or- none)
diad	Two- fold	180	◆
Triad	Three- fold	120	▲
Tetrad	Four- fold	90	◆
hexad	Six- fold	60	◆

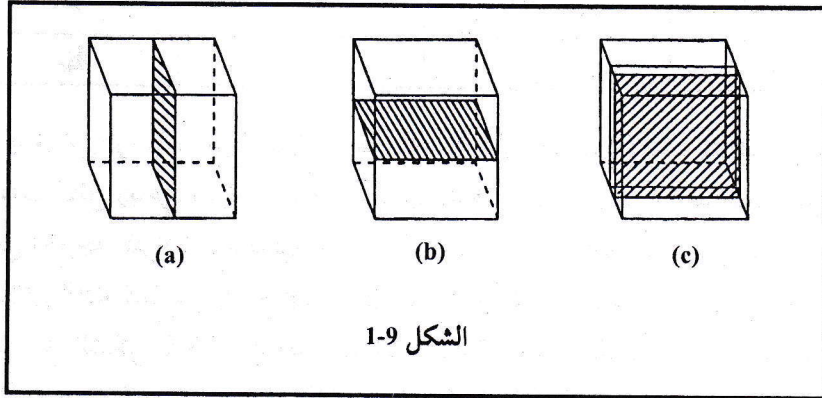
ولغرض توضيح فكرة محور التناظر ذي n - ثنية لناخذ مكعباً. يمتلك المكعب ثلاث محاور ذات تماثل رباعي الثنية وهذا موضح في الشكل 1-8 a، وكل واحد منها عمودي على زوج من الواجه المتوازية للمكعب. وان دوران المكعب حول قطره يظهر محور دوران ذي تماثل ثلاثي الثنية كما هو واضح في الشكل 1-8 b وعدد هذه المحاور اربعة عبر جميع اقطار المكعب. وفي الشكل 1-8 C هنالك ست محاور ثنائية الثنية عندما يتم تدوير المكعب حول الخط الذي يربط نقاط وسط زوج الاضلاع المتعكسة الموازية لبعضها الاخر.



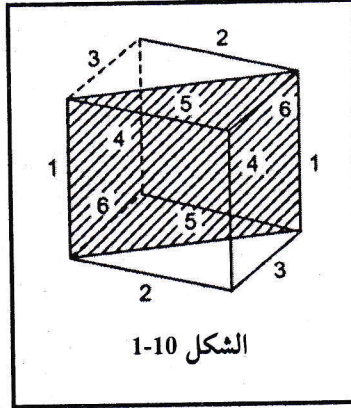
الشكل 1-8

2. مستوى التماثل Plane of symmetry

ان المستوي الذي يمر خلال بلورة ويقسمها الى نصفين بالشكل الذي يكون احد الانصاف مرآة للنصف الاخر يسمى بمستوي التماثل ويرمز لمثل هذا المستوي بالرمز m . في البلورة المكعبة هنالك ثلاث مستويات تماثل كل منها يوازي وجهين متقابلين من المكعب كما هو واضح من الشكل 1-9. والاضلاع الستة للمكعب تظهر مستويات تماثل ثلاثة ايضا كما هو واضح في الشكل 1-10.



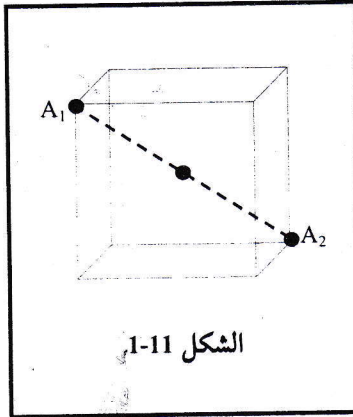
الشكل 1-9



الشكل 1-10

3. مركز الانقلاب Centre of inversion

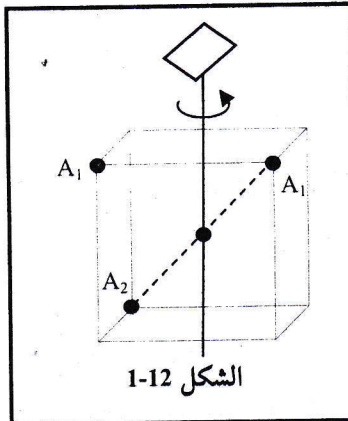
هو تلك النقطة في البلورة التي ان رسم خط مستقيم من اية نقطة (ذرة) A_1 على البلورة خلال المركز وانتج مسافة متساوية من الجانب الاخر لهذا المركز فانه سيلقي نقطة او ذرة مماثلة A_2 (الشكل 1-11). تحليليا بالنسبة لنقطة (z, y, x) هنالك نقطة مماثلة عند $(\bar{z}, \bar{y}, \bar{x})$. ويرمز لمركز الانقلاب بالرمز $\bar{I}$ (يقرا واحد بار).



الشكل 1-11

4. محور دوران-انقلاب Rotation-inversion axis

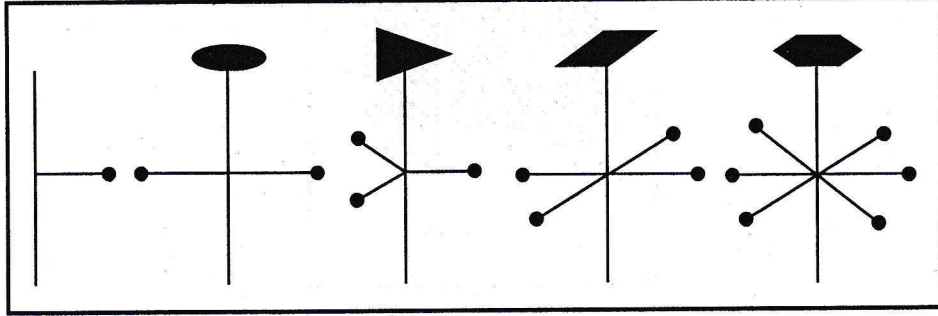
ذلك المحور الذي يترك الترتيب الذري للبلورة دونما تغيير عندما نقوم بتدوير البلورة حوله خلال زاوية $2\pi/n$ radians ($n = 1, 2, 3, 4, 6$) وتنبع بانقلاب حول نقطة شبكية يمر خلالها محور الدوران. ان عنصر التماثل هذا في الحقيقة محور تماثل مركب. يمكن تمثيل محاور دوران - انقلاب كـ $\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$ (وتقرأ واحد بار، اثنين بار، وهكذا) وتعني على التسايع دوران بزاوية $60^\circ, 90^\circ, 120^\circ, 180^\circ, 360^\circ$.



الشكل 1-12

من ثم انقلاب خلال المركز. ولكي نوضح مؤثر الدوران - انقلاب هذا نلاحظ الشكل 1-12 النقطة A_1 تصبح عند موضع النقطة A_1' عند تدويرها بزاوية 90° ثم تصبح في موضع النقطة A_2 عند الانقلاب.

أمثلة عن محاور الدوران الخمسة (ثنائية واحدة - ثنائي الثنية - ثلاثي الثنية ورباعي الثنية وسداسي الثنية):



وجدير بالذكر ان هنالك اختيارات اخرى ممكنة كذلك لمؤثرات التناظر، ولكن تكون جميعها مكافئة للمجموعات الخطية للمؤثرات التي ذكرت اعلاه. وفي الواقع يتم تعيين التماثل الكلي للفضاء حول نقطة بوساطة مجموعة من عناصر تماثل عند تلك النقطة وان جمعا من مجموعة مؤثرات تماثل كهذه عند نقطة تسمى مجموعة نقطة Point group. ان مجموعة النقطة هي تمثيل للطرق التي يمكن خلالها ترتيب عناصر التماثل العيانية بتوافق ذاتي حول نقطة هندسية واحدة ثابتة. ووجد ان هنالك 32 طريقة للقيام بذلك، ومن هنا هنالك 32 مجموعة نقطة.

يمكن تصنيف البلورات التي تعود الى انظمة مختلفة على اساس مجاميع نقطة. وفي البلورة يمكن جمع مؤثرات تماثل مجموعة النقطة مع عناصر التماثل الانتقالي (التي سنشرحها لاحقا) شريطة ان تكون متساوقة. وان مثل هكذا مجاميع تسمى بالمجاميع الفضائية Space groups. وهنالك 230 مجموعة فضائية تظهر بوساطة البلورات.

1.6 عناصر التماثل الانتقالي Translation Symmetry Elements

ان عنصر تماثل مجموعة نقطة ليس فقط يمكن ان يجمع مع عنصر اخر كهذا ليظهر عنصر تماثل هجين، ولكن كذلك يمكن ان يجمع مع الانتقال وهنالك عنصري تماثل انتقال تظهر بوساطة البلورات:

1. مستوى التزحلق Glide plane

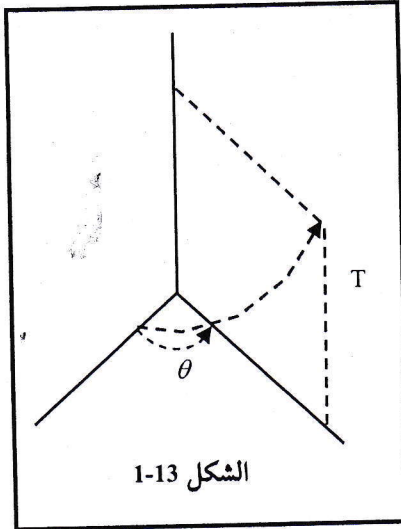
يفضي مستوي تماثل (مستوي مرآة) يتحد مع مؤثر انتقال آني $(\vec{T} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c})$ الى مستوي تزحلق في بلورة ويكون مستوي التزحلق دائما

موازي الى مستوي التماثل. والجدول 1-2 يعرض مستويات التزحلق المختلفة التي تظهر بواسطة بلورات.

الجدول 1-2

الزحف	الرمز	مركبة المتجه $\bar{T}$
زحف محوري	a	$a / 2$
زحف محوري	b	$b / 2$
زحف محوري	c	$c / 2$
زحف قطري	n	$\frac{a}{2} + \frac{b}{2}, \frac{b}{2} + \frac{c}{2} \text{ or } \frac{c}{2} + \frac{a}{2}$
زحف الماس	d	$\frac{a}{4} + \frac{b}{4}, \frac{b}{4} + \frac{c}{4} \text{ or } \frac{c}{4} + \frac{a}{4}$

2. المحور اللولبي Screw axis



يفضي محور دوران يتحد مع انتقال موازي لمحور الدوران الى عنصر تماثل يسمى المحور اللولبي. راجع الشكل 1-13 ويرمز للمحور اللولبي عادة بالرمز P_n ويبين دوران بزاوية θ تساوي $2\pi / P$ وانتقال يعطى بواسطة $\frac{n}{P}$ مضروباً بمتجه الانتقال $\bar{T}$ ، موازيا لمحور الدوران. على سبيل المثال لكي نقوم بمؤثر المحور اللولبي 6_2 .

$P = 6$ و $n = 2$ ومن هنا سنعرف زاوية الدوران $\theta = 2\pi / 6 = 60^\circ$. اما مقدار الانتقال فيكون $n / P = 2 / 6 = 1 / 3$ مضروباً بمتجه الانتقال بموازية محور الدوران ونستمر نعيد هذه العملية حتى نكمل دورة تامة.

ولما كان هنالك فقط خمس محاور دوران ممكنة في بلورة فيمكن ان يكون لدينا فقط 11 محور لولبي يتم تمثيلها كما يأتي: $2_1; 3_1; 3_2; 4_1; 4_2; 4_3; 6_1; 6_2; 6_3; 6_4; 6_5$.

1.7 شبائك برافز Bravais lattices

شبكة برافز هي مجموعة جميع الذرات المتكافئة في بلورة التي تعود لذاتها عندما تزاوح بطول متجه وحدة باتجاه يوازي متجه الوحدة. تكون شبكة برافز والشبكة احادية الذرة متطابقة في العادة ولكن الشبكة متعددة الذرات تتكون من العديد من شبائك برافز المتماثلة هندسيا. وغالبا ما تكون شبكة برافز لبلورة متعددة الذرات اكثر تماثلاً من شبكة البلورة نفسها. فهي تحتوي على جميع عناصر تماثل البلورة وربما تمتلك عناصر تماثل اضافية. على سبيل المثال ربما تمتلك بلورة مستوية تماثل ثلاثي الثنية بينما تمتلك شبكة برافز تمثل سداسي الثنية. و تمتلك شبكة برافز مراكز انقلاب عند جميع المواضع بينما الشبائك البلورية (بالضرورة متعددة الذرات) ليس بالضرورة ان تمتلك عنصر تماثل كهذا.

عندما نعرف شبكة فاننا لا نضع قيودا على الاطوال a و b و c والزوايا α و β و γ بين كل زوج من الاطوال. ومن ناحية المبدأ هنالك عدد غير محدود من اشكال الشبكة الممكنة. ولكن بالاخذ بعناصر التماثل المختلفة بالاعتبار يكون هنالك عدد ثابت من طرق ترتيب النقاط في فضاء الشبكة، بحيث تمتلك كل نقاط الشبكة المحيط نفسه تماما. ان كل من هذه الترتيبات لشبكة فضائية تسمى شبكة برافز. جدير بالذكر ان عبارة شبكة برافز ما هي الا عبارة شائعة لهذه الشبائك وليست تعريفا رسميا، وفي واقع الامر ان فرانكهيم Frankenheim هو اول من اشتق 15 شبكة متوازي اسطح من النقاط في الفضاء. ولكن بعد سنوات ست في عام 1848 اثبت اوغست برافز Auguste Bravais ان العدد الممكن لمثل هذه الشبكات هو 14 وان الشبكة الخامسة عشر هي واحدة من هذه الشبائك الاربعة عشر. ومن هنا اصبحت هذه الشبائك الاربعة عشر تعرف بشبائك برافز وبالطريقة نفسها عرف ان هناك 5 شبائك برافز في بعدين.

شبائك برافز ببعدين

يتم تعريف وحدة الخلية ببعدين بوساطة متجهين أساسيين هما $\vec{a}$ و $\vec{b}$ والزاوية α بينهما. وتعرف الشبكة العامة بان فيها $a \neq b$ وان α عشوائية في الاختيار وتسمى هذه الشبكة بالشبكة المائلة Oblique lattice والشكل a 1-14 يعرض الشبكة المائلة. مثل هذه الشبكة لا تتغير وتبقى كما هي فقط تحت تدوير $2\pi/1$ و $2\pi/2$ حول اية نقطة شبكة. ونوع التماثل لها هو تماثل دوراني ثنائي - الثنية مع المؤثر العام $(2,1)$.

إذا وضعنا بعض القيود على هذا النوع العام من الشبكة فسوف نحصل على أربع أنواع أخرى من الشبائك ببعدين وتكون هذه الشبائك الخاصة ثابتة لا تتغير تحت تدوير $2\pi/3$ أو $2\pi/4$ أو $2\pi/6$ أو تحت انعكاس مرآوي.

عندما تكون $a=b$ والزاوية $\alpha=120^\circ$ ، فالشبكة تسمى شبكة سداسية كما يتضح من الشكل b 1-14، وهذه الشبكة لا تتغير تحت تدوير $2\pi/3$ و $2\pi/6$ حول محور يمر خلال نقطة شبكة وعمودي على المستوي. ولهذه الشبكة تماثل دورانى ثلاثى - الثنية وسداسى - الثنية وتماثل انعكاسى $3m$ و تماثل انعكاسى بمراآت $6mm$.

