بسم الله الرحمن الرحيم

الفصل الاول:علم البلورات
المرحلة الثالثة :فرع المواد /قسم العلوم التطبيقية
مدرس المادة : د. ناهدة جمعة حميد

علم البلورات

ويقسم الى :

- علم البلورات الفيزيائية ((Physical crystallography)) يهتم هذا الفرع بداراسة الصفات الفيزيائية للبلورات وعلاقة هذه الصفات بالخواص الهندسية لها .
- علم البلورات الكيميائية ((Chemical crystallography)) يتضمن هذاالنوع من الدراسات النظرية والعملية حول منشأ البلورات ونموها .

١- المواد الصلبة المتبلورة والغير متبلورة :
Crystalline and Amorphous Material

يمكن تصنيف المواد الصلبة وفقاً لمعايير مختلفة ، ومن أهم هذه المعايير ذلك الذي يصف المادة الصلبة من حيث كونها متبلورة (Crystalline) أو غير متبلورة (Amorphous) .

المواد المتبلورة : تحوي المواد الصلبة المتبلورة صفوفاً من الذرات مرتبة بشكل هندسي معين .أن لهذه الذرات داخل الشكل الهندسي صفة الترتيب الدوري ((Periodic arrangement)) ويطلق على هذه الصفة بالترتيب طويل المدى ((long – range order)) .

المواد غير المتبلورة : ويكون تجمع ذراتها بصورة عشوائية وبغير نظام مكونة هيئة معقدة بحيث لايمكن أعتبار تركيبها تكراراً لاي شكل معين .

وتتكون أما نتيجة لسرعة التبريد من الصهر كما في الزجاج أو نتيجة للتجمد البطيء كما هو الحالة في المواد الهلامية .

٢- البنية البلورية "Crystal structure" : _

تعرف البلورة على أنها جسيم صلب يحتوي على عدد من الذرات وله شكل هندسي معين ويتكون من وحدات غاية في الصغر تتكرر بأنتظام في الابعاد الثلاثة . ويمكن تعريف البنية البلورية من العلاقة التي تربط دور كل من الاساس Basis والشبيكة lattice في البناء . (شكل رقم ١-١) .

الاساس + الشبكية = البنية البلورية

الاساس Basis :- يعرف الاساس في علم البلورات على أنه عبارة عن أيون أو ذرة أو جزيئة أو مجموعة من الذرات تلتصق مع كل نقطة من نقاط الشبيكة لتشكل هيئة معينة . يلعب الاساس دوراً مهماً في البناء البلوري حيث يجب أن يكون متماثلاً في البنية والترتيب والاتجاه .

الشبيكة lattice :- يمكن تخيل البلورا بأنها ناتجة عن تكرار الاساس ولكن بدلاً من رسم وحدة النموذج الكلي يكون مناسباً أكثر تمثيل الاساس بواسطة نقطة شبيكة ((lattice point)) وهكذا تمثل كل نقطة شبيكة موقع ذرة أو أيون أو جزيئة أو مجموعة من الايونات أو مجموعة من الجزيئات لتنتج ترتيب منتظم من النقاط. أما في الابعاد الثلاثة فيطلق على هذا الترتيب بالشبيكة الفراغية ((Space lattice)) .

*

* * * * *

٣-المتجمعات الانتقالية للشبيكة: "Lattice Translation"

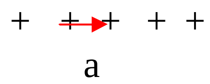
تحدد المواقع النسبية لنقاط الشبيكة بواسطة المتجهات الانتقالية البدائية (a) الذي يقع المحور – x و (b) على المحور y وأخيراً (c) الذي يقع على المحور z .

أ- المتجهات الانتقالية في الشبيكة الخطية: "Translation vector in linear lattice"

تحدد مواقع نقاط الشبيكة ذات البعد الواحد بمتجهة أنتقالي بدائي واحد يطلق عليه (a) ويرسم بين أي نقطتين متماثلتين متجاورتين كما هو مبين أدناه :

R = na

حيث n يمثل عدد صحيح موجب أو سالب .

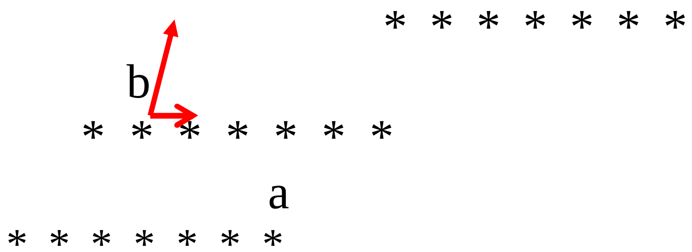


ب- المتجهات الانتقالية في الشبيكة المستوية: " Translation vector in planer lattice"

تحدد الشبكية المستوية (ذات بعدين) بمتجهين أنتقالين بدائيين وهما (a) و (b) . ان المتجهة الانتقالي الشبيكي (R) لاي نقطة متماثلة في الشبيكة المستوية . يجب أن يبدأ من نقطة تقاطع المتجهين الانتقالين التي تعد كنقطة أصل وكما هو مبين أدناه ويمكن كتابته بالصيغة الرياضية التالية : -

$$\mathbf{R = n_1 a + n_2 b}$$

حيث أن n_1, n_2 عددين صحيحين قيمة كل واحد منهما تعتمد على أختيار موقع نقطة الاصل .

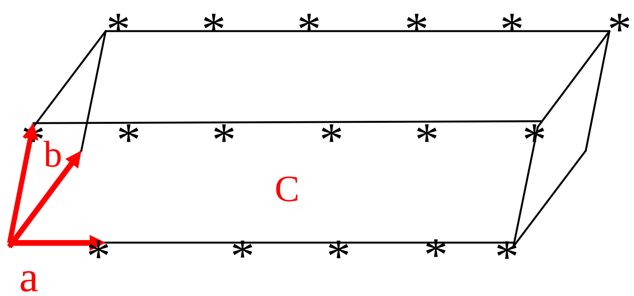


ج - المتجهات الانتقالية في الشبيكة الفراغية: "Translation vector in space lattice"

تحدد الشبيكة الفراغية (ذات الابعاد الثلاثة متجهات بدائية a,b,c وبهذا يجب أن يبدأ المتجه الانتقالي الشبيكي R لاي نقطة متماثلة في هذه الشبيكة من نقطة تقاطع المتجهات الثلاثة والتي تعد نقطة أصل وكما مبين أدناه .

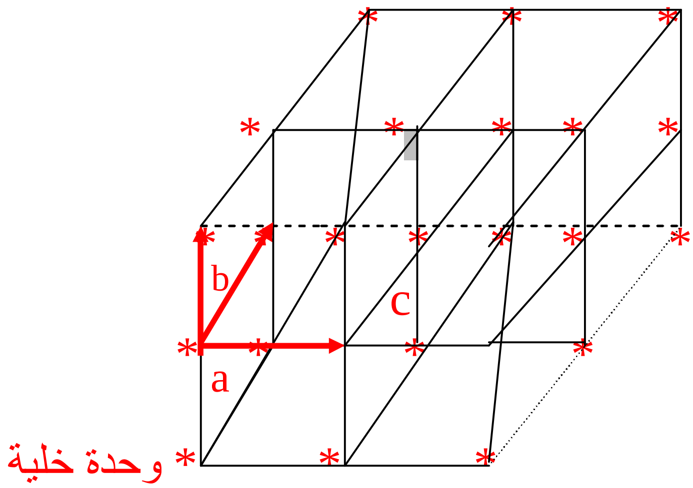
$$\mathbf{R=n_1 a + n_2 b+n_3 c}$$

حيث أن n_1,n_2,n_3 أعداد صحيحة

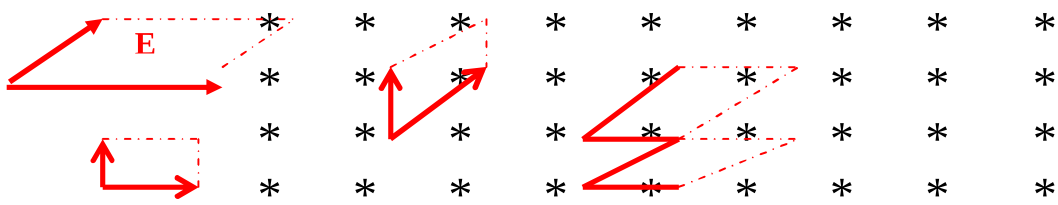


٤-وحدة الخلية " Uint cell " :-

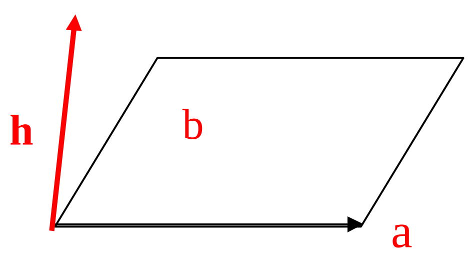
ان لكل مادة صلبة شكل بلوري خاص ولبناء هذا الشكل توجد وحدات بنائية مرتبة داخل البلورة في نظام هندسي ثابت . تحءزي هذه الوحدات على عدد معين من الايونات أو الذرات أو الجزيئات مرتبة في الاتجاهات الثلاثة داخل الشبيكة البلورية . وهكذا يمكن التعبير عن البلورة بدلالة الشبيكة .فعند ربط الشبيكة تحصل على سلسلة من الاجسام على شكل متوازي السطوح
((Parallipped)) وكما هو مبين في الشكل أدناه :-



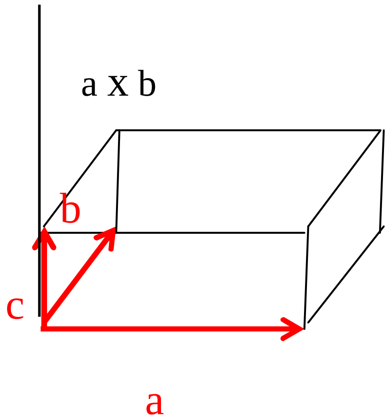
أما اذا أستعملت شبيكة ذات بعدين فيكون شكل وحدة الخلية متوازي أضلاع وكما هو مبين في الشكل أدناه حيث نجد أن مساحات الخلايا المرسومة متساوية .



تعرف وحدة الخلية ((بأنها وحدة في الشبيكة الفراغية وهي الوحدة التي بتكرارها في الاتجاهات الثلاثة ينتج عنها بلورة كبيرة من المادة الصلبة والتي لها نفس تماثل وحدة الخلية)) . تحدد وحدة الخلية عادةً بدلالة المتجهات c,b,a والزوايا المحصورة بين هذه المتجهات وهي الزاوية (α) الزاوية المحصورة بين a , c وهي (β) تمثل الزاوية المحصورة بين b,a وتمثل الزاوية المحصورة بين c,b والزاوية المحصورة بين b,a هي (γ) .



الارتفاع = b sin γ
المساحة = /a / / b/ sinγ
Area = a x b



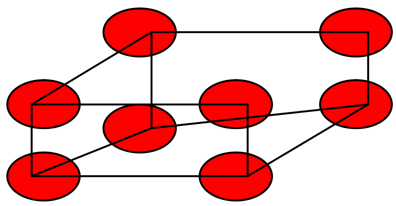
Area = a x b
Volume = a x b .c

٥- أنواع وحدة الخلية :- "Type of unit cell"

لقد وجد في علم البلورات نوعين أساسيين منl وحدة الخلية .

أ – الخلية البدائية ((primitive cell)) :-

يرمز لهذا النوع من الخلايا بالحرف (P) وهي أبسط أنواع وحدة الخلية وتكون على شكل متوازي مستطيلات فعلى الرغم من وجود نقطة شبكية (ذرة) عند الاركان الثمانية لوحدة الخلية البدائية ، الا أن كل نقطة ركنية من هذه النقاط مشتركة بين ثماني خلايا بدائية متجاورة فأن ١/٨ يتبع الخلية البدائية الواحدة وبالتالي تسهم النقاط الواقعة عند الاركان الثمانية بما يساوي نقطة شبيكية واحدة أذن كل خلية البدائية تحتوي على نقطة شبيكية واحدة أو ذرة [١= ٨x١/٨]



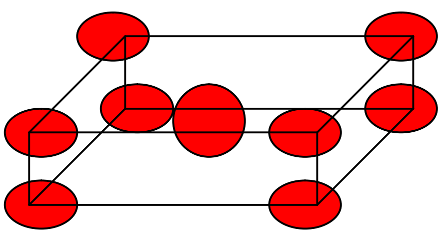
(p)

ب-– الخلية غير البدائية ((Non- primitive cell)) :-

يطلق على الخلية غير البدائية بالخلية المركبة ، وذلك لتداخل شبكتين أو أكثر لتكوين شكل مركب أخر . توجد الخلية غير البدائية على ثلاثة أنواع : -

١- خلية ممركزة الجسم Body –centred cell :-

يرمز لهذه الخلية بالرمز (I) ويحتوي هذا النوع من الخلايا على نقطة شبيكية واحدة متمركزة في الخلية بالاضافة الى وجود نقطة شبيكية عند كل نقطة ركنية بين ثماني خلايا بدائية متجاورة أذن كل خلية ممركزة الجسم تحتوي على نقطتين شبيكيتين .

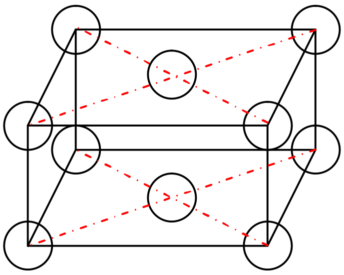


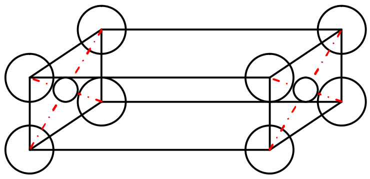
(I)

٢- خلية متمركزة الوجهين والقاعدة :

"Baser & Centered Cell"

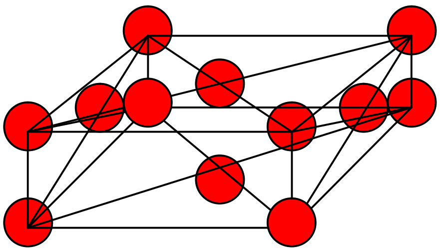
يرمز لهذه الخلية "C " ويحوي هذا النوع من الخلايا بالاضافة الى وجود نقطة شبكية عند كل نقطة ركنية مشتركة بين ثماني خلايا بدائية متجاورة ،على عند كل نقطة شبيكة عند مركز وجهين متقابلين وبما انه كل وجه مشتركا بين خليتين متلاصقتين ،فعليه فان (½) النقطة يتبع الخلية الواحدة وبالتالي تسهم النقطتين الواقعتين عند مركز الوجهين المتقابلين بمايساوي نقطة شبكية واحدة (١=X٢ ½) اذن كل خلية متمركزة الوجهين المتقابلين تحوي على نقطتين شبكية .





٣- خلية ممركزة الاوجه "Face cent real cell" :-

يرمز لهذه الخلية بالحرف (F) ويحوي هذا النوع من الخلايا بالاضافة الى وجود نقطة شبكية عند مركز كل وجه من الاوجه المحيطة بجسم متوازي السطوح، وحيث أن كل وجه يكون مشتركاً بين خليتين متلاصقتين فعليه فأن (½) النقطة يتبع الخلية الواحدة، وبالتالي تسهم النقاط الواقعة عند مركز كل وجه بما يساوي ثلاثة نقاط شبيكية (٣= ٦ X ٢ /١) وكما مبين في الشكل أدناه تحتوي كل خلية متمركزة الاوجه على أربعة نقاط شبيكية .



٦-الانظمة البلورية: "Crystal system"

لقد أستطاع العالم برافيز ((Bravais)) في عام ١٨٤٨ بجهود مكثفة أجراها في مجال دراسة علم البلورات للتوصل بوجود البنى البلورية بأربعة عشر شبيكة فراغية ، فقد أطلق على هذا النظام بأسم ((الشبيكات الاربعة عشر لبرافيز Bravais lattice – ١٤)) تختلف شبيكات الاربعة عشر لبرافيز بعضها عن بعض من حيث :
أولاً :- خلاياها والتي تعتبر وحدة البناء الاساسية لكل بلورة وتختلف في وحدات الخلية للمواد الصلبة في أطوال المحاور الثلاثة a, b, c . وتختلف في الزوايا المحصورة مابين المحاور البلورية (α ، β ، γ) .
ثانياً : تختلف في أنواع التماثل التي تمتلكها .
لقد صنف برافيز الشبيكات الفراغية الاربعة عشر الى سبعة أنظمة ، وفيما يلي شرح خصائص الأنظمة البلورية السبعة .

١- نظام ثلاثي الميل Triclinic system

$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha \neq \beta \neq \gamma = ٩٠^{o}$$

ويحوي هذا النظام على صنف واحد لشبيكة برافيز الخلية البدائية (P)

٢- نظام احادي الميل Monoclinic system

$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha = \gamma = ٩٠^{o} \neq \beta$$

يحوي هذا النظام على صنفين لشبيكة برافيز وهي شبيكة الخلية البدائية (P) وشبيكة الخلية المتمركزة الوجهين المتقابلين او القاعدتين (C) .

٣- النظام المعيني القائم Orthorhombic system

$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = ٩٠^o$$

ويضم هذا النظام أربعة أصناف لشبيكة برافيز وهي شبيكة الخلية البدائية (P) . و شبيكة الخلية المتمركزة الوجهين (C) وشبيكة الخلية المتمركزة (I) . وشبيكة الخلية المتمركزة الاوجه (F) .

٤- النظام الرباعي القائم Tetragonal system

$$a = b \neq c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = ٩٠^o$$

ويحوي هذا النظام على صنفين من شبيكة برافيز وهي شبيكة الخلية البدائية (P) . وشبيكة الخلية المتمركزة (I) .

٥- النظام المكعبي Cubic system

$$a = b = c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = ٩٠^o$$

ويضم شبيكة برافيز وهم شبيكة الخلية البدائية (P) وشبيكة الخلية المتمركزة (I) وشبيكة الخلية متمركزة الاوجه .

٦- نظام ثلاثي التماثل Trigonal system

$$a = b = c$$
$$١٢٠ > \alpha = \beta = \gamma = ١٢٠$$

٧- النظام السداسي Hexagonal system

$$a = b \neq c$$
$$\alpha = \beta = ٩٠$$

$$\gamma = ١٢٠$$

المصادر-١- أساسيات علم المواد / فان فلاك
٢- فيزياء الحلة الصلبة / يحيى الجمال

بسم الله الرحمن الرحيم

الفصل الثاني :علم البلورات
المرحلة الثالثة :فرع المواد /قسم العلوم التطبيقية
مدرس المادة : د. ناهدة جمعة حميد

التماثل البلوري " Crystal symmetry "

١-التماثل "Symmetry":-

يعرف التماثل على أنه تكرار أو تطابق أجزاء معينة لشكل ما عند أجراء عملية .مجموعة عمليات التماثل .

٢-عناصر التماثل "Symmetry element" :-

في الاشكال المتاثلة يمكن ان تتوافر العناصر التماثلية التالية : -

أ- محور التماثل .
ب- مركز التماثل .
ت- مستوى التماثل.
ث- محور التماثل الانقلابي .
والتي سيتم شرحها أدناه.

أ - محور التماثل Axis Symmetry :-

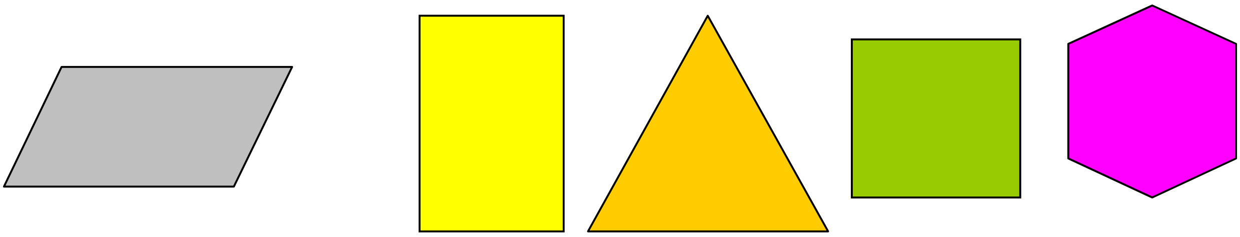
يعرف محور التماثل بأنه عبارة عن مستقيم أذا ما دار الشكل حوله بزاوية معنية حل الشكل محل نفسه . ان أصغر زاوية بدورها الشكل حول محور التماثل كي يحل الشكل محل نفسه تدعى بزاوية الدوران البدائية (θ) لذلك المحور . تحدد زاوية الدوران لمحور معين بعدد المرات التي يحل الشكل فيها محل نفسه ، عند دورانه حول ذلك المحور دورة كاملة أي زاوية قدرها ٣٦٠ . فأذا ما كانت زاوية الدوران البدائية لمحور التماثل تقدر بـ (θ) وعدد مرات أحلال الشكل محل نفسة عند الدوران ٣٦٠° بـ n يكون لدينا العلاقة

$$n = \frac{360}{q}$$

حيث (n) درجة محور التماثل

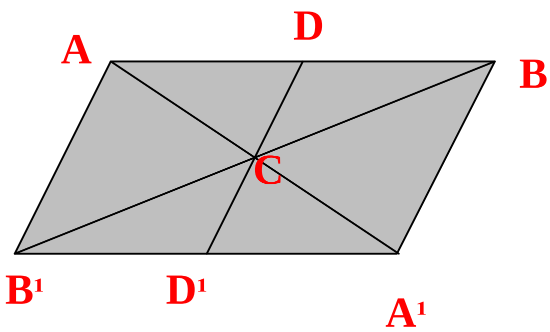
تعرف درجة محور التماثل بعدد مرات أحلال محل الشكل نفسه عند دورانه حول محور التماثل زاوية مقدارها ٣٦٠°
.

يقال لمحور التماثل الدوراني بأنه أحادي التماثل " one -fold axis " أذا كان تكرار الشكل مرة واحدة في الدورة الكاملة أي أن البلورة تعيد نفس الوضع كل مرة واحدة (٣٦٠°) ويقال ذلك لمحور التماثل الدوراني بأنه ثنائي التماثل" Two -fold axis " أذا كان تكرار الاشكال المتشابهة مرتين في الدورة الكاملة أي أن البلورة تعيد نفس الوضع كل (١٨٠°) وكما هو مبين بالشكل أدناه أذا تكرروضع البلورة ثلاث مرات خلال الدورة الواحدة أي كل (١٢٠°) يسمى المحور في هذه الحالة ثلاثي التماثل " Three -fold axis " وأما المحور الدوراني الرباعي التماثل " Four -fold axis " فيكرر الوضع أربعة مرات في الدورة الكاملة اي كل(٩٠°) وفي حالة المحور السداسي التماثل " Six -fold axis " وهو يمتثل بتكرار نفس الوضع ست مرات في الدورة الواحدة أي كل (٦٠°). ولقد توصل الباحثون في علم البلورات من أثبات أن المحاور الدورانية الخماسية والسباعية والثمانية التماثل لاوجود لها في البلورات حيث أنه لايتفق والترتيب الذري في النظم البلورية المختلفة ((أن السبب في ذلك يرجع الى أن وحدة البناء البلوري تقبل التكرار في الابعاد الثلاثة دون ترك فراغات بينها كما في الثنائي ، الثلاثي ، الرباعي والسداسي ولكن أن تكرار الخلية الواحدة التي لها تماثل خماسي أو سباعي أو ثماني ينتج عنه فجوات أو فراغات بينية في الترتيب الداخلي يؤدي الى عدم أنتظام البناء البلوري .



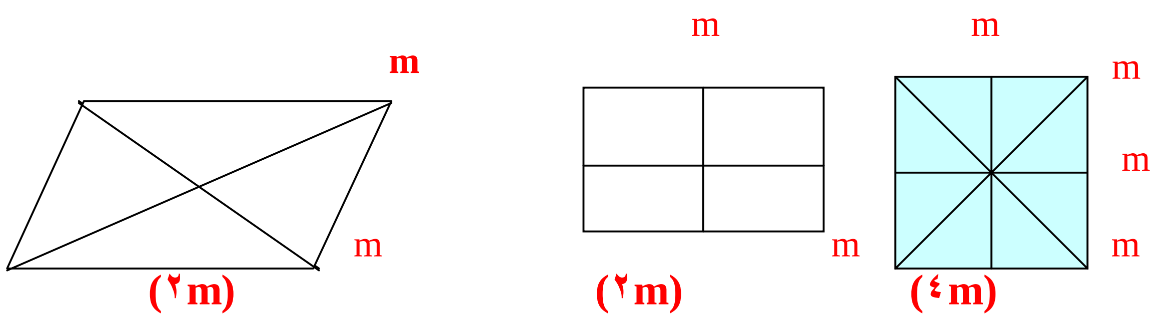
أ- مركز التماثل -: Symmetry centre

يعرف مركز التماثل بأنه عبارة عن نقطة خاصة داخل الشكل حيث أذا مر مستقيم ما من خلالها فأنه سيقابل نقطة مشابهه تماماً على الجزء المقابل وعلى مسافة مساوية ويرمز لمركز التماثل بالرمز (C) . يبين الشكل أدناه شكل متوازي أضلاع "ABA¯B¯" مع النقطة (C) الناتجة من تقاطع أقطار متوازي أضلاع بالنقطة (C) ثم حدد المستقيم الحاصل بمقدار يساوي (AC) فأن نهايته ستنطبق على (A¯) والعكس صحيح أذا ما أنعكست النقطة ((A¹ من النقطة (C) لانطبقت على النقطة (A) . بأنعكاس النقطتين (D,B) والنقطة (C) يتم أنطباقها في النقطتين (D¹,B¹) والعكس بالعكس وهكذا بالنسبة لكل نقاط الشكل .



جـ - مستوى التماثل " Symmetry Plane "

يطلق على مستوى التماثل بالمرآة المستوية ويعرف على أنه عبارة عن مستوى يقسم الجسم أو البلورة الى نصفين متساويين ومتشابهين بحيث يكون أحد النصفين مرآة "mirror image"للنصف الاخر . يرمز لمستوى التماثل بالرمز (m) , نرى في بعض الاحيان أن الجسم يمتلك مستوين للتماثل متقاطعين بزاوية قائمة أو يقال لها مرآة مزدوجة "double mirror " ويرمز لها ((٢m)) .



واجب : أرسم مستويات التماثل لنظام مكعبي .

د- محورالتماثل الانقلابي "Inversion axis of Symmetry"

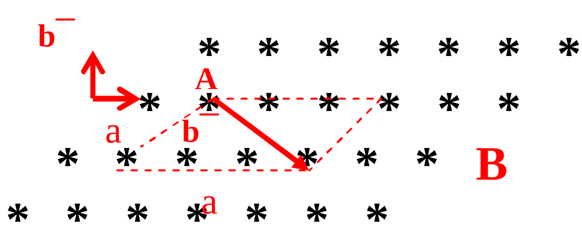
يعرف محور التماثل الانقلابي بأنه عبارة عن مستقيم أذا مادار الشكل حوله بزاوية معينة وأنعكست صورته خلال نقطة معينة لحل الشكل محل نفسه .
أذاً يتضح لنا من التعريف ان هذا العنصر التماثلي له عملية واحدة ذات مرحلتين متعاقبتين تبدأبمرحلة التدوير ولا يرد الجسم الى وضعه الاصلي ولكن يعقب ذلك مرحلة الانقلاب وعند الانتهاء منها نحصل على التماثل أو التكرار أي عودة الجسم الى وضعه الاصلي .يميز محور التماثل الانقلابي بوضع علامة (-) فوق رمز المحور الدوراني المناسب وعندما يقال محور تماثل انقلابي من النوع الثاني يعبر عن ذلك بشكل (‾٢) ويلفظ " two bar " وللمحور الانقلابي الثلاثي (‾٣)" three bar" وللمحور الانقلابي الالرباعي (‾٤) " four bar" وللمحور الانقلابي السداسي (‾٦) " six bar" ونؤكد مرة أخرى على عدم وجود محور أنقلابي خماسي .

٣-عمليات التماثل '' The Symmetry operations ''

هي العمليات التي تحدث على الجسم دون أن تغير شكله أو خصائصه فتؤدي الى التماثل . وهذه العمليات هي :-

١- عمليات التماثل الانتقالي ((Translation)) بواسطة المتجه الانتقالي T .
٢- عمليات التماثل الدوراني ((Rotation)) عن طريق دورانه بزاوية θ .
٣- عمليات التماثل الانقلابي ((Inversion)) من خلال أنقلابه عند المركز I .
٤- عمليات التماثل الانعكاسي ((Reflection)) عن مستوى عاكس (مرآة) .
٥- عمليات التماثل الانزلاقي ((Glide))(أنعكاسي + أنتقالي) .
٦- عمليات التماثل البرمي ((Screw)) (دوراني + أنتقالي) .

