فيزياء الحالة الصلبة

المرحلة الرابعة

الفصل الأول: (Crystal Structure)

المقدمة

المركبات الكيميائية والعناصر المكونة توجد بثلاثة حالات: الحالة الصلبة والحالة السائلة والحالة الغازية.

الحالة الصلبة: تمتاز بشكل وحجم ثابت مع الزمن عند درجات حرارة معينة. المسافات بين الذرات بضعة A° (10^{-10}m) أي بحدود (10^{28}-10^{29}) ذرة/m^3.

الحالة السائلة: الشكل متغير والحجم ثابت في أي زمن واي درجة حرارة المسافة بين الذرات بضعة A° أي بحدود (10^{28}-10^{29}) ذرة/m^3.

الحالة الغازية: ليس لها حجم او شكل ثابت في أي درجة حرارة المسافة بين الذرات بضعة A° أي بحدود (10^{15}-10^{16}) ذرة/m^3.

هناك حالة رابعة للمادة هي البلازما والتي تكون فيها المادة عبارة عن غاز متأين وحالة خامسة تظهر فيها المادة بشكل دقائق نووية ذات طاقة عالية

التناظر الانتقالي في البلورة Translation symmetry

هو تعبير اخر عن صفة الدورية في البلورة وهذا التناظر يعني : انه اذا تحركت نقطة ما بواسطة أي متجه يربط بين نقطتين، تبدو النقطة وكأنها لم تتحرك أي ان ما يجاورها لم يتغير. وعلى أساس حالة التبلور يمكن تصنيف المادة الصلبة الى:

١-غير المتبلورة (عشوائية التوزيع).

٢-متبلورة : ترتيب دوري منتظم لمدى طويل(انتظام غير محدود).

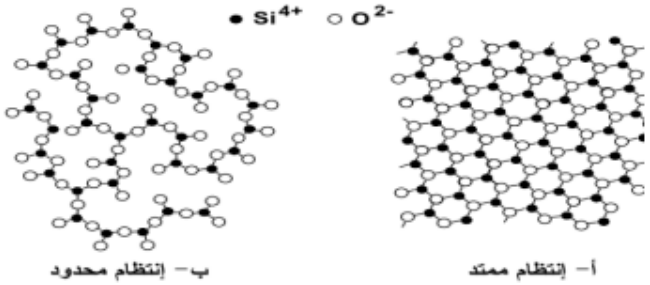
٣-متعددة التبلور(انتظام محدود) ترتيب منتظم لمدى قصير ثم يعود الى العشوائية.

بشكل عام، تختلف المواد غير المتبلورة عن المواد المتبلورة بكيفية انتظام الذرات في المادة حيث يغيب الانتظام في النوع الاول (اي تتوزع الذرات بشكل عشوائي)، بينما يوجد هذا الانتظام في النوع الثاني من المواد الصلبة. بالرغم من ان هذا المفهوم صحيح الى حد كبير الا انه يوجد في بعض المواد غير المتبلورة مزيج من العشوائية والانتظام للذرات.

يوجد نوعان من الانتظام هما الانتظام المحدود (قصير المدى) والانتظام الممتد (طويل المدى). في الانتظام المحدود تكون الذرات او المجموعات الذرية مرتبة ومتكررة على المدى القصير لكنها تفقد هذا الترتيب والانتظام في المدى الطويل فعندها تسمى المادة بـ المادة الصلبة غير المتبلورة non-crystalline (امورفية amorphous) ويسمى التركيب البنائي لهذه المواد تركيبا ذا انتظاما قصير المدى.

بينما اذا اظهر التركيب البنائي لمادة صلبة انتظاما الى مدى طويل فيقال ان هذا التركيب ذا انتظاما ممتداً و تسمى المادة بـ المتبلورة او البلورية crystalline والذي يؤدي الى تكوين البلورات.

يوجد الكثير من المواد الصلبة التي يمكن ان تتواجد بالحالتين البلورية والامورفية وذلك اعتماداً على ظروف التحضير، وخير مثال على ذلك هي مادة رمل الصحراء، حيث منه يمكن الحصول على اكثر من شكل للمادة الصلبة مثل الزجاج (مادة غير متبلورة) او الكوارتز/الماس (مادة متبلورة).