وعندما تكون $a=b$ والزاوية $\alpha=90^\circ$ فإن هذه الشبكة تسمى بالشبكة المربعة وهي لا تتغير تحت تدوير $2\pi/4$ ويوضحها الشكل C 1-14. يمتلك هذا النوع من الشبائك محاور تماثل دورانية رباعية - الثنية وتماثل انعكاسى بمراآت متعامدين $4mm$. وتظهر حالتي الشبكة الأخرتين عندما نسمح بالانعكاس المرآوي. لتكن وحدة المتجهات الأولية هي:

$$\vec{a} = a_x \hat{i} + a_y \hat{j} \quad \text{و} \quad \vec{b} = b_x \hat{i} + b_y \hat{j} \quad \dots\dots\dots 1-3$$

إذا ان $\hat{i}$ و $\hat{j}$ وحدة متجهات عبر الاحداثي x و y على التعاقب. لو أخذنا الاحداثي x على انه خط الانعكاس فإن $\vec{a}$ و $\vec{b}$ يكون لها انعكاسات عند $\vec{a}'$ و $\vec{b}'$ بالشكل:

$$\vec{a}' = a_x \hat{i} - a_y \hat{j} \quad \text{و} \quad \vec{b}' = b_x \hat{i} - b_y \hat{j} \quad \dots\dots\dots 1-4$$

إذا كانت الشبكة لا تتغير تحت مؤثر الانعكاس فإن $\vec{a}'$ و $\vec{b}'$ يجب ان تكون متجهات شبكة من النوع $n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b}$ إذا ان n_1 و n_2 هي اعداد صحيحة. وهنا لدينا اختيارين:

الاول ان تكون $\vec{a}$ و $\vec{b}$ متعامدة تبادليا وبذلك:

$$\vec{a} = a\hat{i} \quad \text{و} \quad \vec{b} = b\hat{j}$$

وتكون:

$$\vec{a}' = \vec{a} \quad \text{و} \quad \vec{b}' = -\vec{b}$$

وبذلك ستكون الشبكة معرفة على ان فيها $a \neq b$ وان $\alpha = 90^\circ$ ، والتي لا تتغير تحت مؤثر الانعكاس وتسمى هذه الشبكة بالشبكة المستطيلة rectangular lattice. راجع الشكل d 1-14. تمتلك هذه الشبكة مجاميع نقط تماثل هي تماثل انعكاسي $1m$ و $2mm$.

والاختيار الثاني تكون فيه $\vec{b}' = \vec{a} - \vec{b}$ ، أي من المعادلة 1-3:

$$b'_x \hat{i} - b'_y \hat{j} = (a_x - b_x) \hat{i} + (a_y - b_y) \hat{j}$$

بحيث ان:

$$b'_y = a_y - b_y \text{ و } b'_x = a_x - b_x \dots\dots\dots 1-6$$

ولكن بالانعكاس من الاحداثي x لدينا:

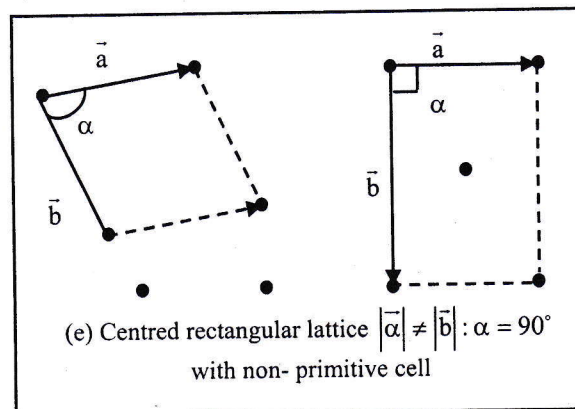
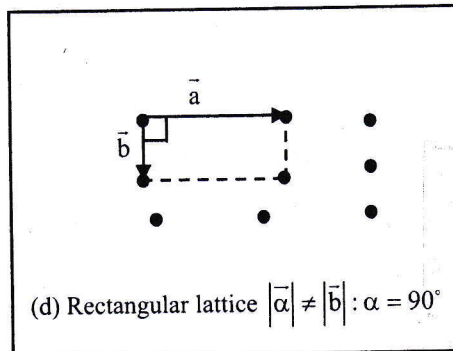
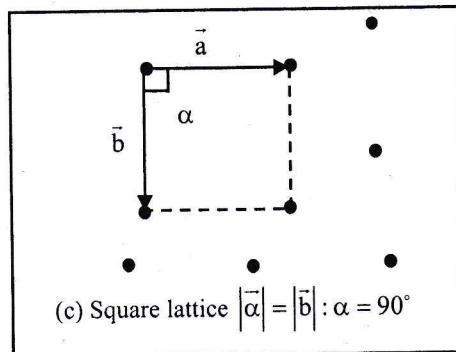
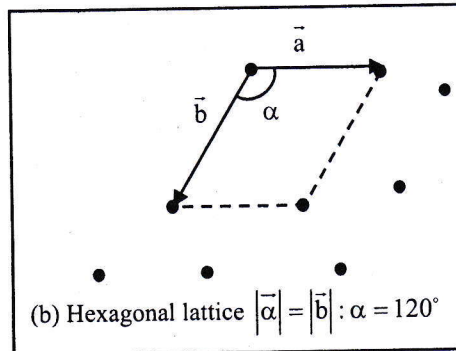
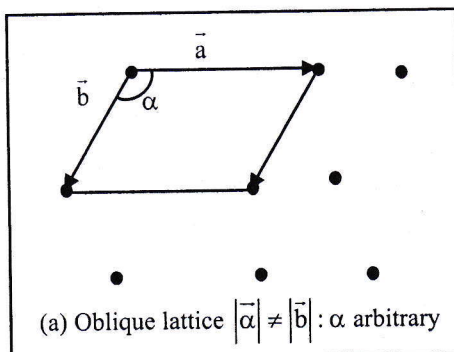
$$b'_y = -b_y \text{ و } b'_x = b_x \dots\dots\dots 1-7$$

وبحل المعادلات 1-6 و 1-7 نحصل على:

$$b_x = \frac{1}{2}a_x \text{ و } a_y = 0$$

وبتعويض هذه القيم في المعادلة 1-4 يكون لدينا:

$$\vec{b}' = \frac{1}{2}a_x \hat{i} - b_y \hat{j} \text{ و } \vec{a}' = a_x \hat{i}$$



الشكل 1-14

او تعرف الشبكة الجديدة ذات تماثل المرآة كما يأتي:

$$\vec{b} = \frac{1}{2}a\hat{i} + b_y\hat{j} \text{ و } \vec{a} = a\hat{i} \dots\dots\dots 1-8$$

وتسمى بالشبكة المستطيلة المركزة centered rectangular lattice التي يعرضها الشكل e 1-14. وتمتلك مجاميع نقطة تماثل هي تماثل انعكاسي 1m و 2mm.

شبائك برافرز بثلاثة ابعاد

ذكرنا ان الشبكة البرافزية هي نظام غير محدد من النقاط يمكن تكوينه بالاعادة الانتقالية لنقطة واحدة وفي الابعاد الثلاثة. أوضح برافرز انه من الممكن وجود 14 طريقة لترتيب النقاط في الفضاء ومن خلالها تستطيع الذرات أو الجزيئات أو الايونات المكونة للبلورة ان ترتب نفسها ضمن هذه الطرائق فقط. تختلف شبائك برافرز الاربعة عشر بعضها عن بعض من حيث:

1. شكل وحدة الخلية.
 2. أنواع التماثل التي تمتلكها.
- يمكن تقسيم الشبائك الاربعة عشر على خمس أنواع أساسية تبعاً لكيفية توزيع نقاط الشبكة على وحدة الخلية وهي:

1. شبائك أولية Primitive lattices : يرمز لها بالرمز P، وتتكون من التجميع أو الازاحة الطبيعية لأحد الشبائك المستوية الخمسة في فضاء ثلاثي الابعاد حيث يكون في كل ركن من اركان أي خلية نقطة شبكية واحدة فقط. وهذه النقطة الواحدة تكون مشتركة لثمانية خلايا متلاصقة وبذلك تكون حصة الخلية الواحدة من هذه النقطة 1/8 نقطة. لذلك فان كل وحدة خلية اساسية أو أولية تحوي نقطة شبكية واحدة فقط.
2. شبائك ممرکز الوجه Face-centered lattices: يرمز لها بالرمز F، وهي شبائك أولية ولكن مع وجود نقطة شبكية في مركز كل وجه من الالوجه الستة للخلية. تحتوي وحدة الخلية اربعة نقاط شبكية حيث تعتبر كل نقطة في مركز وجه مشتركة لخليتين متلاصقتين، لذلك فنصفها يسهم في خلية ما. تحتوي خلية الشبكة ممرکز الالوجه على اكبر عدد ممكن من نقاط الشبكة مقارنة بالانواع الخمسة للشبائك.

3. شبائك مركز الجسم Body-centered lattices: يرمز لها بالرمز I ، تمتاز بوجود نقطة شبكية واحدة في مركز الخلية إضافة الى النقاط الموجودة في اركان الخلية، وبذلك تحتوي على نقطتي شبكية فقط.

4. شبائك مركز الجانب أو القاعدة Base or Side centered lattices: يمتاز هذا النوع من الشبائك بوجود نقطة شبكية واحدة عند كل من مركزي زوج من الواجه الموازية لبعضها فضلاً عن النقاط الموجودة في اركان الخلية. اذا كان هذا الزوج من الواجه يمثل سطحي البداية والنهاية للمتجه $\vec{c}$ تسمى الشبكية شبكية مركزية القاعدة C ، واذا كان هذا الزوج من الواجه يمثل سطحي البداية والنهاية للمتجه $\vec{a}$ وتسمى الشبكية بشبكية مركزية القاعدة A ، واذا كان هذا الزوج من الواجه يمثل سطحي البداية والنهاية للمتجه $\vec{b}$ تسمى الشبكية بشبكية مركزية القاعدة B . تحتوي وحدة الخلية في هذا النوع من الشبائك نقطتي شبكية فقط.

5. شبكية معينة الواجه Rhombohedral lattices: ويرمز لها بالرمز R . ان معين الواجه هو شكل تكون اضلاعه الثلاثة متساوية $a = b = c$ ولكنها ليست متعامدة وفيها تكون $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$.

تتوزع هذه الانواع الخمسة من الشبائك الفضائية على الانظمة البلورية ومنها نحصل على 14 نوعاً من الشبائك البلورية المكونة للانظمة البلورية المختلفة. ويمكن جدولة هذه الشبائك الاربعة عشر على سبعة انظمة مختلفة للمحاور. ويعرض الشكل 1-15 شبائك برافس الاربعة عشر والتي واحدة منها هي شبكية عامة وهي الشبكية ثلاثية الميل (triclinic) والثلاث عشر الباقية هي انواع خاصة.

يمكن لنا الان ان نعرف الانظمة البلورية السبعة:

1. النظام البلوري ثلاثي الميل Triclinic: ويمثل الشبكية العامة كما ذكرنا، ويعرف بان فيه $a \neq b \neq c$ والزوايا فيه $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ ويسمى بنظام ثلاثي الميل وتمتلك هذه الشبكية الحد الأدنى من التماثل وليس لها محور تماثل وتمثل بالرمز P .

2. النظام البلوري أحادي الميل Monoclinic: ويعرف هذا النظام بان فيه $a \neq b \neq c$ والزوايا فيه $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$ وتكون الزاوية β حادة او بين 90° و 180° . هنالك نوعان من هذا النظام احدهما احادي الميل بسيط يرمز له بالرمز P والاخر مركز

القاعدة يمتلك نقطتين عند مراكز زوج الواجه المتعكسة التي يرمز لها بالرمز C ولهذا النظام محور ثنائي الشية فقط.

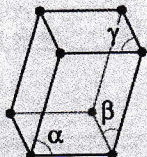
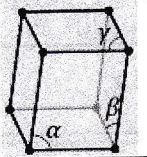
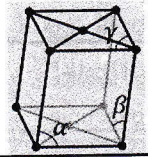
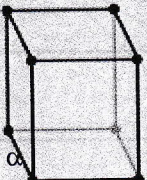
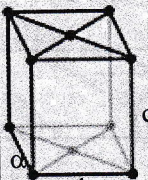
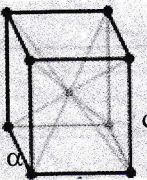
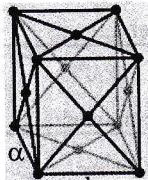
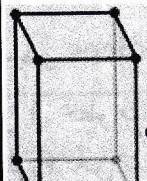
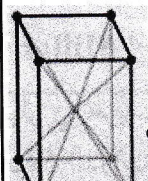
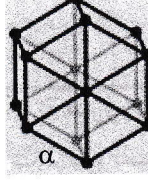
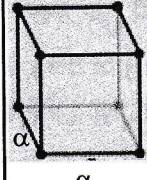
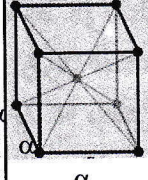
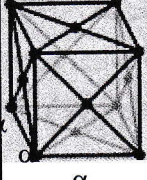
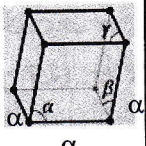
3. النظام البلوري المعيني القائم Orthorhombic: ويتم الحصول على هذا النظام عندما تكون $a \neq b \neq c$ والزوايا $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. لهذا النظام اربع انواع من الشبائك، البسيط P والمركز القاعدة C والمركز الجسم والواجه. الخلية ممرضة الجسم هي خلية بسيطة مع نقطة اضافية عند تقاطع اقطار الجسم ويرمز له بالرمز I . والخلية ممرضة الواجه هي كذلك خلية بسيطة مع نقاط اضافية عند مراكز ازواج الواجه الثلاثة، أي جميع الواجه الستة ممرضة ويرمز لمثل هذه الشبكة بالرمز F وتمتلك ثلاث محاور ثنائية-الثنية متعامدة تبادلياً.

4. النظام البلوري الرباعي Tetragonal: ويعرف هذا النظام البلوري بان فيه $a = b \neq c$ والزوايا $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. يمكن ان تكون الخلية الرباعية بسيطة P أو ممرضة الجسم I .

5. النظام البلوري الثلاثي Trigonal: نحصل على هذا النظام البلوري عندما تكون $a = b = c$ و الزوايا فيه $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ < 120^\circ$ ويسمى كذلك نظام معيني rhombohedral لامكانية اشتقاقه بوساطة البدء من خلية مكعبة وضغطها (أو أستطالتها) عبر قطرها. ويمتلك هذا النظام نقطة شبكية واحدة فقط، فهو نظام بسيط يرمز له بالرمز P وله محور ثلاثي واحد وهذا المحور الفريد يميل بالتساوي عن المحاور الثلاثة.

6. النظام البلوري المكعب Cubic: ويعرف بان فيه $a = b = c$ وان $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. وله ثلاث انواع من الشبائك هي المكعب البسيط ($s.c.$) ويرمز له بالرمز P والمكعب ممرض الجسم ($b.c.c.$) ويرمز له بالرمز I والمكعب ممرض الواجه ($f.c.c.$) ويرمز له بالرمز F . ولهذا النظام اربع محاور رباعية.

7. النظام البلوري السداسي Hexagonal: ويتميز بان فيه $a = b \neq c$ وان $\alpha = \beta = 90^\circ$; $\gamma = 120^\circ$. في هذا النظام هنالك فقط نقطة شبكية واحدة ويرمز له بالرمز P . له محور سداسي واحد وهذا المحور الفريد يكون قائم الزاوية مع بقية المحورين.