١-عمليات التماثل الانتقالي "Translation Symmetry operations"



حيث ‾b, a‾ المحاور البلورية

يسمى المتجه AB بالمتجه الانتقالي T فأذا أردنا أيجاد قيمته فأنها تكون متساوية الى

$$T^{-} = 3a^{-} - b^{-}$$

ويمكن تعريف T بدلالة المحاور البلورية (Crystal axis) ,b ، a بحيث يكون دائماً من مضاعفات عددية للمسافة ويمكن تطبيق T على أي نقطة داخل البلورة بحيث يحقق الشرط .

$$T^{-} = n_1\, a^{-} + n_2 b^{-}$$

$$T^{-} = n_1 a^{-} + n_2 b^{-} + n_3 c^{-} \qquad \text{(In two dimension)}$$

$$T^{-} = n_1 a^{-} + n_2 b^{-} + n_3 c^{-} \qquad \text{(In three dimensions)}$$

٢ ـ عمليات التماثل الدوراني بزاوية الدوران ''θ''

Rotation symmetry operation by angle ''θ''

يمكن تعريف زاوية الدوران كما يلي $q = \frac{2p}{n}$

حيث n عدد صحيح يدعى بـ n- fold

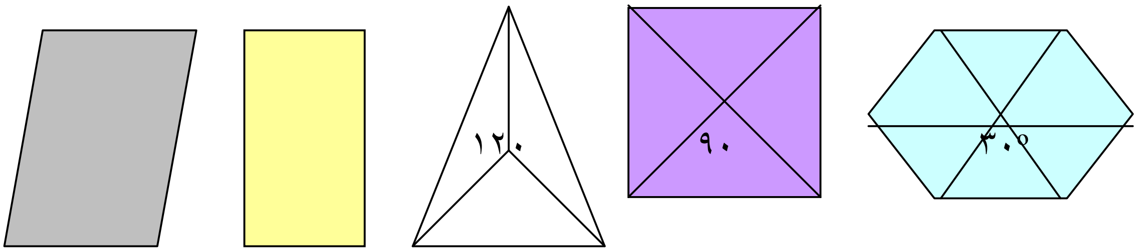
$$\rightarrow If\ n = 1 \rightarrow 1-\ fold \quad q = 2p = 360^{0}$$

$$\rightarrow If \quad n=2 \rightarrow 2-fold\,\theta = \pi = 180^0$$

$$\rightarrow If \quad n=3 \rightarrow 3-fold \quad \theta = \frac{2\pi}{3} = 120^0$$

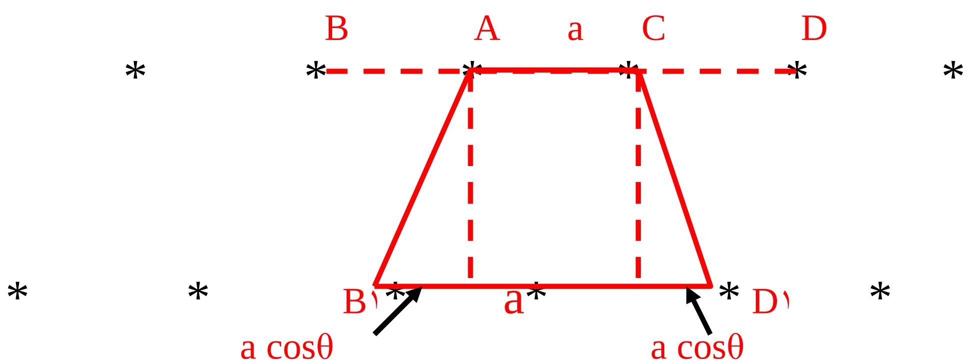
$$\rightarrow If \quad n=4 \rightarrow 4-fold\,\theta = \frac{2\pi}{4} = 90^0$$

$$\rightarrow If \quad n=6 \rightarrow 6-fold\,\theta = \frac{2\pi}{6} = 60$$



١-fold ٢-fold ٣-fold ٤- fold ٦- fold

أما الاشكال ذات المحاور الخماسية والسباعية والثمانية والتساعية فأنها لايمكن أن يكون لها محاور تماثلية لانه مثل هذا النوع لاتصلح أن تكون بلورة أي أنها وضعت نقطة أخرى بجانبها تكونت فراغاً بينها أي تترك مسافات مربعة (**هذا بالنسبة للخماسية**) اما الاضلاع السباعية وهي تسبب تراكب الواحدة فوق الاخرى عند صفها ومن هنا نستنتج أن أية جزيئة منفردة قد لا تمتلك أية درجة من درجات التماثل الدوراني تكون بلورة من تلك الجزيئات التي لها درجة تماثل السباعي فأكثر وذلك لان الاشكال السداسية تستطيع أن تملأ أي حيز دون ترك أي فراغ بينها أو حصول تراكب مع بعضها البعض بينما الاشكال الخماسية والسباعية وغيها لايمكنها عمل ذلك وأن ترك الفراغ ((over lapping)) بين وحدات البناء البلوري يؤدي الى عدم أنتظام دورية البناء البلوري في فضاء ثلاثي الابعاد .



كل نقطة من نقاط الشكل أعلاه هي تمثل " lattice point " من تعريف " lattice " أنها نقاط منتظمة ومرتبة لذلك يجب أن تكون النقاط المأخوذة هي شبكة حقيقية أي مضاعفات عددية للمسافة بين نقطتين وأذا لم تكن كذلك فأن (θ) يكون غير مسموح بها أي الشكل أعلاه لايكون " Translation "'((أذا كانت θ التي دورنا بهاالنقاط مسموحة يجب أن تكون النقاط الناتجة من مضاعفات عددية للمسافة مابين نقطتين ومن العلاقة يجب أيجاد :

$$B^1D^1 = Na$$

N = عدد صحيح ومن الشكل السابق: -

$$B^1D^1 = a + 2a\cos\theta$$

$$Na = a(1+2\cos\theta$$

$$N = 1 + 2\cos\theta$$

$$2\cos = N - 1$$

$$\cos\theta = \frac{N-I}{2}$$

أذا لم يتحقق الشرط هذا ($\cos q = \frac{N-1}{2}$) فلا تكون θ مسموحاً بها ويجب أن تكون N عدد صحيح ليس كبير وهناك قيم لـ cosθ و لـ N لتحقيق الشرط وهذه القيم :-

$$-1 \le \cos q \le 1$$

$$-1 \le N \le 3$$

س: لو كان لدينا شكل خماسي فماذا يحصل لونقلناه ؟

$$q = \frac{2p}{n} = \frac{2p}{5} = 72^0$$

$$\cos q = \frac{N-1}{2}$$

$$\cos 72^0 = \frac{N-1}{2}$$

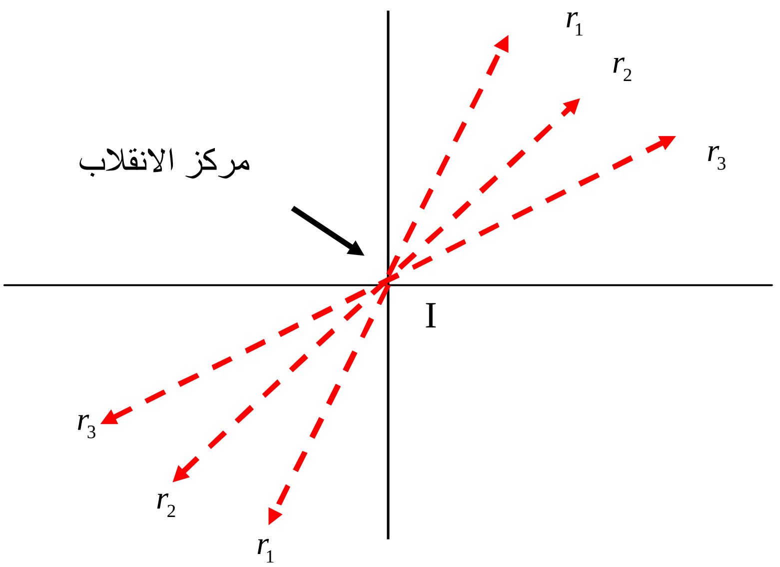
N= ٠,٤ $\neq$ لايمثل عدد صحيح

أي لم يتحقق الشرط أي لايحصل الانتقال أي أن الخماسي لايصلح أن يكون أنتقالياً .

واجب : لو كان لدينا شكل سداسي ، سباعي ماذا يحصل لو نقلناه

٣- عملية التماثل الانقلابي "Inversion symmetry operation""

نفرض وجود نقطة وهمية مثل (I) لمركز أنقلابي وعملها هو قلب المتجه r_1 الى r_1 وهذا يدعى بالتماثل الانقلابي والبلورة تمتلك نقطة أنقلاب مركزي .



$$r_1 = ax_1 i + ay_1\ i$$

$$-r_1 = ax_1 i - ay_1 j$$

٤- عملية التماثل الانعكاسي " Reflection (mirror) symmetry operation"

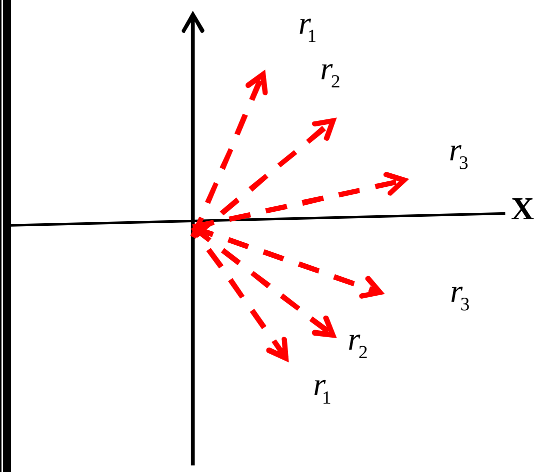
أن الفرق بين التماثل الثالث والرابع هو أن المحور الثالث يتم خلال نقطة بينما الرابع يتم على مرآة .

فأذا وضعنا المرآة على المحور (x) فأن المحور(y) هو الذي سوف يتغير (تنقلب أشارته) وبالعكس .

أ- عند وضع المرآة على المحور (x)

$$r_1 = ax_1 i + ay_1 i$$

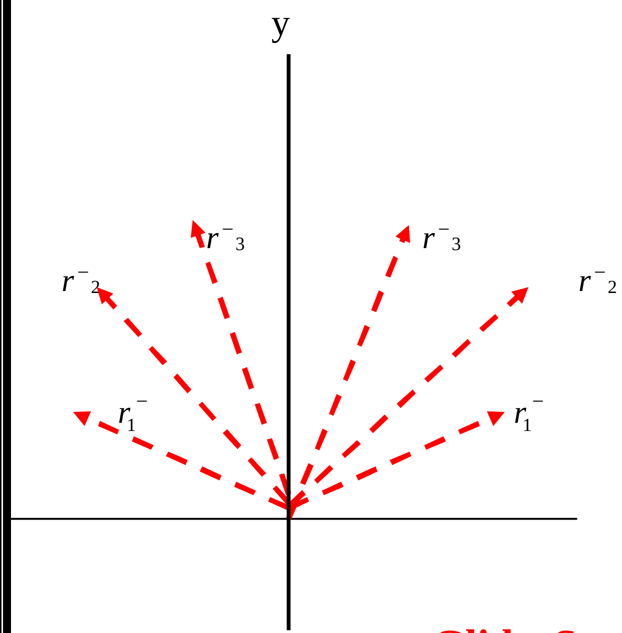
$$r_1 = ax_1 i - ay_1 i$$



ب- عند وضع المرآة على المحور (y)

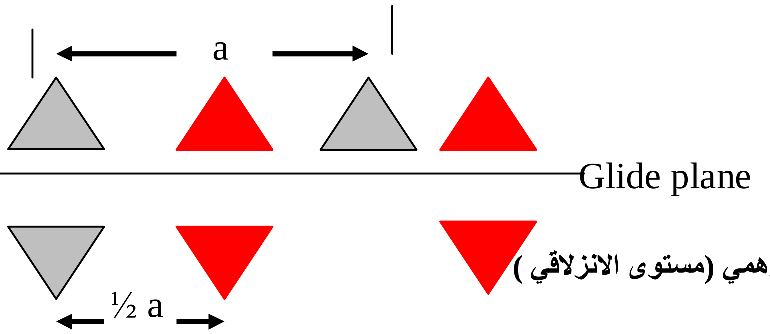
$$r_1 = ax_1 i + ay_1 j$$

$$r^-_1 = -ax_1 i + ay_1 j$$

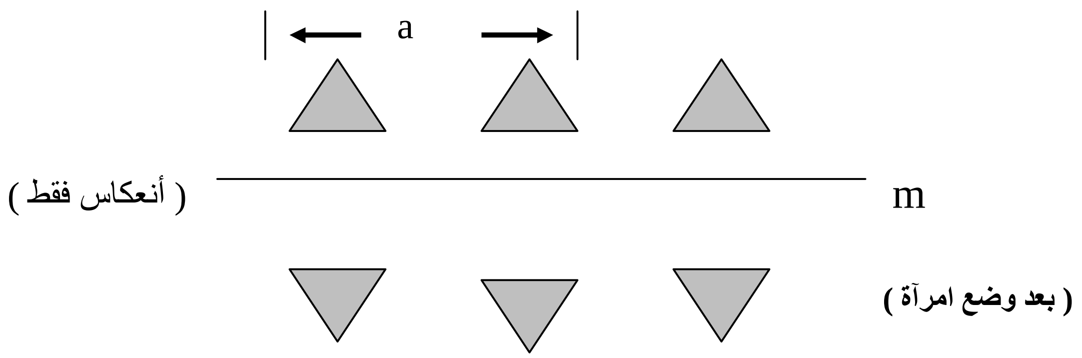


٥ – عملية التماثل الانزلاقي " Glide Symmetry Operation (Rotation + Translation)"

(أنعكاس + أنزلاق)



خط وهمي (مستوى الانزلاقي)



أذا فرضنا أن لدينا مستوى وهمي عمله عمل مرآة أو بنفس الوقت تنقل النقطة العليا صورتها نحو الاسفل مزاحة بمقدار (½ a) وهذه النقطة عند تطبيق (Glide) عليها سوف تكون أيضاً مزاحه بـ (½ a) .نستنتج حصول (أنعكاس وأنزلاق) في الاول و (أنعكاس) فقط في الثاني .

٦- عملية التماثل البرمي "Screw Symmetry Operation (Rotation + Translation)"

عمله عمل البرغي فأنه يدور حول محور وينفس الوقت يزاح نحو الاعلى أو الاسفل .
أذن التماثل البرمي يمكن أن ينجز من خلال الدوران بـ n – fold مع أزاحة وأنتقال بواسطة المتجه T لذلك :

$$nT^{-} = Na^{-} \qquad T^{-} = \left(\frac{N}{n}\right)a^{-}$$

حيث N عدد صحيح
$n = \left(\frac{2p}{q}\right)$ عدد الدوران (fold)
a ثابت الشبيكة

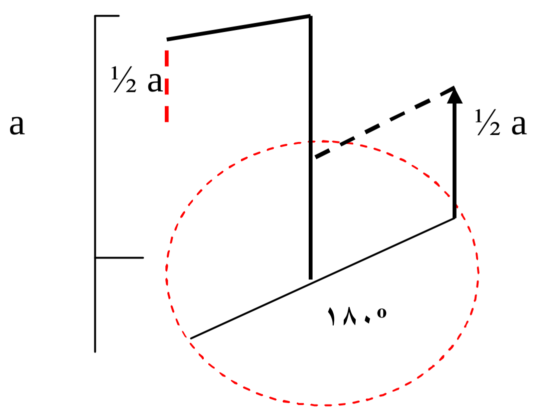
مثال: أرسم عملية التماثل البرمي (Nn = ٢١)

أي n =٢, N =١

$$T = \frac{N}{n}a^{-}$$

$$T = \frac{I}{2}a$$

$$q = \frac{2p}{n} = \frac{2p}{2} = p \quad (\text{أي } ٢\text{-fold})$$



واجب : أرسم

$N4_1$

$n = 4, N = 1$

3_2

$n = 3, N = 2$

بسم الله الرحمن الرحيم

الفصل الثالث:علم البلورات
المرحلة الثالثة :فرع المواد /قسم العلوم التطبيقية
مدرس المادة : د. ناهدة جمعة حميد

المستويات البلورية ومعاملاتها '' Crystal plan and their indices ''

تتكون البلورات من مستويات ذرية " Atomic planes " والتي تسمى بمستويات الشبيكة "Lattice planes". أن لكل مستوي من المستويات له موقع وأتجاه داخل البلورة . وتعتمد الخواص الفيزيائية على المستويات وأتجاهها داخل البنية البلورية .وكما هو معلوم لايجاد أي موقع ، أي نقطة أو أي خط مستقيم تستعمل نظريات الهندسة التحليلية ، أما بالنسبة الى المستويات البلورية وأتجاهاتها فهناك طرق مختلفة لايجادها أو تمثيلها ومن أهم تلك الطرق طريقة التقاطع وطريقة ميلر .

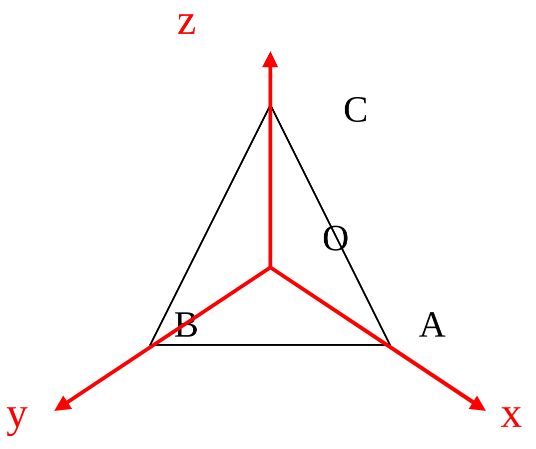
١- طريقة التقاطع '' Intercepts Method ''

يمثل أي مستوي من البلورة بنسب أطوال تقاطع هذا المستوي مع المحاور البلورية الرئيسية الثلاثة.

٢-طريقة ميلر '' Miller Method ''

لقد أستطاع ميلر في القرن الماضي من أيجاد طريقة لتمثيل المستويات غير المعتمدة على الزوايا الصلبة بل تعتمد على أرقام ثلاثة يرمز لها (l, k , h) ويطلق عليهم بمعاملات ميلر . ونختار هذه الطريقةعن الطريقة الاولى هو تجنب أستخدام أشارة المالانهاية (∞) لتحديد المستويات التي لاتقاطع مع محاور الاتجاهات الرئيسية وتتلخص الطريقة كالاتي :-

١- أختيار ثلاثة محاور كارتيزية z,y,x بحيث يقطعوا المستوي ولا يقعد عليه . كما مبين في الشكل :-



٢- قس المسافة بين نقطة الاصل ونقاط تقاطع المستوي مع المحاور الكارتيزية ولتكن A على المحور x وB على المحور y وC على المحور z . ومن المحتمل أن تكون قيم C,B,A أعداد صحيحة أو مضاعفة أو أجزاء كسرية وتكون أما سالبة أو موجبة .

٣ - خذ مقلوب قيم الاعداد C,B,A . فأذا كانت نتيجة مقلوب هذه الاعداد تساوي أعداد صحيحة وكميات كسرية أو كان جميعها كميات كسرية فيضرب كل مقلوب بأصغر عدد صحيح (أصغر قاسم مشترك) ليحول جميع المقلوبات الى أعداد صحيحة، فيكون الناتج حينئذ هو معاملات ميلر (hkl) لذلك المستوى .

٤- ضع معاملات ميلر (hkl) بين قوسين صغيرين من دون وضع أشارة الفارزة بين المعاملات وعلى هذا النحو (hkl) يمثل المستوى المرسوم .

٥- قد تكون جميع معاملات ميلر أعداد موجبة وتكون جميعها سالبة أو مختلفة موجبة و سالبة حيث تعتمد على تقاطعات المستوي مع المحاور المختارة .

مثال :- جد معاملات ميلر للمستوي الذي يقطع الاحداثيات الكارتيزية عند x=٣ , y=٢ , z =١ .

١- نأخذ مقلوب الاعداد C=١ , B=٢, A=٣

١/١ ، ½, ⅓

٢- نضرب هذه الارقام بالقاسم المشترك الاصغر (٦) :

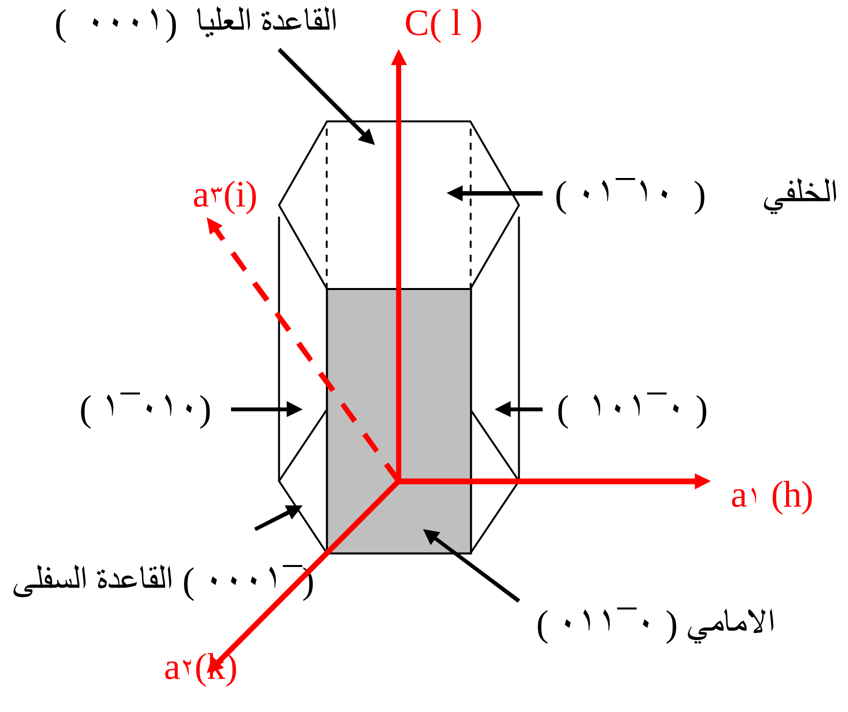
٦ × (١/١ ، ½, ⅓)

(٦ ,٣ ,٢)

٣- نضع هذه الارقام بين قوسين صغيرين من دون أشارة الفارزة (hkl) : (٢٣٦) .وهذه تمثل أحداثيات المستوي .

٣-معاملات ميلر للنظام السداسي " Hexagonal "

يمكن لمعاملات ميلر الثلاثة (hkl) أن تصف جميع المستويات المختلفة أي بلورة . في الانظمة السداسية " Hexagonal " من المفيد وضع أربعة محاور كما مبين في الشكل أدناه .تؤدي هذه الى أربعة تقاطعات ومعاملات (h k i l) تدعى بمعاملات ميلر – برافيز " Miller –Bravais indices " أن المعامل الرابع (i) يعتبر معامل أضافي واللذان يرتبطان بمجموع المعاملين الاولين بالعلاقة (h + k = -i) .



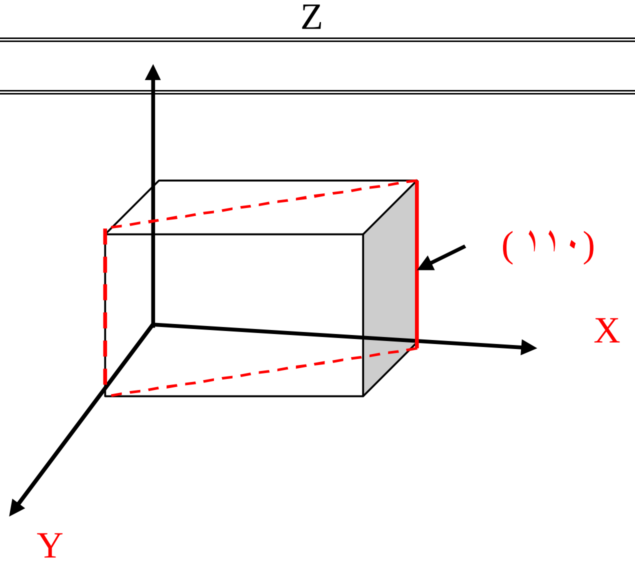
واجب :أرسم المستويات في بلورة مكعبة (٠٠١) ، (١٠٠‾) ، (١٠٠) ، (٢٢٢) ،(١١٠) ، (١١١) ، (١١٠) ،(٠٢٠) ،(٠١٠‾) ،(١٠١) ، (١٢١ ‾) في بلورة سداسية المستويات (٠١٢‾١) ، (٢١‾٠١) ،(٠٠٠٢) .

٤- تعيين موقع المستويات داخل البلورات المكعبة :-
Position of planes in a cubic crystal

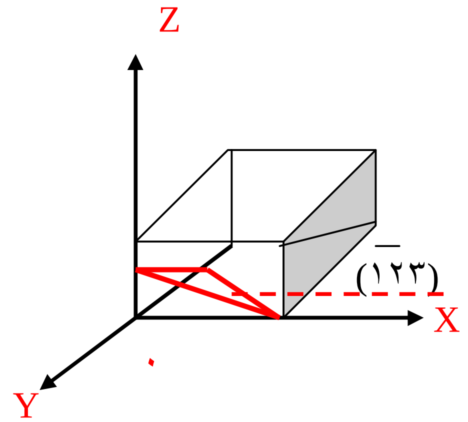
يتم تعين المستويات في البلورة المكعبة بنفس الطريقة المذكورة أنفاً مضافاً اليها نقطة أخرى وهي تحديد طول ضلع الخلية .

مثال أرسم المستوي (١١٠) في بلورة مكعبة ؟

١١٠
١/٠ ، ١/١ ،١/ ١
∞ ، ١، ١



مثال : أرسم المستوي (٣ ¯١٢) داخل بلورة مكعبة ؟



واجب : أشر وأعط معاملات ميلر لاوجه البلورة المكعبة ؟

٥- أتجاهات المستويات داخل البلورة ": Planes direction in side the crystal"

يمكن تصنيف أتجاه أي مستوي داخل البلورة بأستخدام ثلاث معاملات أساسية (w,v,u) وتكتب عادة بالصيغة التالية (uvw) .أن قيم هذه المعاملات أعداد صحيحة وليس لها معامل مشترك أكبر كما هو المعمول به في قيم معاملات ميلر وتكتب قيم مركبات المتجهات كالآتي :-

أ- بأتجاه المحور -X **a = u a**
ب- بأتجاه المحور -Y **b = u b**

ج - بأتجاه المحور Z   c= w c

فعلى سبيل المثال يعبر عن أتجاه المستوي (١١١) ب [١١١] أما في حالة البلورة المكعبة فيمكن كتابة المستويات :

[١٠٠] ⟶ مستوي بأتجاه المحور - X

[٠١٠] ⟶ مستوي بأتجاه المحور - Y

[٠٠١] ⟶ مستوي بأتجاه المحور - Z

أن البلورة التي تحوي على عدد من المستويات يكون لها أتجاهات متكافئة يعبر عنها بالصيغة [uvw] فعند كتابة < ١١٠ > يقصد به أن هناك مستويات واقعة في أتجاهات متكافئة وهم [٠١١] ، [١٠١] ، [١١٠] ، [٠١¯١] ، [¯١٠ ¯١] ، [¯١ ¯١٠].

٦- تقاطع المستويات " Intersection of planes "

خط تقاطع له معامل أتجاهي مساوي الى حاصل الضرب الاتجاهي لمعاملات ميلر للمستويين المتقاطعين:-

(hkl) ×(h¹k¹l¹) =[uvw]

(١١١) × (١١٢) =

w	v	u
١	١	١
٢	١	١

u = [٢-١] = ١

v = [١-٢] = -١

w = [١-١] = ٠

uvw = [١١¯٠]

[١١١] × [١١٢] = [١١¯٠]

ويحدد هذا خط تقاطع المستويات .

٥-الزاوية بين المستويين " Angle between two planes "

لايجاد الزاوية θ بين المستويين يجب معرفة معاملات ميلر لكل مستوي ينتمي الى نطاق له متجه محور النطاق [uvw] ولايجاد العلاقة الرياضية ترمز للمستوي الاول .

$$A = h_1u_1 + k_1v_1 + l_1w_1 \ldots\ldots\ldots\ldots(1)$$

$$B = h_2u_2 + k_2v_2 + I_2w_2 \ldots\ldots\ldots\ldots(2)$$

$$A.B = /A//B/\cos q$$

$$\cos\Theta = \frac{(h_1u_1 + k_1v_1 + l_1w_1)\bullet(h_2u_2 + k_2v_2 + l_2w_2)}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2}\bullet\sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}$$

$$\cos\Theta = \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + I_1I_2}{\sqrt{(h_1^2 + k_1^2 + I_1^2)\times(h_2^2 + k_2^2 + I_2^2)}} \ldots\ldots\ldots\ldots(3)$$

آخذين بالحسبان

u١. u٢ = v١.v٢ = w ١.w٢ = ١

θ =٠ cos θ=١

u١. v١ = u١. w٢ = v١. u٢ = v١. w٢ = w١. u٢ = w١. v٢ = ٠

$\theta = ٩٠^o$, $\cos\theta = ٠$

مثال: أحسب الزاوية المحصورة بين (١٠٠) ، (٠١٠)

$$\cos q = \frac{h_1 h^2 + k_1 k^2 + I_1 I^2}{\sqrt{\left(h_1^{\,2} + k_1^{\,2} + I_1^{\,2}\right) \times \left(h_2^{\,2} + k_2^{\,2} + I_2^{\,2}\right)}}$$

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

$\theta = ٩٠^o$

واجب : أ) أحسب الزاوية المحصورة بين [١١١] ، [٠٠١] في بلورة مكعبة .
ب) أحسب الزاوية المحصورة بين [١١١] ، [١‾١١]

مثال : جد المستويات المكافئة {١٠٠}, {١١١}

{١٠٠} ≡ (١٠٠), (٠١٠) , (٠٠١) , (١‾ ٠٠) , (٠١‾٠) ,(٠٠١‾)

{١١١} ≡ (١١١) , (١‾١١), (١١‾١) , (١١١‾) ,(١‾١١‾), (١‾١١), (١١‾١),(١١‾١)

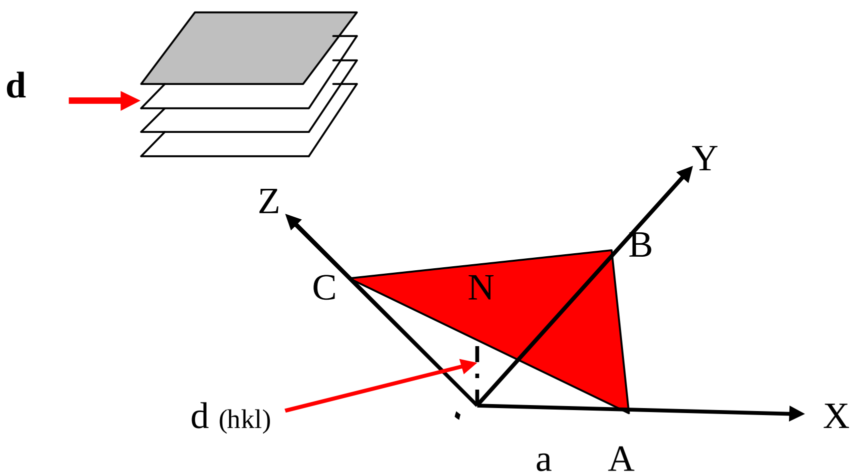
مثال : جد الاتجاهات المكافئة < ١١٠ >:-

< ١١٠ > = [١١٠] , [٠١١] , [١٠١] , [‾١١٠], [١ ‾١٠], [١٠١‾], [‾١٠١], [‾١١٠] , [٠١١ ‾],[١‾٠١‾], [٠ ١‾١], [٠١١ ‾]

واجب : أ) جد المستويات المكافئة {٢١٠}
ب) جد الاتجاهات المكافئة < ١٢١ > , < ١١٠ > .