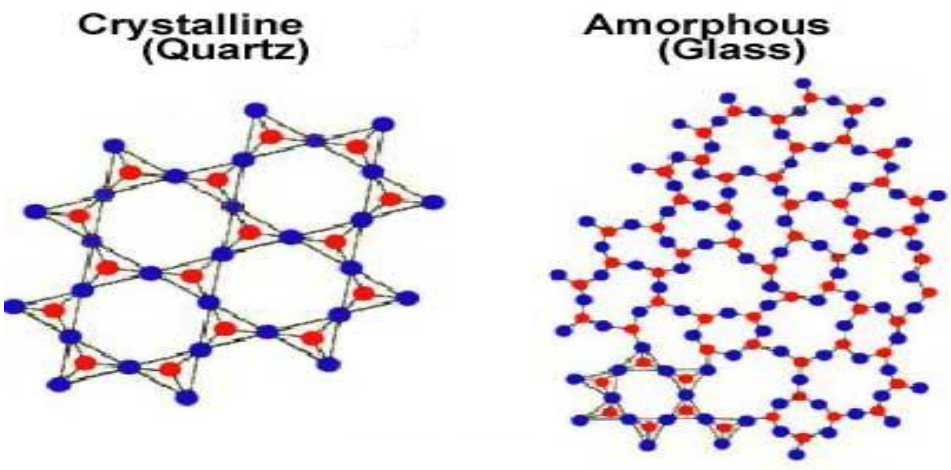


التركيب البنائي للكوارتز والزجاج، حيث يظهر انتظاما ممتدا أو انتظام محدودا.

مما سبق، يمكن تعريف الانتظام المحدود للمجموعات الذرية بأنه انتظاماً مستمراً في المدى المكاني القصير ويغيب في المدى المكاني البعيد. يتواجد هذا النوع من الانتظام في المواد غير المتبلورة (الامورفية). اما الانتظام الممتد فهو الترتيب الذي يتكرر على المدى الطويل ليشمل كل التركيب البنائي للمادة مكوناً الشبيكة البلورية، اي ان هذا الانتظام يتواجد فقط في المواد المتبلورة.

المواد المتبلورة والمواد الغير متبلورة (Crystal and amorphous materials)

توجد المواد الصلبة على نوعين متميزين هما المواد الصلبة المتبلورة (crystalline) والمواد الصلبة الغير المتبلورة (amorphous)، ان المواد الصلبة المتبلورة كما هو الحال في معظم المواد الصلبة تحوي صفوفا من الذرات المتجمعة والمرتبة بشكل دوري مكونة تشكيلة ثلاثية الابعاد (three dimensional) ولهذا السبب تمتلك نوعا من التماثل (symmetry) ويمكن اعتبار تركيبها ناتجا من تكرار نموذج او خلية الوحدة (unit cell) الثلاثية الابعاد. اما المواد الصلبة التي تتجمع ذراتها عشوائيا وبغير نظام مكونة تشكيلة معقدة بحيث لا يمكن اعتبار تركيبها تكراراً لاي خلية وحدة فتسمى بالمواد الصلبة غير المتبلورة مثل الكاربون والزجاج (اوكسيد السليكون) بأنواعه كافة.



المواد غير المتبلورة **المواد المتبلورة**

الشكل 1 توضيح تخطيطي للمواد المتبلورة وغير المتبلورة

يمكن التمييز عملياً بين المواد الصلبة المتبلورة والمواد الصلبة الغير المتبلورة بثلاث معايير مستقلة وهي:

1. تنصهر المواد غير المتبلورة من خلال مدى معين لدرجات الحرارة الذي يكون عادة بضع درجات، بينما تنصهر المواد المتبلورة فجأة عند درجة حرارة معينة.
2. تكون المواد غير المتبلورة تشكيلة منتشرة ومتبعثرة عند حيود الاشعة السينية منها وهذه التشكيلة عبارة عن سلسلة من الحلقات المتحدة المركز، بينما تكون هذه التشكيلة للمواد المتبلورة عبارة عن بقع (spots) متميزة ومنفصلة بعضها عن بعض وذات تماثل معين.
3. تكون جميع المواد المتبلورة متباينة الخواص الاتجاهية (anisotropic) وبدرجات متفاوتة اي ان بعض صفاتها المميزة تعتمد على الاتجاه الذي تقاس معه تلك الصفات بالنسبة الى محاور البلورة (crystal axes)، بينما تكون المواد الصلبة غير المتبلورة جميعاً متماثلة الخواص الاتجاهية (isotropic) اي لا يظهر للاتجاه اي تأثير على خواصها.