Crystal system	Bravais lattices			
<u>triclinic</u>	P		P	C
	$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$		$\alpha \neq 90^\circ$ $\beta, \gamma = 90^\circ$	$\alpha \neq 90^\circ$ $\beta, \gamma = 90^\circ$
		<u>monoclinic</u>		
<u>orthorhombic</u>	P	C	I	F
	$a \neq b \neq c$	$a \neq b \neq c$	$a \neq b \neq c$	$a \neq b \neq c$
				
<u>tetragonal</u>	P	I		A
	$a \neq c$	$a \neq c$		$a \neq c$
			<u>hexagonal</u>	
<u>cubic</u>	P	I	F	
	$a = b = c$	$a = b = c$	$a = b = c$	
				<u>rhombohedral (trigonal)</u>
				$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$ 

الشكل 1-15

يعرض الجدول 1-3 حجم مختلف وحدات الخلية.

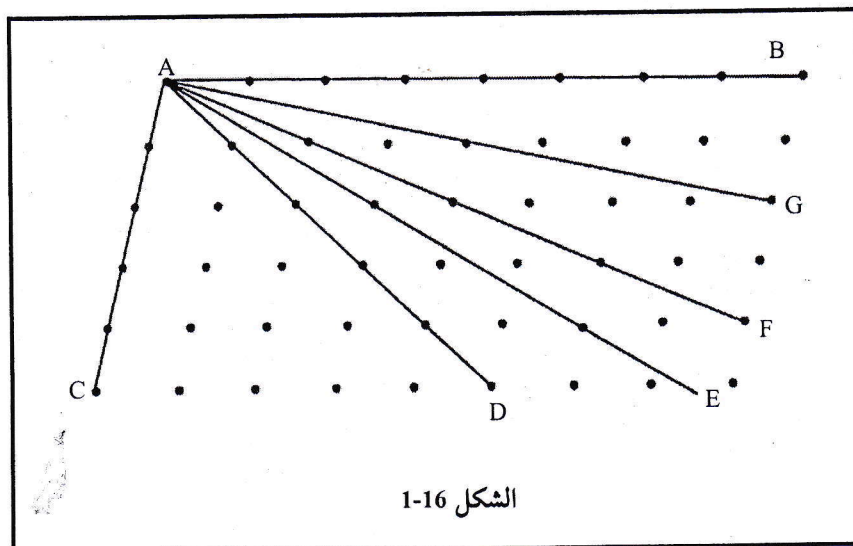
الجدول 1-3

النظام البلوري Crystal system	الحجم Volume
ثلاثي الميل Triclinic	$abc \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}$
احادي الميل Monoclinic	$abc \sin \alpha$
معيي قائم Orthorhombic	abc
رباعي Tetragonal	a^2c
ثلاثي Rhombohedral	$a^3 \sqrt{1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha}$
سداسي Hexagonal	$\frac{3\sqrt{3}a^2c}{2}$
مكعب Cubic	a^3

1.8 معاملات ميلر Miller indices

قبل الخوض في خطوات ميلر في تعريف مستويات البلورات يكون ضروريا أن نأخذ فكرة عن أوجه البلورة. نحن نعرف ان الذرات أو الجزيئات أو الايونات ترتب نفسها بانتظام وتكرارية في البلورة بالابعاد الثلاثة، وان هذه النظامية تمتد عبر مسافات طويلة مقارنة مع وحدة التكرارية. لنأخذ أولا الحالة الموضحة في الشكل 1-16 لشبكة ببعدين. تعتبر الخطوط الموازية الى AB و AC هي الخطوط التي تمتلك أعلى كثافة من النقاط عليها، أما بقية الخطوط مثل AD و AE والى اخرها تمتلك كثافة نقاط أقل. ان هذه الخطوط عندما نتعامل مع الشبكة ثلاثية الابعاد تصبح مستويات (عمودية على سطح الورقة). ان نمو البلورة يحدث بطريقة تكون فيها المستويات ذات الاكثر كثافة عند الواجه الطبيعية للبلورة، ومن هنا نستنتج ببساطة ان اوجه البلورة الموازية الى AB و AC ستحمل العلاقة الزاوية نفسها كما تلك التي بين مستويات الشبكة AB و AC . وهذا يعني ان الزوايا البينية بين

الوجوه ستبقى بذات العلاقة مع مستويات الشبكة AB و AC . ولما كانت الواجه موازية الى مستويات معرفة من نقاط الشبكة فان الزوايا بين الواجه تكون ثابتة في البلورات المختلفة للمادة نفسها. ان التغيرات في الابعاد الواقعية للبلورات والتطور النسبي للواجه لاي مادة معينة لا يغير الزوايا بين الواجه، شريطة ان يكون نوع الواجه نفسه تحت المناقشة. ولما كانت كل مستويات الشبكة الموازية الى AB (وكذلك بالطريقة نفسها بالنسبة للمستويات الموازية الى AC) متكافئة فتكون كافية لتعطي اتجاه المستويات بدون اعطاء مواقعها في الفضاء.



لكي نعرف اتجاه مستوي يتطلب تعريف محاور الاحداثيات اولا بدلالة الاتجاه وانتقال الوحدة. اذا علمنا نظامية ترتيب نقاط الشبكة يصبح من السهل اختيار اكثر المجاميع ملائمة لمحاور الاحداثيات ووحدة الخلية. لناخذ المستويات التي اثارها هو AB والمستويات التي اثارها هو AC والمستويات BAC (مستوي الورقة). ان هذه المستويات تقسم كامل الفضاء ضمن البلورة الى عدد كبير من متوازيات السطوح كلها متشابهة في الشكل والابعاد. ان اطوال اضلاع هذه الاسطح المتوازية يعطي معاملات الشبكة نفسها عبر محاور الاحداثيات الثلاثة، وكذلك تعرف الزوايا α و β و γ المتضمنة بوساطة الاحداثيات. ان مقدار a و b و c و α و β و γ تعد صفات مادة معينة. جدير بالذكر ان اختيار ثلاث مجاميع من المستويات المتقاطعة يعد أمرا اعتباطيا الى حد بعيد ولكن الاختيار المناسب

سيفضي الى ان يكون التماثل الواقع تحت البحث افضل وبذلك يفضل الاختيار المناسب لهذه المجاميع.

يمكن تحديد موضع وتوجيه orientation مستوي بلورة بوساطة أي ثلاث نقاط ليست على استقامة واحدة في المستوي. واذا كانت هذه النقاط تقع على محاور بلورة فيمكن تعيين المستوي من خلال معرفة مواضع النقاط عبر المحاور بدلالة ثوابت الشبكة. ولكن عند تحليل التركيب يكون اكثر الطرق فائدة في تعيين توجيه مستوي هي تلك التي اقترحها ميلر Miller في تعريف مستوي بوساطة ثلاث اعداد صحيحة تشتق بطريقة معينة من خلال تقاطعاتها بوساطة المستوي المعني بالدراسة. وتسمى الاعداد الثلاثة الصحيحة التي تعرف المستوي بمعاملات ميلر للمستوي ويتم اشتقاقها تبعا للخطوات التالية:

1. جد التقاطعات التي يصنعها المستوي على المحاور $\bar{a}$, $\bar{b}$, $\bar{c}$ وعبر عنها كمضاعفات لوحدة المسافات عبر المحاور الثلاثة.
 2. خذ مقلوب هذه الأعداد.
 3. نأخذ المضاعف المشترك الأصغر للمقامات ونضربه بهذه الأعداد لنحصل على اصغر ثلاث اعداد تمتلك النسبة نفسها.
- يتم حصر النتيجة بين قوسين بدون ان نضع فوارز بين الأعداد. نعبر عن معاملات ميلر بالصورة $(hk\ell)$.

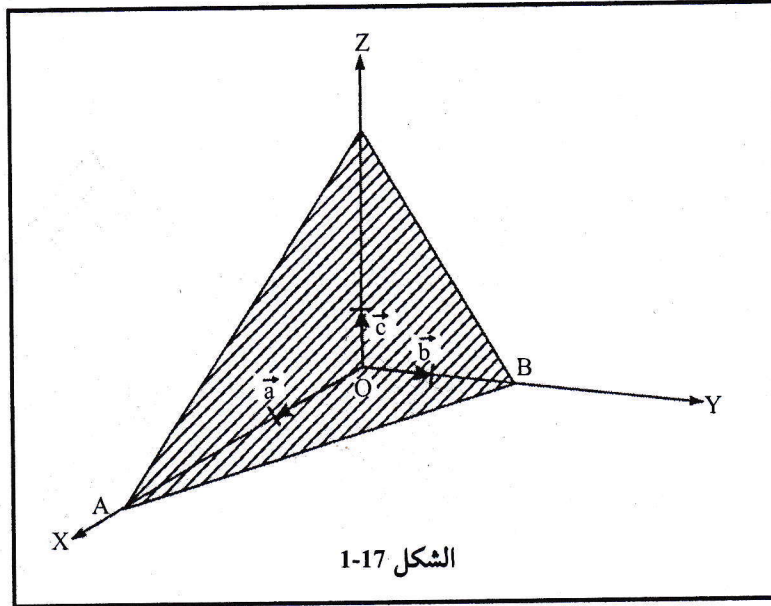
مثال 1-3

اذا قطع مستوي المحاور $\bar{c}$ و $\bar{b}$ و $\bar{a}$ عند $4c$ و $2b$ و $3a$ على التعاقب. لاحظ الشكل 1-17. حدد معاملات ميلر لهذا المستوي.

الحل:

$$\text{نأخذ مقلوب هذه الأعداد وهي: } \frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$$

ونأخذ المضاعف المشترك الأصغر للمقامات وهو 12 ونضربه بهذه الأعداد لنحصل على اصغر الأعداد التي لها النسبة نفسها وستكون هي 4, 6, 3. وبذلك يتم تمثيل معاملات ميلر للمستوي تمثل كما يلي: (463).

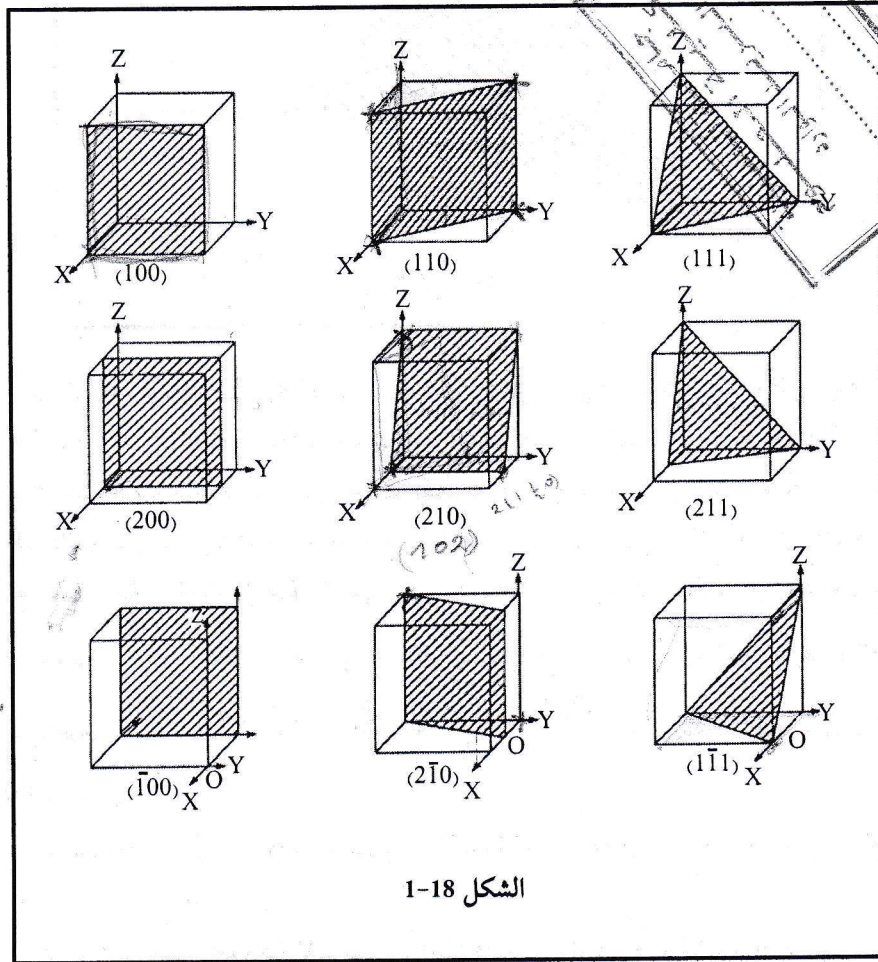


ان كل المستويات الموازية لبعضها البعض، والتي بذلك تمتلك التوجيه نفسه بالنسبة للمحاور الثلاثة تعود لعائلة المستويات نفسها ويتم تمثيلها بوساطة معاملات ميلر نفسها. ان معاملات ميلر بذلك هي ليست فقط تقوم بتحديد مستوي منفرد ولكن مجموعة او عائلة كاملة من المستويات ذات التوجيه المتشابه. ومن بين كامل عائلة المستويات هنالك واحد منها يمر خلال نقطة الاصل نفسها. على أي حال، سيكون هنالك واحد منها هو الاقرب لنقطة الاصل المختارة وسيقطع التقاطعات $\frac{a}{h}, \frac{b}{k}, \frac{c}{l}$. وبقيّة اعضاء العائلة تقطع التقاطعات $\frac{2a}{h}, \frac{2b}{k}, \frac{2c}{l}; \frac{3a}{h}, \frac{3b}{k}, \frac{3c}{l}; \dots, \frac{na}{h}, \frac{nb}{k}, \frac{nc}{l}$ بحيث تبقى النسب بين التقاطعات نفسها.

الشكل 1-18 يعرض بعض مستويات البلورة الموصوفة في وحدة خلية مع معاملات ميلر لها.

ربما يستدل على مجموعة المستويات المتكافئة بالتماثل او متكافئة بقدر ما يتعلق بالمسافات البينية بين المستويات وكثافة الذرات بوساطة الأقواس المعقدة، أي أقواس حول المعاملات بهذا الشكل $\{hkl\}$. الشكل 1-18 يعرض مستويات مختلفة داخل خلية بلورة. المستوي الذي يقطع الاحداثي X عند وحدة مسافة ويكون موازي للاحداثي Y

والاحداثي Z يقطع التقاطعات $1a, \infty, \infty$ وان معاملات ميلر لهذا المستوي هي (100) ويسمى هذا المستوي بمستوي A أو المستوي YZ أو المستوي bc . وبالطريقة نفسها معاملات المستويات B و C هي (010) و (001) على التعاقب. اذا قطع مستوي احداثي من الطرف السالب لنقطة الأصل يكون المعامل الخاص به سالباً ويؤشر بواسطة خط فوق المعامل $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ والشكل 1-18 يعرض المستويات (100) و $(2\bar{1}0)$ و $(1\bar{1}1)$.



الشكل 1-18

بالنسبة للبلورات ذات التماثل العالي ربما ترتبط مستويات معينة بواسطة التماثل وبذلك تكون متكافئة من وجهة النظر الذرية. بذلك، بالنسبة لبلورات ذات تماثل مكعي تكون فيها معاملات وحدة الخلية a و b و c متساوية بالمقدار ومتعامدة تبادلياً، فان أي

تحويل أو تغيير لاشارة المعاملات ينتج مستوي مكافئ. وعلى سبيل المثال المستويات (100) و $(\bar{1}00)$ مستويات متكافئة وكذلك المستوي (111) يكافئ المستوي $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ والمستوي (210) يكافئ المستوي $(2\bar{1}0)$.

ملاحظة

من خلال ملاحظة عامة لحيود الاشعة السينية كانت شدة الانعكاس عن $(hk\ell)$ و $(\bar{h}\bar{k}\bar{\ell})$ نفسها وهذا معناه ان مقدار الشدة المشتتة عن مستويات $(hk\ell)$ من احد جوانب نقطة الاصل هي نفسها من الجانب المعاكس ويسمى هذا التعميم بقانون فريدل Friedel's law. ورغم ان هنالك استثناءات له ولكن في العموم تمتلك انماط حيود الاشعة السينية مركز تماثل بالاضافة الى أي مما تمتلكه البلورة نفسها من عناصر تماثل.