٧-المسافة بين المستويات " Inter planer distance "

تتكون البلورة من عدد من المستويات يفصل بعضها عن بعض مسافة بينية يرمز لها بالرمز (d_{hkl}) .كما هو مبين في الشكل أدناه .يمكن حساب المسافة البينية للمستويات التي لها نفس معاملات ميلر .



أن معاملات ميلر للمستوي ABC المبين في الشكل هي (hkl) وبما أن المحاور متعامدة ، فيكون المثلث (ONA) قائم الزاوية وأن المسافة الفاصلة بين نقطة الاصل والمستوي ABC هي (ON) .

$$ON = OA\cos a \ldots\ldots\ldots\ldots(1)$$

$$ON = d_{(hkl)} \ldots\ldots\ldots\ldots(2)$$

$$d_{(hkl)} = \left(\frac{a}{h}\right)\cos a \ldots\ldots\ldots\ldots(3)$$

$$\cos^2 a = \frac{h^2}{a^2} d^2{}_{(hkl)} \ldots\ldots\ldots\ldots(4)$$

وكذلك في المثلثين ONB , ONC

$$\cos b = \frac{k^2}{b^2} d^2{}_{(hkl)} \ldots\ldots\ldots\ldots(5)$$

$$\cos^2 g = \frac{l^2}{c^2} d^2{}_{(hkl)} \ldots\ldots\ldots\ldots(6)$$

$$\cos^2 a + \cos^2 b + \cos^2 g = 1$$ **(Directional** cosine **)**

$$\frac{h^2 d^2{}_{(hkl)}}{a^2} + \frac{k^2 d^2{}_{(hkl)}}{b^2} + \frac{l^2 d^2{}_{(hkl)}}{c_2} =$$

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

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

وللمكعب : a = b = c = a

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

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

مثال جد المسافة بين المستويات الاتية :

$$d010 = \frac{a}{\sqrt{0+1+0}} = a$$

$$d111 = \frac{a}{\sqrt{1+1+1}} = a$$

$$d001 - \frac{a}{\sqrt{0+0+1}} = a$$

$$d111 = \frac{a}{\sqrt{1+1+0}} = \frac{a}{\sqrt{2}}$$

$$d^{-}100 = \frac{a}{\sqrt{1+1+0}} = a$$

بسم الله الرحمن الرحيم

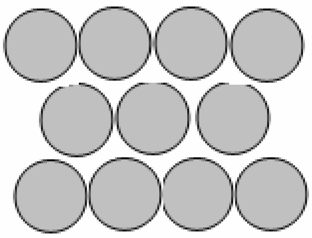
الفصل الرابع :علم البلورات
المرحلة الثالثة :فرع المواد /قسم العلوم التطبيقية
مدرس المادة : د. ناهدة جمعة حميد

طرق رص الذرات و الايونات : "The mechanism of packing the atoms and ions "

هناك عدة طرق لرص الذرات أو الايونات على أعتبار أنها كرات ثابة الحجم .

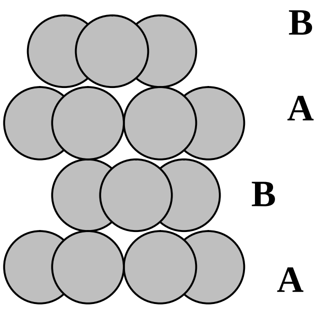
١-الرص المحكم " Close packing "

عندما ترص ذرات المادة الصلبة التي تشبه كرات صلدة متساوية الحجم في مستوى واحد بالطريقة التي تجعل ونوع مراكز هذه الكرات على أركان مثلث متساوي الاضلاع بحيث تلامس ست كرات أخرى وكما هو موضح في الشكل ، ويطلق على هذا الرص بالرص المحكم، أذا أضيفت طبقة ثانية من الكرات فوق الطبقة الاولى بحيث تقع كل كرة من الطبقة التالية فوق الفجوة المتكونة من التقاء ثلاث كرات مع بعضها في الطبقة الاولى ثم أذا أضيفت طبقة ثالثة سينشأ نوعين من الرص .



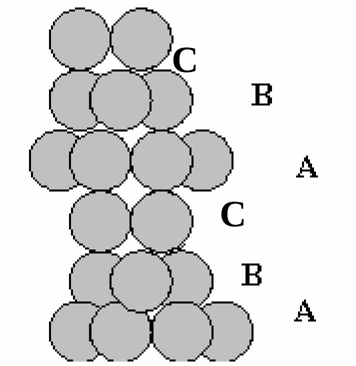
٢- الرص السداسي المحكم "Hexagonal close packing "

حيث تترتب كرات الطبقة الثالثة فوق الطبقة الاولى وعند تكرار النوع من الترتيب نحصل على بنية متكررة وبعد كل طبقتين أي AB AB AB.......... ويطلق على هذا النوع من الرص بأسم الرص السداسي المحكم ويرمز له بالرمز (hcp) أن كل كرة في هذه البنية تكون على تماس مع ست كرات في نفس المستوي ، وضع ثلاث كرات في الطبقة التي فوقها وثلاث
كرات في الطبقة التي فوقها والتي تحتها وكما هو مبين في الشكل أدناه .



٣ - الرص المكعبي " Cubic close packing "

تترتب كرات الطبقة الثالثة فوق فجوات الطبقة الاولى التي تحتلها كرات الطبقة الثانية ، وتتكرر العملية في هذا الترتيب بعد ثلاث طبقات أخرى ....ABC , ABC , ABC ويطلق على هذا النوع من الرص أسم الرص المكعبي المحكم ويمز له بأختصار CCP . أن كل كرة في هذه البنية تكون على تماس مع ثلاث كرات في الطبقة التي فوقها والتي تحتها وكما هو مبين أدناه :-



هناك نوعين من الرص المكعبي المحكم وهي الرص المكعبي المحكم ممركز الاوجه الرص المكعبي ممركز الجسم .تتبلور جميع الفلزات بترتيب الرص المحكم أو بترتيب الرص المكعبي ممركز الجسم وذلك لان البلورات مكونة من ذرات من نوع واحد . أما البلورات الايونية فلا تتكون من أيونات متماثلة أحادية النوع بل في أيونات موجبة وسالبة ولذا تتحكم عدة عوامل في تحديد بنية البلورة الايونية .

٤-البلورات الايونية " Ionic crystals "

تتكون البلورات الايونية من أيونات من أيونات موجبة وأيونات سالبة . يميل كل أيون لاحاطة نفسه بأكبر عدد ممكن من الأيونات ذات الشحنة المعاكسة . يعتمد العدد التناسقي للبلورات الايونية على النسبة بين حجمي الايونين الموجب والسالب وعلى الشرط اللازم لاستقرار الذرة لذا فأن عدد الأيونات السالبة التي تستطيع ملامسة ايون موجب عدد محدد ، وعليه فأن العدد التناسقي لكل من الايون الموجب والايون السالب في البلورات الايونية البسيطة من نوع ($A^+ B^-$) وذلك لضمان تعادل الشحنة . تنشأ الاواصر الايونية من تفاعل ذرات ذات طاقة تأين واطئة (أذا تفقد الكترون أو أكثر بسرعة) مع ذرات تميل الى أكتساب الالكترونات الفائضة . وتعطي الذرات الاولى الكترونات للذرات الاخيرة لتصبح أيونات موجبة وسالبة على التعاقب ، ونأخذ الايونات في البلورات الايونية حالة التوازن عندما تتعادل قوة الايونات المتشابهه . أن أبسط مثال على البلورات الايونية هي المركبات المتكونة من أرتباط فلزات موجبة الكهربائية ذات قابلية على التحول الى أيون موجب بسهولة مثل أيون الصوديوم وأيون المغنسيوم مع عناصر سالبة الكهربائية ذات القابلية على التحول اى أيون سالب مثل الكلور وأيون الفلور وأيون البروم أيون اليود وأيون الاوكسجين وأيون الكبريت .

أن أهم خواص البلورات الايونية هي : -

١- رديئة التوصيل للكهربائية والحرارة وذلك بسبب أفتقارها للالكترونات الحرة وبتحسين توصيلها الكهربائي عند درجات عالية .
٢- تكون البلورات الايونية صلدة جداً وذلك بسبب القوى الكهربائية القوية نسبياً بين الايونات .
٣- لها درجات أنصهار وغليان عاليتين .
٤- تمتص البلورات الايونية الاشعة الصادرة من المنطقة تحت الحمراء حيث تكون طاقة الطيف لتلك المنطقة كافية لتهيج أهتزازي للذرات وهذا يعود الى أن القوى (قوى تآصر البلورات الايونية) والتي تكون ضعيفة .
٥- تكون معظم البلورات الايونية دايمغناطيسية أي تنافر مع المجالات المغناطيسية ، حيث أن الاوربيتالات الالكترونية للايونات تكون مشبعة والكترونات كل اوربيتال مزدوج وذلك تكون محصلة العزم المغناطيسي صفراً .
٦- تذوب البلورات في المذيبات المستقطبة التي لها ثابت عزل كهربائي عالي .

٥-البنية البلورية لبعض البلورات الايونية "Crystal structure for some crystals "

سنتطرق الى البينات البسيطة مثل بنية كلوريد الصوديوم وبنية كلوريد السيزيوم وبنية كبريتيد الخارصين .

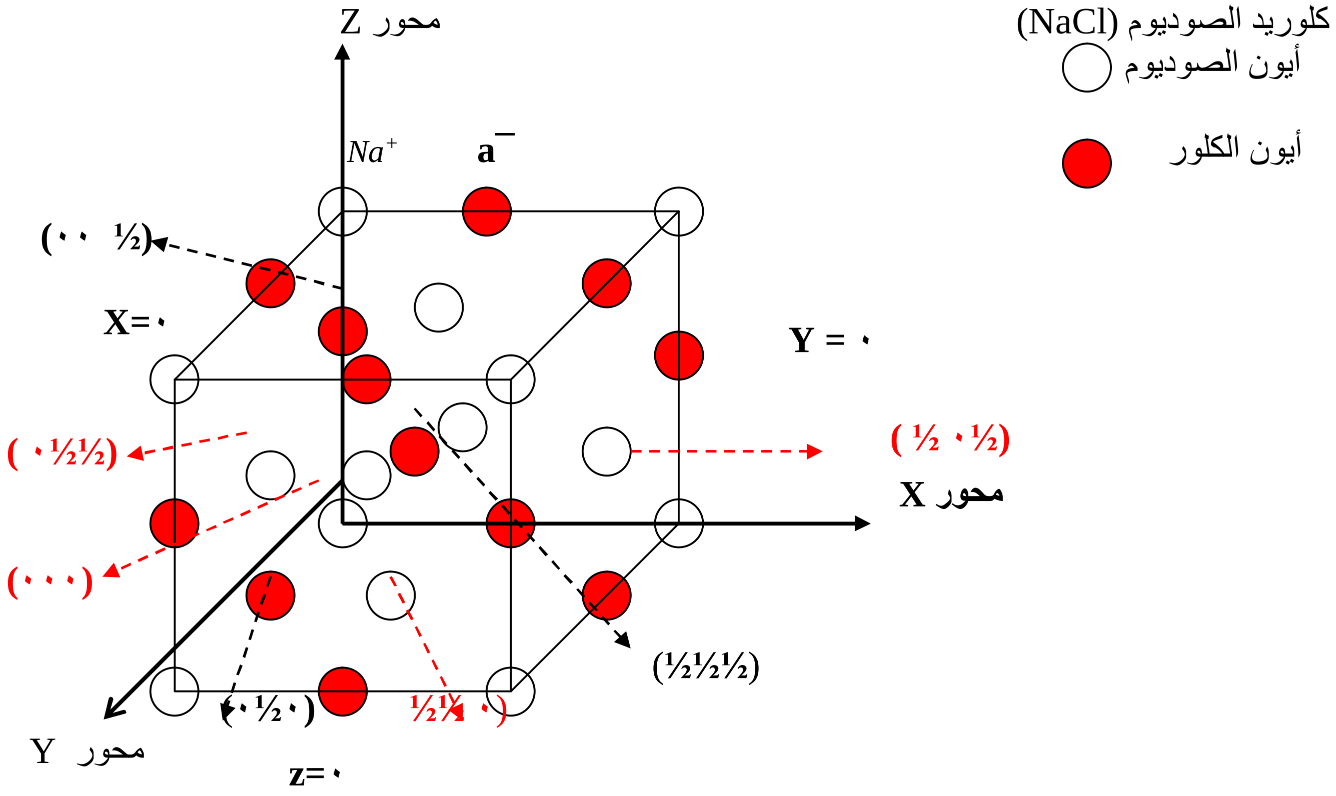
أ- بنية كلوريد الصوديوم "NaCl"

تعد وحدة الخلية لبنية كلوريد الصوديوم (NaCl) المبينة في الشكل من الخلايا غير البدائية وذلك لتداخل شبيكتين أحداهما مكونة من أيونات (Na) والاخرى من أيونات (Cl) .
والشبيكتان مزاحة أحدهما عن الاخرى بأتجاه الخط الذي يربط ركنين متقابلين في المكعب بمقدار يساوي (½) ، وأن بنية كلوريد الصوديوم هي من نوع ممركز الوجه (Fcc) حيث يحيط كل أيون (Na) (٦) أيونات من (Cl)والعكس صحيح . وعليه يكون العدد التناسقي لبلورة كلوريد الصوديوم يساوي (٦) . تحتوي وحدة الخلية (لكلوريد الصوديوم على أربعة أيونات من الصوديوم وعلى أربعة أيونات من الكلور في وحدة الخلية) كما يلي :

$$Na^+ = 000 \cdot ½½ \text{ ٠ } ,½ \text{ ٠}½ , \text{ ٠}½½$$

$$Cl^- = ½½½ \text{ ،٠٠٠ } ½ , \text{ ٠ } ½ \text{ ٠ } ,½ \text{ ٠٠}$$

أن البلورات التي لها نفس بنية كلوريد الصوديوم كثيرة وتشمل بشكل عام فلوريدات وبروميدات وأيونات الصوديوم والبوتاسيوم والليثيوم والفضة وأكاسيد وكبريتيدات المغنسيوم والكالسيوم والباريوم والمنغنيز



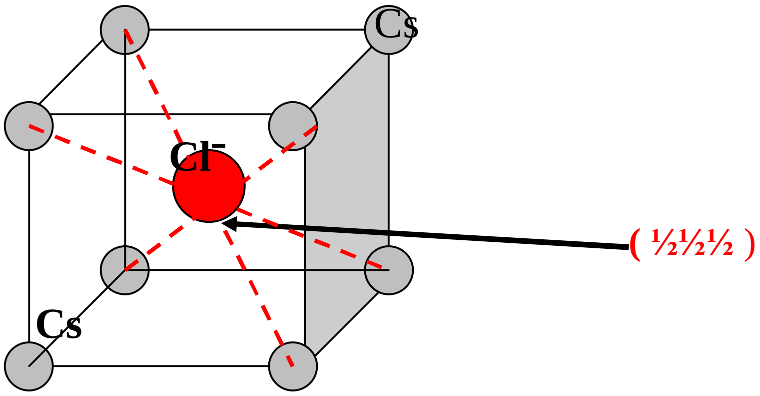
ب – بنية كلوريد السيزيوم " CsCl "

تعد وحدة خلية بنية CsCl المبينة في الشكل أدناه من الخلايا غير البدائية وذلك لتداخل شبيكتين أحدهما مكونة من أيونات الكلور (Cl) والاخرى من أيونات السيزيوم (Cs) والشبيكتان مزاحة أحداهما على الاخرى بأتجاه والخط الذي يربط ركنين متقابلين من المكعب بمقدار يساوي (½).أن بنية كلوريد السيزيوم هي من نوع مكعب متمركز الجسم (BCC) يحاط كل أيون سيزيوم ب(٨) أيونات كلور ، وكذلك فكل أيون كلور يحاط بثمان أيونات من السيزيوم.
أن العدد التناسقي لبلورة كلوريد السيزيوم هو (٨) . تحتوي وحدة خلية لكلوريد السيزيوم على أيون واحد من السيزيوم وعلى أيون واحد من الكلور . أن موقع الايونات في وحدة الخلية مبينة في الشكل أدناه .

Cs^+ = ٠٠٠ , Cl^- = ½½½
كلوريد السيزيوم

أيون السيزيوم Cs^+

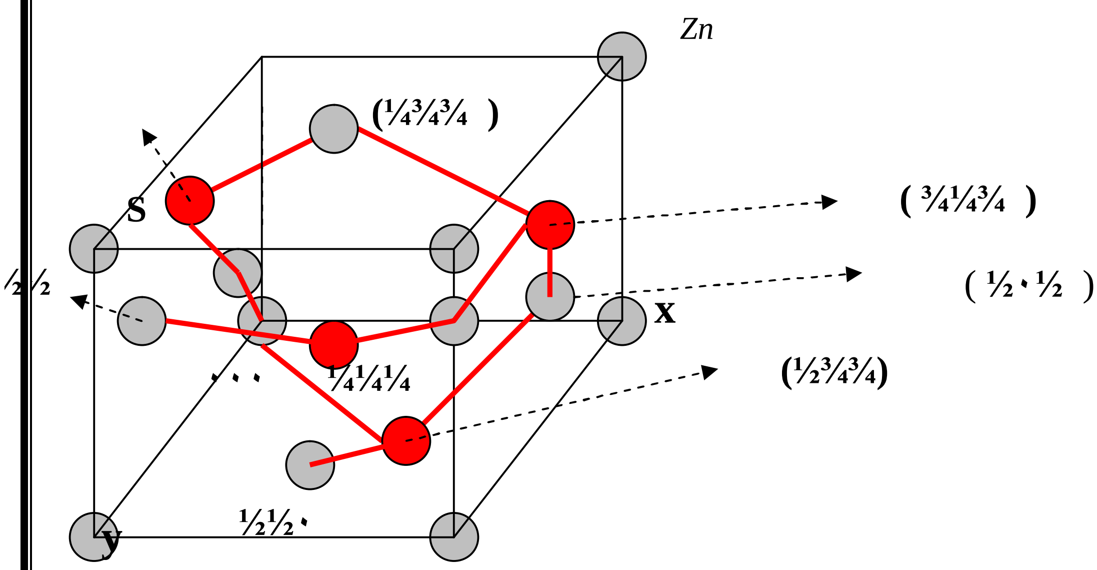
أيون الكلور Cl^-



أن البلورات التي لها نفس البنية البلورية لكلوريد السيزيوم معروفة وهي كلويد الامونيوم وبروميد التلريوم وأيوديد البرليوم وسبيكة النحاس بالبلاديوم وسبيكة النحاس بالخارصين وسبيكة الالمنيوم نيكل وسبيكة البرليوم بالنحاس .

جـ- بنية كبريتيد الخارصين "ZnS"

تعد وحدة خلية بنية (ZnS) المبينة في الشكل أدناه من الخلايا غير البدائية وذلك لنداخل شبيكتين من نوع ممركزة الاوجه أحدهما مكونة من أيونات الخارصين (Zn) والاخرى من أيونات الكبريتيد (S) . والشبيكات مزاحة أحدهما على الاخرى بأتجاه الخط الذي يربط ركنيين متقابلين من المكعب يساوي بمقدار(¼) .أن بنية كبريتيد الخارصين من نوع الرص المكعبي المحكم . يحاط كل خارصين بـ (٤ أيونات) من الكبريت موزعة على أركان رباعي السطوح ويكون الخارصين في مركزه وبنفس الوقت يحاط كل أيون كبريتيد بـ (٤ أيونات) خارصين وبنفس الطريقة . أن العدد التناسقي لبلورة كبريتيد الخارصين يساوي (٤) .



تحتوي وحدة خلية (ZnS) على أربعة أيونات من (*Zn*) وعلى أربعة أونات من (*S*) . وأن موقع هذه الايونات في وحدة الخلية مبينة كالآتي :-

$$Zn = 000\ ,\ \tfrac{1}{2}0\tfrac{1}{2},\ 0\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\ ,\ \tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}0$$
$$S = \tfrac{1}{4}\tfrac{1}{4}\tfrac{1}{4},\ \tfrac{3}{4}\tfrac{1}{4}\tfrac{3}{4},\ \tfrac{1}{4}\tfrac{3}{4}\tfrac{3}{4},\ \tfrac{3}{4}\tfrac{3}{4}\tfrac{1}{4}$$

أن البلورات التي لها نفس بنية كبريتيد الخارصين فلوريد النحاسوز، كلوريد النحاسوز ، أيوديد الفضة ، كبريتيد الكادميوم ، سبيكة الانديوم زرنيخ ، سبيكة الكادميوم قصدير ، كلوريد السليكون .

٥-البلورات التساهمية " Covalent crystsls "

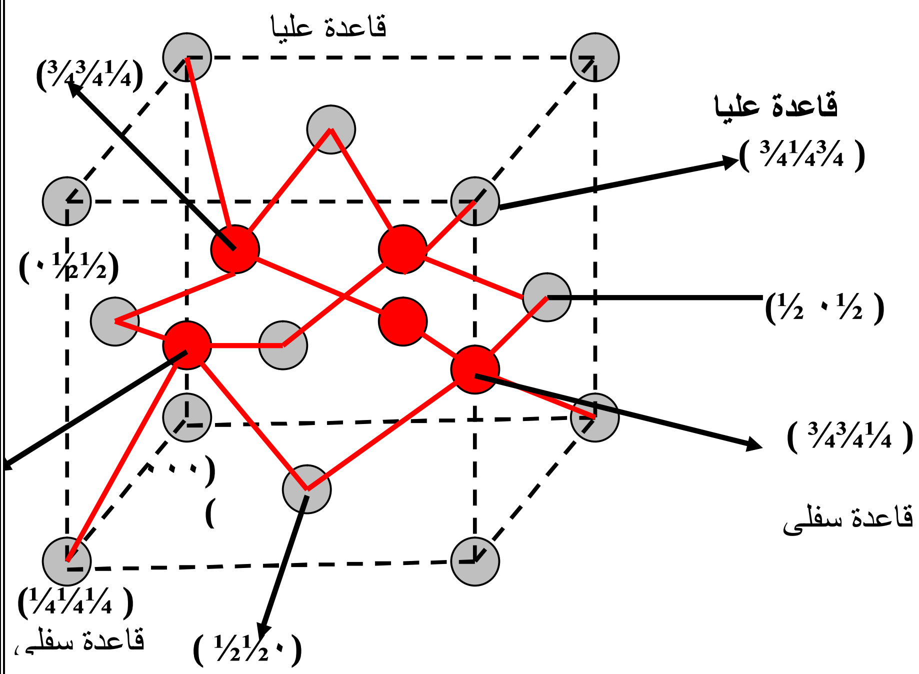
تنشأ البلورات التساهمية من تآصر زوج من الالكترونات حيث تساهم كل ذرة بالكترونين وعليه يكون الالكترونان مشتركان بين الذرتين بدلاً من أي يكون لكل منها ملكية خاصة لاحدى الذرتين كما في حالة الاواصر الايونية . أن البلورات التي ترتبط ذراتها بأواصر تساهمية هي الماس والسليكون والجرمانيوم وكبريتيد السليكون .

أن من أهم خواص البلورات التساهمية هي :-

١- تكون جميع البلورات التساهمية صلدة وقاسية جداً ، فالماس مثلاً هو أصلب مادة معروفة وكبريتيد السليكون مادة تستخدم في الصناعة لاغراض البرادة .
٢- أن البلورات التساهمية ذات درجات أنصهار عالية جداً .
٣- لاتذوب في السوائل الاعتيادية .
٤- رديئة التوصيل الكهربائي وذلك لان جميع الكتروناتها مرتبطة أرتباطاً وثيقاً ويتحسن توصيلها عند درجات الحرارة العالية .

البنية البلورية للماس " Diamond structure "

تعد بنية وحدة الخلية من الماس المبينة في الشكل أدناه من الخلايا غير البدائية وذلك لتداخل شبيكتين متمركزتين الاوجه الاولى تحتوي على نوع واحد من الذرات وهي الكاربون ، والسليكون مزاحة أحدهما عن الاخر بأتجاه الخط الذي يربط مركبتين متقابلتين مثل المكعب بمقدار يساوي (¼) وأن البنية للماس من النوع مكعب ممركز الاوجه فأذا كانت أحدى ذرتي الاساس في الموقع ٠٠٠ فأن ذرة الاساس الثانية تكون في الموقع (¼¼¼) وبموجب ذلك تحتوي الخلية على ثماني ذرات كاربون على المواقع التالية :-



الشبيكة الاولى : ١- ذرة واحدة في الركن ٠٠٠
٢- وثلاثة في مركز الاوجه ½½ ٠ ,½ ٠½, ٠ ½½

وأربعة داخل الخلية : ١- (٢) في القاعدة السفلى عند المواقع ¼¼¼ , ¾¾¼
٢ - (٢) في القاعدة العليا عند المواقع ¾¼¾ , ¾¾ ¼

أن كل ذرة كاربون مرتبطة بأربع ذرات مجاورة وتكون محاطة ب ١٢ ذرة أخرى بصفة جار ثاني .

بسم الله الرحمن الرحيم

الفصل الخامس :علم البلورات
المرحلة الثالثة :فرع المواد / قسم العلوم التطبيقية
مدرس المادة : د. ناهدة جمعة حميد

العدد التناسقي ومعامل الرص
"Coordination number and the packing factor"

١-العدد التناسقي " Coordination number "

هو العدد (عدد الذرات التي تبعد بمسافات متساوية عن ذرة معينة) وكلما أزداد العدد التناسقي أصبح رص التركيب البلوري محكم (Closely packing) .

١- بالنسبة للمكعب البسيط (Sc) Simple cubic كل ذرة لها ست جارات (٦) ذرات .
٢- بالنسبة لشبيكة المكعب المتمركز الجسم (bcc) body centred cubic كل ذرة لها ثمان جارات .
٣- بالنسبة لشبيكة متمركز الوجه Face centred cubic(FCC) فأن كل ذرة لها (١٢) جارة .

٢-نسبة أنصاف الاقطار :

هي نسبة نصف قطر الايون الموجب الى نصف قطر الايون السالب .وترتيب الايونات السالبة حول الموجبة كما موضح في الجدول .

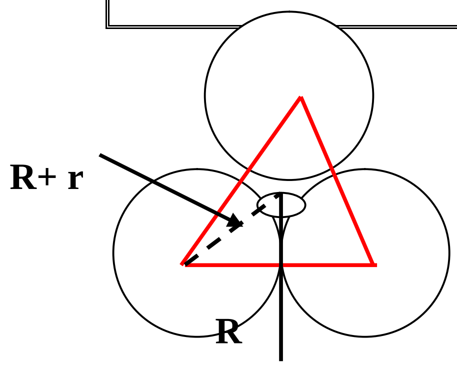
ت	نسبة أنصاف الاقطار	ترتيب الايونات	الشكل البلوري	العدد التناسقي
١	٠,١٥- 0.٢٢٥	زوايا مثلث متساوي الساقين	ثلاثي الاوجه	٣
٢	٠,٩٣-٠,٤١	زوايا رباعي	رباعي الاوجه	٤
٣	٠,٤٢- ٠,٧٣	زوايا ثماني	ثماني الاوجه	٦
٤	٠,٧٣ -١	زوايامكعب	مكعب	٨
٥	١,١	الرص المحكم	ذو أثني عشر وجه	١٢

مثال -١- وضح كيف يمثل العدد ٠,١٥٥ أصغر نسبة لانصاف أقطار الايونات السالبة للعدد التناسقي (٣) .

الحل : -

لاحظ الشكل

نفرض أن (r) تمثل نصف قطر الايون الموجب (R) تمثل نصف قطر الايون السالب .



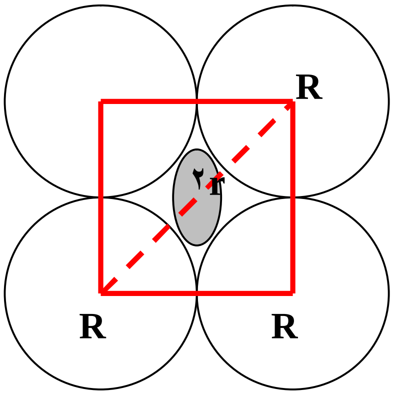
$$\cos 30^0 = \left(\frac{R}{R+r}\right) = 0.866$$

$$\frac{R+r}{R} = 1.1547$$

$$\therefore \frac{r}{R} = 1.1547 - 1$$

$$\therefore \frac{r}{R} = 0.155$$

مثـال (٢) : بـرهن أن العدد ٠,٤١٤ هو أصـغر نـسبة بـين نـصفي قطـري الايـونين الموجـب والسالب للعدد التناسقي (٦) .