مصطلحات أساسية

علم البلورات (Crystallography)

هـو العلـم الـذي يخـتص بدراسـة المـواد المتبلـورة مـن حيـث الشـكل الخـارجي للبلـورات ودراسـة التركيـب الـذري الـداخلي وذلـك باسـتخدام حيـود الاشـعة السـينية (x- ray diffraction)، ويقسـم الـى علـم البلـورات الهندسـي وعلـم البلورات الكيمياوي

البلورة (Crystal)

جسـم صـلب متجـانس يحـده أسـطح ملسـاء مسـتوية تكونـت بفعـل عوامـل طبيعيـة مناسـبة مـن ضـغط ودرجـة حـرارة. او هي جسم او بناء يتكون من وحدات غاية في الصغر هي الذرات تتكرر بانتظام في الابعاد الثلاثية.

البلورات الحقيقية والبلورات المثالية (Real and perfect crystals)

معظـم المـواد الصـلبة هـي مـواد متبلـورة ولكـن البلـورات التـي تتكـون منهـا هـذه المـواد تكـون غيـر مثاليـة او غيـر تامـة (imperfect)، ولهـا عيوبهـا الداخليـة فهـي مشـوهة ومتكسـرة بسـبب قـوة تـؤثر فيهـا كمـا ان الحجـم الصـغير للبلـورات يـؤدي الـى ظهـور انـواع مـن العيـوب حيـث ان طبقاتهـا الخارجيـة تختلـف عـن طبقاتهـا الداخليـة. كـل هـذه العيـوب يجـب ان تؤخـذ بنظـر الاعتبـار عنـد دراسـة البلـورات الحقيقيـة (real crystal). لـذلك يـتم البـدء بدراسـة خواص البلورات المثالية (perfect crystal) ليتم مناقشة طبيعة العيوب بدقة وفهم خواص البلورات الحقيقة.

س/ هل يمكن الحصول على بلورة تامة perfect crystal او حالة بلورية مثالية ؟

تحتفظ البلورة التامة بصفة الدورية الى اللانهاية وبالإبعاد الثلاثة. وعمليا لا يمكن الحصول على حالة بلورية مثالية لان سطح البلورة يشكل عيبا للبلورة، والحركة الاهتزازية للذرات تؤثر على صفة الدورية بفعل تقلبات درجة الحرارة بالإضافة الى الشوائب التي لا يمكن تجنبها والتي تشكل خللا في التبلور وهناك العديد من هذه الحالات سندرسها في فصل العيوب البلورية لاحقا. ومن الامثلة على العيوب البلورية ما يلي:

١-ان سطح البلورة يشكل عيبا من عيوب البلورة وذلك لان الدورية التي تمتلكها سوف تضطرب على السطح فالذرات القريبة من السطح تكون في محيط يختلف عن محيط الذرات الواقعة في عمق البلورة ونتيجة لذلك تسلك سلوكا مختلفا عن العمق.

٢-الحركة الاهتزازية للذرات حول موضع استقرارها قد تؤثر على التنظيم الدوري للبلورة بدرجة كبيرة او صغيرة اعتمادا على درجة الحرارة.

٣-بالرغم من التقنيات المتقدمة لأنماء البلورات لا تزال هناك بعض الشوائب والتشوه في البلورات التامة والتي لا يمكن التخلص منها حتى في احسن عمليات الانماء البلوري وهي تؤثر على دورية الشبيكة.

البلورة المثالية هي مجاميع متماثلة من الذرات ذات حجوم محددة ويمكن وصفها بالدورية (periodicity) المنتظمة الثلاثية الابعاد والتي تكرر نفسها عند فواصل او فسح (spacing) متساوية تماماً، وتكون مترابطة بعضها مع بعض بقوى متبادلة عند مواقع ثابتة في الفضاء، وطاقتها الداخلية كامنة وتخضع لقوانين علم الهندسة للدقائق الساكنة وتكون خالية من العيوب.

هنالك نوعين من البلورات الحقيقية:

الاول يدعى بالبلورة الاحادية (single crystal) حيث تمتد دورية التشكيلة او النموذج البلوري الثلاثي الابعاد خلال البلورة بأكملها.