ملاحظة

لوحظ بشكل شائع ان معاملات $(hk\ell)$ لوجه بلورة تكون اعداد صحيحة صغيرة (موجبة أو سالبة) ونادرا ما تكون اكبر من ثلاثة. وان ارقام اكبر من 5 تكون شحيحة للغاية في البلورات الطبيعية وتسمى هذه الملاحظة العملية بقانون المعاملات المعقولة law of rational indices ويتأتى هذا القانون ببساطة من فكرة برافز، انه في العموم وعند نمو البلورة فانه فقط تلك المستويات التي تحدث كوجوه طبيعية تمتلك كثافة عالية من نقاط الشبكة وغالباً ما تسمى وجوه كهذه بمستويات بسيطة وتمتلك معاملات ميلر واطئة.

1.9 معاملات الاتجاه في البلورة Indices of a direction in a crystal

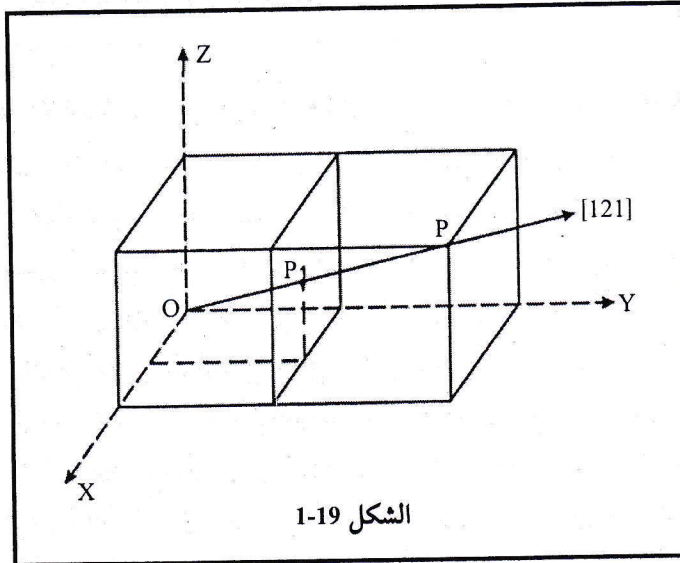
لكي نثبت معاملات الاتجاه علينا ان نحرك نقطة من نقطة الاصل عبر ذلك الاتجاه حتى تصل اول نقطة شبكة احداثياتها ua, vb, wc وستكون معاملات الاتجاه هي u, v, w وتكتب بين أقواس مربعة دون فوارز $[uvw]$. وتكتب معاملات الاتجاه $\vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$ في البلورة كما يأتي $[uvw]$ ، ولتعريف $[uvw]$ نعرف معاملات ميلر لمستوي فنقول: ان معاملات الاتجاه $[uvw]$ في بلورة هي مجموعة اصغر اعداد صحيحة تمتلك نسبة مركبات المتجه في الاتجاه المطلوب تعود للاحداثي. بعبارة اخرى ان u, v, w هي احداثيات نقطة شبكة الاولى على المتجه، وستكون هذه هي اصغر الاعداد الصحيحة التي تتم الحركة من نقطة الاصل. وان نقاط الشبكة التي بعدها على هذا الاتجاه هي تلك التي تملك احداثيات $2u, 2v, 2w; 3u, 3v, 3w$ وهكذا..

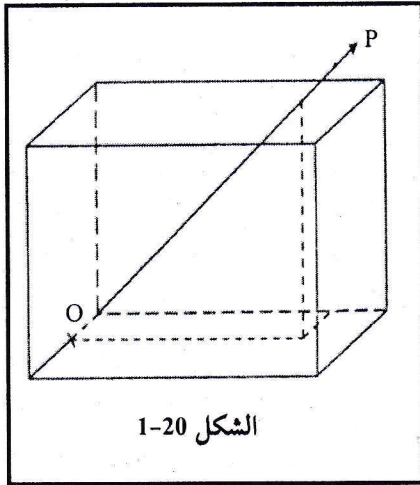
المحور a هو اتجاه $[100]$ بينما المحور $-a$ اتجاهه $[\bar{1}00]$ وبالطريقة نفسها الاتجاه الموجب والسالب للمحور b هما $[010]$ و $[0\bar{1}0]$ بينما الاتجاهات الموجبة والسالبة للمحور c هي $[001]$ و $[00\bar{1}]$. وبالطريقة نفسها الوجه القطري للمستوي ab يمتلك المعاملات $[110]$ ومعاملات الوجه القطري للمستويات bc و ca هي $[011]$ و $[101]$ حسب الترتيب.

ولما كانت مستويات بلورة ذات معاملات ميلر مختلفة متكافئة فيجب ان تكون الاعمدة على هذه المستويات المتكافئة متكافئة. ومن هنا تكون الاتجاهات ذات المعاملات المختلفة متكافئة. ان المجموعة الكاملة للاتجاهات المتكافئة التي لها $[uvw]$ عضواً يعبر عنها بواسطة ضم المعاملات بالشكل $\langle uvw \rangle$. وان اقطار جسم البلورة المكعبة المختلفة هي $[111]$ و $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ و $[1\bar{1}\bar{1}]$ و $[\bar{1}1\bar{1}]$ و $[\bar{1}\bar{1}1]$ و $[1\bar{1}1]$ و $[\bar{1}11]$ و $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ وكلها متكافئة وتمثل كما يلي $\langle 111 \rangle$. في الحقيقة في بلورة مكعبة يكون اتجاه $[uvw]$ عمودياً على المستوي ذي معاملات ميلر (uvw) كنتيجة للتماثل وفي هذه الحالة يكون التمييز بين نوعي الرموز غير مهما ولكنه ليس حقيقياً في اشكال البلورة الاخرى.

لكي نوضح الان كيفية رسم اتجاه $[uvw]$ سنأخذ الاتجاه $[121]$.

تبعاً لما قمنا به اعلاه علينا تحريك المسافات $\bar{a}$ و $2\bar{b}$ و $\bar{c}$ كي تصل النقطة P كما هو واضح في الشكل 1-19. وبعدها سيعطينا OP الاتجاه المطلوب.





يمكننا ان نحصل على الاتجاه نفسه عند التحريك ضمن وحدة خلية منفردة اذا قمنا بتقسيم الاعداد بوساطة 2 أو ان تكون لدينا المعاملات $\left[\frac{1}{2}1\frac{1}{2}\right]$. احداثيات P_i هي $\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}$ وعند مد OP_i يمر خلال P باحداثيات هي $1, 2, 1$. وعموما اذا كانت u, v, w بوساطة p, q, r هي اعداد صحيحة واذا قمنا بقسمة u, v, w بوساطة اكبر عدد بين p, q, r ولنقل الان هو r فيكون

لدينا $u = \frac{p}{r}a, v = \frac{q}{r}b, w = \frac{r}{r}c$ لذلك بوساطة الحركة خلال $\frac{p}{r}$ عبر الاحداثي X وخلال $\frac{q}{r}$ عبر الاحداثي Y وخلال c عبر الاحداثي Z ضمن وحدة خلية منفردة يمكننا الحصول على الاتجاه $[uvw]$. على سبيل المثال يمكن كتابة الاتجاه $[234]$ على انه $\left[\frac{1}{2}\frac{3}{4}1\right]$ ويرسم بسهولة في وحدة خلية منفردة كما هو في الشكل 1-20.

1.10 المسافات البينية بين المستويات في البلورة

Interplaner spacing in crystals

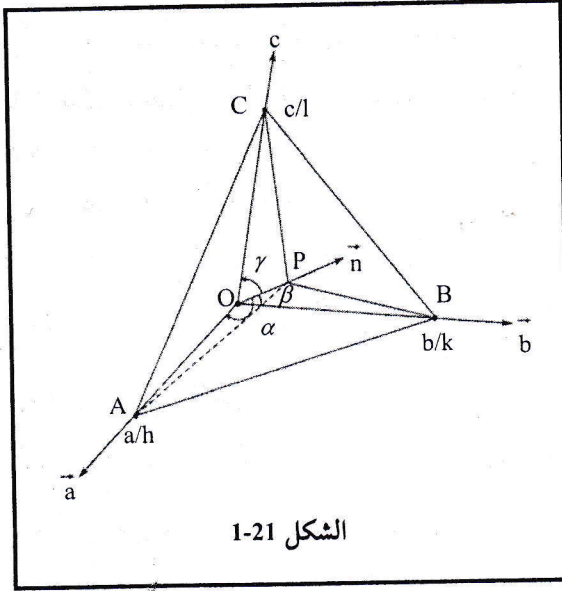
في البلورة تتكون عائلة مستويات (hkl) من عدد كبير من مستويات موازية لبعضها البعض الاخر وتفصل بينها مسافات متساوية، ويمكن تعيين هذه المسافة البينية بين المستويات المتجاورة لمجموعة مستويات (hkl) بأخذ أي نقطة شبكية كنقطة أصل وحساب المسافة العمودية بين نقطة الاصل هذه واقرب مستوي الى نقطة الاصل. وان التقاطعات التي تقطع بوساطة هذا المستوي على المحاور هي a/h و b/k و c/l كما يتضح ذلك في الشكل 1-21. اذا كان $\vec{n}$ يمثل وحدة المتجه العمودي على هذا المستوي وان P نقطة على هذا المستوي والعمود $\vec{n}$ تكون المسافة البينية بين المستويات بالنسبة الى مستويات (hkl) هي:

$$d_{hkl} = \frac{a}{h} \cos \alpha = \frac{\vec{n} \cdot \vec{a}}{h}$$

$$d_{hk\ell} = \frac{b}{k} \cos \beta = \frac{\vec{n} \cdot \vec{b}}{k} \dots\dots\dots 1-9$$

$$d_{hk\ell} = \frac{c}{\ell} \cos \gamma = \frac{\vec{n} \cdot \vec{c}}{\ell}$$

ان $\cos \alpha$ و $\cos \beta$ و $\cos \gamma$ هي اتجاهات جيب تمام العمود.



الشكل 1-21

يمكن ان نحصل على علاقة $d_{hk\ell}$ لانظمة البلورات السبعة بدلالة معاملات المستويات وثوابت الشبكة $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ ان علاقة الحالة العامة لنظام الميل الثلاثي معقدة جداً، واننا سوف نشق العلاقة بالنسبة للنظام المتعامد. ولهذا النظام سنأخذ الاحداثيات x و y و z عبر الاتجاهات $\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$ على التعاقب. ومن ثم سيكون جمع مربع اتجاهات جيب التمام للعمود $\vec{n}$ مساوياً I . لدينا من المعادلة 1-9:

$$\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = \frac{h^2 d_{hk\ell}^2}{a^2} + \frac{k^2 d_{hk\ell}^2}{b^2} + \frac{\ell^2 d_{hk\ell}^2}{c^2} = I$$

أو:

$$\frac{I}{d_{hk\ell}^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{\ell^2}{c^2} \dots\dots\dots 1-10$$

ومعادلة المستوي $(hk\ell)$ هي:

$$\frac{x}{a/h} + \frac{y}{b/k} + \frac{z}{c/\ell} = I$$

ولما كانت هذه المعادلة من الشكل:

$$f(x, y, z) = \text{Constant}$$

$$\vec{\Delta f} = \frac{h}{a} \hat{i} + \frac{k}{b} \hat{j} + \frac{\ell}{c} \hat{k}$$

اذ ان $\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$ هي وحدة المتجهات الاعتيادية عبر الاحداثيات Z و y و x حسب الترتيب. وكذلك يجب ان تكون $\vec{\Delta f}$ متجه عمودي على هذا المستوي. يعطى وحدة المتجه العمودي بوساطة:

$$\vec{n} = \frac{\vec{\Delta f}}{|\vec{\Delta f}|} = \frac{(h/a)\hat{i} + (k/b)\hat{j} + (\ell/c)\hat{k}}{[(h/a)^2 + (k/b)^2 + (\ell/c)^2]^{1/2}}$$

ومن المعادلة 1-9 نحصل على:

$$d_{hk\ell} = \frac{\vec{n} \cdot \vec{a}}{h} = \frac{1}{h} \frac{(h/a)a}{[(h/a)^2 + (k/b)^2 + (\ell/c)^2]^{1/2}}$$

أو تكتب:

$$\frac{1}{d_{hk\ell}^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{\ell^2}{c^2}$$

1. بالنسبة للنظام ثلاثي الميل (العام) سنكتب العلاقة فقط دون اثبات:

$$\frac{1}{d_{hk\ell}^2} = \frac{\begin{vmatrix} \frac{h}{a} & \cos \gamma & \cos \beta \\ \frac{h}{a} & \frac{k}{b} & 1 \\ \frac{\ell}{c} & \cos \alpha & 1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 1 & \frac{h}{a} & \cos \beta \\ \frac{k}{b} & \cos \lambda & \cos \alpha \\ \cos \beta & \frac{\ell}{c} & 1 \end{vmatrix} + \frac{\ell}{c} \begin{vmatrix} 1 & \cos \gamma & \frac{h}{a} \\ \cos \gamma & 1 & \frac{k}{b} \\ \cos \beta & \cos \alpha & \frac{\ell}{c} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & \cos \gamma & \cos \beta \\ \cos \gamma & 1 & \cos \alpha \\ \cos \beta & \cos \alpha & 1 \end{vmatrix}} \quad \text{..1-11}$$

وهذه النتيجة التي تعرضها المعادلة 1-11 الخاصة بنظام البلورة العام يمكن تبسيطها بالنسبة للأنظمة البلورية الاخرى.

2. بالنسبة للنظام البلوري احادي الميل: نعروض في المعادلة 1-11 القيم $a \neq b \neq c$ و $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$ ليكون لدينا:

$$\frac{1}{d_{hk\ell}^2} = \frac{h^2}{a^2 \sin^2 \beta} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{\ell^2}{ac \sin^2 \beta} \dots\dots\dots 1-12$$

3. بالنسبة للنظام البلوري المعيني القائم: نعوض $a \neq b \neq c$ و $\alpha = \gamma = \beta = 90^\circ$ في المعادلة 1-11 أو نعوض عن $\beta = 90^\circ$ في المعادلة 1-12 لنحصل على:

$$\frac{1}{d_{hk\ell}^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{\ell^2}{c^2}$$

وهذه تشبه المعادلة 1-10 التي حصلنا عليها قبل ذلك.