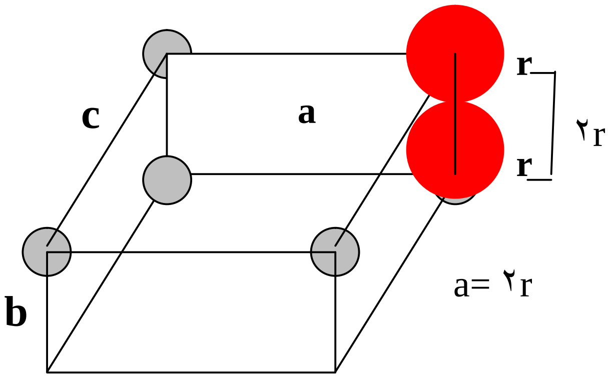
$$(R + 2r + R)^2 = (2R)^2 + (2R)^2$$
$$(2r + 2R)^2 = 2(2R)^2$$
$$(2r + 2R) = 2\sqrt{2}R$$
$$2r = \left(2\sqrt{2} - 2\right)R$$
$$\left(\frac{r}{R}\right) = \sqrt{2} - 1$$
$$\left(\frac{r}{R}\right) = 0.414$$

٣- معامل تراص الذرات " Atomic packing factor "

الطريقة التي تترتب فيها الذرات أو الايونات أو الجزيئات في الحالة الصلبة تحدد صفات تلك المـادة . ترتيب التـراص للذرات يعتمد علـى نـصف قطر الذرات في المـادة وعلـى نوعيـة الاواصر وكثافة التراص في البلورة يعبر عنه تراص الذرات Atomic packing factor ويعرف : -

عامل التراص = حجم الذرات في وحدة الخلية / حجم وحدة الخلية

ا-بالنسبة للمكعب البسيط (Sc) : -



- عدد الذرات = ٨ × ١/٨ = ١ ذرة
- المسافة عن أقرب جارة (a = d).
  a=b=c
- العلاقة ما بين نصف قطر الذرة و a هي : -
  a = ٢r

$$r = \frac{a}{2} = \frac{d}{2} \qquad (a = d)$$

- المتجهات البدائية " Primitive vectors "
  حيث =

$$\left.\begin{aligned} a^{-} &= ia = ai \\ b^{-} &= jb = aj \\ c^{-} &= kc = ak \end{aligned}\right] \quad a = b = c$$

- حجم (Sc)

$$V = / a^{-}.b^{-} \times c^{-} /$$
$$= / ai.ai \times ak /$$
$$= / ai..a^{2} i /$$
$$= a^{2}(i.i) \qquad (i.i = 1)$$
$$\therefore V = a^{3}$$

- عامل التراص " Atomic packing factor "

$$p.f = \frac{Volum\ of\ one\ atom \times no.of\ atom / unitcell}{Vtot.}$$

$$p.f = \frac{4/3p\, r^{3} \times no\ of\ atom / unit\ cell}{Vtot.}$$

$$p.f = \frac{4/3p\, r^{3} \times 1}{a^{3}}$$

$$\therefore pf = \frac{4/3p\left(\frac{a}{2}\right)^{3} \times 1}{a^{3}}$$

$$\therefore p.f = \frac{p}{6} = 52\%$$

$$\therefore p.f(Sc) = 52\%$$

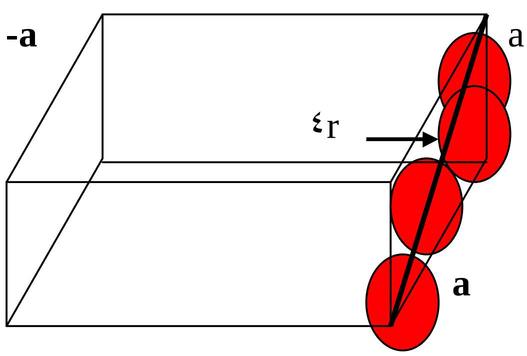
ب-بالنسبة Fcc :

- عدد الذرات في وحدة الخلية .

$$(8 \times 1/8) + (6 \times 1/2) = 1 + 3 = 4 \quad ($$

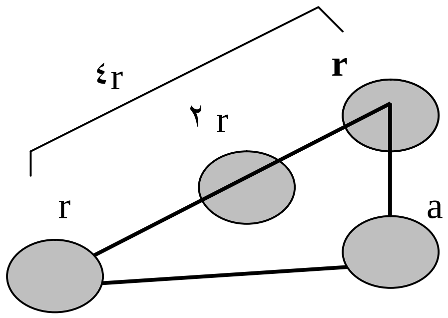
المسافة لأقرب جارة :

$$(4r)^{2} = a^{2} + a^{2}$$
$$4r = \sqrt{2a2}$$
$$4r = \sqrt{2}a$$
$$\therefore a_{fcc} = \frac{4r}{\sqrt{2}}$$



$$\therefore p.f = \frac{4/3p\, r^3 \times 4}{(\frac{4r}{\sqrt{2}})^3} = 0.74$$

$$\therefore p.f_{(fcc)} = 74\%$$



جـ-بالنسبة " bcc "

- عدد الذرات $(8\times1/8+1)=2$

$$(4r)^2 = a^2 + x^2$$

$$x^2 = a^2 + x^2 = 2a^2$$

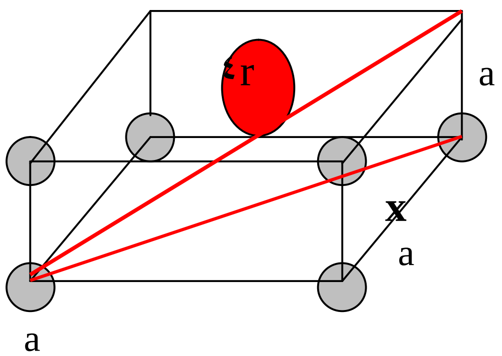
$$\therefore (4r)^2 = 3a^2$$

$$4r = \sqrt{3}a^2$$

$$a_{bcc} = \frac{4r}{\sqrt{3}}$$

$$p.f = \frac{4/3p\, r^3 \times 2}{a^3}$$

$$p.f = \frac{4/3p\, r^3 \times 2}{\left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^3} = 68\%$$



د- معامل الرص للنظام السداسي :-

$$a = b \neq c$$

$$a = b = 90 \neq g = 120$$

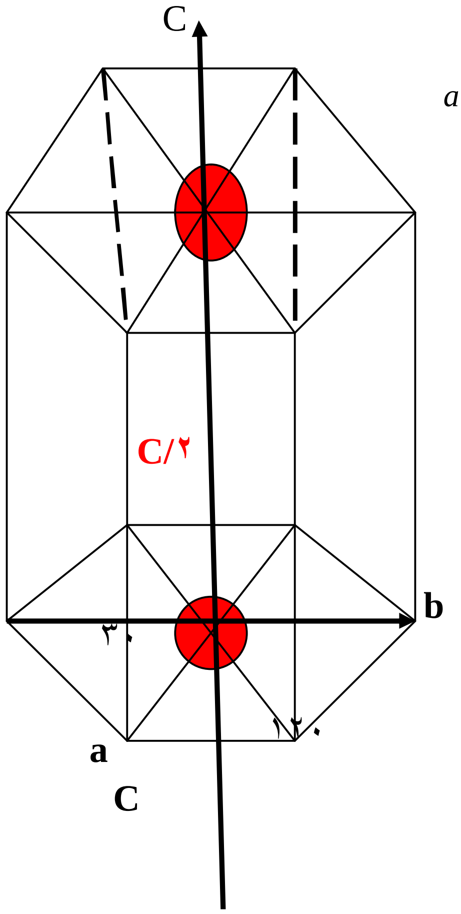
$$no.of\ atoms = 12\times1/6 + 2\times1/2 + 3$$

$$= 6atoms$$

$$V = a.b\,c \sin\frac{p}{2} = a.bc$$

$$= abc\cos 30 = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2c$$

$$a^2 = \left(\frac{c}{2}\right)^2 + \left(\frac{2}{3}a\cos 30\right)^2$$



$$a^2 = \frac{c^2}{4} + \frac{4}{a}a^2\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^2$$

$$a^2 = \frac{c^2}{4} + \frac{4}{a}a^2 \times \frac{3}{4}$$

$$a^2 = \frac{c^2}{4} + \frac{a^2}{3}$$

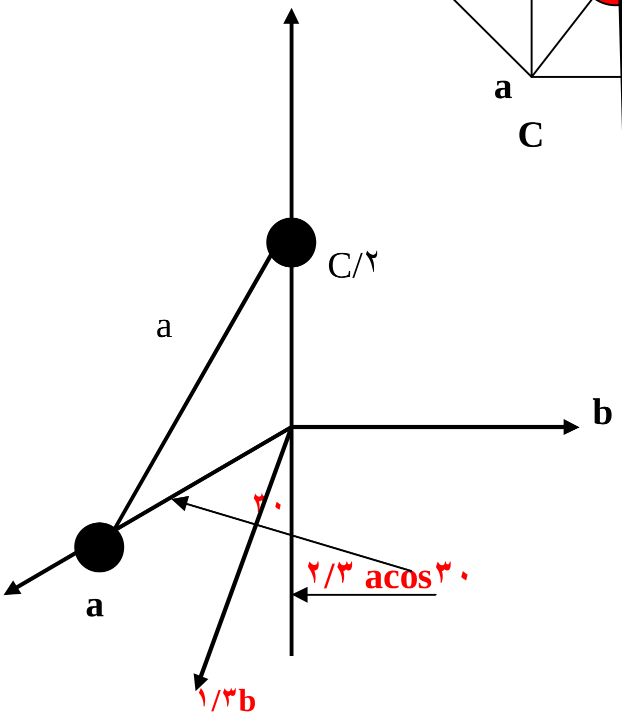
$$\frac{c^2}{4} = a^2 - \frac{a^2}{3}$$

$$\frac{c^2}{4} = \frac{2a^2}{3}$$

$$\frac{c^2}{a^2} = \frac{8}{3}$$

$$\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}}$$

$$\therefore V = \frac{\sqrt{3}}{2}.a^2.\frac{ca}{a}$$



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

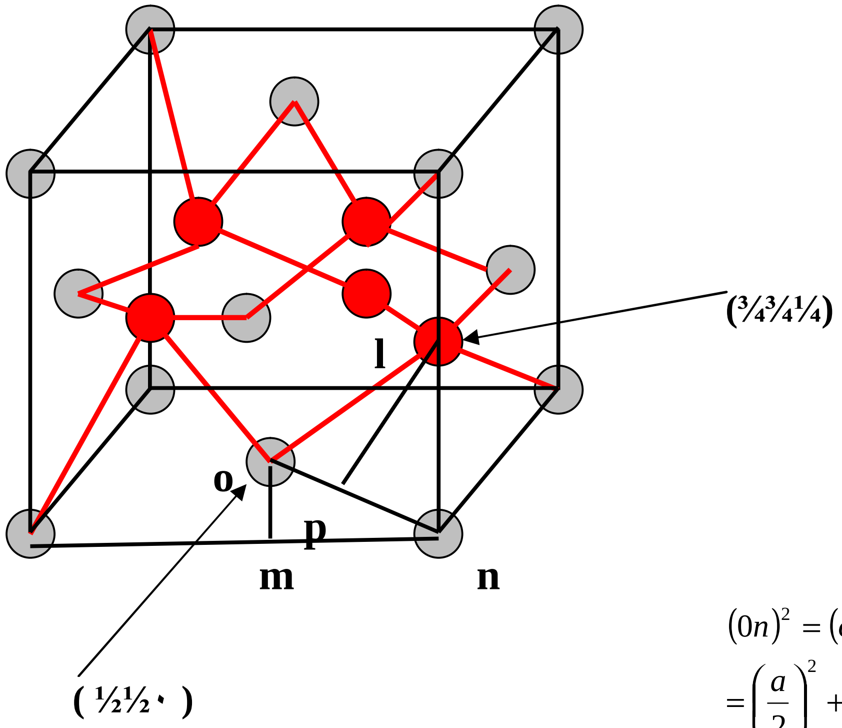
$$2R = a \qquad \therefore r = \frac{a}{2}$$

$$p.f = \frac{\frac{4}{3}p\left(\frac{a}{2}\right)^2 \times 6}{3\sqrt{2}a^3}$$

$$p.f = 0.74$$

هـ- معامل الرص بالنسبة للنظام الماسي : -'' Diamond structure ''

٠٠٠, ½½٠ , ½ ٠ ½ , ٠ ½ ½
¼¼¼ ، ¾¾¼ ، ¾¼¾ , ¼¾¾



$$(0n)^2 = (om)^2 + (mn)^2$$

$$= \left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2$$

$$(on)^2 = \frac{2a^2}{4} = \frac{a^2}{2} \Rightarrow 0n = \frac{a}{\sqrt{2}}$$

$$pn = \tfrac{1}{2} on \Rightarrow pn = \frac{a}{2\sqrt{2}}$$

$$(\ln)^2 = (pl)^2 + (pn)^2$$

$$= \left(\frac{a}{4}\right)^2 + \left(\frac{a}{2\sqrt{2}}\right)^2$$

$$= \frac{a^2}{16} + \frac{a^2}{8} = \frac{3a^2}{16}$$

$$\therefore \ln = \frac{\sqrt{3}}{4} a$$

$$2r = \frac{\sqrt{3}}{4} a$$

$$r = \frac{\sqrt{3}}{8} a$$

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

$$p.f = \frac{\frac{4}{3}p\left(\frac{\sqrt{3}}{8}a\right)\times 8}{a^3}$$

$$p.f = 0.34$$

بسم الله الرحمن الرحيم

الفصل السادس :علم البلورات
المرحلة الثالثة :فرع المواد /قسم العلوم التطبيقية
مدرس المادة : د. ناهدة جمعة حميد

حيود الاشعة السينية والبنية البلورية " X- Ray diffraction and crystal structure"

يمكن الحصول على معلومات معينة عن بنية المواد الصلبة من المشاهدات العينية أو المجهرية للمنظر الخارجي للبلورة ، أما أذا أردنا الحصول على معلومات دقيقة عن بنية المواد الصلبة فلابد لنا من أستعمال التقنيات الحديثة التي تعتمد على حيود الاشعة السينية تعد تقنية حيود فوتونات الاشعة مصدراً أساس للمعلومات الدقيقة عن البنية البلورية في علم البلورات وهناك تقنيات أخرى مكملة لتقنيات الاشعة السينية مثال على ذلك تقنية حيود النيوترونات . أن أستخدام هذه التقنيات تمكننا الحصول على معلومات عن ثابت الشبيكة والمسافة البينية بين المستويات والزوايا بين المستويات ومواقع الذرات داخل الشبيكة وكذلك تماثل نقطة المجاميع .... الخ . أنه من المعروف في علم البصريات أنه لو سقط شعاع من الضوء على فتحة صغيرة فأن الشعاع يعاني حيودا عند خروجه من كل نقطة من نقاط الفتحة التي مر من خلالها . وحسب نظرية ها يجنز " Hygens" تنشأ موجات ضوئية جديدة تتداخل بدورها مع بعضها . ولو سقطت حزمة شعاعية من الضوء على محزز الحيود " diffraction grating " الذي يكون البعد بين شقوقه المتجاورة مساوية تقريباً الى طول موجة الضوء المستخدم ، فأن كل شق من المحزز سيخرج شعاع منعكس وتخرج الاشعة في النهاية في مجموعة متناسقة مع بعضها وزوايا الانعكاس محددة لكل مجموعة لقد أستخدم العالم ماكس فون لاوي " Max Vun Laue "في عام (١٩١٢) المبدأ المذكور حيث أستخدام الاشعة السينية بدلاً من الاشعة الضوئية وأعتبر الشبيكة البلورية للمادة الصلبة كمحزز حيود ذات ثلاث أبعاد . ومن خلال تجاربه لاحظ لاوي أن الاطوال الموجية للاشعة السينية التي يمكن أن يحدث فيها حيود بحدود قيمة المسافة بين المستويات البلورية (1-2 Aº~) .

يعتمد الطول الموجي الناتج من التقنيات الثلاثة على الطاقة اللازمة لحيود الاشعة السينية والحزمة النيوترونية في المادة الصلبة .

أن العلاقة بين طاقة الفوتون للاشعة السينية والطول الموجي هي : -

$$l\left(A^{o}\right)=\frac{12.4}{E(keV)}..............(1)$$

حيث λ تمثل الطول الموجي للاشعة السينية .

E تمثل طاقة الاشعة السينية .

فأذا كان الطول الموجي للاشعة السينية يساوي (١Aº) فتكون قيمة الطاقة مساوية الى (E ~ ١٢,٤٠٠ eV) .

١-تقنية توليد الاشعة السينية " X- Ray generating technique "

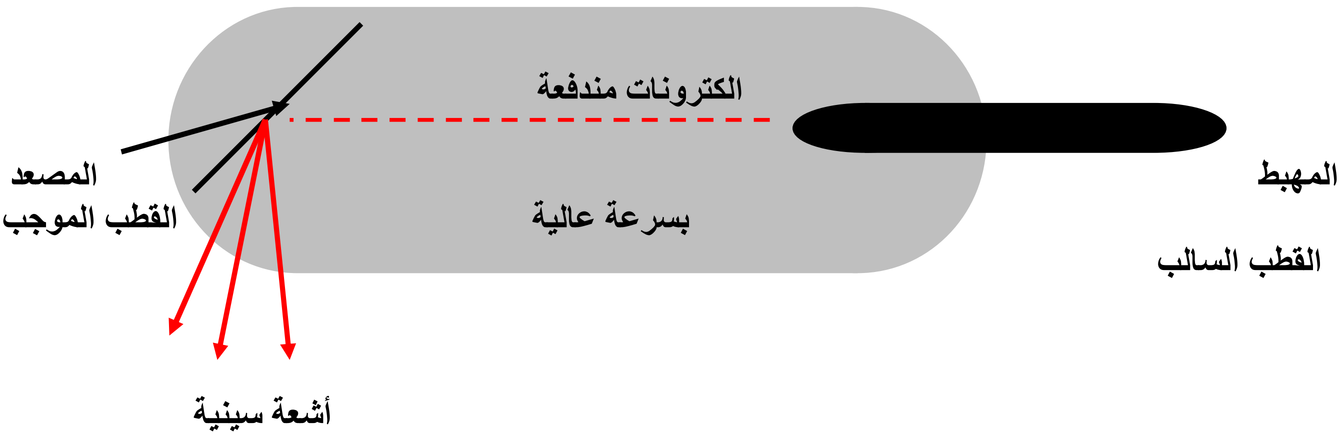
لو سلط جهد كهربائي عالي بحدود (30-150 keV) بين طرفي المهبط ((Cathode)) والمصعد ((Anode)) الموضوعين داخل أنبوبة مفرغة والمبينه في الشكل (١) وأذا تم زيادة طاقة حركة الالكترونات في ذرات فتيلة المهبط وبتسخينها بجهد منخفض ذات قيمة (١٠V) وتحريرها من أرتباطها بنوات الذرات فأن هذه الالكترونات المتحررة تجد نفسها تحت تأثير الجهد العالي (٣٠ keV) مندفعة بسرعة عالية نحو المصعد (يصنع عادة من النحاس والموليبديوم) وأصطدامها بذراته بهذه الطاقة العالية نجد أنها تفقد طاقة حركتها ويمتصها المصعد ويحولها الى صور أخرى من الطاقة فهذه الالكترونات الفارغة للمصعد تعمل في المقام الاول عن الاحلال يوضح الالكترونات في ذرات المصعد ونزلها من أغلفتها المتزنة ونقلها الى أغلفة أخرى ويعبر عن هذه الحالة بالتهيج أي الذرة أصبحت متهيجة

(Excited) وواضح مما سبق أن أنتقال الالكترونات من غلاف الى آخر يعني تغيراً في طاقة سواء بالاكتساب أو الفقدان (الاكتساب عند الانتقال من غلاف الى غلاف ذات طاقة عالية أما الفقد فبالعكس) . أي أن أكتساب الالكترونات ذرات المصعد للطاقة من الالكترونات القارعة والقادمة من المهبط سيجعلها تغير في غلافها للحظة قصيرة جداً تحاول بعدها العودة الى وضع أتزانها مطلقة ما أكتسبته من طاقة . وأنطلاق الطاقة من هذه الحالة سيبدو في صورة موجات قصيرة متناهية في قصرها ($\sim 1\ A^o$) وغير مرئية تعرف بالاشعة السينية .

تنبعث الاشعة السينية من المصعد وفي جميع الاتجاهات ويمكن حساب الطاقة الحركية المكتسبة للالكترونات من فرق الجهد الكهربائي ومن العلاقة :-

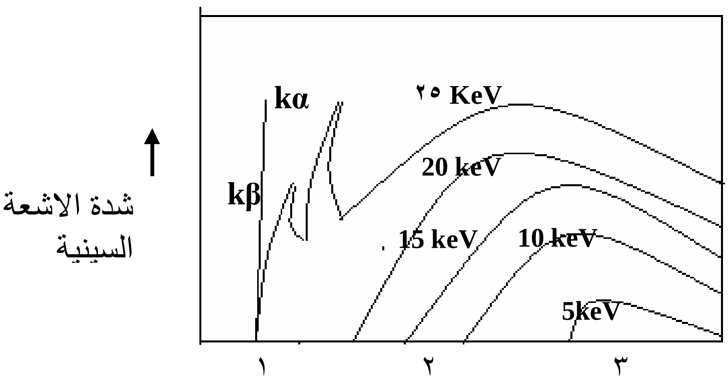
$$K.E = eV = \frac{1}{2}mv^2 \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(2)$$

e- شحنة الالكترون .
V – فرق الجهد الكهربائي المسلط بين المهبط والمصعد .
m – كتلة الالكترون .
v– سرعة الالكترون قبل الاصطدام مع المصعد وهي تبلغ ⅓ .
سرعة الضوء عند فرق جهد بحدود (30 keV) .



شكل (١)

ومن الجدير بالذكر أن جزء ضئيل جداً بـ نحو (١ %) فقط من طاقة الالكترونات يتحول الى أشعة السينية بينما يتحول معظم هذه الطاقة (٩٩ %) الى حرارة في المصعد الامر الذي يوجب بأستمرار تبريده .
أن الاشعة الصادرة من المصعد تتكون من خليط من عدة أشعاعات يطلق عليها الاشعة البيضاء ، وأن كل شعاع له طول موجي معين ، أي أن الاشعة البيضاء عبارة عن طيف مستمر من الاشعة بأطوال موجية متدرجة في الطول . ولقد وجد أن أطوال موجات هذه الاشعة وشدتها تتوقف على فرق الجهد الكهربائي بين المصعد والمهبط .



شكل رقم (٢) : أطياف الاشعة السينية عن فروق جهد مختلفة

يوضح الشكل(٢) العلاقة بين شدة الاشعة السينية وأطوال مجموعة الموجات عند جهود مختلفة (5, 10 , 15, 20 25 keV) ، ويلاحظ بالشكل أن شدة الاشعة تظل منعدمة حتى طول موجي معين تسمى بطول الموجي القصير (λ_{swl}) (short wave length) تبدأ بعد ذلك شدة الاشعة السينية بالزيادة تدريجياً لتصل الى الذروة ثم تتناقص تدريجياً مرة اخرى . وعلاوة على ذلك نجد أنه بأزدياد فرق الجهد تزداد قيمة شدة الاشعة بصورة عامة .وكذلك نقطة بداية (λ_{min}) وواضح أن هذا الطيف لابد أن ينشأ في ظروف أصطدام متغيرة للالكترونات بالمصعد ومن هذه الحقيقة تنشأ في الواقع من كون بعض الالكترونات المصطدمة تفقد طاقتها دفعة واحدة بينما يخضع البعض الاخر للانحراف هنا وهناك بذرات المصعد فاقدة طاقتها تدريجياً(على دفعات) حتى تستقر وبالتالي تتولد أشعة المصعد بأطوال موجات حسب ظروف أصطدام تفقد طاقتها دفعة واحدة عند الأصطدام بالمصعد ستعطي أشعة بطاقة كمية عالية (فوتون بطاقة قصوى) أي أشعة بطول موجي أقصر مايمكن وذلك بتحويل كل طاقتها الى طاقة موجية وحسب المعادلة الاتية :-

$$E_{\max} = eV_{\max} = h\nu_{\max} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(3)$$

$$\nu_{\max} = \frac{C}{\lambda_{swl}} \ldots\ldots\ldots\ \ldots\ldots\ldots\ \ldots\ldots\ldots\ \ldots\ldots (4)$$

$$\lambda_{swl} = \frac{hc}{eV_{\max}} = \frac{12.4}{V_{\max}} \ldots\ldots (5)$$

V_{max} =اقصى فرق جهد يقاس بالكيلوفولت.
C= سرعة الضوء .
h= ثابت بلانك .
ν= التردد .

أن العلاقة (٥) تربط فرق الجهد المصعد بطول الموجة الناشئة عن الالكترونات الاخرى التي تفقد طاقتها تدريجياً الى أطوال أكبر (طاقات أقل) ونحصل في النهاية على طيف الاشعة المستمر (الاشعة البيضاء).

٢-الاشعة المميزة " The characteristic rays "

يلاحظ من الشكل (٢) أنه بأزدياد الجهد المسلط تتغير قيم المنحنيات دون شكلها فتضل محتفظة بطابعها الانسيابي المستمر حتى جهد معين ويتوقف على مادة المصعد يظهر عنده أرتفاع ملحوظ في شدة الاشعة عند أطوال محددة (تتوقف أيضاً على مادة المصعد) .وهذا الارتفاع في الشدة يبرز ظهور أشعة مرتفعة في شدتها ذات أطوال موجات يكاد يكون محدد تسمى بالاشعة المميزة .

تظهر الاشعة المميزة منطبقة على الاشعة البيضاء كما يبدو ذلك في الشكل (٢) و الاشعة المميزة تنطلق في الحقيقة عندما تصطدم الالكترونات بذرات المصعد . من الاغلفة الداخلية للذرة وتعطي الاشعة المميزة الحروف .... , N, M , L , K طبقاً للغلاف الخارجي المنزوع منه الالكترونات وبديهي ينتمي الشعاع (K) الى أعلى طاقة وأقصر طول موجي ناتجة مما يليه وهكذا .ومن ناحية أخرى لوحظ أن طرد الالكترون من الغلاف K يتبعه سقوط من الغلاف L الى الغلاف K لتعويض النقص والوصول بالذرة الى حالة أقل طاقة حرة ممكنة . فأن هذه المحاولة ينتج عنها أنبعاث أشعة تسمى K_α .أما أذا كان التعويض يتم بسقوط الالكترون من الغلاف M الى الغلاف K فأن الاشعة المنبعثة يطلق عليها K_β .

يتوقف أزدياد شدة الاشعة المميزة عن مستوى الاشعة البيضاء على شدة التيار بين المهبط والمصعد عن الحد الحرج (حد ظهور الاشعة المميزة ويمكن كتابة العلاقة للاشعة المميزة ويمكن لخط K (K-line) كالاتي : -

$$I_{K-line} = BI\nu - Vk^{m} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(6)$$

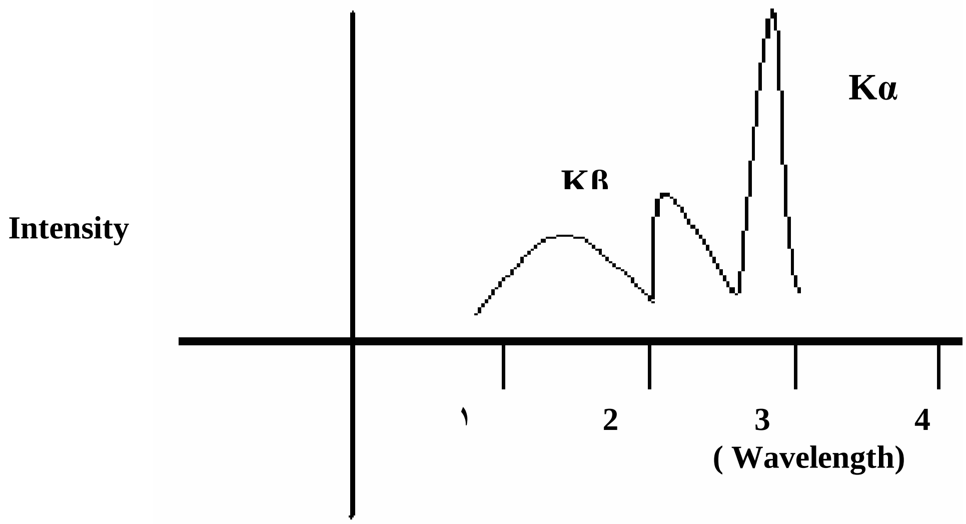
حيث أن :-

B = تمثل ثابتاً
V_k = الجهد الحرج للاشعة المميزة – k
I = شدة التيار المار في أنبوبة الاشعة
m= ثابتاً يقدر بحوالي (١,٥)

أن من أهم مميزات الاشعة المميزة أرتفاع شدتها تقدر بنحو ٩٠ مرة أكثر من شدة الاشعة البيضاء عند نفس الطول الموجي . أن هذه الاشعة وخاصة أشعة K_α تلعب دوراً هاماً في دراسة البنية البلورية للمواد الصلبة .

٣-المرشحات " Filters "

تستخدم المرشحات في الاشعة السينية بعد توليدها في أنابيب الاشعة السينية بقصد الحصول على أشعة آحادية اللون ((Monochromic)) . والمرشحات عبارة عن رقائق من فلزات تختار بحيث يكون عددها الذري أقل بعدد واحد من العدد الذري للمصعد . فمصعد النحاس (z = 29) يختار مرشح من النيكل (z = 28)، ويهدف المرشح الى تغيير موقع حد الامتصاص الى مواقع أقصر في الطول الموجي (شكل ٣) حيث تمتص المرشح على الاشعة الداخلة ولا ينفذ منه الا الاشعة العالية الشدة (k) بطول موجي من (1.54A°) ، وهذه الاشعة هي المستخدمة في دراسة البنية البلورية للمواد الصلبة .