والثاني يدعى بالبلورة المتعددة التبلور (polycrystalline) حيث لا تمتد دورية النموذج البلوري خلال البلورة بل تنتهي عند حدود داخل البلورة تدعى بحدود الحبيبات (grain boundaries).

شبيكة برافس والمتجهات الانتقالية في البلورة Bravais lattice and crystal translation vectors

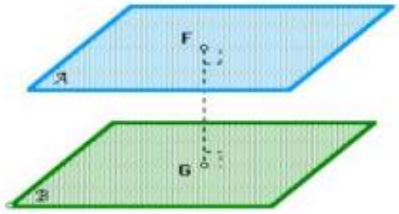
يدرس التركيب البلوري بدلالة بنية أو شبيكة فضائية (space lattice) دورية واحدة مع مجموعة من الذرات ترافق كل نقطة من نقاط الشبيكة الفضائية بصورة تماثلية وتدعى هذه المجموعة من الذرات أساساً (basis)

وهـذا الاسـاس يعيـد نفسـه فـي الفضـاء ليكـون البلـورة. ويمكـن التعبيـر عـن ذلـك بعلاقـة رياضـية بسـيطة هـي

شبيكة فضائية + أساس = تركيب بلوري

الاساس Basis: يعـرف الاسـاس فـي علـم البلـورات علـى أنـه عبـارة عـن أيـون أو ذرة أو جزيئـة أو مجموعـة مـن الـذرات تلتصـق مـع كـل نقطـة مـن نقـاط الشـبيكة لتشـكل هيئـة معينـة. يلعـب الاسـاس دورا مهمـا فـي البنـاء البلـوري حيث يجب أن يكون متماثلا في البنية والترتيب والاتجاه.

الشـبيكة lattice: يمكـن تخيـل البلـورة بأنهـا ناتجـة عـن تكـرار الاسـاس ولكـن بـدلا مـن رسـم وحـدة النمـوذج الكلـي يكـون مناسـبا أكثـر تمثيـل الاسـاس بواسـطة نقطـة شـبيكة ((lattice point)) وهكـذا تمثـل كـل نقطـة شـبيكة موقـع ذرة أو أيـون أو جزيئـة أو مجموعـة مـن الايونـات أو مجموعـة مـن الجزيئـات لتنـتج ترتيـب منـتظم مـن النقـاط. أمـا في الابعاد الثلاثة فيطلق على هذا الترتيب بالشبيكة الفراغية ((Space lattice)).



ثابت الشبيكة: هو اقصر مسافة عمودية بين مستويات الشبيكة.

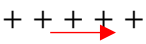
المتجهات الانتقالية للشبيكة:

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

تحـدد مواقـع نقـاط الشـبيكة ذات البعـد الواحـد بمتجهـة انتقـالي بـدائي واحـد يطلـق عليـه (a) ويرسـم بـين أي لقطتين متماثلتين متجاورتين كما هو مبين أدناه:

$$T = na$$

حيث n يمثل عند صحيح موجب أو سلب.

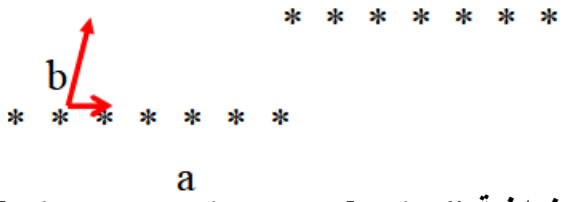


ب. المتجهات الانتقالية في الشبيكة المستوية:" Translation vector In planer lattice "

تعـدد الشـبكية المسـتوية (ذات بعـدين) بمتجهـين انتقـاليين بـدائيين وهمـا (a) و (b) ان المتجهـة الانتقـالي الشـبيكي (T) لاي نقطـة متماثلـة فـي الشـبيكة المسـتوية. يجـب أن يبـدأ مـن نقطـة تقـاطع المتجهـين الانتقـالين التـي تعـد كنقطـة أصل وكما هو مبين أثناء ويمكن كتابته بالصيغة الرياضية التالية:

$$\vec{T}=n_1\vec{a}+n_2\vec{b}$$

حيث ان n_1 وn_2 عددين صحيحين قيمة كل واحد منهما تعتمد على اختيار موقع نقطة الاصل.