4. بالنسبة للنظام البلوري الرباعي: نعوض $a = b \neq c$ و $\alpha = \gamma = \beta = 90^\circ$ في المعادلة 1-11 أو نضع فقط $a = b$ في المعادلة اعلاه ونحصل على:

$$\frac{1}{d_{hk\ell}^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{\ell^2}{c^2}$$

5. وبالنسبة للنظام البلوري المكعب: نعوض $a = b = c$ و $\alpha = \gamma = \beta = 90^\circ$ في المعادلة 1-11 أو نعوض فقط $a = c$ في المعادلة 1-13 ونحصل على:

$$\frac{1}{d_{hk\ell}^2} = \frac{h^2 + k^2 + \ell^2}{a^2} \dots\dots\dots 1-13$$

6. وبالنسبة للنظام الثلاثي: نعوض $a = b = c$ و $\alpha = \gamma = \beta \neq 90^\circ < 120^\circ$ في المعادلة 1-11 ونحصل على:

$$\frac{1}{d_{hk\ell}^2} = \frac{(h^2 + k^2 + \ell^2) \sin^2 \alpha + 2(hk + k\ell + \ell h)(\cos^2 \alpha - \cos \alpha)}{a^2 (1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha)}$$

7. واخيرا بالنسبة للنظام السداسي: نعوض $a = b \neq c$ و $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$ في المعادلة 1-11 لنحصل على:

$$\frac{1}{d_{hk\ell}^2} = \frac{4}{3} \frac{h^2 + k^2 + hk}{a^2} + \frac{\ell^2}{c^2} \dots\dots\dots 1-16$$

الزوايا بين المستويات والاتجاهات

يمكن ان نحصل على العلاقات التي تعطينا الزاوية θ بين مستويين $(h_1 k_1 \ell_1)$ و $(h_2 k_2 \ell_2)$ بالنسبة الى النظام البلوري المعيني القائم من خلال:

$$\cos \theta = \frac{h_1 h_2 \frac{bc}{a} + k_1 k_2 \frac{ca}{b} + \ell_1 \ell_2 \frac{ab}{c}}{\sqrt{\left(h_1^2 \frac{bc}{a} + k_1^2 \frac{ca}{b} + \ell_1^2 \frac{ab}{c} \right) \left(h_2^2 \frac{bc}{a} + k_2^2 \frac{ca}{b} + \ell_2^2 \frac{ab}{c} \right)}} \dots\dots\dots 1-17$$

وبالنسبة للنظام الرباعي نعوض عن $a = b$ في المعادلة اعلاه ونحصل على:

$$\cos \theta = \frac{(h_1 h_2 + k_1 k_2)c + \ell_1 \ell_2 \frac{a^2}{c}}{\sqrt{\left[(h_1^2 + k_1^2)c + \ell_1^2 \frac{a^2}{c} \right] \left[(h_2^2 + k_2^2)c + \ell_2^2 \frac{a^2}{c} \right]}} \dots\dots\dots 1-18$$

وبالنسبة للنظام المكعب نعوض $a = b = c$ في المعادلة 1-17 ونحصل على:

$$\cos \theta = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + \ell_1 \ell_2}{\sqrt{(h_1^2 + k_1^2 + \ell_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + \ell_2^2)}} \dots\dots\dots 1-19$$

ان قيمة الزاوية δ بين الاتجاهين $[u_1 v_1 w_1]$ و $[u_2 v_2 w_2]$ بالنسبة للنظام المعيني القائم هي:

$$\cos \delta = \frac{u_1 u_2 a^2 + v_1 v_2 b^2 + w_1 w_2 c^2}{\sqrt{(u_1^2 a^2 + v_1^2 b^2 + w_1^2 c^2)(u_2^2 a^2 + v_2^2 b^2 + w_2^2 c^2)}}$$

بالنسبة للنظام الرباعي:

$$\cos \delta = \frac{(u_1 u_2 + v_1 v_2)a^2 + w_1 w_2 c^2}{\sqrt{(u_1^2 + v_1^2)a^2 + w_1^2 c^2 (u_2^2 + v_2^2)a^2 + w_2^2 c^2}} \dots\dots\dots 1-20$$

وبالنسبة للنظام المكعب:

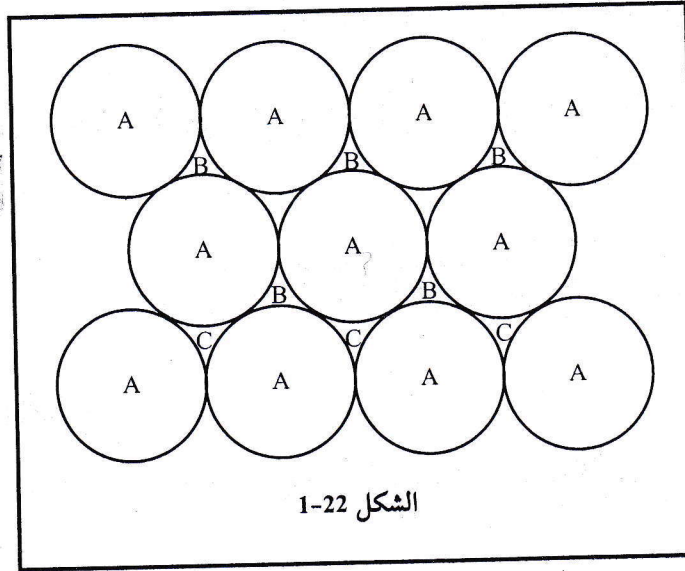
$$\cos \delta = \frac{u_1 u_2 + v_1 v_2 + w_1 w_2}{\sqrt{(u_1^2 + v_1^2 + w_1^2)(u_2^2 + v_2^2 + w_2^2)}} \dots\dots\dots 1-21$$

ان الاتجاهات $[u_1v_1w_1]$ و $[u_2v_2w_2]$ تكون متعامدة تبادلياً في الحالات الثلاثة اعلاه عندما يكون البسط في علاقاتها صفراً. على سبيل المثال بالنسبة للنظام المكعب يكون الاتجاهين متعامدين تبادلياً اذا كانت:

$$u_1u_2 + v_1v_2 + w_1w_2 = 0$$

1.11 التعبئة المتماصة Close-Packing

اذا اريد ترتيب كرات متماثلة بشعاع منتظم كي تشغل أدنى حجم فراغي فيمكن اتمام ذلك فقط بطريقتين، أولاهما يقود الى تركيب التعبئة المتماصة المكعبة Cubic Close-Packed (c.c.p.) أو مكعب ممرکز الاوجه (f.c.c.) وثانيهما تقود الى تركيب تعبئة متماصة سداسية Hexagonal Close-Packed (h.c.p.). يختلف التركيب في طريقة ترتيب الكرات، أي بمعنى بطريقة تشكيل الشبكة. ويوضح الشكل 1-22 الطريقة التي يمكن لكرات متماثلة ان تعبأ بتماسك في مستوي. تقع مراكز هذه الكرات A عند زوايا مثلثات متساوية الأضلاع وكل كرة تلامس ست كرات أخريات في مستواها الخاص.



الشكل 1-22

إن مثل هذه الطبقة تشكل شبكة برافز سداسية ببعدين كما يتضح ذلك في الشكل 1-14b. دعونا نقوم ببناء طبقة ثانية B على هذه الطبقة A. طبعا سنواجه صعوبة في وضع كرات الطبقة الثانية B على قمم كرات الطبقة A الا اذا كانت مراكز الطبقة الثانية B

عمودية على الفجوات الموجودة بين كرات الطبقة A . أما الطبقة الثالثة فستكون مستعدة للثبات فوق الطبقة الثانية B باحدى طريقتين: الطريقة الاولى تكون في وضع مراكز كرات الطبقة الثالثة عموديا فوق مراكز كرات الطبقة A أي تكون الطبقة الثالثة اعادة للطبقة A وهكذا نستمر بالعمل بوضع الطبقة الرابعة فوق مراكز الطبقة B وكأن الطبقة الرابعة اعادة للطبقة B ونواصل هذا الترتيب الذي سيكون عبارة عن سلسلة من $ABABAB \dots$. وبهذا نحصل على تركيب $(h.c.p.)$. أما الطريقة الثانية لوضع الطبقة الثالثة والتي سنسميها C فوق الطبقة الثانية B فتكون من خلال وضع مراكز كرات الطبقة C عموديا فوق الفجوات المتماصة والمتجاورة في كلا الطبقتين A و B وهكذا نواصل وضع مراكز كرات الطبقة الرابعة عموديا فوق مراكز كرات الطبقة A وكأن الطبقة الرابعة اعادة للطبقة A ويكون بهذا التوافق ترتيب السلسلة هو $ABCABC \dots$ ومنه نحصل على تركيب مكعي متماسك $c.c.p.$ أو $f.c.c.$.

تتصف كلا الطريقتين في التعبئة المتماصة أو أي نظام بلوري آخر بوساطة كميتين: عدد المحاور و نسبة التعبئة. ان عدد المحاور لنظام بلورة هو عدد المسافات المتساوية لاقرب الجيران لاي من ذراته. وان نسبة التعبئة تعرف على انها نسبة حجم وحدة الخلية المشغول بوساطة الكرات التي فيه وتسمى احيانا بعامل التعبئة الذري Atomic packing factor. من الواضح هنا انه كلما كان عدد المحاور كبيرا أو كانت نسبة التعبئة كبيرة فهذا يعد مؤشر لتعبئة اكثر تماسكا.

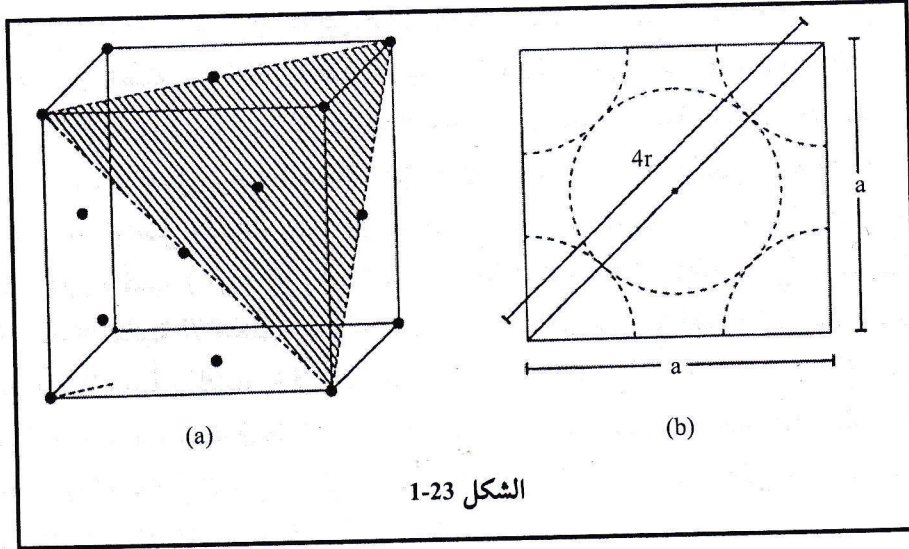
1.12 بعض التراكيب البلورية الانموذجية

Some typical crystal structures

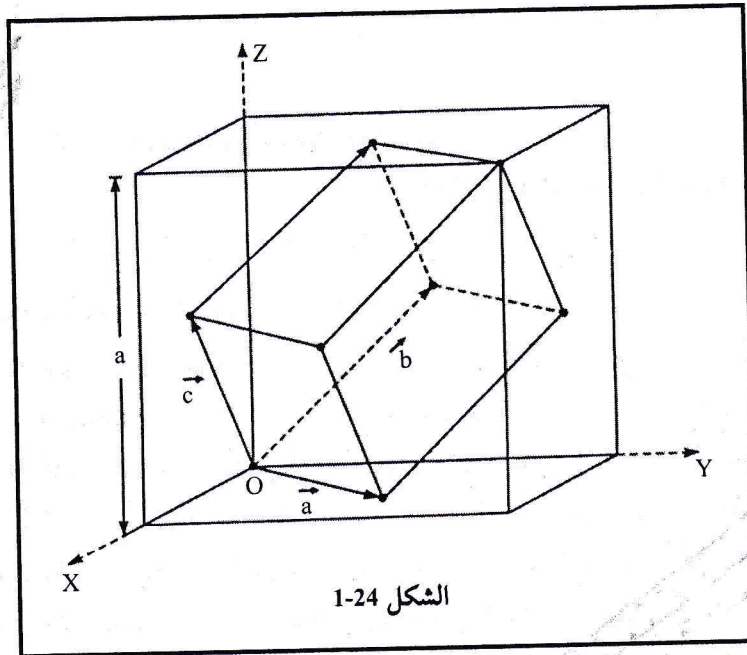
سنناقش بعض التراكيب البلورية الاكثر شيوعا والتي تغطي عددا مهما من المواد:

تركيب المكعب ممرکز الاوجه $f.c.c.$

يتم الحصول على وحدة خلية تركيب مكعب ممرکز الاوجه بوساطة رصف طبقات متماسكة التعبئة بسلسلة $ABCABC \dots$ والتي يوضحها الشكل 1-23. هنالك ذرات عند زوايا وحدة الخلية وعند مركز كل وجه واذا ربطنا بين الشكل 1-23 و 1-22 نجد ان المستوي المضلل هو طبقة بتعبئة متماسكة وتمثل المستوي (111) العمودي على قطر حجم المكعب. ومن التماثل يمكن ايجاد طبقة الذرات المعبأة بتماسك من كل المستويات ذات الشكل $\{111\}$. وفي هذا التركيب يكون محيط كل ذرة متماثل شكلاً وتوجهاً.



ويوضح الشكل 1-24 مواضع الذرات التي تشكل شبكة برافرز ووحدة الخلية الثلاثية الاولى rhombohedral primitive unit cell لهذا التركيب. اشتقت وحدة الخلية الاولى من الخلية التقليدية بواسطة متجهات الانتقال الاولى $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ التي توصل نقطة الاصل مع مراكز الواجه الثلاثية.



$$\vec{a} = \frac{1}{2}a(\hat{i} + \hat{j}) \quad , \quad \vec{b} = \frac{1}{2}a(\hat{j} + \hat{k}) \quad , \quad \vec{c} = \frac{1}{2}a(\hat{k} + \hat{i})$$

وتمثل a ضلع المكعب.

ولحساب حجم وحدة الخلية الاولى:

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

$$V = \frac{a}{2}(\hat{i} + \hat{j}) \cdot \frac{a}{2}(\hat{j} + \hat{k}) \times \frac{a}{2}(\hat{k} + \hat{i})$$

$$V = \frac{a^3}{4} \text{ وهذا هو ربع الحجم التقليدي.}$$

من الواضح أن كل ذرة في تركيب (f.c.c.) لها 12 أقرب جار، ست يحيطون بها في الطبقة نفسها وثلاث في الطبقة التي فوقها وثلاث في الطبقة التي تحتها. وبذلك يكون عدد المحاور 12. ولكي نحسب نسبة التعبئة نحتاج الحجم الكلي للكرات في وحدة الخلية وحجم وحدة الخلية. اذا قمنا بتوضيح الكرات التي يعرضها الشكل 1-23 a بالشكل الذي تلامس بعضها الاخر عبر الوجه القطري كما في الشكل 1-23 b وان r هو نصف قطر كل كرة فسوف يكون الطول القطري للوجه $D = 4r$ ، ولكن هذا الطول القطري للوجه يكون بدلالة ضلع المكعب a معطى بوساطة $\sqrt{2}a^2$ وبذلك:

$$16r^2 = D^2 = 2a^2 \text{ أو } 4r = D = \sqrt{2}a^2$$

ثم:

$$\frac{r}{a} = \frac{1}{2\sqrt{2}}$$

ان عدد الكرات في وحدة الخلية لتركيب (f.c.c.) هو:

$$8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$$

وهذه تعطينا الحجم المشغول بوساطة الكرات:

$$V_i = 4 \left(\frac{4}{3} \pi r^3 \right)$$

بينما حجم وحدة الخلية هو $V = a^3$.

اذن نسبة التعبئة F ستكون:

$$F = \frac{V_t}{V} = \frac{16\pi}{3} \left(\frac{r}{a} \right)^3$$

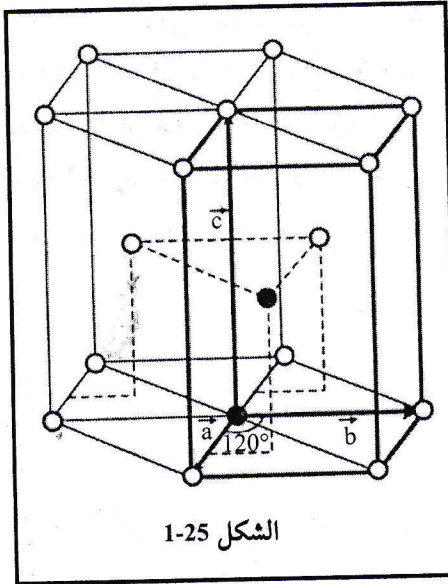
واذا عوضنا قيمة $\frac{r}{a}$ من اعلاه يكون لدينا نسبة التعبئة هي:

$$F = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0.7406$$

وان مسافة اقرب جار:

$$d = \frac{D}{2} = \frac{a}{\sqrt{2}}$$

تركيب التعبئة المتماسك السداسي (h.c.p.)