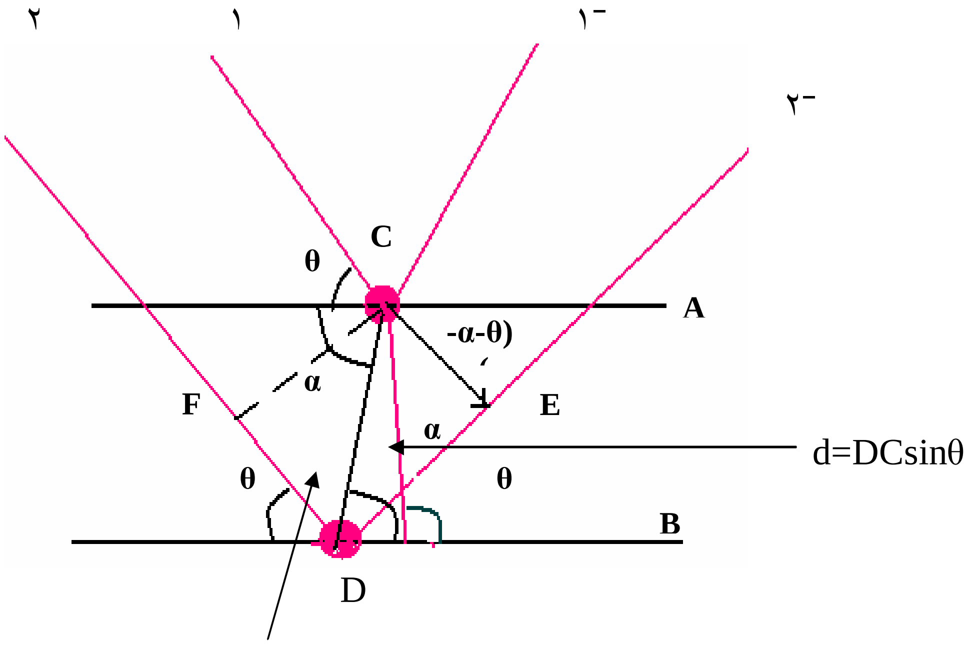


شكل رقم (٣) : أطياف الاشعة السينية الناتجة عن فرق الجهد kV ٢٥ عند تصادم الالكترونات بالموليبيديوم .

٤-نظرية الحيود وقانون براك :-

أذا ما سقطت الاشعة السينية على تركيب ذري بلوري (البنية البلورية والسطح ما بين الايونات المكونة للبنية البلورية ، فأن هذه الحزمة من الاشعة السينية ستنعكس – الاصطلاح المستعمل في الاعمال المتعلقة بالاشعة السينيةهو الحيود ((Diffraction)) وبطريقة تشبه الى حد كبير الطريقة التي ينعكس بها الضوء المرئي حيث أن زاوية السقوط تساوي زاوية الأنعكاس .ولكن هناك فرق رئيسي بين انعكاس الضوء المرئي عن الاجسام وحيود الاشعة السينية عن الاجسام المتبلورة . حيث أن زاوية السقوط تساوي زاوية الأنعكاس .ولكن هناك فرق رئيسي بين أنعكاس الضوء المرئي عن الاجسام وحيود الاشعة السينية عن الاجسام المتبلورة .حيث أنه في الثانية تخترق الاشعة السينيةالسطح الاول الى الاسطح الآخرى الموجودة بين الايونات لتنعكس فيها أيضاً .ويكون الشعاع المنعكس عن الاسطح المختلفة أما متجانس أو مختلف في الطور ويشترط أن تكون هذه الاشعة في نفس الطور لتكون حزمة من

الاشعة ذات قوة كافية . ويرينا الشكل التالي حيود الشعاعين (١،٢) عن أسطح البنية البلورية (A,B) بعد أرتطامها بالايونات (D,C) ونلاحظ بأن الشعاعين ١⁻، ٢⁻ لهما نفس الضوء .



[180 – (α + θ)]

يرينا الشكل السابق أسطح البنية البلورية (A,B) وقد أسقط عليها الشعاعين (١،٢) وبزاوية تسمى (Gleaning angle) قدرها (θ) وعند أرتطام هذين الشعاعين بالذرات (D,C) تتناثر الاشعة السينية بجميع الاتجاهات وقد رسمنا فقط شعاعين في هذه الحالة وهي (١،٢) حيث أفترضنا بأنه في النقطتين (E,C) سيكون هناك فرق في الطور مقداره (nλ) ولذلك ستقوي أحدهما الاخرى لتؤلف شعاع سيني منعطف مؤلفاً من الشعاعين (١⁻،٢⁻) أن الحزمة الحائدة والتي يمثلها الشعاعين (١⁻،٢⁻)المنعكسان عن أسطح البنية البلورية (A,B).تنتج فقط عندما يكون هذين الشعاعين من الحزمة (أوأي شعاعين متجاورين كالشعاعين (١⁻،٢⁻) في الشكل السابق في نفس الطور). أي أن المسافة الاضافية التي يقطعها الشعاع الثاني (٢⁻-٢) عن الشعاع الاول (١⁻ - ١)تزيد بعدد صحيح من الاطوال الموجية ويعبر عنه بمقدار (nλ)حيث تمثل (λ)الطول الموجي المستعمل للاشعة السينية وn عدد صحيح أو على هذا الاساس من الممكن القول بأن الفرق في المسار بين مسار الشعاعين (FD+ DE =nλ) لنفرض الآن بأن الزاوية (θ) تمثل زاوية السقوط وزاوية الانعكاس ولندع زاوية (α) هي الزاوية التي يصنعها (CD)مع الاسطح البلورية (اسطح الشبيكة البلورية) . في الشكل السابق

$$FD + DE = DC\cos 1[180 - (\theta + \alpha)] + DC\cos(\alpha - \theta)$$

$$\because \cos(\alpha + \theta) = \cos\theta\cos\alpha - \sin\theta\sin\alpha$$

$$\cos(\alpha - \theta) = \cos\theta\cos\alpha + \sin\theta\sin\alpha$$

$$n\lambda = CD\cos[180 - (\alpha + \theta)] + DC\cos(\alpha - \theta)$$

$$n\lambda = -CD\cos(\alpha + \theta) + DC\cos(\alpha - \theta)$$

$$n\lambda = -CD\cos\theta\cos\alpha + CD\sin\theta\sin\alpha + CD\cos\theta\cos\alpha + CD\sin\theta\sin\alpha$$

$$n\lambda = 2CD\sin\theta\sin\alpha$$

$$d = CD\sin\alpha$$

$$n\lambda = 2d\sin\theta$$

معادلة براك

أن هذه المعادلة الاخيرة والشهيرة تسمى معادلة براك ((Bragg law)) هي التي تحدد الشرط لحدوث حيود الاشعة السينية عن اسطح الشبيكة البلورية المتوازنة والتي تفصل بينها مسافات متساوية هي المسافة (d) .

مثال :- أشعة سينية مجهولة الطول الموجي أحيدت بزاوية مقدارها (٢θ = ٤٣,٤٠) بواسطة بلورة نحاسية (Fcc) ثابت الشبيكة = nm ٠,٣٦١٥ ، لوحظ أن خط الحيود للنحاس من المرتبة الاولى (n=1) بالنسبة d_{111}

أ- جد الطول الموجي للاشعة السينية .

ب- أذا أستخدمت نفس الاشعة السينية لتحليل التنكستن (bcc) ماهي زاوية الحيود للمرتبة الثانية n =٢ بالنسبة d_{010} ؟

$$2q = 43.4^0$$

$$q = 21.7$$

$$n l = 2d \sin q$$

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

$$\therefore n l = \frac{2a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \sin q$$

$$l = \frac{2a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \bullet \frac{\sin q}{n}$$

$$\therefore l = \frac{2 \times 0.3615}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 1^2}} \times \frac{\sin(21.7)}{1}$$

$$\therefore l = 0.1543 nm$$

$$(b) \qquad R_w = 0.1367 nm$$

$$aw = \frac{uR_w}{\sqrt{3}} = \frac{4(0.1367)}{\sqrt{3}} = 0.3157 nm$$

$$n l = 2d \sin q$$

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

$$n l = \frac{2a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \bullet \sin q$$

$$\therefore \sin q = n l \frac{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}{2a} = \frac{2 \times 0.1543 \sqrt{0^2 + 1^2 + 0^2}}{2(0.3157)}$$

$$\therefore \sin q = 0.488 \rightarrow q = 58.4$$

المصادر-١- أساسيات علم المواد / فان فلاك
- ٢ - فيزياء الحلة الصلبة / يحيى الجمال

المصادر-١- أساسيات علم المواد / فان فلاك
- ٢ - فيزياء الحلة الصلبة / يحيى الجمال

بسم الله الرحمن الرحيم

المحاضرة السابعة : علم البلورات
المرحلة الثالثة : فرع المواد /قسم العلوم التطبيقية
مدرس المادة : د. ناهدة جمعة حميد

الطريقة التجريبية لدراسة حيود الاشعة السينية " Experimental diffraction methods "

كما بينا سابقاً أن أسهل طريقة لدراسة البنية البلورية هي أستعمال تقنية حيود الاشعة الاشعة السينية . بما أن الحيود يحدث في حالة تحقيق قانون براك . لذا نرى أن هناك قيوداً للحصول على الحيود .فعليه تم تصميم بعض الطرق التجريبية التي يمكن بواسطتها الحصول على نمط الحيود بكل سهولة . أن هذه الطرق مبنية على أساس :-

١- أما تغير (λ) بشكل مستمر أثناء التجربة .
٢- أو تغير (θ) بأستمرار خلال تسجيل نمط الحيود .

ومن أهم الطرق الشائعة في تجارب الحيود هي :-

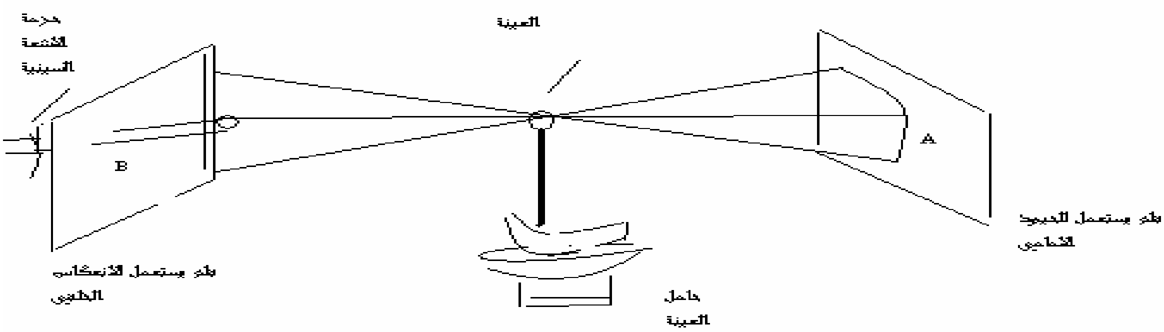
أولاً: طريقة لاوي " Laue method"

تمتاز طريقة لاوي عن بقية الطرائق المستعملة للكشف عن البنية البلورية للبلورة (العينة) المطلوب فحصها هي .

١- بقاء البلورة ثابتة لاتتحرك عندما تسقط عليها الاشعة السينية .
٢- تعد هذه الطريقة من الطرق السريعة والسهلة للتعرف عن التماثل البلوري والاتجاهات البلورية .
٣- الحصول على معلومات عن العيوب التي تنتج من التأثيرات الميكانيكية أو الحرارية على المواد الصلبة.
٤- ويمكن تحديد شكل وحدة الخلية للمادة الصلبة ولا يمكن تحديد القيمة العددية لحجم وحدة الخلية .

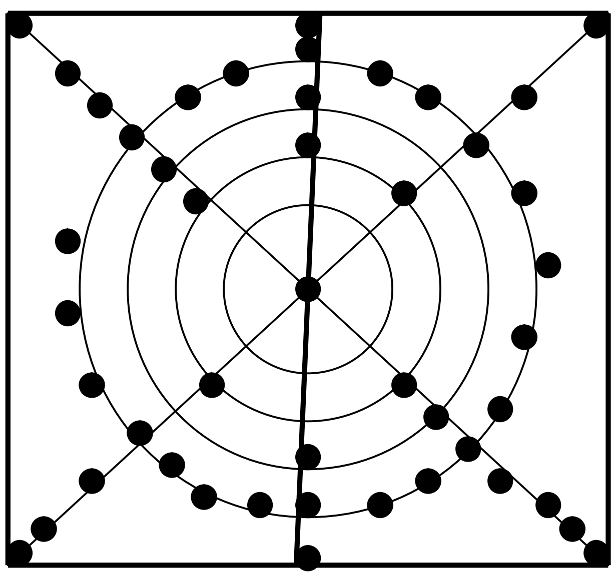
ومن الجدير بالذكر هنا أنه (أ) لايمكن أستخدام هذه الطريقة لدراسة البنية البلورية للمواد الصلبة ، وذلك بسبب المدى الواسع للطول الموجي للاشعة السينية المستعملة وكذلك (ب) لايمكن معرفة نوع الاساس المرافق لشبيكة المادة الصلبة تحت المجهر .

يبين الشكل التالي رسماً توضيحياً لالة تصوير لاوي ((Laue camera)) .



يستعمل في طريقة لاوي (١) بلورة آحادية صغيرة الحجم بحدود (1mm) مثبت فوق منظم للزويا يدعى بالكوينوميتر " goniometer " الذي يتكون من قوسين متعامدين بعضهما على بعض لغرض جعل البلورة بوضع دقيق بأتجاه الاشعة السينية .(٢) يوضح فلمين فوتغرافيين مستويين في جهتين متقابلتين يبعد كل منهما عن البلورة بحدود (٥ cm)) فيستعمل الفلم الفوتغرافي الواقع بين المصدر (مصدر الاشعة السينية) والبلورة للانعكاس الخلفي Back reflection بينما يستعمل الفلم الفوتغرافي الواقع خلف البلورة أي في جهة نفوذ الاشعة السينية للحيود الامامي ((Forward diffraction)) .

تسلط الاشعة السينية البيضاء التي يكون طيفها ذا طول موجي مستمر بحدود (A° 2- A° ٠,٢) بصورة عمودية على البلورة وعلى الفلمين الفوتوغرافيين .وبما أن طول الموجة (λ) يتغير بأستمرار وأن لكل مجموعة من مجاميع المستويات في داخل البلورة لها مسافة بينية (d) معينة وأنها تصنع زاوية خاصة مع أتجاه الاشعة السينية الساقطة على البلورة فعليه فأن كل مجموعة مستوية من المستويات تختار أحد الاطوال الموجية المناسبة لها ، أي الاطوال الموجية التي تحقق قانون براك للحيود ((λ≤2d))في ذلك الاتجاه أذن فأن الحزمة الحائدة سوف تخرج بزاوية معينة وتسقط على الفلم الفوتوغرافي لتحدث عليه نقاطاً أو بقعاً ((spots)) وكما هو موضح بالشكل ادناه.

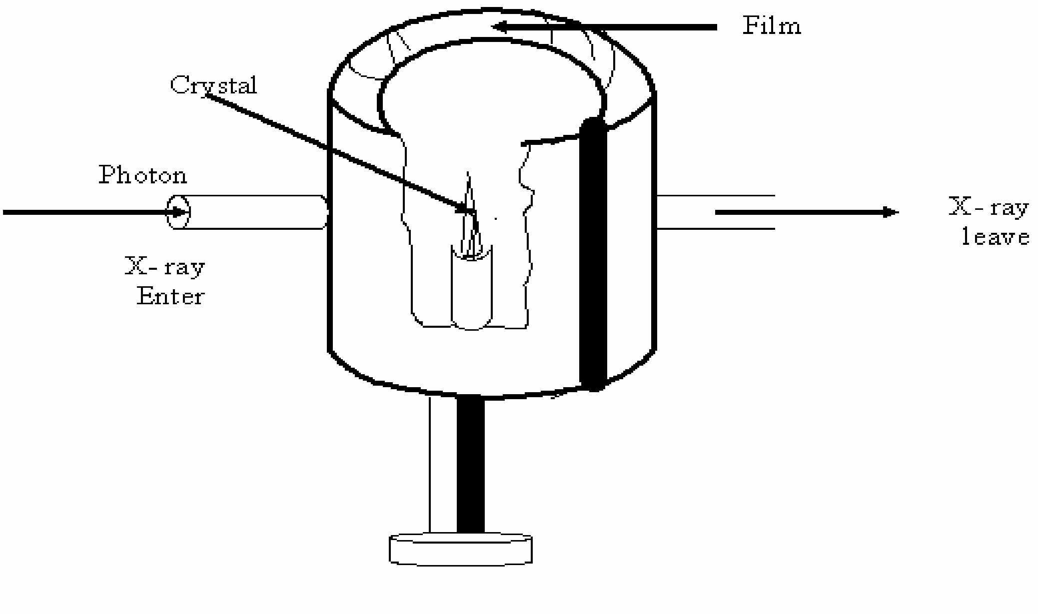


تشكيلة بقع الحيود لبلورة بالسليكون

فأذا أعتبرنا أتجاه الشعاع الساقط على البلورة هو محور التماثل ((axis of symmetry)) للبلورةفأن تشكيلات بقع الحيود الظاهرة على الفلم الفوتغرافي الموضح في الشكل يبين التماثل المبين للبلورة .

ثانياً : طريقة تدوير البلورة " Rotating –crystal method "

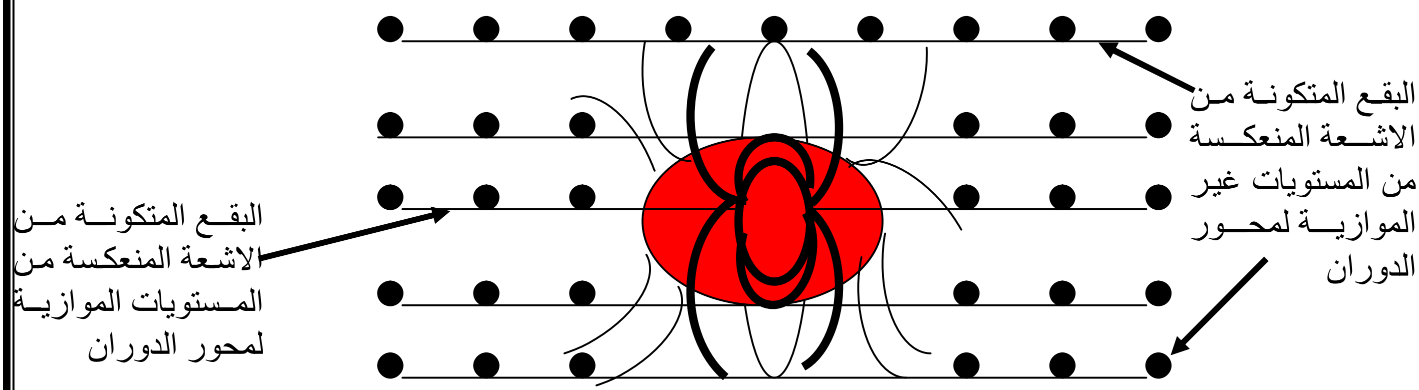
تختلف هذه الطريقة عن طريقة لاوي بأنه يسمح للبلورة بالدوران حول محور ثابت عمودياً على أتجاه الاشعة السينية الساقطة أي أن هذه الطريقة تعتمد على (١) تغييرزاوية براك . (٢) يستخدم هذه الطريقة أيضاً أشعة سينية ذات طول موجي أحادي ، يبين الشكل رسماً توضيحياً لالة التصوير (الكاميرا) المستخدمه في هذه الطريقة .



(يبين الشكل طريقة تدوير البلورة)

يستعمل في هذه الطريقة (١) بلورة صغيرة الحجم بحدود (1 mm) تثبت فوق منظم الزوايا (goniometer) لغرض جعل البلورة بوضع دقيق بأتجاه الاشعة السينية .(٢) يدور منظم الزوايا حول نفسه ب(٣٦٠°) بواسطة محرك كهربائي ذو سرع مختلفة .(٣) تبطن أسطوانة الكاميرا بفلم فوتغرافي من الداخل ثم توضع في المكان المخصص لها بحيث يكون محورها مطابقا تماماً لمحور دوران البلورة .

أن عملية التدوير المستمر للبلورة في أثناء تعرضها للاشعة السينية ذات الطول الموجي الاحادي يعطي الفرصة لعدد كبير من مجاميع المستويات لكي تنتقل الى وضع الانعكاس عندما تضع الزاوية المناسبة (θ) التي تحقق قانون براك وثم تتكون بقع سوداء على الفلم الفوتوغرافي . أن هذه البقع السوداء تكون تشكيلة معينة ذات خطوط متوازنة لاتجاه سقوط الاشعة السينية وكما هو مبين في الشكل : -



(تشكيلة بقع الحيود ذات خطوط متوازية لاتجاه الاشعة السينية)

أن الاشعة المنعكسة من جميع المستويات البلورية الموازية لمحور الدوران العمودي تكون بقعاً سوداء في خط أفقي يقع في منتصف الفلم الفوتغرافي . أما المنعكسة من المستويات غير الموازية لمحور الدوران العمودي فأنها تكون بقعاً سوداء في خطوط أفقية أعلى وأوطأ من الخط الافقي الواقع في منتصف الفلم .

تستعمل هذه الطريقة للكشف عن البنية البلورية حيث أن المسافة البينية بين الخطوط الافقية للبقع السوداء على الفلم الفوتغرافي والعمودي على محور دوران البلورة تتناسب طردياً مع المسافة البينية في الشبيكة المقلوبة فعند قياس المسافة بين أعلى وأوطأ خطأ للبقع المتكونة على الفلم الفوتغرافي نحصل على متجه الشبيكة المقلوبة الموازي لمحور الدوران ويمكن أيجاد أحداثيات وحدة الخلية أيضاً.

ثالثاً : طريقة تذبذب البلورة '' Oscillating –crystal method ''

تعد طريقة تذبذب البلورة حالة خاصة من طريقة تدوير البلورة حيث يسمح للبلورة بالتذبذب خلال مدى زاوي يتراوح عادة بين (° 20 -0) بدلاً من تدويرها خلال دورة كاملة (° ٣٦٠) .

تمتاز هذه الطريقة في الحصول على أسوداد كاف للبقع المتكونة بالانعكاس في وقت قصير جداً بالمقارنة مع الوقت اللازم في تدوير البلورة وكذلك تقلل من أحتمالية تداخل الانعكاسات المختلفة وذلك بسبب السماح لعدد محدد من مجاميع المستويات أن تظهر أنعكاسها .

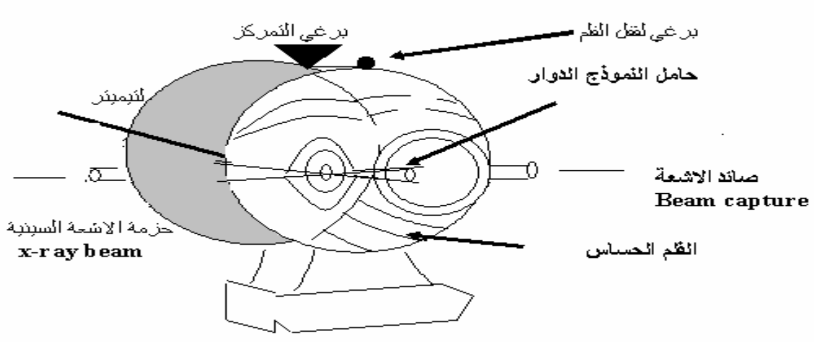
رابعاً : طريقة المسحوق '' Powder method ''

تعد طريقة المسحوق من الطرق المهمة جداً في دراسة البنية البلورية للمواد الصلبة وخاصة التي يتعذر الحصول عليها بشكل بلورات أحادية .لذلك يستعاض عن البلورة الاحادية في هذه الطريقة بمسحوق البلورة .

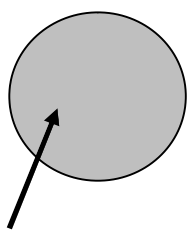
يتم الكشف عن البنية البلورية لمسحوق المادة الصلبة بتقنيتين :

أ) تقنية التصوير '' photography technique''

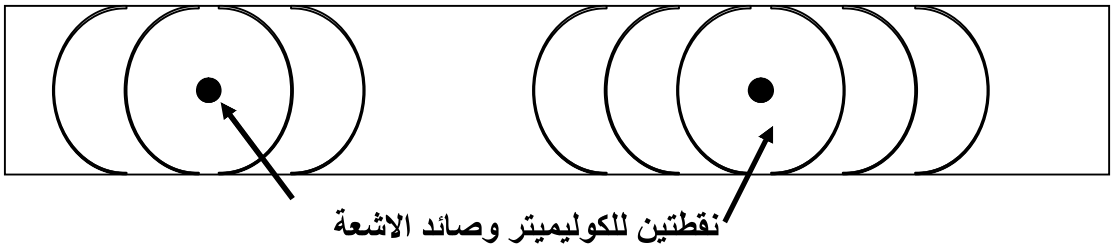
لقد أستطاع ديباي الالماني (١٩١٦) Deby وشرر الامريكي الجنسية (١٩١٧) Sherre كل على أنفراد التوصل الى طريقة خاصة أعتمدت على تطويرها لآلة التصوير للكشف عن البنية ((بنية المواد المتعددة التبلور)) أطلق عليها كاميرا ديباي وشرر "Deby and Sherrer camera") يحضرمسحوق المادة المراد فحصها بواسطة سحقه في هاون العقيق (("Agate mortary")) ويفضل سحق المادة ألى حجم لايزيد عن (٤٠µm) .يتم وضع مسحوق المادة بعد ذلك في أنبوبة شعرية من الزجاج ذات قطر داخلي يصل (٠,٣ mm) وطولها (8cm) .تثبت الانبوبة الشعرية التي تحتوي على مسحوق المادة في مركز الكاميرا وكما مبين في الشكل أدناه :-



(الاجزاء الرئيسية لكاميرا ديباي وشرر)

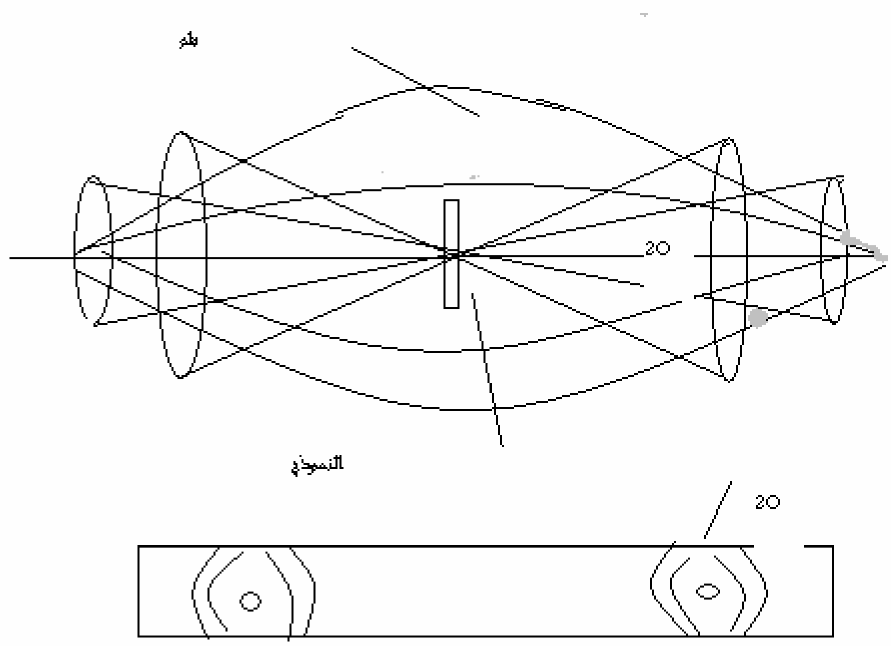


غطاء محكم



نقطتين للكوليميتر وصائد الاشعة

تبطن أسطوانة الكاميرا بفلم فوتوغرافي من الداخل . يتم دوران العينة بواسطة محرك كهربائي حول محور رئيسي عمودي على أتجاه الاشعة السينية . يتراوح الزمن اللازم لتعرض العينة الى الاشعة السينية بمدة لاتقل عن ثلاثة ساعات وذلك للحصول على صورة واضحة على الفلم الفوتغرافي فعندما تسقط الاشعة السينية ذات الطول الموجي الاحادي على هذا المسحوق المتجانس من الحبيبات أو من البلورات الصغيرة (crystallite)، فيكون هناك أحتمال كبير من توافق وضع أحدى الحبيبات أو أحدى البلورات الصغيرة أو عدد منهما مع زاوية سقوط الاشعة . بحيث يحقق قانون براك وبذلك تحدث ظاهرة الحيود . وتشكل الانعكاسات من مجموعة معينة من المستويات البلورية مخاريط متجمعة حول محور الذي هو شعاع سقوط الاشعة السينية والزاوية الداخلية (2θ) وهكذا فأن لاي مجموعة من المستويات ينتج عنها سلسلة من المخاريط المتداخلة تعود الى الانعكاسات ($n = 1,2,3,4,5$……………..ect) من الدرجة الاولى والثانية والثالثة ....الخ وكما هو موضح بالشكل ، وبما أن محاور هذه المخاريط تنطبق مع حزمة الاشعة السينية ، لذا يتكون لكل مخروط قوسين على الفلم مرتبة بشكل منسق على جانبي الفتحتين الذي تدخل وتخرج من خلالها الاشعة السينية من الة التصوير .



أ) المجاور .
ب) تشكيل الحيود على فلم فوتوغرافي .