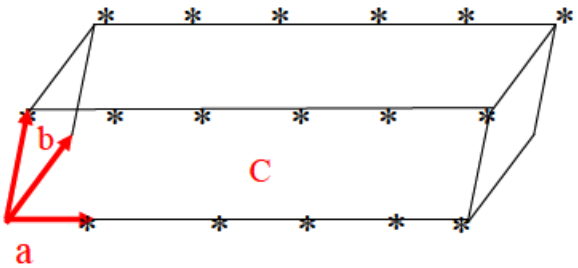


ج. المتجهات الانتقالية في الشبيكة الفراغية:"Translation vector in space lattice"

تحـدد الشـبيكة بدلالـة ثـلاث متجهـات، $\vec{a}$ و$\vec{b}$ و $\vec{c}$ وتسـمى المتجهـات الانتقاليـة (أو الزحفيـة) الأساسـية (fundamental translation vectors) ويسـمى المتجـه الـذي يـربط هـذه المتجهـات الـثلاث بـالمؤثر الانتقـالي للشبيكة أو للبلورة: $\vec{T}$ (translation operator)

$$\vec{T}=n_1\vec{a}+n_2\vec{b}+n_3\vec{c} \qquad (1)$$

حيث ان n_1 وn_2 وn_3 اعداد صحيحة،



وحدة الخلية (Unit cell)

هي وحدة بناء المواد المتبلورة. حيث تتكون البلورة من عدد كبير جداً من وحدات او بلوكات او خلايا متشابهة على شكل متوازي السطوح تكرر نفسها بصورة دورية منتظمة في الابعاد الثلاثية. وهي على نوعين:

أ- خلية وحدة اولية (بدائية)

ب- خلية وحدة غير اولية (غير بدائية)

قد تكون خلية الوحدة الاولية جزءاً من خلية وحدة اعتيادية او تقليدية (conventional) في البلورة وهذا يعني انه ليست كل خلية وحدة للبلورة هي خلية وحدة اولية بل قد يكون حجم خلية الوحدة للبلورة مساوياً او على شكل مضاعفات صحيحة لخلية الوحدة الاولية.

وان المؤثر الانتقالي يربط بين اي موقعين داخل البلورة بحيث تبدو الذرات المحيطة بهذين الموقعين متماثلة ولهذا يسمى هذا المؤثر بالمؤثر الزحفي حيث تكون النتيجة عن زحف اي موقع داخل البلورة بمقدار متجه الوصول الى موقع آخر $\vec{r}$ بحيث تبدو الذرات حوله مثل تلك المحيطة بالموقع $\vec{r}$ اي ان:

$$= \vec{r} + \overrightarrow{T}\vec{r}$$

وتعرف الشبيكة ومحاورها الانتقالية بأنها اولية (primitive) إذا كانت اي نقطتين في الشبيكة تخضع للعلاقة:

$$\vec{r}= \vec{r} + n1\vec{a} + n2\vec{b} + n3\vec{c}$$

اما إذا كانت نقاط شبيكة ما لا تخضع جميعها للعلاقة اعلاه فهي شبيكة غير اولية (non-primitive) والمحاور التي تحددها محاور غير اولية. ومن ناحية اخرى تكون المحاور الاولية للشبيكة اشكالاً لمتوازيات السطوح تسمى خلية وحدة اولية (primitive I unit cell) اما المحاور غير الاولية فتكون خلية وحدة غير اولية. (non-primitive unit cell) يتم حساب حجم خلية الوحدة الاولية 7 بدلالة المحاور الانتقالية الاولية كالاتي:

$$\mathbf{V=|\vec{a}x\vec{b}.\ \vec{c}|}$$

يجب اجراء عملية الضرب الاتجاهي (cross) أولا ثم الضرب النقطي dot ويستخدم هذا القانون لحساب حجم الخلية الأولية وغير الأولية.

وهناك طريقة اخرى لتمييز خلية الوحدة الاولية من غيرها حيث يوجد في كل ركن من الاركان الثمانية لخلية الوحدة الاولية نقطة شبيكة واحدة وان كل ركن مشترك مع ثمانية خلايا وبذلك تشترك كل خلية والخلايا المجاورة بمقدار $\frac{1}{8}$ النقطة. اي ان كثافة النقاط لخلية وحدة اولية هي نقطة واحدة فقط وكل وحدة خلية اولية

تحوي أكثر من نقطة شبيكة واحدة هي خلية وحدة غير اولية وهذا يحصل فقط عند وجود نقاط شبيكة في مواضع أخرى من الخلية فضلا عن النقاط الموجودة في اركانها الثمانية.