الشكل 1-25

يعطينا القيام برصف طبقات تعبئة متماسكة من الكرات على شكل سلسلة $ABABAB \dots$ تركيب سداسي متماسك التعبئة $h.c.p$ كالذي في الشكل 1-25، فيه لا تشكل المواضع الذرية شبكية برفز. ان وحدة الخلية الموضحة في الشكل هي وحدة خلية أولية ذات أساس مكون من ذرتين متماثلتين عند $\frac{2}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{2}$ و 000 موضحة في الشكل 1-25 على صورة كرتين بلون اسود غامق. وتمتلك الخلية الأولية الموضحة بخطوط سوداء غامقة في الشكل 1-25 بزواوية تضمهما مقدارها 120° . المحور c عمودي على المستوي المتكون بواسطة a و b . ولكي نحسب نسبة التعبئة في هذه الحالة نحتاج معرفة قيمة c/a ولكي نجد هذه النسبة نأخذ كرة مثل B تستقر بين ثلاث كرات متماسكة التعبئة هي A و A' و A'' كما هو في الشكل 1-26a. ويتضح من الشكل ان مراكز هذه الكرات الاربعة تقع عند زوايا رباعي الاسطح منتظم كما في الشكل 1-26 b. اذا كان BQ عمودياً على المستوي $AA'A''$ فانه سيعطي الفسحة h بين الطبقات المتتابعة للتركيب السداسي متماسك التعبئة. من الشكل الهندسي يتضح ان Q

مقدارها 120° . المحور c عمودي على المستوي المتكون بواسطة a و b . ولكي نحسب نسبة التعبئة في هذه الحالة نحتاج معرفة قيمة c/a ولكي نجد هذه النسبة نأخذ كرة مثل B تستقر بين ثلاث كرات متماسكة التعبئة هي A و A' و A'' كما هو في الشكل 1-26a. ويتضح من الشكل ان مراكز هذه الكرات الاربعة تقع عند زوايا رباعي الاسطح منتظم كما في الشكل 1-26 b. اذا كان BQ عمودياً على المستوي $AA'A''$ فانه سيعطي الفسحة h بين الطبقات المتتابعة للتركيب السداسي متماسك التعبئة. من الشكل الهندسي يتضح ان Q

يجب ان تقع على AP بالشكل الذي يكون فيه $QP = \frac{1}{3}AP$ ، اذ ان P هو نقطة وسط الضلع $A'A''$ وكذلك:

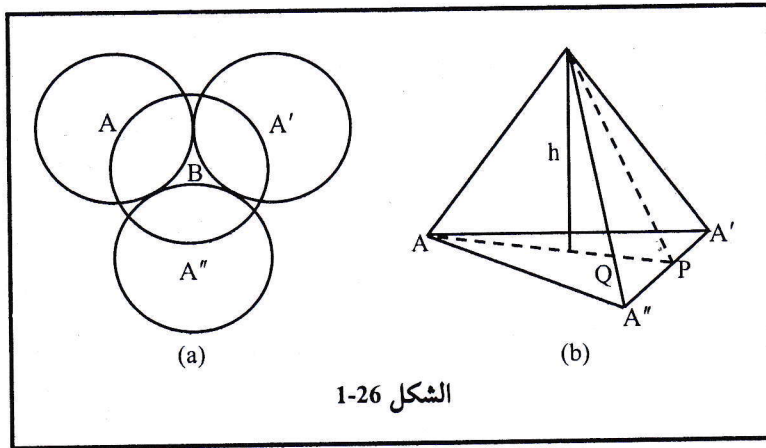
$$QP = \frac{1}{3}AP = \frac{a}{2\sqrt{3}} \text{ و } AP = BP = A'A'' \sin 60^\circ = a \sin 60^\circ = a\sqrt{3}/2$$

$$h^2 = (BP)^2 - (QP)^2 = \frac{3}{4}a^2 - \frac{1}{12}a^2 = \frac{2}{3}a^2$$

$$h = a\sqrt{\frac{2}{3}}$$

ان المسافة الشاقولية بين طبقات التعبئة المتماصة في وحدة خلية سداسية هي c وهذه تساوي $2h$.

$$\frac{c}{a} = \frac{2h}{a} = \frac{2}{a} \cdot a\sqrt{\frac{2}{3}} = 2\sqrt{\frac{2}{3}} = 1.633$$



الشكل 1-26

ومرة أخرى اذا رسمت الكرات التي في الشكل 1-25 على المقياس نفسه كما بالنسبة للمسافات الذرية الداخلية فان الكرات التي عند نهايات الضلع $\bar{a}$ ستلامس الواحدة الأخرى عند وسط $\bar{a}$. بذلك يكون $a = 2r$ أو $r = a/2$. والان هنالك كرتان واحدة عند موضع 000 والأخرى عند موضع $\frac{2}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{2}$ تصاحب كل من نقاط الشبكة الثمانية في

وحدة الخلية الأولية. وبذلك يكون عدد الذرات في وحدة الخلية هو $2 \left(8 \times \frac{1}{8} \right) = 2$ ومن هنا يكون الحجم الذي تشغله هذه الكرات هو:

$$r = a/2 \text{ لأن } V_i = 2 \left(\frac{4}{3} \pi r^3 \right) = \frac{1}{3} \pi a^3$$

وان الحجم الكلي لوحدة خلية التركيب السداسي هو:

$$V = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c$$

ومن هنا تكون نسبة الرص (أو عامل الرص الذري) هو:

$$F = \frac{V_i}{V} = \frac{2\pi}{3\sqrt{3}} \left(\frac{a}{c} \right)$$

ولما كان $\frac{a}{c} = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}$ فان عامل الرص الذري يكون:

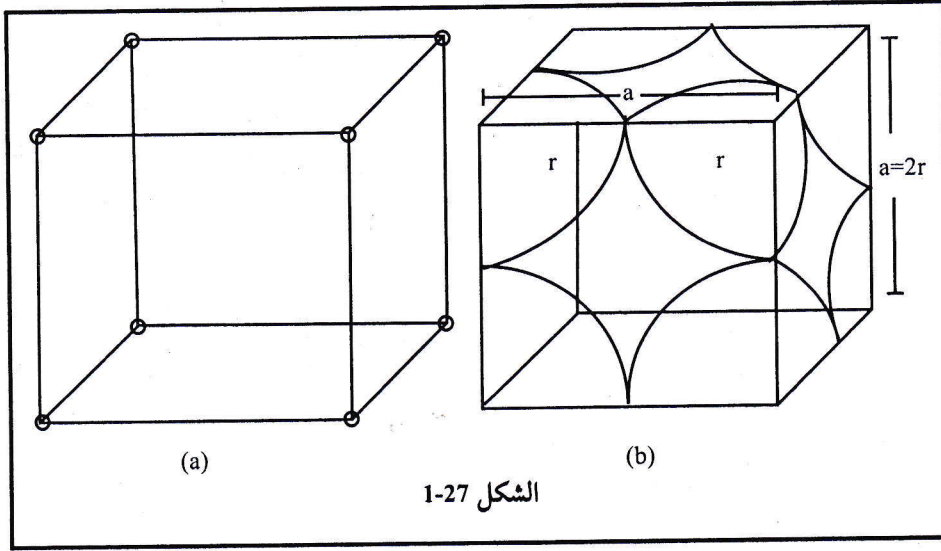
$$F = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0.7406$$

عدد محاور تركيب $h.c.p$ نفس عدد محاور تركيب $f.c.c$ وهي 12 محور.

ولما كانت الذرات ليست على شكل كرات صلبة فغالباً ما تختلف نسبة محاور وحدة الخلية c/a قليلاً عن القيمة المثالية (1.633). فيمتلك الزنك عملياً $c/a = 1.86$ والمغنيسيوم $c/a = 1.623$.

تركيب مكعب بسيط ($s.c.$)

يعرض الشكل a 1-27 شكل وحدة خلية تركيب المكعب البسيط وهي تمتلك فقط ذرات عند الزوايا الثمانية للمكعب وبذلك يكون عدد الذرات او النقاط لكل وحدة خلية هي $8 \times \frac{1}{8} = 1$ وبذلك تكون وحدة خلية المكعب البسيط خلية أولية.



الشكل 1-27

عدد أقرب الجيران هو 6، وبذلك يكون عدد محاور هذا التركيب هو 6. ولكي نعرف العلاقة بين نصف قطر الذرة وثابت الشبكة a لابد ان نتعامل مع رسم الذرات بصورة تجعلها تلامس بعضها الاخر عبر أضلاع المكعب كما هو معروض في الشكل 1-27 b. ومن هذا الشكل سنجد ان $r = a/2$. وبذلك سيكون عامل التعبئة الذري هو:

$$F = \frac{4/3 (\pi r^3)}{a^3} = \frac{\pi}{6} = 0.524$$

توضح نسبة التعبئة للمكعب البسيط انه تركيب غير متماسك وبذلك لا يكون التركيب مرغوبا بواسطة العناصر الطبيعية. لقد وجد ان عنصر البولونيوم Polonium فقط يظهر تركيب مكعب بسيط عند درجة حرارة تحت $75^\circ C$. ولكن هذا التركيب مفيد جدا في دراسة التراكيب المعقدة الاخرى. على سبيل المثال يمكن اعتبار تركيب المكعب ممرکز الجسم على انه يحتوي تركيبين متماثلين للمكعب البسيط احدهما يتكون من ذرات الزوايا والاخر من ذرات المركز، وبالطريقة نفسها يمكن اعتبار تركيب $f.c.c$ يحتوي على اربع تراكيب متماثلة متداخلة من تركيب المكعب البسيط $s.c$.
مسافة اقرب جار $d = a$.

المتجهات الاولى للمكعب البسيط هي:

$$\vec{a} = a\hat{i} \quad \text{و} \quad \vec{b} = b\hat{j} \quad \text{و} \quad \vec{c} = c\hat{k}$$

وبذلك يكون حجم وحدة الخلية للمكعب البسيط:

$$V = \vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c} \\ = a\hat{i} \cdot (b\hat{j} \times c\hat{k})$$

ولما كانت $a = b = c$ في المكعب

$$V = a\hat{i} \cdot (a\hat{j} \times a\hat{k})$$

$$V = a\hat{i} \cdot a^2\hat{i} \quad \text{وبذلك يكون حجم وحدة خلية المكعب البسيط } V = a^3$$

تركيب المكعب مركز الجسم (b.c.c.)

يعرض الشكل 1-28 وحدة خلية تركيب المكعب مركز الجسم (الخطوط

المتصلة. لهذه الخلية ذرات ثمانية عند اركان المكعب وواحدة عند مركزه وبذلك تمتلك وحدة

الخلية ذرتين $8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$ ومن هنا فهي ليست خلية أولية. ان وحدة الخلية الاولى

للمكعب مركز الاوجه تكون تركيب ثلاثي rhombohedron طول ضلعه $\frac{\sqrt{3}}{2}a$ والزوايا

بين اضلاعه المتجاورة هي $190^\circ 28'$. وتشتق الخلية الاولى من الخلية التقليدية بوساطة

المتجهات الانتقالية الاولى $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ التي تربط نقطة الاصل مع ذرات مرز المكعبات الثلاثة

المجاورة. ان متجهات الانتقال الاولى للخلية الاولى بدلالة طول ضلع المكعب a هي:

$$\vec{a} = \frac{a}{2}(\hat{i} + \hat{j} - \hat{k}) \quad \text{و} \quad \vec{b} = \frac{a}{2}(-\hat{i} + \hat{j} + \hat{k}) \quad \text{و} \quad \vec{c} = \frac{a}{2}(\hat{i} - \hat{j} - \hat{k})$$

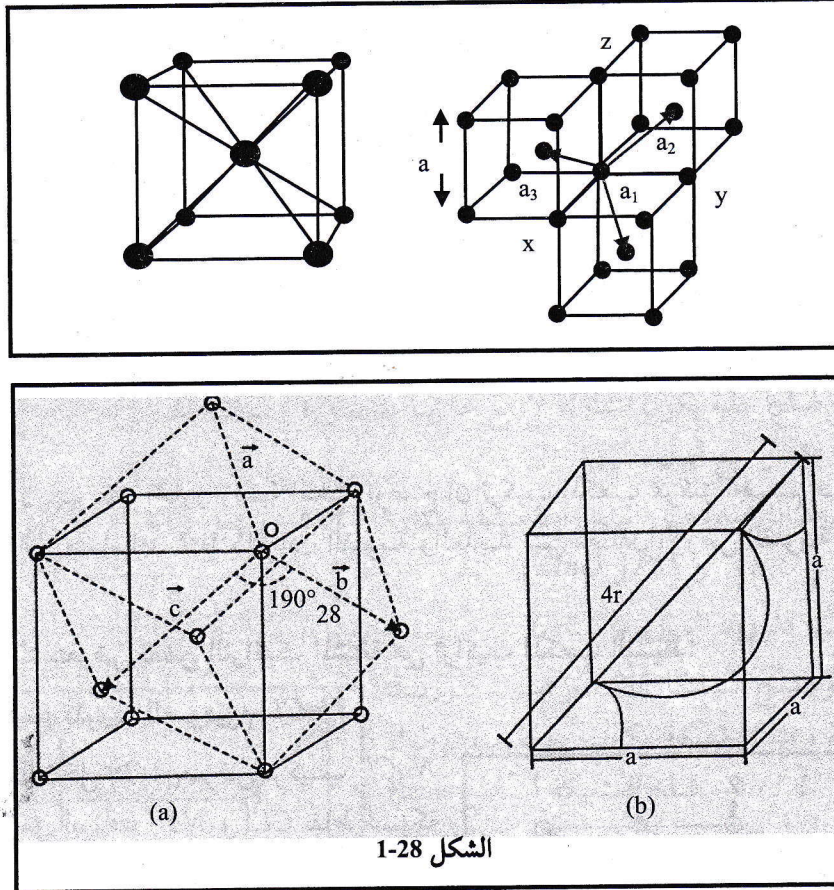
ومنها نجد حجم وحدة الخلية الاولى:

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

$$V = \frac{a}{2}(\hat{i} + \hat{j} - \hat{k}) \cdot \frac{a}{2}(-\hat{i} + \hat{j} + \hat{k}) \times \frac{a}{2}(\hat{i} - \hat{j} + \hat{k})$$

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

في هذا التركيب يكون المستوى الأكثر كثافة بالذرات هو المستوى (110).



الشكل 1-28

ان عدد اقرب الجيران في هذا التركيب هو 8 وبذلك يكون عدد المحاور فيه 8 ايضا. يمكن حساب نسبة التعبئة بسهولة اذا رسمنا الكرات ذات النصف قطر r في تركيب وحدة خلية المكعب ممرکز الاوجه التقليدية بمقياس المسافات البينية بين الذرات فسنجد ان كرة المركز تلامس الكرات التي عند الاركان والشكل 1-28 b يوضح ذلك. من هذا الشكل سنعرف العلاقة بين r وطول ضلع المكعب a :

أو $(4r)^2 = D^2 = a^2 + (\sqrt{2}a)^2$ ، $r = \frac{\sqrt{3}}{4}a$ ، اذا ان D الطول القطري للجسم المكعب وان $(D/2) = d$ تمثل مسافة اقرب جار.