فلأجل حساب قيمة الزاوية (θ) يقاس نصف قطر الكاميرا (R) ومن ثم تقاس المسافة (S) بين كل قوسين متقابلين على الفلم الفوتوغرافي ثم تطبق المعادلة التالية للحصول على قيمة الزاوية (θ) بالمقياس القطري (Radias) أو زاوية نصف قطرية :

$$q = \frac{S}{4R}$$

فعندما نجد قيمة (θ) {زاوية الانعكاس } لقوس معين على الفلم ليصبح من الممكن حساب المسافة البينية (d) لمجموعة المستويات وذلك بأستعمال معادلة براك على أن تعطى قيمة (n = 1) لكل الحالات كما أنها نتجت عن أنعكاس الدرجة الاولى .

تعد تقنية التصوير من الطرق المشابهه التي تستخدم في طبع الأصابع (Finger print) لتتعرف على الأشخاص حيث تكون الصور مختلفة من مسحوق الى مسحوق آخر وتدل على نوع معين من أنواع المواد الصلبة . لهذا فأن كان هناك مادة صلبة غير معروفة فيأخذ مسحوقها ويصور بواسطة الأشعة السينية وتقارن الصورة الجديدة مع صور المواد الصلبة الاخرى . فأذا تطابقت صورتان نستنتج أنها لمادة صلبة واحدة ، عادة يحفظ مع كل جهاز من هذه الأجهزة عدد كبير من الصور المختلفة ولمختلف المواد الصلبة للمقارنة مع الصور للمواد الصلبة المجهولة وذلك للتعرف عليها . لكن عملية المقارنة ليس بالأمر السهل ، لهذا عوضت عن الصور ببطاقات (Cards) تحوي معلومات عن كل مادة صلبة ومن هذه المعلومات قيم المسافة البينية (d) بين المستويات . فالباحث عليه أن يجد قيمة (d) بعدها يرجع الى هذه البطاقات للتعرف على المادة الصلبة .

ب- تقنية التسجيل " Diffract meter technique "

لقد أستطاعت العديد من الشركات الى صناعة جهاز خاص لدراسة البنية البلورية للمادة الصلبة التي تكون على هيئة مسحوق . لقد أطلق على هذا الجهاز بأسم جهاز قياس حيود الاشعة السينية (X- ray diffract meter).

يحضر مسحوق المادة المراد الكشف عنها بنفس الطريقة الواردة في تقنية التصوير . يخلط المسحوق بمادة الاسيتون ويوضع على سطح شريحة زجاجية (glass slide) ثم توضع العينة في مكانها المعين في داخل الجهاز .تدور العينة والكاشف بواسطة محرك . بحيث عندما تدور العينة بزاوية (θ) يكون الكاشف قد دار بزاوية (θ ٢) وعليه فأن الزاوية المسجلة على شريط الورق تمثل ضعف الزاوية في معادلة براك . وهكذا يمكن قراءة زوايا قمم (peaks) الانعكاسات من على الشريط الورقي وكذلك ارتفاعات القمم التي تتناسب طردياً مع شدة الانعكاسات المكونه لها .

تمتاز هذه التقنية عن تقنية التصوير بما يلي :-

١- في تقنية التصوير تحتاج الى عدة ساعات لعرض الفلم للاشعة السينية بالاضافة الى الزمن اللازم لتحميضه وتثبيته وغسله وتجفيفه ، بينما في هذه التقنية تحتاج الى حوالي ساعة واحدة .
٢- من الصعب جداً تقدير الشدة التي تظهر عليها صورة المسحوق بينما يمكن قياس شدة الانعكاسات من على الشريط الورقي بطريقة سهلة وأكثر دقة .
٣- يمكن قراءة (θ ٢) مباشرة من على الشريط الورقي من حسابها في تقنية التصوير .

بسم الله الرحمن الرحيم

الفصل الثامن : علم البلورات
المرحلة الثالثة :فرع المواد /قسم العلوم التطبيقية
مدرس المادة : د. ناهدة جمعة حميد

أشتقاق لاوي لسعة الموجة المستطيرة

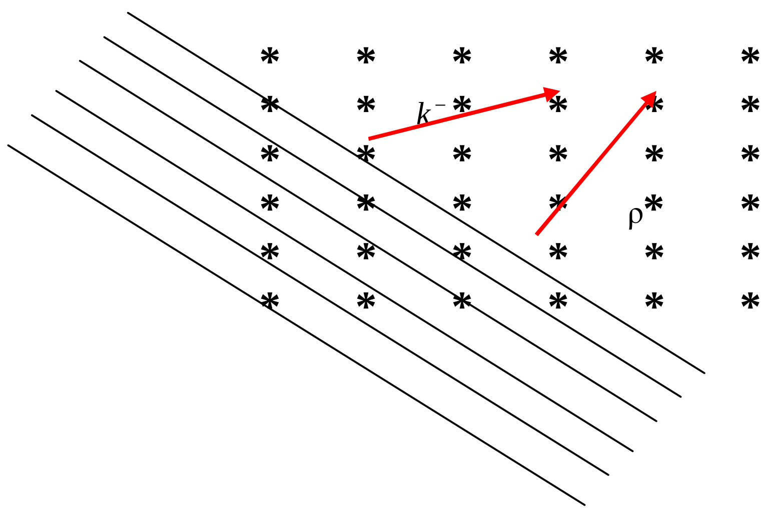
لقد بينا سابقاً أن الحيود يحدث من الذرات الموجودة في المستويات البلورية . أن هذه المعادلة لاتعطي تفاصيل دقيقة كما يحدث داخل البلورة أثناء الحيود وكذلك لاتعطي معلومات عن شدة وسعة الموجة المستطيرة. لقد أهمل براك في نظريته دور التوزيع الالكترون سواءاً في داخل الذرة أو في داخل وحدة الخلية ، أضافة الى ذلك فلقد أهمل في حساباته مساهمة الموجات المستطارة الناتجة من كل عنصر حجمي للبلورة .

فعند سقوط حزمة من الاشعة ذات طول موجي معين على ذرات البلورة ، فأن كل الكترون من الالكترونات لتلك الذرات تعمل على أستطارة جزء الاشعة الساقطة بصورة متشاكهه وفي أتجاهات مختلفة وذلك حسب قانون ثومسن (Thomson) . الأ أن مساهمتها يمكن أن تهمل وذلك لكونها أثقل من كتلة الالكترون وأن أستجابتها ضعيف جداً .

أن سعة الموجة الكلية المستطارة التي يمكن أن ترصد عند نقطة معينة تساوي حاصل جمع سعات الموجات المستطارة والتي تقع جميعها في نفس الأتجاه .

أن أول من درس ظاهرة الموجة المستطارة داخل البلورة هو العالم لاوي (Laue) حيث أستطاع أن يحصل على علاقة أتجاهات الموجة المستطارة الخارجة من البلورة بالنسبة للموجة الساقطة .وكذلك حصل على معادلات مكافئة لمعادلة براك أطلق عليها بمعادلات لاوي ((Laue eqactions)) .نفرض أن موجة كهرومغناطيسية مستوية تسقط على شبيكة بلورة صغيرة ذات مجموعة من الشحنات النقطية (point charges) مرتبة بنظام وشكل دوري ومحددة بالمتجهات الأساسية a^{-},b^{-},c^{-} وكما هو مبين في الشكل .

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{A}\exp\left[\boldsymbol{i}\left(\boldsymbol{k}^{-}.\boldsymbol{x}^{-} - \boldsymbol{wt}\right)\right]$$



موجة كهرمغناطيسية مستوية ساقطة على شبيكة بلورة صغيرة

حيث أن

k يمثل العددالموجي يساوي $\frac{2p}{l}$

λ الطول الموجة

التردد الزاوي

t الزمن

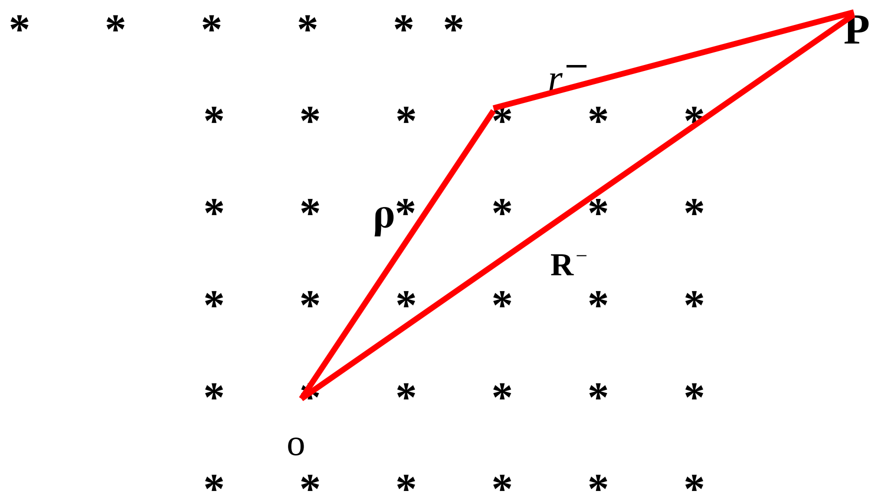
A سعة الموجة

تحتوي المعادلة (١) جزء حقيقي (real) وعلى جزء خيالي (imaginary) . وبما أن الجزء الحقيقي هو المهم في الحسابات الفيزياوية ، فعليه يمكن أهمال الجزء الخيالي .

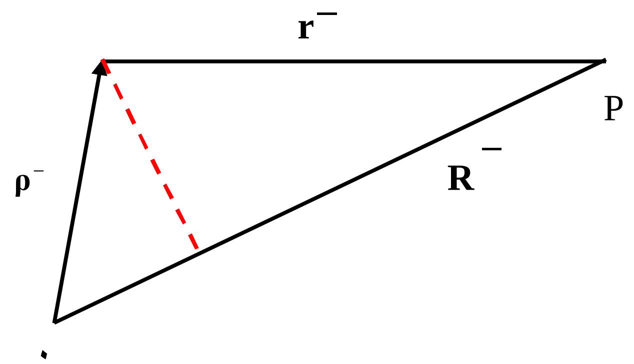
أن سعة الموجة الكهرومغناطيسية ، كما تشاهد عند نقطة مركز الاستطارة المعروف بالمتجه ($\bar{r}$) والمثبت في الشكل السابق ،تكتب بالصيغة الرياضية التالية :

$$E(r) = A_{exp}^{\,i\ \bar{k}.\bar{r}} \ldots\ldots (2)$$

حيث تم حذف الدالة الأسية التي تحتوي على التردد الزاوي والزمن من هذه المعادلة وذلك لعدم أهميتها في الأشتقاق خاصة اذا أعتبرنا الزمن في لحظة معينة (t = 0) . تعمل نقطة الشحنة (الذرة) الواقعة عند ($\bar{r}$) على أستطارة جزء من الموجة الساقطة خارج البلورة وكما هو مبين في الشكلين (اوب) .



شكل (ا) العلاقة الاتجاهية بين الحزمة الساقطة والحزمة الحائدة



شكل (ب) $\vec{r} = (\bar{R} - \bar{\rho})$

أن سعة الموجة المستطيرة من نقطة الشحنة الواقعة في مركز الاستطارة ($\bar{r}$) عند نقطة الرصد P الواقعة خارج البلورة والتي موقعها الاتجاهي بالنسبة لنقطة الأصل ، تتضمن على عامل الطور expi ($\bar{k}.\bar{p}$) للموجة الساقطة على ($\bar{r}$)وعلى عامل الطور (exp ikr) للموجة المستطيرة عند النقطة ($\bar{r}$) ذات الموقع الأتجاهي (R) ، حيث أنه يمكن كتابة r كما يلي :-

$$\bar{r} = \bar{R} - \bar{\rho} \ldots\ldots (3)$$

فعليه فأن عامل الطور الأجمالي للموجة المستطيرة عند النقطة (p) يساوي حاصل ضرب عامل الطور للموجة الساقطة في عامل الطور للموجة المستطيرة .

p عامل الطور الأجمالي عند $=\exp(ik^{-}.r^{-})\exp ikr$

$= \exp(ik.r^{-} + ikr)$ .... (٤)

يمكن أعادة كتابة المعادلة (٣) وبصيغة أخرى وذلك بتربيع

$$r^2 = (R^{-} - \rho^{-})^2$$

$$= \left(R^2 - 2R^{-}\rho\cos(\rho,R) + \rho^2\right)$$

عندما تكون (من أبعاد البلورة) << R ، فعليه تكون قيمة نسبة $\frac{r}{R}$ أصغر بكثير من واحد ، أي أن :

$$\frac{r}{R}\langle\langle 1$$

أي أن $\frac{r}{R}\langle\langle 1$

$\therefore$

$$r^2 = R^2\left[1 - \frac{2r}{R}\cos(r,R) + \frac{r^2}{R^2}\right]$$

فعليه يمكن أهمال $\frac{r^2}{R^2}$ لنحصل على : -

$$r = R\left[1 - 2\frac{r\cos(r,R)}{R}\right]^{1/2}$$

$R >> r$

أو

$$r = R - r\cos(r,R) \ldots (5)$$

بتعويض قيمة R من المعادلة (٥) في المعادلة (٤) نجد أن :-

$$= \exp\left[ik^{-}.r^{-} + ik^{-1}(R - r\cos(r,R))\right]$$

P عامل الطور عند $= \exp\left[ik^{-}.r + ik^{-1}R - ikr\cos(r,R)\right] \ldots (6)$

أما أذا أفترضنا أن أستجابة البلورة للموجة الساقطة من النوع الخطي ، فعليه فأن التردد الزاوي (w) . للموجة المستطيرة يساوي التردد الزاوي (w) للموجة الساقطة : وأن قيمة الموجة في الفراغ يساوي w = ck حيث أن ؤ تمثل سرعة الضوء ، فعليه نحصل على :-

$$K = k^1 \qquad \text{وان} \qquad w = w^1 \ldots (7)$$

وبما أن قيمة الموجة المستطيرة k^{-1} يساوي قيمة الموجة الساقطة k^{-} وأن أتجاه يعرف بأتجاه R^{-} فعليه يمكن كتابتها :

$$kr\cos(r^{-},R^{-}) = k^1 r\cos(r.R^1) = k^{-1}.r^{-} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(8)$$

وبتعويض المعادلة (٨) في (٦) نحصل على

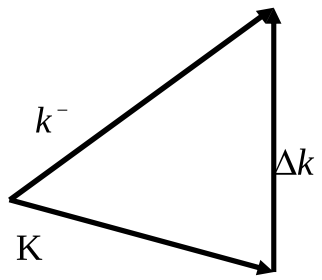
p عامل الطور عند $= \exp\left[ik^{-}.r^{-} + ikR - k^1.r\right]$

$$= \exp ik\operatorname{Re}xp - ir.\Delta k$$

$$= \exp ik\operatorname{Re}xpi\left[k^{-}.r^{-} - k^{-1}.r^{-}\right] \ldots (9)$$

حيث أن $\Delta k^{-} = k^{-1} - k^{-}$

فتعوض بالتغير الحاصل في قيمة الموجة المستطيرة والمبين في الشكل ادناه



أما لأيجاد محصلة سعة الموجات المستطارة عن كل شحنة نقطية من نقاط الشبيكة عند النقطة (P)فتجمع معاملات الطور لهذه الموجات المستطيرة والمبينة في المعادلة (٩) . على أن يهمل معامل exp ikR لكونه ثابتاً ، وهكذا فأن محصلة سعة الموجات (б) تكتب بالصيغة الرياضية : -

$$s = \sum_{mnp} \exp - i r_{mnp} . \Delta k^{-} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (10)$$

وكما بينا سابقاً أن الالكترون يعمل على أستطارة الموجة ، لأن من الممكن أن نفرض أن سعة الموجة المستطيرة من عنصر حجمي dv من البلورة يتناسب مع التركيز الموضعي للألكترون n (r) لذلك العنصر الحجمي . وعليه فأن سعة الموجة المستطيرة عند النقطة P تتناسب مع

$$F \Delta k = \int d u n(r) \exp - i r^{-} . \Delta k^{-} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (11)$$

الاستطارة من نقاط منفصلة من الشبيكة " Scattering from discrete lattice points "

نفرض وجود بلورة محدودة نقاط مراكز أستطارة مماثلة عند كل نقطة من الشبيكة يعبر عنه بالصيغة الرياضية :

$$r^{-} = m a^{-} + n b^{-} + p c^{-} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (12)$$

حيث أن m,n,p أعداد صحيحة مدى قيمة كل واحد منهم من ٠ الى (M-1) حيث أن M تحدد وحدات الخلايا الممتدة على طول حافة البلورة . وعليه يمكن القول أن البلورة تحتوي على M^{3} من الخلايا البدائية .

أن محصلة سعة الموجات المستطارة عن كل نقطة من نقاط الشبيكة أعطيت في المعادلة (١٠) .فعند تعويض المعادلة (١٢) بالمعادلة (١٠) نجد أن :-

$$s^{-} = \sum_{mnp} \exp\left(- i \left(m a^{-} + n b^{-} + p c^{-}\right) . \Delta k^{-}\right) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (13)$$

أو تكتب بصورة تفصيلية أكثر :-

$$s^{-} = \left[\sum_{m} \exp\left(- i m \left(a^{-} . \Delta k^{-}\right)\right)\right]\left[\sum_{n} \exp\left(- i n \left(b^{-} . \Delta k^{-}\right)\right)\right]$$

$$\left[\sum_{r} \exp\left(- i r \left(c^{-} . \Delta k^{-}\right)\right)\right] \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (14)$$

$$\left(r_{mnp} . \Delta k\right) = 2p\,(\text{integer})$$

$$|s|_{\max} = M^{3}$$

ويتحقق الشرط أعلاه عندما

$$a^{-}.\Delta k^{-} = 2pa_1$$
$$b^{-}.\Delta k^{-} = 2pa_2$$
$$c^{-}.\Delta k^{-} = 2pa_3$$

حيث أن a_1, a_2, a_3 أعداد صحيحة .يمكن أعادة كتابة المعادلات الثلاثة بالتعويض عن قيم a_1, a_2, a_3 بـ l,k,h على المعادلة

(معادلات لاوي)

$$a^{-}.\Delta k^{-} = 2ph$$
$$b^{-}.\Delta k^{-} = 2pk \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (15)$$
$$c^{-}.\Delta k = 2pl$$

$$|s| = \sum_{mnp} e^{-2p\,(mh+nk+pl)}$$

$$\sum_{m=0}^{M-1}\sum_{n=0}^{M-1}\sum_{n=0}^{M-1}(1) = M^3$$

وتدعى معادلات لاوي للنهايات العظمى للحيود .

أن من الضروري معرفة الحل الأمثل لمعادلات لاوي ومواصفات Δk^{-} لكي نحصل على حيود الحزمة للأشعة السينية . ويكون حل معادلات لاوي سهلاً عندما تكون المحاور الاساسية للبلورة a,b,c متعامدة مع بعضها (orthogonal) كما في أنظمة البلورات المكعبة والرباعية والمعينية القائمة وعند ذلك تصبح معادلات لاوي كما يلي :

$$\Delta k^{-} = 2p\left(\frac{h}{a}i^{-} + \frac{k}{b}j^{-} + \frac{l}{c}k^{-}\right) \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (16)$$

حيث أن k,j,i يمثل وحدات المتجهات بأتجاه محاور البلورة c^{-}, b^{-}, a^{-} .

بسم الله الرحمن الرحيم

الفصل التاسع : علم البلورات
المرحلة الثالثة :فرع المواد /قسم العلوم التطبيقية
مدرس المادة : د. ناهدة جمعة حميد

الشبيكة المقلوبة "Reciprocal lattice"

أن حيود الأشعة السينية تنتج من أستطارتها من الذرات الواقعة ضمن مجموعة من المستويات المتوازية في البلورة فعليه من الصعب عملياً تعقب معرفة مصدر كل أستطارة وذلك بسبب التداخل بين المستويات في البلورة . فلأجل معرفة مصدر كل أستطارة يمكن أستخدام مفهوم الشبيكة المقلوبة وأظهار كل مجموعة متوازية من المستويات في البلورة بدلالة نقطة يطلق عليها بنقطة الشبيكة المقلوبة .

أن ظهور البقع السوداء على الفلم الفوتغرافي ينتج في الحقيقة عن أستطارة الأشعة السينية من الذرات الواقعة في مجموعة من المستويات المتوازية فلأجل تشخيص هذه البقع السوداء على الفلم الفوتغرافي من النموذج النظري للشبيكة المقلوبة والذي يعد مكافئاً لشكل صورة نموذج الحيود والبقع السوداء التي تظهر على الفلم الفوتوغرافي .

تعتبر الشبيكة المقلوبة من الناحية الرياضية عبارة عن تحولات فورير Fourier Transformation للشبيكة الحقيقية .

تعتمد تحولات فورير على نقاط أو موجات تعيد نفسها بشكل دوري .وبما أن المستويات البلورية في أي مجموعة من المستويات المتوازية تعيد نفسها بشكل دوري بمسافة بينية (d) فعليه يمكن تطبيق نظرية فورير هنا وكذلك يمكن كتابة دالة فورير : -

$$F(r+d)=F(r)\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(1)$$

لقد أستطاع فورير أن يجزء هذه الدالة الى مركبتين ، الاولى تدعى بالمركبة الجيبية $\sin(\alpha r)$ والثانية بالجيب تمامية $\cos(\alpha r)$ ويمكن كتابة الدالة بـ $(\exp i\alpha r)$ حيث

$$a=\frac{2pn}{d}$$

حيث n عدد صحيح ، d المسافة البينية بين المستويات البلورية . أن الدالة النهائية والتي يمكن التوصل لها ذات العلاقة بالشبيكة المقلوبة : -

$$F(r)=\int_{-\infty}^{+\infty}F(n)\exp i\frac{2pnr}{d}dr\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(2)$$

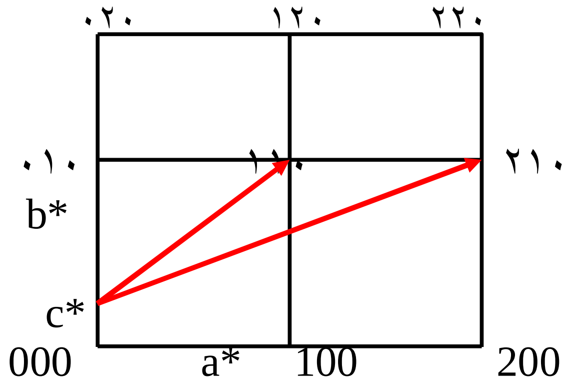
ومن هنا جاءت تسمية الشبيكة المقلوبة (معادلة ٢) حيث نرى أن المسافة (d) بين المستوياتتظهر في هذه المعادلة بصورة مقلوبة . أن مقلوب المسافة هو الذي يعين موقع نقطة في الشبيكة المقلوبة. وعليه يعد من الناحية الرياضية (متجهاً) . أن مثل هذا المتجهة يطلق عليه (بمتجه الشبيكة المقلوبة) ويرمز له (G) الذي يساوي مقلوب المسافة (d) . ويكتب رياضياً بالصيغة :-

$$|G_{nk}l|=\frac{A}{d_{hkl}}\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(3)$$

حيث A يمثل عامل مقياس الرسم أما = ١
أو = ٢π

١-طريقة بناء الشبيكة المقلوبة ''Construction of reciprocal lattice''

أن كل مجموعة من المستويات المتوازية في بلورة تمثل بمتجهات في نقطة الأصل لشبيكة مقلوبة ما . وكل متجه عمودياً على تلك المجموعة من المستويات التي يمثل وأن طوله يتناسب عكسياً مع المسافة البينية (d) لتلك المجموعة من المستويات . وبعبارة آخرى أن النقاط الواقعة عند نهايات تلك المتجهات العمودية تشكل الشبيكة المقلوبة للبلورة . يبين الشكل (ب)مجموعة الخطوط المستقيمة التي تمثل مستويات ذات أحداثيات (٠١٠) و(١٠٠) و(١١٠) و(٢١٠) مرسومة من بعدين وتعود هذه المستويات الى خلية مكعبة ، فلأجل تعين مواقع نقاط الشبيكة المقلوبة االتي تناظر هذه المستويات تتبع الخطوات التالية :



(ا) يمثل مجاميع المستويات في بلورة مكعبة بنقاط شبيكة مقلوبة

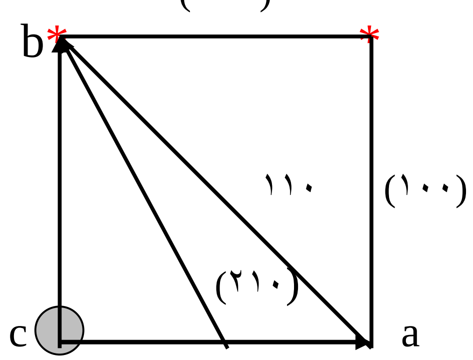
(1) أرسم من نقطة الأصل المشتركة (٠) أحداثيات البلورة .

(٢) جد قيمة $\frac{1}{d_{hkl}}$ لكل مجموعة من المستويات المتوازية .

(٣) يمثل الشكل (ا) مجموعة النقاط التي تمثل المستويات والتي يطلق عليها بمقلوب الشبيكة .

تعريف الشبيكة المقلوبة :-

يمكن تعريف الشبيكة المقلوبةبأنها عددغير محدد من النقاط المرتبة بأنتظام وبشكل دوري في فضاء ذات ثلاثة أبعاد . أن طول المتجه بين نقطة الأصل وأي نقطة في الشبيكة المقلوبة يتناسب عكسياً مع المسافة البينية (d) في مجموعة من المستويات المتوازية في شبيكة حقيقية .

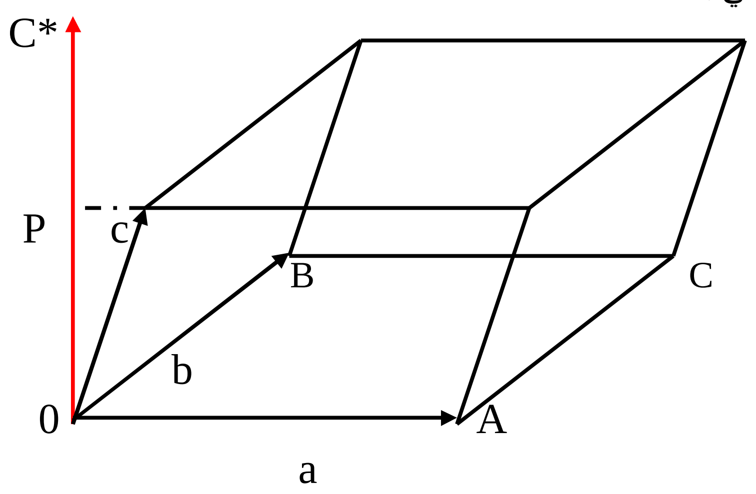


مجموعة الخطوط المستقيمة تمثل المستويات الذرية

٢-المحاور الأساسية للشبيكة المقلوبة :

يمكن تحديدها بمتجهات المحاور الأساسية a,b,c وبنفس الطريقة يمكن تحديد الشبيكة المقلوبة . بمحاور

أساسية أخرى . تعرف المتجهات الاساسية للشبيكة المقلوبة a^* وتقرأ (a-ster) و(b*-star) و (c* -star) بدلالة المتجهات الأساسية للشبيكة الحقيقية a,b,c فلأجل أشتقاق العلاقة بين المتجهات الأساسية للشبيكة الحقيقية ومتجهات الشبيكة المقلوبة ، نفرض عندنا وحدة خلية من نظام ثلاثي الميل (Triclinic) ، ذات محاور أساسية (a,b,c) والمبينة في الشكل التالي :



(وحدة خلية في نظام ثلاثي الميل)

أن حجم وحدة الخلية يساوي مساحةالقاعدة في الأرتفاع . أن أرتفاع الخلية يساوي p٠ ويعادل (d_{001}) وأن العلاقة بين المساحة والحجم يمكن أن تكتب بهذه الصيغة .

$$Volume = Area.d_{001} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (1)$$

$$\therefore \frac{Area}{Volum} = \frac{1}{d_{001}} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (2)$$

$$|G_{001}| = \frac{A}{d_{hkl}} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (3)$$

$$G_{001} = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a}.\vec{b} \times \vec{c}} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (4)$$

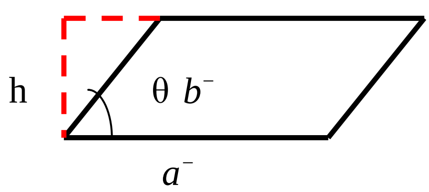
حيث وحدة الخلية :

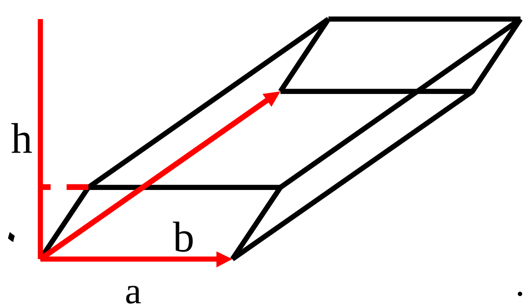
الأرتفاع (h) = $|\vec{b}| \sin\theta$

المساحة = $|a||b|\sin\theta$

$\vec{a} \times \vec{b}$

حجم وحدة الخلية = $\vec{a}.\vec{b} \times \vec{c}$





وبنفس الطريقة يمكن التعبير عن G_{100}, G_{010} .

$$G_{010} = 2p \cdot \frac{c^{-} \times a^{-}}{a^{-}.b \times^{-} c^{-}} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(5)$$

$$G_{100} = 2p \cdot \frac{b^{-} \times c^{-}}{a^{-}.b^{-} \times c^{-}} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(6)$$

وحيث أن

$$G_{100} = a^* = A^{-}.$$

$$G_{010} = b^* = B^{-}.$$

$$G_{001} = c^* = C^{-}.$$

$$G_{100} = a^* = A = 2p \cdot \frac{b^{-} \times c^{-}}{a.b^{-} \times c^{-}} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(7)$$

$$G_{010} = B^{-} = b^* = 2p \cdot \frac{c^{-} \times a^{-}}{a^{-}.b^{-} \times c^{-}} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(8)$$