التماثل البلوري Crystal Symmetry:

هناك أربع عمليات يمكن أن تتحدد بها عمليات التناظر داخل البلورة هي:

الانتقال	Translation
الدوران	Rotation
الانعكاس	Reflection
الانقلاب	Inversion

يقصد بالتماثل او التناظر (symmetry) هو تكرار او تطابق أجزاء شكل ما حول شكل او مستقيم او نقطة فالدائرة تكون متماثلة (تكرار او تعيد نفسها حاول أي قطر منها) والكرة تكون متماثلة حول أكبر مستوي دائري لها.

اما الشكل الذي لا يملك صفة التكرار ولا يملك تطابق في اجزاءه مثل الحذاء فقد يكون شكل عدم التماثل او عدم التناظر(asymmetry).

العناصر الأساسية للتماثل هي:

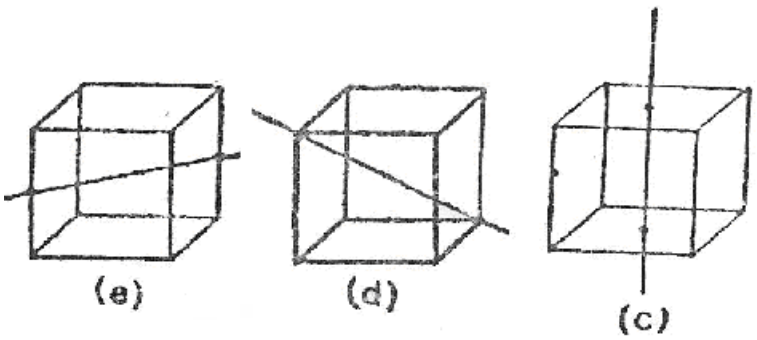
1. محور تماثل دوراني مناسب	Proper rotation axis of symmetry
2. محور تماثل دوراني غير مناسب	Improper rotation axis of symmetry
3. مستوى التماثل	Plane of symmetry
4. مركز التماثل	Center of symmetry

1. محور تماثل دوراني مناسب

هو مستقيم وهمي يمر بمركز البلورة وتدور حوله البلورة °360 بحيث تقدم نفس الصورة دون تغير أكثر من مرة واحدة، أثناء دورة كاملة (شكل 2). وفي الحقيقة فإنه من الممكن أن نجد بلورات تظهر دون تغير، نفس الصورة مرتين، ثلاث، أربع، أو ست مرات، وذلك أثناء دورة كاملة مقدارها (°360). ويعرف الخط بمحور التماثل.

- فإذا ظهر الشكل الأصلي مرة ثانية بعد دوران (180°) درجة يعرف المحور بأن له تماثل ثنائي وهناك إمكانيات أخرى لتكرار الشكل الخارجي للبلورة بعد كل (120°) درجة بالنسبة للمحور ثلاثي التماثل
- أو بعد (90°) درجة للمحور رباعي التماثل
- أو بعد (60°) درجة بالنسبة للمحور سداسي التماثل

وبالإضافة الى ذلك فإنه قد يكون للبلورة مركز تماثل



الشكل (2) محور التماثل

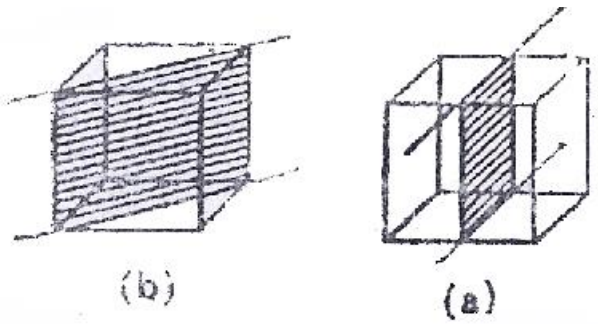
2. محور تماثل دوراني غير مناسب

ان محـور التماثـل الـدوراني غيـر المناسـب يعيـد او يكـرر الجهـة اليسـرى مـن الجسـم مـن جهتـه اليمنـى والعكـس بـالعكس، ان مـؤثر التماثـل الـذي يمكـن ان يكـون مثـل هـذه المجـاميع او الأزواج مـن الاجسـام المتعاكسـة يسـمى بمـؤثر الانعكـاس(reflection operator) إذا كانـت عمليـة التـدوير تتبعهـا عمليـة انعكـاس لكـي يكـرر الجسـم نفسـه. فـان هـاتين العمليتـين تعـدان عمليـة هجينيـة واحـدة وتسـمى بالعمليـة الدورانيـة الانعكاسـية(rotoreflection) ويسمى عنصر التماثل في هذه الحالة محورا دورانيا انعكاسيا (rotoreflection axis).