مسافة اقرب جار هي:

$$d = \frac{\sqrt{3}}{2} a$$

ومن هنا يكون الحجم الكلي المشغول بواسطة كرتي وحدة الخلية هو:

$$V_t = 2 \left(\frac{4}{3} \pi r^3 \right) = \frac{\sqrt{3}}{8} \pi a^3$$

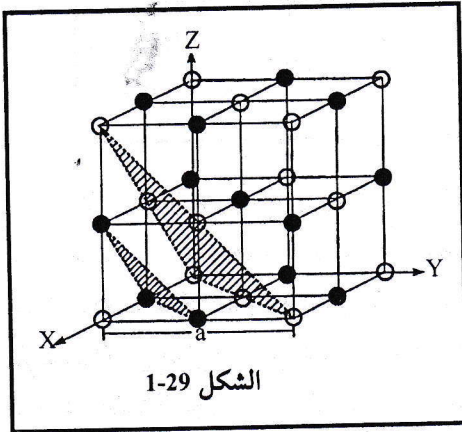
ونعرف ان حجم وحدة الخلية هو $V = a^3$ وبذلك نسبة التعبئة ستكون:

$$F = \frac{V_t}{V} = \frac{\sqrt{3}}{8} \pi = 0.6802$$

ان قيم عدد المحاور ونسبة التعبئة توضح ان تركيب المكعب ممرکز الجسم هو ايضا تركيب غير متماسك. تمتلك المعادن القلوية والعديد من معادن الارض القلوية تركيب *bcc*.

والان سنستعرض بعض التراكيب المشتقة من تراكيب المكعب البسيط:

1. تركيب كلوريد الصوديوم $NaCl$



الشكل 1-29 يعرض تركيب $NaCl$

وفيه تشغل أيونات Na^+ و Cl^- نقاط شبكية المكعب البسيط بالتعاقب. لكل أيون ست اقرب جيران من النوع الاخر (عدد المحاور 6) وهناك 12 اقرب جار لاحق من الايون نفسه. تشغل ايونات النوع الواحد نقاط شبكية المكعب ممرکز الاوجه. ان شبائك Na^+ و Cl^- مزاحة عن بعضها البعض الاخر بواسطة نصف وحدة باتجاه a , $[100]$. ويمكننا ان

نرى كذلك من الشكل ان المستويات المتابعة من النوع $\{111\}$ تكون مشغولة بالكامل بالايونات Na^+ و Cl^- , ويمكن وصف شبكية برفز لبلورة كلوريد الصوديوم بانها شبكية مكعبة ممرکز الاوجه طول ضلعها $5.63 \text{ \AA}$. تتكون قاعدة هذه الشبكية من ايون صوديوم

واحد وايون كلور واحد تفصل بينهما نصف مسافة الطول القطري لجسم وحدة مكعب تمتلك اربع وحدات من $NaCl$ موزعه فيها ايونات الصوديوم والكلور على المواضع كما يأتي:

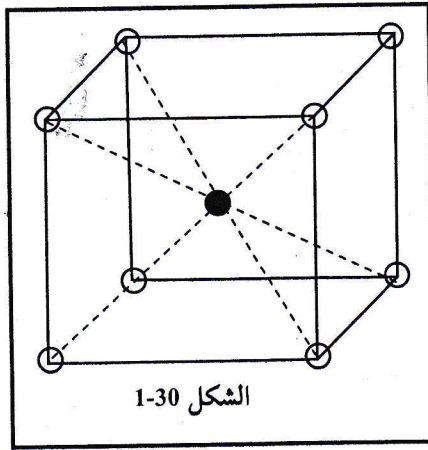
$$Na^+ \quad \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}, 00 \frac{1}{2}, 0 \frac{1}{2} 0, \frac{1}{2} 00$$

$$Cl^- \quad 000, \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0, \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}, 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$$

تحتل ايونات الصوديوم اذن رؤوس الخلية المكعبة الثمانية ومراكز أوجهها الستة بينما تحتل ايونات الكلور مركز الخلية ومتصفات أضلاعها الاثني عشر حيث ان كل ايون يقع في منتصف ضلع خلية يكون مشاركا لاربع خلايا متجاورة وبذلك تكون حصته في الخلية الواحدة بمقدار ربع أيون.

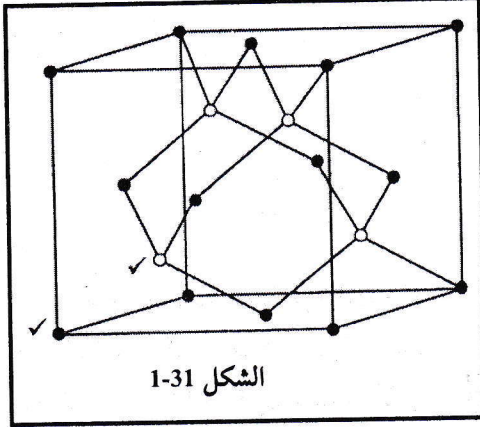
وهناك عدد من البلورات يشابه بلورة $NaCl$ ومنها KCl و KBr و $AgBr$ و LiH و MgO و PbS و MnO .

2. تركيب كلوريد السيزيوم $CsCl$



يوضح الشكل 1-30 تركيب كلوريد السيزيوم ويمتلك شبكة مكعب بسيط $s.c.$ طول ضلعها $4.11 \text{ \AA}$ وهذه الشبكة أساس Basis تتكون من أيون Cs^+ عند 000 و ايون Cl^- واحد عند الموضع $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$ تفصل بينهما مسافة نصف الطول القطري لوحدة مكعب. وتحتل ايونات السيزيوم جميع مواقع الشبكة الموجودة في رؤوس الخلية المكعبة ولكن كما تعلم ان جميع هذه الايونات الثمانية تعادل ايونا واحدا وبذلك يكون هنالك فقط ايونان في الخلية الواحدة احدهما Cs^+ والاخر Cl^- ، أي ان هنالك جزيئة واحدة فقط من $CsCl$ لكل وحدة خلية.

3. تركيب الماس



يعد تركيب الماس مثالا لجزيئة تساهمية منفردة عملاقة ويوضح الشكل 1-31 ان كل ذرة مترابطة رباعيا الى اربع اقرب جيران تقع عند نقاط زوايا الشكل الرباعي وبالرغم من أن جميع الذرات لها المحيط نفسه ولكن هذا المحيط يكون موجه بشكل مختلف بالنسبة للذرات التي توضحها دوائر في الشكل 1-31 عن تلك الممثلة بدوائر غامقة السواد. لذلك لا توجد هنالك

طريقة لاختيار خلية أولية ذات قاعدة مكونة من ذرة واحدة فقط. وكما يتضح من الشكل ان الشبكة الفضائية هي شبكة مكعب ممرکز الاوجه تتكون قاعدتها من ذرتين متماثلتين واحدة عند الموضع 000 والاخرى عند الموضع $\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}$ تلتحق بكل نقطة شبكة. تمتلك كل ذرة اربع اقرب جيران و 12 جار لاحق. هنالك 8 ذرات في المكعب. يمكن اعتبار تركيب الماس مكوناً من شبكتي f.c.c. متقاطعتين: تمتلك احدهما نقطة الاصل 000 (موضحة بكرات سوداء في الشكل) والاخرى (المثلة بكرات دائرية) تمتلك نقطة الاصل عند $\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}$. ان الشبكة مع الذرة الممثلة بكرات على شكل دائرة قد ازيحت بمقدار $\frac{1}{4}$ من وحدة خلية باتجاه [111]. وعلى الرغم من صلابه الماس ودرجة انصهاره العالية فان نسبة التعبئة له $F = 0.3401$ وهو يمثل تقريبا نصف نسبة التعبئة لشبكة f.c.c. يتكون اساسها من ذرة واحدة فقط. أن طول ضلع مكعب بلورة الماس هو $3.56 \text{ \AA}$. ويتبلور الكربون والسليكون والجيرمانيوم بطريقة تبلور الماس نفسها.

4. تركيب كبريتيد الزنك ZnS

هذا التركيب مشابه لتركيب الماس الا ان الاختلاف الوحيد يكون هو ان الاساس Basis في هذا التركيب يتكون من ذرتين مختلفتين هما ذرة Zn وذرة الكبريت S بدلا من ذرتي كربون متشابهتين كما في الماس. تحتل الذرات المختلفة المواقع التالية:

$$Zn \quad 000, 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}, \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$$

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

وهذا معناه وجود 4 جزيئات ZnS في كل خلية وحدة اعتيادية وان كل ذرة Zn تكون محاطة بأربع ذرات S وعلى ابعاد متساوية بمقدار ربع الطول القطري للخلية الاعتيادية وتكون اربع روابط اغلبها من نوع الروابط التساهمية وجزء قليل من الروابط الايونية. ان طول ضلع خلية وحدة كبريتيد الزنك هو $5.41 \text{ \AA}$ وتكون نسبة التعبئة له صغيرة. ان حجم وحدة خلية ZnS أكبر من حجم وحدة خلية الماس.

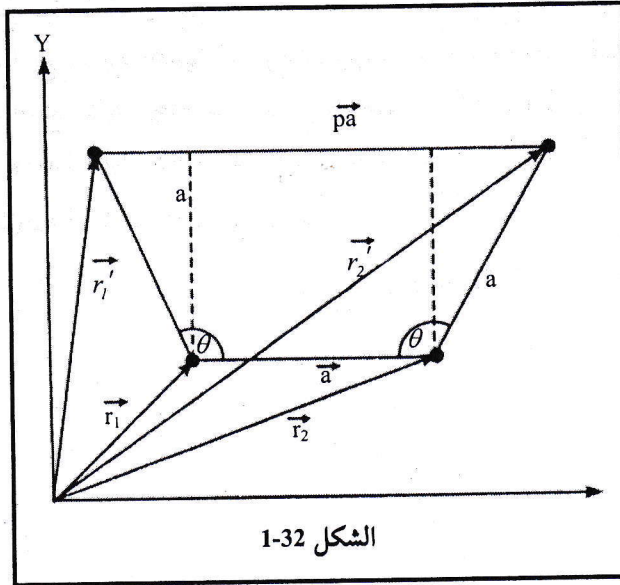
ومن التراكيب المشابهة لتركيب ZnS هي تراكيب



تمارين عامة محلولة

1. أشتق العلاقة العامة لزاوية الدوران مبيناً درجات التماثل المسموحة وغير المسموحة.

الحل:



لنأخذ الاحداثي x عبر متجه الانتقال الاولي لشبكة البلورة $\vec{a}$ ثم من الشكل 1-32 سنجد ان المسافة بين اقرب جارين على شعاع عبر الاحداثي x تعطى بواسطة:

$$|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = a$$

لندع محور تماثل ذي n - ثنية يمر خلال رأس المتجه $\vec{r}_1$ ويكون عمودياً على المستوي XY وليمر محور مشابه كذلك خلال رأس المتجه $\vec{r}_2$. ان تدويراً للمتجه $\vec{a}$ خلال زاوية $\theta = 2\pi/n$ باتجاه معاكس لاتجاه عقرب الساعة سينتج متجه شبكة جديد $\vec{r}_1'$ وان تدويراً للمتجه $\vec{a}$ خلال زاوية $\theta = 2\pi/n$ باتجاه عقرب الساعة سيعطي متجه شبكة جديد $\vec{r}_2'$ ومن هنا ستعطينا رؤوس $\vec{r}_1$ و $\vec{r}_2'$ نقاط شبكة جديدة. ولانه لدينا شعاع دوري من النقاط فيجب أن تكون المسافة $|\vec{r}_1' - \vec{r}_2'|$ متجه انتقالي، وبذلك ستكون هذه المسافة تساوي:

$$|\vec{r}_1' - \vec{r}_2'| = pa \text{، اذ ان } p \text{ أي عدد صحيح.}$$

من الشكل الهندسي يمكن ان نكتب هذه المسافة تساوي:

$$pa = a + 2a \sin(\theta - \pi/2) = a(1 - 2 \cos \theta)$$

$$\cos \theta = \frac{1-p}{2} \leq 1$$

ولما كان $-1 \leq \cos \theta \leq 1$ ستكون $-1 \leq p \leq 3$ أي ان p لكي يحقق المعادلة يجب ان يكون مساويا الى $-1, 0, 1, 3$ فقط

ومن خلال هذا سنتمكن من معرفة مايلي:

رمز الثنية	أسم الثنية	$n = 2\pi / \theta$ (الثنية)	$\theta = 2\pi / n$	$\cos \theta$	p
	عامّة monad	ثنية واحدة 1-fold	$0, 2\pi$	1	-1
	سداسي	سداسي - الثنية 6-fold	$\pi/3$	1/2	2
	رباعي	رباعي - الثنية 4-fold	$\pi/2$	0	1
	ثلاثي	ثلاثي - الثنية 3-fold	$2\pi/3$	-1/2	2
	ثنائي	ثنائي - الثنية 2-fold	π	-1	3

والنتائج اعلاه تبين بوضوح عدم وجود حل ممكن للمعادلة $\cos \theta = \frac{1-p}{2} \leq 1$ اذا كان

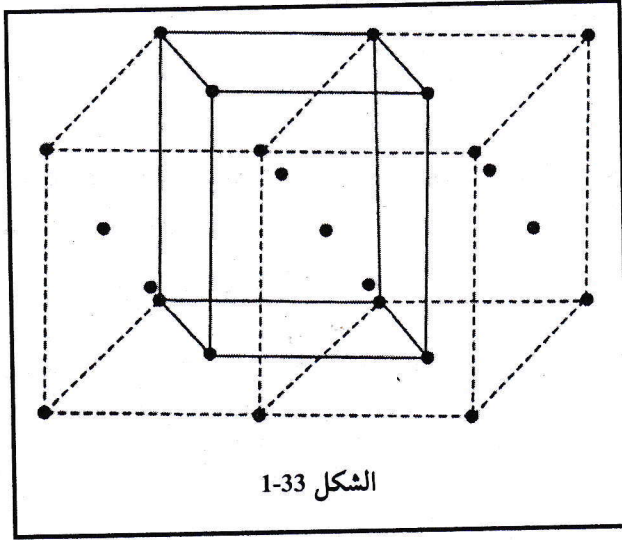
$n = 5$ أو 7 أو 8 أو أكثر. ومن هنا نستنتج ان البلورة تمتلك تماثل دوراني من 1 و 2 و 3 و 4 و 6 ثنية فقط.

2. اثبت إن الشبكة الرباعية مركزية الاوجه ليست من شبائك برافرز

الحل:

تكون الشبكة ليست شبكية برافرزية عندما لا تتواجد بشكل مستقل، أي لا يمكن التعبير عنها بأي من شبائك برافرز الاربعة عشر. يمكننا ان نثبت ذلك عندما نرسم وحدتي خلية للشبكة المعطاة كما موضح في الشكل 1-33 بالخطوط المتقطعة والان نرسم وحدة خلية رباعية جديدة من نقاط شبكية تلك الخليتين كما يتضح في الشكل نفسه وبخطوط متصلة. تمتلك هذه الخلية الجديدة نصف حجم وحدة الخلية الاصلية وتكون شبكية برافرزية من النوع الرباعي الاول. ونجد الان ان جميع نقاط الشبكة المعطاة يمكن المرور

بها بوساطة التكرار الدوري المنتظم لوحدة الخلية الجديدة. وبذلك فان الشبكة الرباعية ممرزة الواجه ليست شبكية برافزية وليس لها وجود.