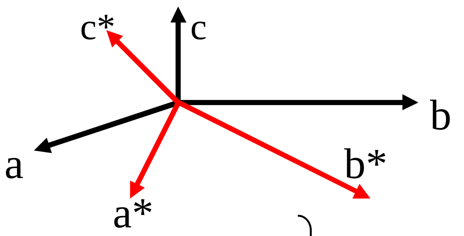
$$G_{001} = C^{-} = c^* = 2p \cdot \frac{a^{-} \times b^{-}}{a^{-}.b^{-} \times c^{-}} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(9)$$

فعليه :-

$$a^* \perp c^{-}, b^{-}$$

$$b^* \perp c^{-}, b^{-}$$

$$c^* \perp b^{-}, a^{-}$$



$$\left.\begin{aligned} &a^{-} * .a^{-} = 2p, b^{-} * .a^{-} = 0, c^{-} * .a^{-} = 0 \\ &b^{-} * .b^{-} = 2p, a * .b^{-} = 0, c^{-} * b- = 0 \\ &c^{-} * .c^{-} = 2p, a^{-} *, b^{-} = 0, b^{-} * .c^{-} = 0 \end{aligned}\right\} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (10)$$

أن تحديد مواقع نقاط في الشبيكة الحقيقية بواسطة المتجهات الأنتقالية البدائية $a^{-}, b^{-}.c^{-}$ وبهذا يكون المتجه الانتقالي لشبيكة (R^{-}) لأي نقطة يعوض

$$R^{-} = n_1 a^{-} + n_2 b^{-} + n_3 c^{-} \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(11)$$

وبنفس الطريقة يمكن تعويض موقع أي نقطة في الشبيكة المقلوبة بمتجه الشبيكة المقلوبة ($G^{-}{}_{hkl}$) بدلالة أعداد صحيحة (hkl) لمحاور الشبيكة المقلوبة a*,b*, c*

$$G^{-}{}_{hkl} = ha^* + kb^* + lc^* \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(12)$$

٣-أنواع المتجهات الموجودة في وحدة الخلية المكعبة :-

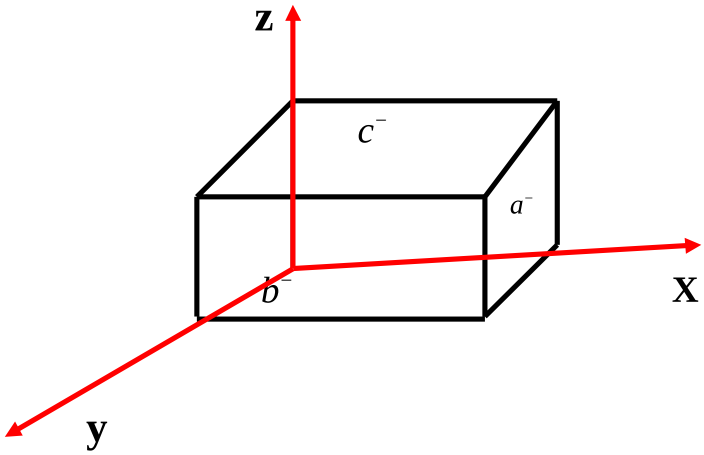
(١) بالنسبة للمكعب البسيط (Sc)

$$a^{-} = b^{-} = c^{-}$$

$$ia = jb = kc$$

$$ia = ja = ka$$

$$a = g = B = 90 = \frac{p}{2}$$

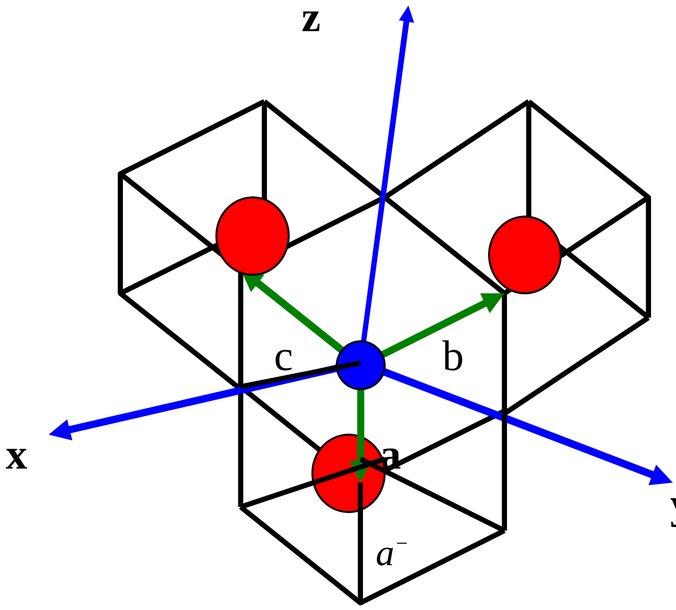


(٢) بالنسبة للمكعب المتمركز الجسم (bcc):-

$$a^{-} = \frac{a}{2}(i + j - k)$$

$$b^{-} = \frac{a}{2}(-i + j + k)$$

$$c^{-} = \frac{a}{2}(i - j + k)$$

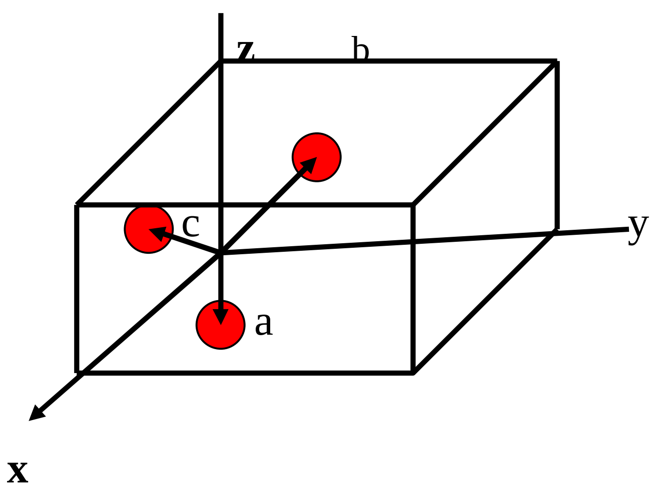


(٣)بالنسبة للمكعب المتمركز الوجه (Fcc) :-

$$a^{-} = \frac{a}{2}(i + j)$$

$$b^{-} = \frac{a}{2}(j + k)$$

$$c^{-} = \frac{a}{2}(i + k)$$



مثال: جد قيمة الشبيكة المقلوبة لشبائك مكعبة Fcc,bcc,sc

(١) بالنسبة sc :-

$$A = a^* = 2p \frac{b^- \times c^-}{a^-.b^- \times c^-}$$

$$b^- \times c^- = jb \times kc$$

في الخلية المكعبة a=b=c=

$$a = b = g = 90^\circ = \frac{p}{2}$$

$$b^- \times c^- = (j \times k)(b \times c)$$

$$= ibc \sin q$$

$$q = \frac{p}{2}$$

$$V = \left| ia.ia^2 \right| = a^3$$

حجم وحدة الخلية

$$\therefore A = 2p \frac{(ia^2)}{a^3} = \frac{i2p}{a}$$

$$b = 2p \frac{c^- \times a^-}{a^-.b^- \times c^-}$$

$$a^- \times c^- = ka \times ic$$

$$= (k \times i)(c \times a) = jac \sin a$$

$$b = 2p \frac{ja^2}{a^3} = \frac{j2p}{a} = \frac{j2p}{b}$$

$$C^- = 2p \frac{a^- \times b^-}{a^-.b^- \times c^-}$$

$$a^- \times b^- = ia \times jb = (i \times j) ab \sin q$$

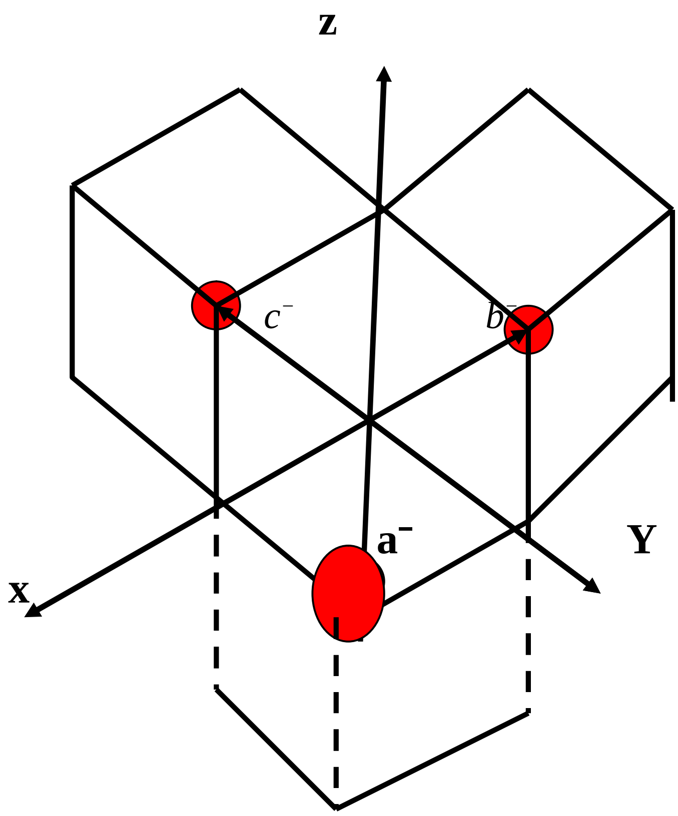
$$= kab$$

$$= ka^2$$

$$c^- = 2p \frac{ka^2}{a^3} = k\frac{2p}{a} = k\frac{2p}{c}$$

$$\therefore A = i\frac{2p}{a}, b = j\frac{2p}{b}, c = k\frac{2p}{c}$$

متجهات الشبيكة المقلوبة للمكعب البسيط



أما بالنسبة bcc :-

$$a^- = \frac{a}{2}(i + j - k)$$

$$b^- = \frac{a}{2}(-i + j + k)$$

$$c^- = \frac{a}{2}(i - j + k)$$

$$\begin{array}{ccc} i & j & k \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{array}$$

$$V = \left| a^-.b^- \times c^- \right|$$

$$b^- \times c^- = \frac{a}{2}(-i + j + k) \times \frac{a}{2}(i - j + k)$$

$$= \frac{a^2}{4}[i(1+1) - j(-1-1) + k(1-1)]$$

$$= \frac{a^2}{4}(2i + 2j) = \frac{a^2}{2}(i + j)$$

$$a^-.b^- x c^- = \left| \frac{a}{2}\left((i + j - k) . \frac{a^2}{2}(i + j) \right) \right|$$

$$V = \left| \frac{a^3}{4}(1+1) \right| = \frac{a^3}{2}$$

$$\therefore V = \frac{a3}{2}$$ حجم الخلية المكعبة bcc

$$A = 2p \frac{b^- \times c^-}{a^-.b \times c} = \frac{2p \frac{a^2}{2}(i + j)}{\frac{a^3}{2}}$$

$$A = \frac{2p}{a}(i + j)$$

i	j	k
1	-1	+1
1	+1	-1

$$b = 2p \frac{c^- \times a^-}{a.b^- \times c^-}$$

$$a^- \times c^- = \left(\frac{a}{2}\right)(i + j - k) \times \left(\frac{a}{2}\right)(i - j + k)$$

$$= \frac{a^2}{4}\left(i(1-1) - j(-1-1) + k(1+1)\right)$$

$$= \frac{a^2}{4}(2j + 2k) = \frac{a2}{2}(j + k)$$

$$b = 2p \frac{\frac{a^2}{2}(j+k)}{\frac{a^3}{2}}$$

$$b = \frac{2p}{a}(j+k) = \frac{2p}{a}(j+k)$$

$$b = \frac{2p}{a}(j+k)$$

i	j	k
1	1	-1
-1	+1	1

$$c = 2p \frac{a^- \times b^-}{a^-.b^- \times c^-}$$

$$a^- \times b^- = \frac{a}{2}(i + j - k) \times \frac{a}{2}(i - j + k)$$

$$= \frac{a^2}{4}\left[i(1+1) - j(1-1) + k(1+1)\right]$$

$$= \frac{a^2}{4}(2i + 2k)$$

$$a^- \times b^- = \frac{a^2}{2}(i + k)$$

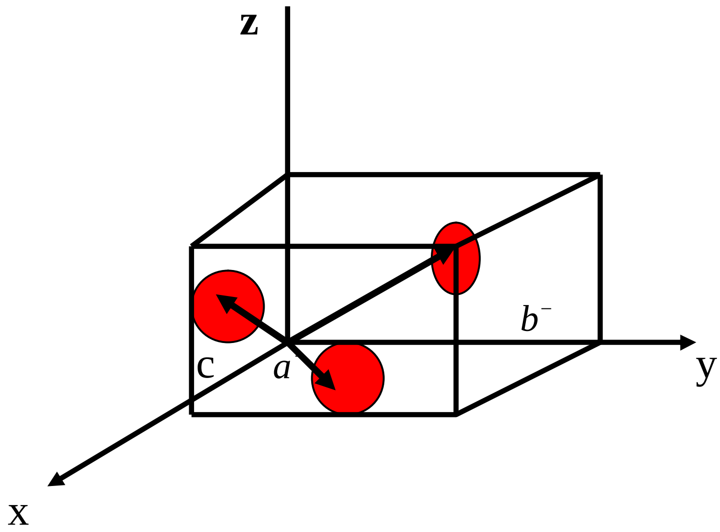
$$c = \frac{2p \frac{a^2}{2}(i+k)}{\frac{a^3}{2}} = \frac{2p}{a}(i+k)$$

$$\therefore \ \mathbf{c} == \frac{\mathbf{2\ \pi}}{\mathbf{a}}(\mathbf{i} + \mathbf{k})$$

$$\therefore A = \frac{2p}{a}(i+j), B = \frac{2p}{a}(j+k), c = \frac{2p}{a}(i+k)$$

متجهات الشبيكة المقلوبة للشبيكة المكعبة (bcc)

متجهات الشبيكة المقلوبةبالنسبة Fcc :-



$$a^{-} = \frac{a}{2}(i+j)$$

$$b^{-} = \frac{a}{2}(j+k^{-})$$

$$c^{-} = \frac{a}{2}(i+k)$$

$$b = 2p\frac{c^{-}\times a^{-}}{a^{-}.b^{-}\times c^{-}} = \frac{2p\,\frac{a^{2}}{4}(-i+j+k)}{\frac{a^{3}}{4}}$$

$$= \frac{2p}{a}(-i+j+k)$$

$$\boxed{b = \frac{2p}{a}(-i+j+k)}$$

$$c = 2p \frac{a^{-} \times b^{-}}{a^{-}.b^{-} \times c^{-}}$$

i	j	k
1	1	0
0	1	1

$$a^{-} \times b^{-} = \frac{a}{2}(i + j) \times \frac{a}{2}(j + k)$$

$$= \frac{a^{2}}{4}[i(1-0) - j(1-0) + k(1-0)]$$

$$a^{-} \times b^{-} = \frac{a2}{4}(i - j + k)$$

$$\frac{a^{2}}{4}(i - j + k)$$

$$c^{-} = 2p \frac{\frac{a^{2}}{4}(i - j + k)}{\frac{a^{3}}{4}}$$

$$\boxed{c^{-} = \frac{2p}{a}(i - j + k)}$$

$$\boxed{A = \frac{2p}{a}(i + j - k), b = \frac{2p}{a}(- i + j + k), c = (i - j + k)}$$

واجب:جد قيمة متجهات الشبيكة المقلوبة لشبيكة ثلاثية البعد.(A=2i,b=i+2j,c=k)

$$A = 2p \frac{b^{-} \times c^{-}}{a^{-}.b^{-} \times c^{-}}$$

$$V = \left| a^{-}.b^{-} \times c^{-} \right|$$

$$b^{-} \times c^{-} = (i + 2j) \times (k)$$

$$= (i \times k) + 2(j \times k)$$

$$b^{-} \times c^{-} = - j + 2i$$

$$a^{-}.b^{-} \times c^{-} = 2i.(- j + 2i)$$

$$= [0 + 4(1)]$$

$$a^{-}.b^{-} \times c^{-} = 4$$

$$A = 2p \frac{(- j + 2i)}{4}$$

$$a.bxc = 4$$

$$A = 2p\,\frac{(-j + 2i)}{4}$$

$$A = \frac{p\,(2i - j)}{2}$$

$$b = 2p\,\frac{cxa}{a.bxc}$$

$$b = 2p\,\frac{2j}{4}$$

$$b = pj$$

$$c = 2p\,\frac{axb}{a.bxc}$$

$$c = 2p\,\frac{axb}{4}$$

$$a \times b = 2i \times (i + 2j)$$

$$= i(0) - j(0 - 0) + k(4 - 0)$$

$$a \times b = 4k$$

$$c = 2p\,\frac{4k}{4} = 2pk$$

$$\boxed{A = \frac{p}{2}(2i - j) \quad , B = pj \quad , c = 2pk}$$

بسم الله الرحمن الرحيم

الفصل العاشر : علم البلورات
المرحلة الثالثة: فرع المواد/ قسم العلوم التطبيقية
مدرس المادة:د.ناهدة جمعة حميد

أحتساب المسافة بين المستويات(d_{hkl})بأستخدام مفهوم الشبكة المقلوبة :-

$$G_{(hkl)}.G_{(hkl)} = (ha^*+kb^*+lc^*).(ha^*+kb^*+lc^*)........................(1)$$

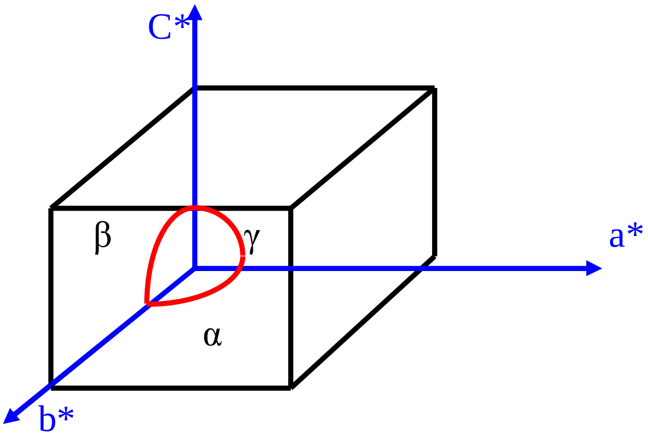
$$= h^2a^2 + hka^*.b^* + hla^*.c^* + khb^*.a^* + k^2b^{*2} + klb^*.c^* + lhc^*.a^* + lkc^*.b^* + l^2c^* ....(2)$$

$$G^2{}_{(hkl)} = h^2a^* + k^2b^* + l^2c^* + 2hka^*.b^* + 2klb^*.c^* + 2lhc^*.a^* ....(3)$$

$$G^2{}_{(hkl)} = h^2a^2 + k^2b^2{}^* + l^2c^2{}^* + 2hka^*b^*\cos\gamma + 2klb^*c^*\cos\beta + 2lhc^*a^*\cos\alpha ....(4)$$

$$\because G_{(hkl)} = \left(\frac{2\pi}{d_{(hkl)}}\right)\hat{n} ....(5)$$

$$\left|G_{(hkl)}\right|^2 = \frac{4\pi^2}{d^2{}_{(hkl)}} = \frac{1}{d^2{}_{(hkl)}} ....(6)$$



$$\therefore \frac{4\pi^2}{d^2{}_{(hkl)}} = h^2a^* + k^2b^2{}^* + l^2c^* + 2hka^*b^*\cos\gamma + 2klb^*c^*\cos\beta^* + 2lhc^*a^*\cos\alpha ....(7)$$

وحيث أن (a^*, b^*, γ^*) تناظر $(\alpha ، \beta و\gamma)$ في الشبكة الحقيقية وأن هذه المعادلة تمثل تعبيراً عاماً للتطبيق على النظام البلوري الثلاثي الميل (Triclinic) حيث أن :-

وأن

$$a^* \neq b^* \neq c^*$$

$$\alpha^* \neq \beta^* \neq \gamma^*$$

وجميع الأنظمة البلورية الأخرى .. وكلما كان التماثل البلوري عالياً تبسطت المعادلة (٧) .

١- **فمثلاً (النظام المكعبي) فأن**

$$c^* = b^* = c^*$$

$$a^* = b^* = g = 90$$

وبنطبيق العلاقة (٧)

$$\frac{4p^2}{d^2_{(hkl)}} = h^2a^2{}^* + k^2b^2{}^* + l^2c^* + 2hka^*b^*\cos g^* + 2klb^*c\cos a + 2lhc^*a^*\cos b^*$$

$$\frac{4p^2}{d^2_{(hkl)}} = h^2a^2{}^* + k^2a^2{}^* + l^2a^2{}^* + 0 + 0 + 0$$

$$\frac{4p^2}{d^2_{(hkl)}} = \left(h^2 + k^2 + l^2\right)a^2{}^*$$

$$a^* = \frac{2p}{a}$$

$$\frac{4p^2}{d^2_{(hkl)}} = \left(h^2 + k^2 + l^2\right)\left(\frac{2p}{a}\right)^2$$

$$\frac{4p^2}{d^2_{(hkl)}} = \left(h^2 + k^2 + l^2\right)\frac{4p^2}{a^2}$$

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

$$\therefore d^2_{(hkl)} = \frac{a}{\sqrt{\left(h^2 + k^2 + l^2\right)}}$$	**للنظام المكعبي**

٢- بالنسبة للنظام المعيني القائم **Orthorhombic**

$$a^* \neq b^* \neq c^*$$

$$a^* = b^* = g^* = 90$$

$$\therefore \frac{4p^2}{d^2_{(hkl)}} = h^2a^* + k^2b^2{}^* + l^2a^2{}^* + 2hka^*b^* + 2klb^*c^*\cos a^* + 2lhc^*a^*\cos^* b^*$$

$$= h^2a^2{}^* + k^2b^2{}^* + l^2c^2{}^* + 0 + 0 + 0$$

$$\frac{4p^2}{d^2_{(hkl)}} = \frac{4p^2}{a^2}h^2 + \frac{4p^2}{b^2}k^2 + \frac{4p^2}{c^2}l^2$$

$$\frac{4p^2}{d^2_{(hkl)}} = 4p^2\left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}\right)$$

$$\therefore \frac{1}{d^2_{(hkl)}} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b2} + \frac{l^2}{c^2}$$ للنظام المعيني

٣- بالنسبة للشكل الرباعي :-

$$a* \neq b* \neq c*$$

$$a* = b* = g* = 90$$

$$\frac{4p^2}{d^2_{(hkl)}} = h^2a^2 * + k^2b^2 * + l^2c^2 * + 2klb * c * \cos a * + 2klb * c * \cos * a * + 2lhc * a * \cos b$$

$$= h^2a^2 * + k^2b^2 * + l^2c^2 * + 0 + 0 + 0$$

$$a + + b + \neq c *$$

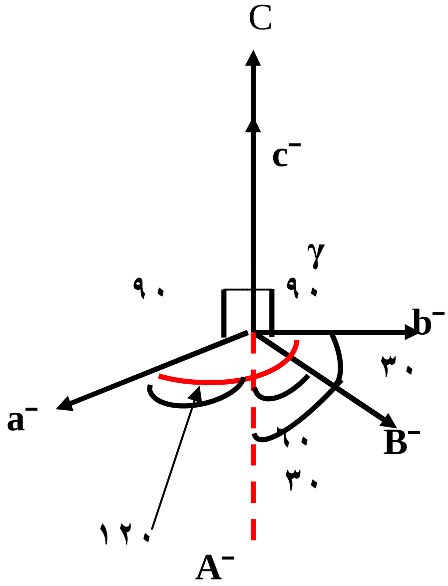
$$= h^2a^2 * + k^2a^2 * + lc *$$

$$\frac{4p^2}{d^2_{(hkl)}} = 4p^2 \frac{h^2}{a^2} + 4p^2 \frac{k^2}{b^2} + 4p^2 \frac{l^2}{c^2}$$

$$\frac{4p^2}{d^2_{(hkl)}} = 4p^2 \frac{\left(h^2 + k^2\right)}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

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

٤- بالنسبة للنظام السداسي "Hexgonal"



$$a* = b* \neq c*$$

$$a* = b* = 90, g* = 60$$

$$A^- = A* = \frac{2p}{a\cos 30} = \frac{2p}{a\frac{\sqrt{3}}{2}} = \frac{2p}{\sqrt{3}a}$$

$$C^- = c* = \frac{2p}{d_{100}} = \frac{2p}{c}$$

$$a * .b* = a * b^2 * \cos g * = \frac{a^2 *}{2}$$

$$\frac{4p}{d^2_{(hkl)}} = h^2a^2 * + k^2b^2 * + 2kha * b * \cos g * + 2klb * c * \cos b + 2lhc * a * \cos g *$$

$$\frac{4p}{d^2_{(hkl)}} = h^2 a^2 * + k^2 b^2 * + l^2 c^2 * + \frac{2hka^2 *}{2}$$

$$= \left(h^2 + hk + k^2\right) a^2 * + l^2 c^2 *$$

$$= \left(h^2 + hk + k^2\right)\left(\frac{4p}{\sqrt{3}a}\right)^2 + l^2 \frac{4p^2}{c^2}$$

$$\boxed{\frac{1}{d^2_{(hkl)}} = \frac{4}{3}\frac{\left(h^2 + hk + k^2\right)}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}}$$

بسم الله الرحمن الرحيم

الفصل الحادي عشر : علم البلورات
المرحلة الثالثة :فرع المواد /قسم العلوم التطبيقية
د.ناهدة جمعة حميد

عامل التركيب الهندسي "Geometrical structure factor" :-

أن شدة أنعكاسات الموجات المختلفة تعتمد على مواقع الذرات في وحدة الخلية وكذلك على التوزيع الالكتروني .
لقد وجد أن سعة الموجة المستطيرة تتناسب مع كمية فيزياوية أطلق عليها (بعامل التركيب الهندسي) .
يلعب عامل التركيب الهندسي دوراً مهماً بأعطاء معلومات بحدوث أو عدم حدوث ظاهرة الحيود ، ويتم ذلك من خلال الحساب النظري لمعامل التركيب الهندسي لأي مستوي أحداثياته (hkl) في وحدة خلية معروفة مواقع الذرات فيها وعلى سبيل المثال . خلية ممركزة الجسم أو خلية ممركزة الأوجه ....الخ .
يعرف عامل التركيب الهندسي بأنه النسبة بين سعة الموجة المستطيرة لجميع الالكترونات الفعلية للذرات في وحدة الخلية وسعة الموجة المستطيرة من الكترون واحد يقع في نقطة ما .
ويعطى بالعلاقة

$$S_G = \sum_j f_j \exp - iGf_j$$

(-عدد مواقع الذرات)

$$r_j = x_j a + y_j\, b + z_j c ....(2)$$

حيث أن :-
fj= عامل التشتيت الذري والذي يعرف بأنه النسبة بين سعة الموجة المستطيرة في ذرة وسعة الموجة المستطيرة من الكترون واحد يقع في نقطة ما .

$$S_G = \sum_j f_j \exp - iG.r_j ....(3)$$

أذا عرفنا أحداثيات ميل للمستويات (hkl) فيمكن كتابة G^- بـ G_{hkl} ، أي

$$G_{hkl} = ha^* + kb^* + lc^*$$

وعليه يمكن كتابة حاصل الضرب $r.G_{hkl}$.

$$r_j.G_{hkl} = (lx_j a^- + y_j b^- + z_j c^-).(ha^* + kb^* + lc^*)$$
$$= 2p\,(x_j h + y_j k + z_j l)...............................(4)$$

وبتعويض (٣)في (٤) نحصل على :-

$$S_{(hkl)} = \sum_j f_j \exp - (i2p\,(x_j h + y_j k + z_j l))..................(5)$$

وتكتب بالصيغة : -

$$S_{(hkl)} = \sum_j f_j [\cos 2p\,(hx_j + ky_j + lz_j) + i \sin 2p\,(hx_j + ky_j + lz_j)].....................(6)$$

وبما أن S تحتوي على عدد معقد ، فللحصول على القيمة المطلقة (/S/) لابد لنا من نأخذ المرافق المعقد Complex conjugate (S*) فعليه .

$$S_{(hkl)}^{\ *} = \sum_j f_j \exp(i2p\,(x_j h + y_j k + z_j l)).....................(7)$$

ويمكن كتابتها بالصيغة التالية :-

$$S^*_{(hkl)} = \sum_J f_j \cos 2p\left(hx_j + ky_j + lz_j\right) - i\sin 2p\left(hx_j + ky_j + lz_j\right) \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(8)$$

$$\therefore \left|S^*_{(hkl)}\right|^2 = \left[\sum_j f_j \cos 2p\left(hx_j + ky_j + lz_j\right)\right]^2 + \left[\sum_j f_j \sin 2p\left(hx_j + ky_j + lz_j\right)\right]^2 \quad \ldots\ldots\ldots\ldots(9)$$

عامل التركيب الهندسي

حساب عامل التركيب الهندسي لشبيكة مكعبة متمركزة الجسم ''Determination of Geometrical Sstructure Factor for Body Centeral Cubic Lattice '': -

تحتوي الخلية المركزة الجسم على ذرتين من نوع واحد فعليه يكون عامل التشتيت الذري في المعادلة (٩) هو F=fi أي أن المعادلة (٩) تصبح بعد التعويض بأحداثيات الذرتين (0,0,0) و(½½½) مما يلي :
fi=f

$$\left|S_{hkl}\right|^2 = \left[f\cos 2p\left(h\times 0 + k\times 0 + l\times 0\right) + f\cos 2p\left(\frac{h}{2}+\frac{k}{2}+\frac{l}{2}\right)\right]^2 +$$

$$\left[\sin 2p\left(h\times 0 + k\times 0 + l\times 0\right) + f\sin p\left(h+k+l\right)\right]^2$$

$$\left|S_{hkl}\right|^2_{bcc} = f^2\left[1+\cos p\left(h+k+l\right)\right]^2$$

حالات خاصة :-

(١) أذا كان حاصل جمع (h+k+l) يساوي عدد فردي فأن

$$\left|S_{hkl}\right|^2 = \left[1+\cos_{(odd)} p\right]$$

$$\left[1-1\right] = -1$$

$$\left|S_{hkl}\right|^2 = 0$$

وهذا يعني أن المستويات التي حاصل جمع (h+k+l) فدي أنها لاتعمل على أنكاس الاشعة وبهذا فأنها لاتظهر بقعاً أوأي شيء على الفلم .