3. مستوى التماثل

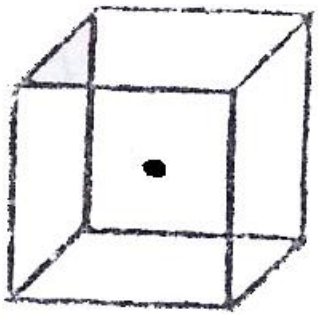
يقـال ان البلـورة لهـا مسـتوي تماثـل عنـدما يمكـن تقسـيمها بواسـطة مسـتوي وهمـي الـى قسـمين بحيـث يكـون أي منهما عبارة عن صورة مضبوطة في المرأة للأخر كما في الشكل (3)

الشكل (3) مستوي التماثل



4. مركز التماثل

هـي تلـك النقطـة التـي إذا رسـم عبرهـا أي خـط فإنـه سـوف يتقـاطع مـع سـطح البلـورة عنـد مسـافات متسـاوية مـن كـل الاتجاهـات. ويمكـن أن يكـون للبلـورة مسـتوى واحـد أو أكثـر، وكـذلك محـور تماثـل واحـد أو أكثـر، ولكـن لا يكـون لهـا أكثـر مـن مركـز تماثـل واحـد. وفـي الواقـع هنـاك بلـورات لـيس بهـا مراكـز تماثـل لأنهـا تنمـو بمعـدل مختلف في اتجاهات متضادة.

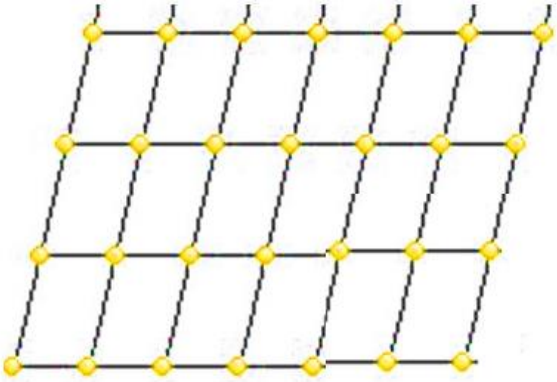


شبيكة البرافيز Bravais lattice

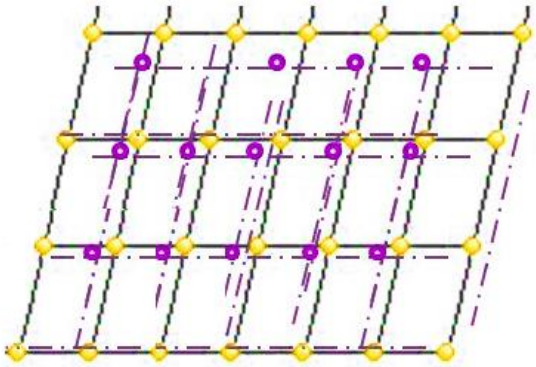
هناك نوعان من الشبائك البرافزBravais وغير البرافز non-Bravais

ونقصد بالشبيكة البرافيز هي مجموعة من النقاط المرتبة بنظام ما وتعيد نفسها بصورة دورية في الفضاء. وهذا يعغني ان تجمع للنقاط حول نقطة ما من نقاط الشبيكة يكون مماثلاً للتجمع حول أي نقطة أخرى من نقاط الشبيكة.

اما في الشبيكة غير البرافيز يكون تجمع للنقاط حول نقطة ما من نقاط الشبيكة غير مماثلاً للتجمع حول أي نقطة أخرى من نقاط الشبيكة.