3. بلورة من البوليمر ذات جزيئة واحدة لكل نقطة شبكية تمتلك متجهات الشبكة الاولى التالية:

$$\vec{a} = 5\hat{i} \quad \text{و} \quad \vec{b} = 5\hat{j} \quad \text{و} \quad \vec{c} = 2.5(\hat{i} + \hat{j} + \hat{k})$$

اذ ان $\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$ وحدة متجه بالاتجاهات x, y, z على الترتيب لنظام احداثيات مستطيل. ما هو نوع شبكية برافز لهذه البلورة؟ احسب حجم وحدة الخلية التقليدية ووحدة الخلية الاولى. ما هي معاملات ميلر لمجموعة المستويات الاكثر كثافة بالجزيئات؟

الحل:

يمكن ان نكتب:

$$\vec{c} = \frac{1}{2}(5\hat{i} + 5\hat{j} + 5\hat{k}) = \frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b} + \vec{c}')$$

اذ ان $\vec{c}' = 5\hat{k}$. وهذا يبين ان $\vec{c}$ تعطي موضع نقطة مركز الجسم في وحدة خلية تركيب المكعب بمركز الجسم المعرفة بوساطة المتجهات $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$. وبذلك تؤشر شبكية برافز المعطاة بأنها مكعب بمركز الجسم.

وان حجم وحدة الخلية التقليدية هو:

$$V = a^3 = 5^3 = 125 A^{\circ 3}$$

ولان الخلية التقليدية هي مكعب ممرکز الجسم فهي تمتلك جزيئتان لكل وحدة خلية بينما الخلية الاولى تمتلك جزيئة واحدة فقط ومن هنا سيكون حجم الخلية الاولى نصف حجم الخلية التقليدية، أي $62.5 A^{\circ 3}$.

ان اكثر المستويات كثافة بالجزيئات في مكعب ممرکز الجسم هو المستوي $\{110\}$.
4. اثبت انه في حالة بلورة مكعبة ان الاتجاه $[hk\ell]$ يكون عمودياً على المستوي $(hk\ell)$ بمعاملات ميلر نفسها.

الحل:

في البلورة المكعبة يعطى المستوي $(hk\ell)$ الاقرب الى نقطة الاصل بالعلاقة:

$$hx + ky + \ell z = 0$$

واي متجه عشوائي في هذا المستوي هو:

$$[x, y, -(hx + ky) / \ell]$$

والان تكون الزاوية δ بين هذا المتجه العشوائي والاتجاه $[hk\ell]$ الزاوية نفسها بين المستوي $(hk\ell)$ والاتجاه $[hk\ell]$. بذلك باستعمال العلاقة

$$\cos \delta = \frac{u_1 u_2 + v_1 v_2 + w_1 w_2}{\sqrt{(u_1^2 + v_1^2 + w_1^2)(u_2^2 + v_2^2 + w_2^2)}}$$

يمكن ان نكتبها:

$$\cos \delta = \frac{hx + ky - \ell(hx + ky) / \ell}{\sqrt{h^2 + k^2 + \ell^2} \sqrt{x^2 + y^2 + (hx + ky)^2 / \ell^2}} = 0$$

اذن $\delta = 90^\circ$

أو نقول ان الاتجاه $[hk\ell]$ عمودي على المستوي $(hk\ell)$.

5. اعط اتجاهات متجهات الانتقال الاولى $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ لوحدة خلية ثلاثية التي يمكن رسمها في تراكيب المكعب ممرکز الجسم والوجه، وكذلك احسب الزاوية δ بين أي ضلعين في كل حالة.

الحل:

من الشكل 1-24 يمكن لنا أن نكتب اتجاهات $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ في تركيب المكعب ممرکز الوجه:

$[110]$ و $[011]$ و $[101]$

تعطى الزاوية بين الاتجاهين $\vec{a}$ و $\vec{b}$ بالعلاقة:

$$\cos \delta = \frac{u_1 u_2 + v_1 v_2 + w_1 w_2}{\sqrt{(u_1^2 + v_1^2 + w_1^2)(u_2^2 + v_2^2 + w_2^2)}}$$

وبذلك:

$$\cos \delta = \frac{1 \times 0 + 1 \times 1 + 0 \times 1}{\sqrt{(1+1+0)(0+1+1)}} = \frac{1}{2}$$

اذن $\delta = 60^\circ$

وبالطريقة نفسها من الشكل 1-28 تكون اتجاهات $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ في مكعب ممرکز الجسم هي:

$[1\bar{1}1]$ و $[\bar{1}11]$ و $[11\bar{1}]$

$$\cos \delta = \frac{1 \times (-1) + 1 \times 1 + (-1) \times 1}{\sqrt{(1+1+1)(1+1+1)}} = -\frac{1}{3}$$

اذن:

$\delta = 109^\circ 27'$ (من جداول المثلثات).

6. عند تسخين الحديد يتعرض للانتقال من تركيب مكعب ممرکز الجسم الى تركيب مكعب

ممرکز الوجه عند درجة حرارة $1180 K$. احسب نسبة كثافة الحديد تحت وفوق درجة حرارة الانتقال هذه.

الحل:

نعرف ان نسبة التعبئة F تعد مقياس لكثافة البلورة ρ .

نعرف ان نسبة التعبئة للمكعب ممرکز الجسم هي $F_{b.c.c.} = \frac{\sqrt{3}}{8} a$ وانها بالنسبة للمكعب ممرکز الواجهه هي: $F_{f.c.c.} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}}$.

وبذلك:

$$\frac{\rho_{bcc}}{\rho_{fcc}} = \frac{F_{bcc}}{F_{fcc}} = \frac{3\sqrt{6}}{8} = 0.92$$

7. طول ضلع مكعب بلورة الماس هو $3.56 \text{ \AA}$. ما هي المسافة بين اقرب الجيران و ما هو عدد الذرات لوحدة الحجم؟

الحل:

يعد تركيب الماس مركباً من شبكتي مكعب ممرکز الواجهه. شبكة fcc التي نقطة الاصل لها $\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}$ نزاح عن تلك التي نقطة الاصل لها 000 بمقدار $\frac{1}{4}$ وحدة الخلية باتجاه $[111]$. المسافة بين ذرة 000 وتلك $\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}$ هي الاقصر والتي تعطى:

$$\ell = \frac{1}{4} \times D \quad \text{اذ ان } D \text{ يمثل الطول القطري لجسم الخلية المكعبة.}$$

$$\ell = \frac{1}{4} (\sqrt{3} a) = \frac{1}{4} \times 1.732 \times 3.56 \text{ \AA} = 1.541 \text{ \AA}$$

عدد الذرات لوحدة الحجم في شبكة مكعب ممركرة الواجهه هي:

$$\text{عدد الذرات} = \frac{4}{a^3} = \frac{4}{3.56^3} \text{ \AA}^{-3} = 0.08866 \text{ \AA}^{-3} = 0.8866 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$$

لوحدة الحجم.

ولما كان تركيب الماس له شبكتي fcc متقاطعتين فيكون عدد الذرات لوحدة الحجم للماس هو:

$$2 \times 0.8866 \times 10^{23} = 1.7732 \times 10^{23} / \text{cm}^3$$

أسئلة وتمارين عامة

1. وضح فيزيائيا سبب عدم امتلاك البلورة الحقيقية محور تماثل دوراني خماسي - الثنية.
 2. اذكر الانواع المختلفة لعناصر التماثل التي يمتلكها الصلب المتبلور.
 3. ارسم المخططات التي توضح نظام مكعب يمتلك مركز تماثل ، ثلاث محاور رباعية، اربع محاور ثلاثية، ست محاور ثنائية، ثلاث مستويات مستقيمة وست مستويات قطرية للتماثل، أي 23 عنصر تماثل بلوري.
 4. وضح ما هو المقصود بعناصر التماثل في البلورة. وضح عناصر التماثل المختلفة التي تظهرها البلورة المكعبة. وضح معنى محور دوران n - ثنية والمحور اللولبي n - ثنية.
 5. ما هي عناصر التماثل الانتقالي التي تظهرها البلورة؟ اشرح واحدة منها.
 6. ميز بين وحدة الخلية الاولى وغير الاولى. عرف وحدة خلية الشبكة. هل تكون وحدة الخلية متوازي سطوح دائما؟ اذا لم تكن ما هو الشكل البديل وكيف يمكن الحصول عليه؟ لماذا تفضل عموما الخلية التقليدية على الخلية الاولى؟
 7. وضح العلاقة المنطقية: شبكة + أساس = تركيب بلوري. معرّف المصطلحات الموجودة في هذه العلاقة.
 8. ما الذي فهمته من الشبكة البرافزية والشبكة غير البرافزية؟ دون أسماء وعرف الانظمة السبعة للشبكات البرافزية الاربعة عشر. اعط محور التماثل الذي يمتلكه كل نظام.
 9. وضح سبب عدم امكانية وجود بلورات رباعية ممركة الوجة ومركزة القاعدة.
 10. ما هو منهج معاملات ميلر في تمثيل مستويات البلورة؟
 11. ارسم تخطيطا يوضح المستويات (100) و (010) و (001) و (101) و (110) و (111) في وحدة خلية مكعب.
 12. اذكر معاملات ميلر للوجة الست لبلورة مكعبة.
- الجواب: (100) و ($\bar{1}00$) و (010) و ($0\bar{1}0$) و (001) و ($00\bar{1}$).

13. جد المسافة بين ذرة زاوية وذرة مركز جسم وحدة خلية مكعب بمركز الجسم ثابت

$$\text{شبيكتها } 5.96 \text{ \AA}^{\circ} \text{ مساعدة في حل التمرين: } \ell = \left\{ \left(a/\sqrt{2} \right)^2 + \left(a/2 \right)^2 \right\}^{1/2}$$

الجواب: $5.162 \text{ \AA}^{\circ}$

14. جد المسافة بين ذرة زاوية عند القاعدة وذرة عند مركز قمة وجه وحدة خلية مكعب

مركز الواجهة ثابت شبيكتها $6.38 \text{ \AA}^{\circ}$ مساعدة في حل التمرين:

$$\ell = \sqrt{\left(a/\sqrt{2} \right)^2 + a^2}$$

الجواب: $7.814 \text{ \AA}^{\circ}$

15. احسب عدد الذرات لوحدة خلية كل من (a) المكعب البسيط (a) مكعب بمركز

الواجهة (c) شبيكة مكعب بمركز الجسم. (d). للكروم شبيكة برفز مكعب بمركز

الجسم طول ضلعه $2.88 \text{ \AA}^{\circ}$ بالنسبة لخلية مكعبة. احسب عدد ذرات الكروم لوحدة

حجم البلورة.

$$\text{الجواب: } 1(a) \ 4(a) \ 2(c) \ (d) \ 8.372 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$$

16. حديد مكعب بمركز الجسم وزنه الذري 56 وكثافته 7.9 gm/cm^3 احسب طول

$$\text{ضلع وحدة خلية المكعب. مساعدة في حل التمرين: } a^3 \cdot \rho = \frac{2 \times 56}{6.02 \times 10^{23}}$$

$$\text{الجواب: } a = 2.866 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

17. كم مكافئ للمستويات $\{111\}$ و $\{123\}$ في بلورة معينة قائمة؟

$$\text{الجواب: } \{111\} = (111), (11\bar{1}), (\bar{1}11),$$

$$\{123\} = (123), (\bar{1}23), (1\bar{2}3), (\bar{1}\bar{2}\bar{3})$$

18. كم مستوي مكافئ الى $\{100\}$ و $\{110\}$ و $\{111\}$ و $\{123\}$ في بلورة مكعب بسيط؟

الجواب:

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

$$\{110\} = (110), (\bar{1}10), (1\bar{1}0), (\bar{1}\bar{1}0) \text{ parallel to z-axis}$$

$$(011), (0\bar{1}1), (01\bar{1}), (0\bar{1}\bar{1}) \text{ parallel to x-axis}$$

$$(011), (0\bar{1}1), (01\bar{1}), (0\bar{1}\bar{1}) \text{ parallel to y-axis}$$

$$\{111\} = (111), (\bar{1}11), (1\bar{1}1), (\bar{1}\bar{1}1), (11\bar{1}), (\bar{1}1\bar{1}), (1\bar{1}\bar{1}), (\bar{1}\bar{1}\bar{1})$$

$$\{123\} = (123), (\bar{1}23), (1\bar{2}3), (12\bar{3})$$

19. ما الذي استوعبته من معاملات ميلر؟ ارسم معاملات ميلر للمستويات: (100)

و (110) لبلورة مكعبة. كيف يمكن حساب المسافة البينية بين المستويات لمجموعة

مستويات ميلر في بلورة مكعبة بدلالة ثابت الشبكة؟ اشتق المعادلة التي حصلت عليها.

20. دوّن معاملات (a): متجهات $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ لوحدة خلية، (b): أقطار أوجه مستويات ab

و bc و ca. (c): الطول القطري لجسم بلورة مكعبة. (d) دوّن مكافئات الطول

القطري لجسم بلورة مكعبة.

الجواب:

$$(a): [100], [010], [001]$$

$$(b): [110], [011], [101]$$

$$(c): [111]$$

$$(d): [111], [\bar{1}\bar{1}\bar{1}], [1\bar{1}\bar{1}], [\bar{1}1\bar{1}], [\bar{1}\bar{1}1], [1\bar{1}1], [\bar{1}11], [11\bar{1}]$$

21. صف خطوات رسم الاتجاه [uvw] موضحاً جوابك برسم الاتجاهات [121] و [234].

22. دوّن علاقة المسافة البينية d لمستويات (hkl) في شبكة ثلاثية الميل. استنبط من هذه العلاقة العلاقات التي تخص انظمة الشبكة الاخرى.

23. أثبت ان المسافة البينية d لمستويات (hkl) تعطى بوساطة:

$$1/d^2 = h^2/a^2 + k^2/b^2 + \ell^2/c^2$$

في حالة الشبكة المعينية القائمة و $d = a/\sqrt{h^2 + k^2 + \ell^2}$ في حالة شبكة مكعب بسيط.

24. اثبت ان المسافة البينية d_{111} و d_{110} لبلورة مكعبة ذات معاملات بيكة تعطى بوساطة $a\sqrt{2}$ و $a\sqrt{3}$ على التعاقب.

25. دوّن علاقة الزاوية θ بين العمود على المستويات $(h_1k_1\ell_1)$ و $(h_2k_2\ell_2)$ في بلورة معينة قائمة وكذلك استنبط العلاقة الخاصة بنظام البلورة الرباعي.

26. احسب زوايا السطح البينية لزوج الاوجه الخاصة ببلورة مكعبة: (100) و (010) و (111) و (111).

الجواب: $\theta = 90^\circ; 70^\circ 32'$

27. دوّن علاقة الزاوية δ بين الاتجاهين $[u_1 v_1 w_1]$ و $[u_2 v_2 w_2]$ في نظام معيني قائم. استنبط من هذه العلاقة ما يخص النظام الرباعي والمكعب.

28. احسب الزاوية بين الاتجاهات [100] و [110] ثم بين [100] و [111] لنظام مكعب.

الجواب: $\delta = \cos^{-1} \frac{1}{\sqrt{2}} = 45^\circ; \cos^{-1} \frac{1}{\sqrt{3}} = 54^\circ 44'$

29. احسب الزاوية θ بين المستوي (111) والاتجاه [111].

الجواب: $\theta = 90^\circ$

30. (a) ارسم مخطط تراكيب كل من: sc, fcc, bcc, hcp والماس.

(b) دوّن احداثيات الذرات المكونة لاساس كل تركيب ككسر من ضلع وحدة خلية. الجواب:

(b): بالنسبة الى sc 000، وبالنسبة الى fcc $0, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ و $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ و $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0, 0$ وبالنسبة الى bcc $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0, 0$ وبالنسبة للماس.

$000, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}$