(٢) أذا كان حاصل جمع (h+k+l) يساوي عدد زوجي فأن

$$\left|S_{hkl}\right|^2 = f^2\left[1+\cos_{(even)} p\right]^2$$

$$f^2 = \left[1+1\right]^2$$

$$\left|S_{hkl}\right|^2 = 4F^2$$

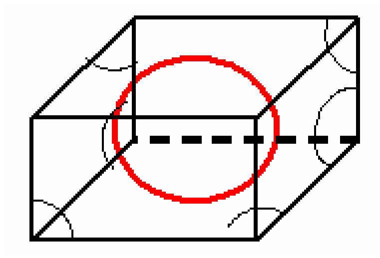
مثال :- أحسب عامل التركيب لبلورة كلوريد السيزيوم Cscl :-

Cs = 000

Cl=½½½

$$|S_{hkl}|^2 = [f_{Cs}\cos 2p(0+0+0) + f_{cl}\cos p(h+k+l)]^2 + [f_{Cs}\sin 2p(0+0+0) + f_{cl}\sin p(h+k+l)]^2$$
$$= [f_{Cs} + f_{cl}\cos p(h+k+l)]^2$$

(٠٠٠)



أذا كان مجموع h+k+l= عدد فردي مثل
= (١+١+١)
أو(١٠٠)
أو (١٢٠)

فأن

$$|S_{(111)}|^2 = [f_{CS} - f_{cl}]^2$$

وأذا كان h+k+l = عدد زوجي
مثل ٢+٢+٢
أو 2+3+1
أو 1+1+2
وهكذا
أو ٢٠٠
أو ١١٠

فأن

$$|S_{(222)}|^2 = [f_{Cs} + f_{cl}]^2$$

حساب عامل التركيب الهندسي لشبيكة مكعبة متمركزة الاوجه "Determination of Geometrical Structure Factor fFor Face Centeral Cubic Lattice" :-

تحتوي الخلية المركزة الاوجه على أربعة ذرات من نوع واحد فعليه يكون عامل التشتيت الذري في المعادلة (١٥) هو fi=f أن أحداثيات الذرات الاربعة هي (٠½½) , (½٠½) ، (½½o) ، (0,0,0)
وبتعويضهما في المعادلة (١٥) نحصل على :-

$$|S_{(hkl)}|^2 = f^2\left[\cos 2p(0+0+0)+\cos 2p\left(\frac{h}{2}+0+\frac{l}{2}\right)+\cos 2p\left(\frac{h}{2}+\frac{k}{2}+0\right)+\cos 2p\left[0+\frac{k}{2}+\frac{1}{2}\right.\right]^2$$

$$+ f^2\left[\sin 2p(0+0+0)+\sin 2p\left(\frac{h}{2}+\frac{k}{2}+0\right)+\sin 2p\left(\frac{h}{2}+0\frac{l}{2}\right)+\sin 2p\left(0+\frac{k}{2}+\frac{l}{2}\right)\right]$$

$$|S_{hkl}|^2 = f^2[1+\cos p(h+k)+\cos p(h+l)+\cos p(k+l)]_2$$

حالات خاصة :-

(١) أذا كانت قيم كل من (hkl) عدداً فردياً :-

$$|S_{(hkl)}|^2 = 16 f^2$$

وهذا يعني أن المستويات ذات قيم أحداثيات فردية تعكس الاشعة ،وتظهر بقعاً سوداء في الفلم

(٢) أذا كانت قيم كل من (hkl) عددا زوجياً أذا أن

$$|S_{(hkl)}|^2 = 16 f^2$$

وهذا يعني أن المستويات ذات قيم أحداثياتها زوجية تعكس الاشعة وبهذا فأنها تظهر بقعاً سوداء على الفلم .

(٣) أذا كانت قيم (hkl) مختلط أي مثلاً (فردي- زوجي – فردي) فعليه :-

$$|S_{(hkl)}|^2 = 0$$

وهذا يعني عدم أنعكاس هذه الاشعة من المستويات (لايحقق شرط براك)

١-واجب:- أحسب عامل التركيب لكلوريد الصوديوم Nacl

Na= 000,½½0, ½0½ ,0½½

Cl=½½½, 00½,0½0, ½00

٢ -واجب :-

بين لماذا الصوديوم المعدني الذي يمتلك نركيز متمركز الجسم (bcc)لايظهر خطوط لطيف الحيود عند المستويات (221),(111) و (٣٠٠) و(١٠٠) في حين تظهر طيف أو خطوط حيود عند المستويات (١١٠) و(٢٢٢) و (٢٠٠) .

بسم الله الرحمن الرحيم

الفصل الثاني عشر : علم البلورات
المرحلة الثالثة :فرع المواد /قسم العلوم التطبيقية
مدرس المادة : د. ناهدة جمعة حميد

العيوب البلورية " Crystal defects "

في البلورات المثالية تترتب الذرات بشكل دوري منتظم من دون أي خلل او عيب الا انه في الحقيقة لا توجد بلورة خالية من العيوب . أن المقصود بمصطلح [العيب defect] في فيزياء الحالة الصلبة هو أنحراف أو أختلال في أستمرارية ترتيب الذرات المنتظم في الشبيكة ، أي عدم أنتظام البنية البلورية . تظهر العيوب البلورية على عدة أشكال والشائع منها وجود الفراغات { vacancies } في البنية البلورية وهذه ناتجة من غياب بعض من الذرات من مواقعها في الشبيكة ، أو وجود أنخلاعات [dislocation] في داخل البنية البلورية .

أن للعيوب البلورية تأثير كبير على تغيير الخواص الفيزياوية على توصيل الكهربائي والتوصيل الحراري وكذلك لها تأثير على تغيير الخواص البصرية والميكانيكية للمواد الصلبة . فعلى الرغم من طموح العلماء المختصين في فيزياء الحالة الصلبة للحصول على بلورة نقية خالية من العيوب ، الا أن فوائد العيوب الكثيرة في مجالات عديدة جعلتهم ينصبون الى خلق العيوب في البلورات النقية . لقد أستطاع الباحثون أضافة ذرات شائبة مثل المغنيسيوم (Mg) في البنية البلورية لبلورة فلوريد الليثيوم (LiF) لتصنع كمجس لقياس كمية الاشعة التي يتعرض العاملون في حقل الاشعاع بدلاً من الفلم الباج الحاوي على فلم فوتغرافي يستعمل لمرة واحدة في حين الاول يستعمل لعدة مرات (بلورة LiF / Mg) ويطلق عليها بلورة قياس جرعات التألق الحراري [Thermo luminescence dosimetry] والتي تكتب بأختصار (TLD)أن التقدم الصناعي في مجال الاجهزة الالكترونية والذي شهده القرن العشرين جاء في الحقيقة من أضافة الشوائب في أشباه الموصلات والذي أدى الى صناعة الترانسستور والدوائر المتكاملة . أن عملية أضافة الشوائب كان في بداية الامر يتم بطريقة كلاسيكية وتدعى طريقة الانتشار { Diffusion } ، أما الان فلقد تطورت الكثير من التقنيات ، وأصبحت تقنية الغرس الايوني [Ion implantation] هي السائدة وذلك لدقتها في مجال تصنيع الدوائر الالكترونية الدقيقة . أن عملية تعرض المواد الصلبة وخاصة الفلزية منها الى الاشعة أو الى النيوترونات تؤدي الى زيادة مقاومتها ، ويرجع السبب الى حدوث أعداد كبيرة من الفراغات في داخل البنية البلورية لتلك المادة .

لقد أستطاع الباحثون في مجال العيوب البلورية التحكم في كثير من الخواص الفيزياويةللمواد الصلبة من خلال العيوب المختلفة ومن أهمها :-

١- يتم التحكم بالتوصيلية الكهربائية والحرارية في المواد الصلبة من خلال تركيز الشوائب .
٢- يعتمد التحكم في درجتي الانصهار والانجماد (في المواد الصلبة على نوع العيوب في بنيتها البلورية).
٣- يتم التحكم في الخواص الميكانيكية للمواد الصلبة أضافة الشوائب أو من خلال تعرضها للاشعة .

٤- يعتمد التحكم في مركز اللون [Colour centres]خاصة في المواد الصلبة الايونية على نوع الشوائب وعلى تركيزها .

٥- أن التألق الضوئي [Luminescence] أو التألق الحراري [Thermo luminescence] يمكن التحكم بها بواسطة الشوائب المختلفة .

تصنيف العيوب البلورية :-

١) العيوب النقطية Point defect

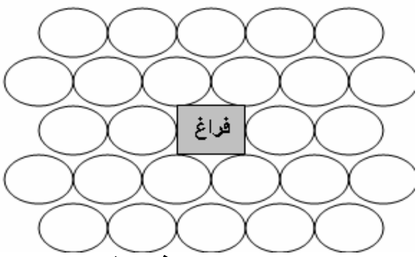
٢) العيوب الشبيكية Lattice defect

أولاً: العيوب النقطية Point defect:-

يعرف العيب النقطي بأنه أنحراف أة أختلال في موقع ذرة أو مواقع عدد قليل من الذرات المجاورة .أما سبب تسميته بالعيب النقطي لكونه يحدث في منطقة صغيرة جداً اذا ما قورنت بحجم البلورة .ولهذا تعد هذه المنطقة كنقطة في قضاء كبير ان العيوب النقطية اما ان تكون نتيجة فراغات [Vacancies]أونتيجة ذرات أضافية [Extra atoms] داخل البنية البلورية .

أ)الفراغات "Vacancies"

أن أبسط أنواع العيب النقطي هو الفراغ والذي هو عبارة عن حيز الذرة المفقودة صمن الترتيب المنتظم للشبيكة وكما هو موضح في الشكل . وقد يحدث هذا النوع من العيب نتيجة عيب في الرص الذري أثناء عملية النمو البلوري [Crystal growth] للمادة ، أو من جراء التذبذب الحراري للذرات حول مواقعها في الشبيكة عند درجات الحرارة العالية الذي من المحتمل أن تزاح الذرة من مكانها تاركة فراغاً .

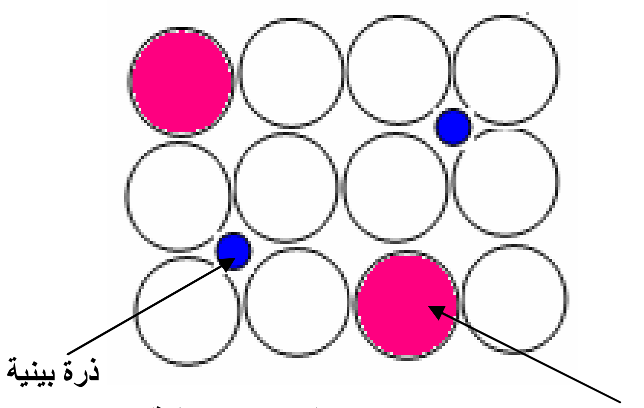


a)تكوين فراغ

ب)الذرات الاضافية Extra atoms:-

أن النوع الاخر في العيب النقطي هو وجود ذرات أضافية في داخل البنية البلورية ويطلق عليها بالشوائب (Impurity) أن الذرة الاضاقية يمكن لها أن تحتل موقعين متميزين في داخل الشبيكة فأذا أحتلت الذرة الاضافية موقع الذرة الاصلية فأنها تدعى عندئذ بالذرة الاستبدالية Substitution atoms) أما أذا أحتلت الذرة الشائبة موقع ما بين الذرة الاصلية فأنها تدعى عندئذ بالذرة الاستبدالية . كما مبين في الشكل (b) . أن الذرات البيينية تكون على نوعين فأما أن تكون من نفس النوع من الذرات البينية تكون على نوعين فأما أن تكون من نفس النوع من ذرات الشبيكة ويتم ذلك بأزاحة الذرة الاصلية للبنية البلورية

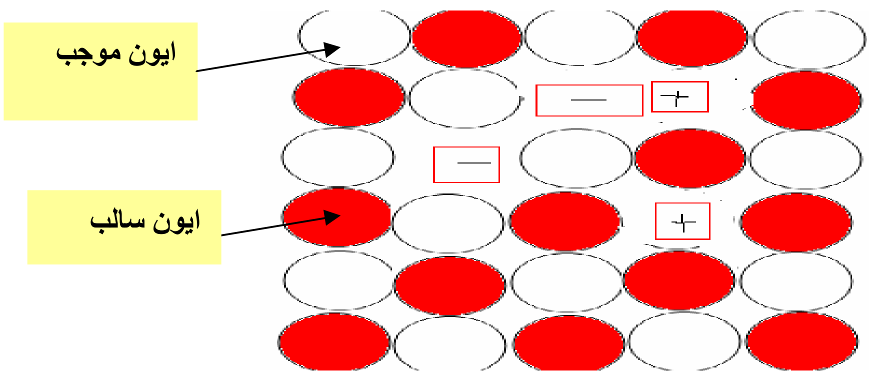
. ويتم أضافة الشوائب الى البنية البلورية بطرق عديدة أهمها طريقة النمو البلـوري أو بأسـتخدام طريقـة الانتشار .وهناك طريقة متطورة دقيقة جداً لاضافة الشوائب يطلق عليها الغرس الايـوني. تعتمـد مواقـع الذرات البينية على نوع رص الذرات أو الايونات المكونة للبنية البلورية ففي المواد الـصلبة ذات الـرص المحكم من الصعب جداً أن تحتوي بنيتها على ذرات بينية وذلك لصغر الحيز بين الذرات حيث لايمكـن أن يستوعب ذرات أضافية ومن أمثلة ذلك النحاس والخارصين . أما في الرص غير المحكـم يمكـن للـذرة الشائبة أن تحتل مكاناً بينياً خاصة أذا كان حجمها صغيراً أي بنصف قطر ($0.8A^o$).



الذرات الاضافية { b }

ج)عيوب شوتكي Schottky defect :-

يعرف عيب شوتكي على أنه فقدان أحدى الذرات من موقعها الاصلي تاركة وراءها حيزاً من الفراغ وكما هو مبين في الشكل . ويحدث عيب شوتكي عادة في البلورات الايونية مثل كلوريد الصوديوم فلقد فرض شوتكي أن البلورة الايونية المعدنية تتكون من أعداد متساوية من الايونات الموجبة والسالبة .فمن أجل خلق فراغ ذو شحنة موجبة (Cation vacancy) يجب على أيون موجب أن يترك موقعه الى خارج البلورة (أي الى سطح البلورة) .وبما أن البلورة دائما تكون في حالة توازن كهربائي ، ولكي تحافظ على توازن الشحنات الكهربائية وجب عليها العمل على طرد أيون سالب الى خارج البلورة ليحل محله فراغاً ذو شحنة سالبة (anion vacancy) وعليه يكون عدد الفراغات ذو الشحنة الموجبة مساويا ً لعدد الفراغات ذو الشحنة السالبة .



(تكوين عيوب شوتكي في البلورات الايونية)

لقد أستطاع شوتكي أن يحصل على علاقة رياضية لحساب تركيز الفراغات في البلورات الايونية تدعى بمعادلة شوتكي .

$$n = Ne^{-E_P/2K_BT}$$

حيث n = عدد الفراغات في البلورة

N = عدد الفراغات في البلورة الايونية

E_P = الطاقة اللازمة لتكوين زوج من الفراغات . Energy of a pair formation

ويطلق عليها طاقة التكوين وتعرف على أنها الطاقة اللازمة لتكوين زوج من الفراغ الموجب والسالب .

K_B = ثابت بولتزمان

$$= 1.380 \times 10^{-23} J/^o k$$

T = درجة الحرارة المطلقة

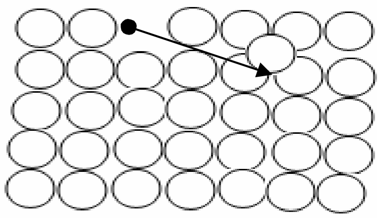
$$1eV = 1.6021 \times 10^{-19}$$

$$\therefore J = \frac{1}{1.6021 \times 10^{-19}} eV.$$

د) عيوب فرنكل Frenkel defect

يعرف عيب فرنكل على أنه أزاحة أحدى الذرات من موقعها الاصلي الى موقع بيني تاركاً ورأها حيزاً من الفراغ وكما هو مبين في الشكل .يحدث عيب فرنكل عادة في البلورات الفلزية وبلورات أشباه موصلات .

لقد أستطاع فرنكل الحصول على العلاقة الرياضية التالية لحساب تركيز عدد الازواج من الفراغ –الذرة البينية في المواد الصلبة غير الايونية :



(تكوين عيوب فرنكل في البلورات غيرالايونية)

$$n = \sqrt{NN_i}\, e^{-\frac{E_i}{2K_BT}}$$

n = عدد الازواج فراغ –ذرة بينية

N = عدد الذرات في البلورة الحقيقية.

N_i = عدد المواقع البينية

E_i = الطاقة اللازمة لازاحة ذرة من موقعها الاصلي الى موقع بيني وتسمى طاقة تكوين فرنكل

K_B= ثابت بولتزمان

T = درجة الحرارة المطلقة

ثانياً : عيوب الشبيكة :Lattice defect

أن العيب النقطي يحدث في موقع ذرة أو في مواقع عدد قليل الذرات .أما أذا أمتد الاختلال أو العيب ليشمل على مسافات عديدة من البلورة فيسمى عندئذ بالعيب الشبيكي وتقسم الى نوعين :-

١ - العيب الخطي Line defect

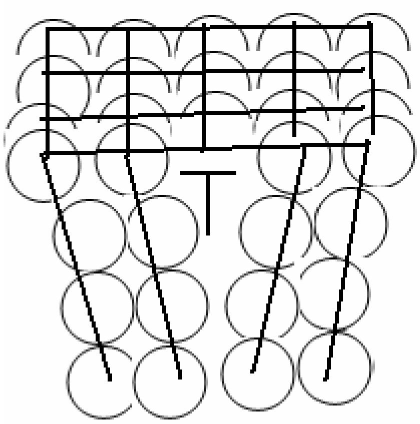
٢ - العيب السطحي surface defect

١ - العيب الخطي Line defect: -

لقد سمي العيب الخطي بهذا الاسم نظراً لطبيعة تطوره أو سريانه التي تكون على أمتداد مسارات خطية . وعليه فأن البلورات وبصورة عامة لاتكون مثالية كما أسلفت سابقاً بل يمكن أن تحوي في بنيتها عيوباً خطية والتي تدعى بالانخلاعات (dislocation) . أن الانخلاعات تؤثر بصورة كبيرة على الخواص الميكانيكية للمادة الصلبة ، حيث تضعف من مقاومة المادة تحت تأثير الاجهاد كثيراً .ولقد تم تقسيم الانخلاعات الى :-

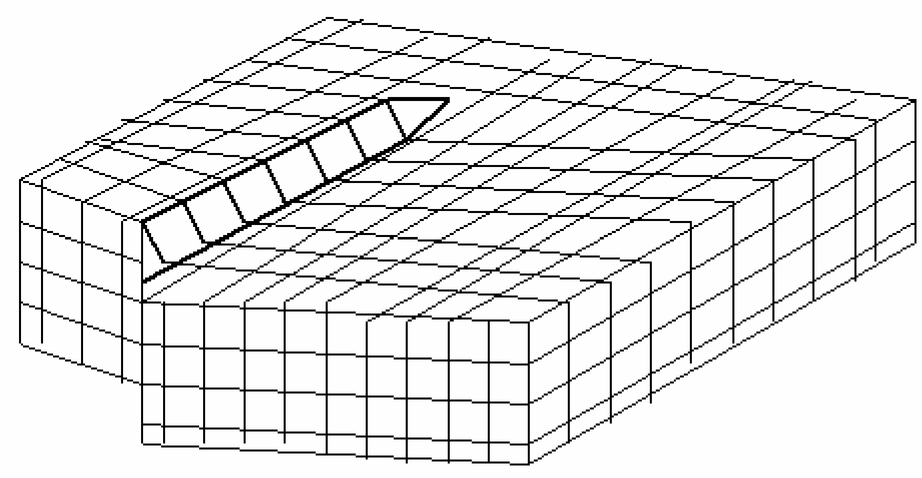
أ- الانخلاع الحافي Edge dislocation:-

يطلق على الانخلاع الحافي بأسم أنخلاع تايلور - أوران Toylor – Orowan والذي يمكن ان يوصف على انه صف من الذرات يميز حدود حافة جزء في المستوي الذي أمتدج خارج البلورة كما مبين في الشكل ويرمز عادة للانخلاع الحافي بحرف L والذي يسمى بمتجه بيرجيز Burgers vector وهذا المتجه بشكل زاوية قائمة مع خط الانحلال الماضي .



ب) الانحلال اللولبي Scraw dislocation :-

يطلق على الانخلاع اللولبي بأنخلاع بيرجيرز والذي يمكن أن يوصف على أنه صف من ذرات المستوي البلوري حوله مساراً لولبياً وكما هو مبين في الشكل . في الانخلاع اللولبي يكون متجه بيرجيرز موازياً لخط الانخلاع .



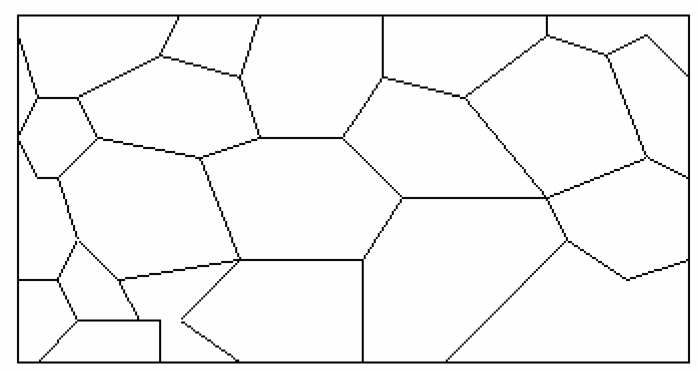
(الانخلاع اللولبي)

٢ - العيب السطحي Surface dislocation :-

لقد سمي العيب السطحي بهذا الاسم لانه ينشأ من تجمع العديد من العيوب الخطية مكونة تسطح من العيوب مثال ذلك حدود الحبيبات ،وخلال التراص والتوائم ....الخ.

أ- الحدود الحبيبية Grain boundary :-

أن بعض المواد الصلبةلاتتكون بنيتها من بلورة واحدة بل من عدد من البلورات صغيرة الحجم **crystallites** والتي يطلق عليها بالحبيبات **grains** . أن كل حبيبة داخل بنية المواد الصلبة تختلف في أتجاهها وحجمها وشكلها وبعدها عن جارتها وبالتالي لابد أن يفصلها عن بعضها بعضاً حدود فاصلة يطلق عليها بحدود الحبيبات وكما هو مبين في الشكل .



(الحدود الحبيبية)

تعد حدود الحبيبات كمناطق أنتقالية تكون الذرات فيها غير متراصة مع أي من البلورتين المتجاورتين .فعند ملاحظة الفلز تحت المجهر لايمكن رؤية الذرات نفسها ولكن يمكن تحديد الحدود الحبيبية على سطح الفلز بعد معاملته بمواد الاظهار (Etching Agents) ويتم هذا لصقل السطح جيداً الى أن نحصل على سطح أملس كالمرآة ثم يعمل السطح لفترة قصيرة بمادة الاظهار الكيماوية فتتعامل معها الذرات في المناطق الانتقالية بسرعة أكبر من باقي الذرات فينتج هذا التفاعل خطوطاً بالامكان رؤيتها تحت المجهر والتي هي حدود الحبيبات . تعمل حدود

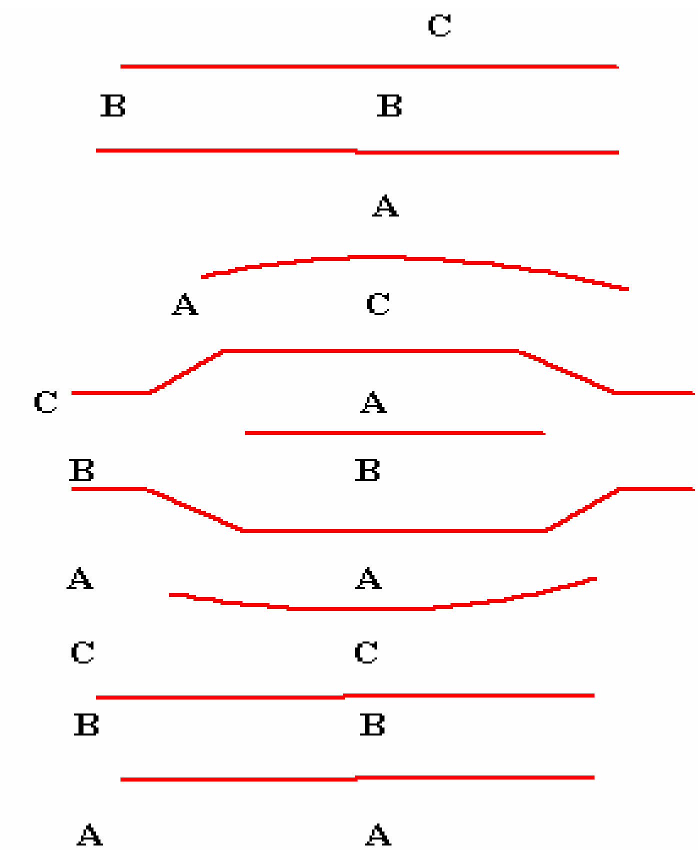
الحبيبات على أعاقة حركة الالكترونات وينتج عن ذلك مقاومة أضافية للمواد الفلزية حيث يقل التوصيل الكهربائي فيها .

ب) خلل التراص Stacking fault :-

يعد خلل التراص من العيوب التي تحدث نتيجة لعدم أستمرارية تعاقب المستويات بسبب خلل في ترتيب الذرات ذات النوع الواحد أو أكثر من نوع.فلو فرضنا وجود عدد (n) من الطبقات التي تتكون من نوع (A) من الذرات وعدد (n+1) من الطبقات التي تكون من نوع(B) ، فعليه يكون تعاقب الطبقات عند أنماء البلورة على هذا النحو فأذا حدث خلل في ترتيب الذرات ، فأن أحد الطبقات التي ذراتها من نوع (C) الموجود في المادة الصلبة كشوائب فتنمو بين الطبقات (n + 1, n) على هذا النحو :-

AB ABC AB ABC AB AB

وبهذا تكون الطبقة C هي خلل التراص وكما هو مبين في الشكل :

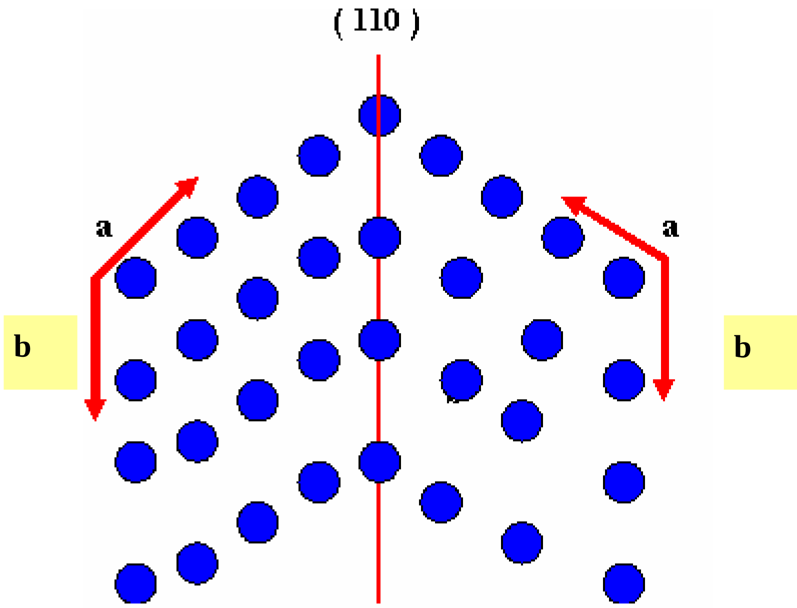


(خلل التراص)

جـ) التوائم Twins :-

تعد التوائم من العيوب السطحية الشائعة والتي تحدث نتيجة عدم أستمرارية دورية الشبيكة وتعد عملية تكوين التوائم نمطاً من أنماط التشويهات اللدنة (Plastic deformation) فنلاحظ خاصة في بنيات البلورات التي تنتمي الى المواد البلورية المكعبة ذات الاوجه المركزة (Fcc) .فمن خلال عملية تكون البلورات التؤامية تحدث أزاحة

صغيرة بين المستويات العديدة المجاورة . أن الجزء المشوه من البلورات له تماثلاً مرآتي مع الجزء غير المشوه وكما هو مبين في الشكل :-



ويتم حدوث عملية التوائمة بالطرق التالية :-

١- تتم بطريقة النمو البلوري وتدعى عندئذ بالتوائم النامية .

٢- يتم بطريقة التشوه الميكانيكي كالطرق أو الضغط وتسمى بالتوائم المشوهه (deformation twin) .

٣- تتم حدوث التوائمة عند صهر المادة وأعادة نموها .

أن مقدار التشوه في الشبيكة البلورية عند الحدود التوأمية يكون بسيطاً لذا تكون طاقة الذرات فيه قليلة .تظهر الحدود التوأمية في بعض السبائك بصورة خاصة مثل سبيكة النحاس الاصفر . أن للتشوه التوأمي أهمية كبيرة مثل الخارصين والمغنيسيوم التي يصعب فيها الانزلاق اللدن (plastic slip)