Bravais lattice



non-Bravais lattice

الشبائك المستوية وتماثلاتها:

هناك خمسة انواع من الشبائك المستوية، فيها خلايا الوحدة كلها أولية ذات مساحة متساوية، كما مبين في الشكل (2)، حيث تكون:

أ. مائلة (obique) بشكل عام. وهي شبيكة عامة حيث لا توجد علاقة خاصة بين أطوال متجهاتها الأساسية وأن الزاوية بين هذه المتجهات تكون غير محددة القيمة.

$$\vec{a} \neq \vec{b} \qquad \emptyset \neq 90°$$

ب. شبيكة مستطيلة أولية (Primitive rectangular lattice): في هذا النوع من الشبائك، توجد قيمة محددة للزاوية بين محاور الشبيكة ولكن من غير تحديد لأطوال تلك المحاور أي أن $\vec{a} \neq \vec{b}$ والزاوية المحصورة بينهما وتساوي ($40°$) ان لهذه الشبيكة درجة تماثل أعلى من درجة تماثل الشبيكة المائلة حيث تمتلك فضلا عن التماثل الدوراني الثنائي.

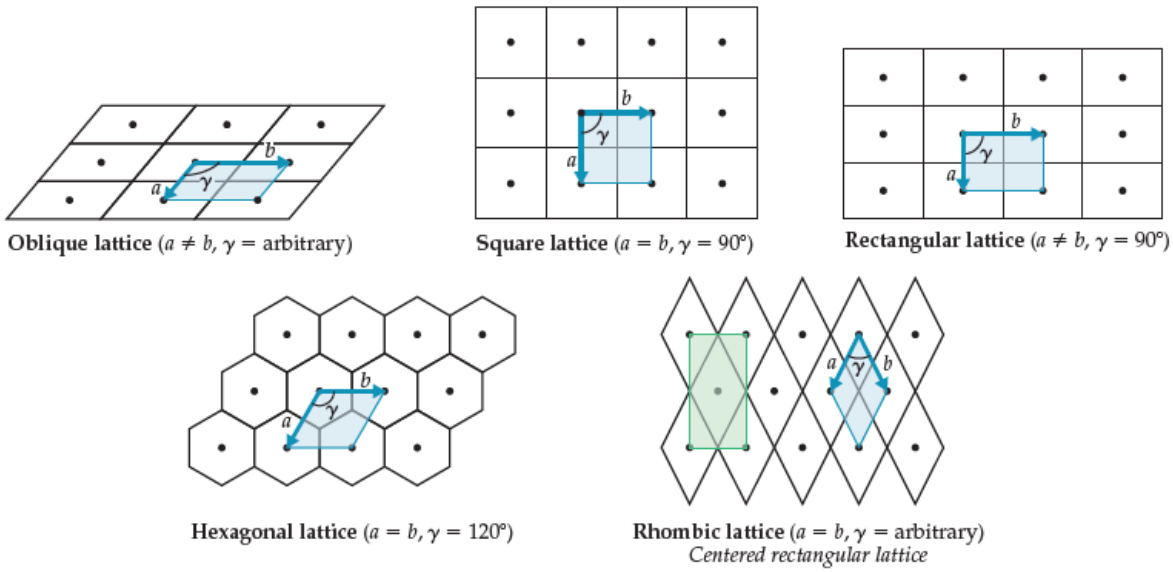
وهـي شـبيكة غيـر أوليـة تمثـل حالـة (Centered rectangular lattice): شبيكـة مسـتطيلة متمركـزة .ت غيـر المتسـاويين فعنـدما تكـون قيمـة $\vec{a}$و$\vec{b}$بـين محاورهـا Øخاصـة لشـبيكة مائلـة ولكـن بقيمـة محـددة للزاويـة Ø مساوية لـ $\left[\cos^{-1}\left(\frac{a}{2b}\right)\right]$

فنحصـل علـى خلايـا أوليـة علـى شـكل متـوازي أضـلاع ولكـن يمكـن فـي نفـس الوقـت تشـكيل خلايـا غيـر أوليـة بهيئة مستطيلات تتمركز في كل منها نقطة شبيكة.

ث. شبيكـة مربعـة Square lattice: تكون المحاور الأولية لشبيكة مربعة متساوية والزاوية بينهما قائمة

ج. ($\vec{a} = \vec{b}$ $\emptyset = 90°$) ويمتلـك هـذا النـوع مـن الشـبائك المسـتوية محـاور تماثـل دورانيـة وتمـاثلا انعكاسـيا بمـرآتين متعامـدتين (4mm) فـي أركـان المربـع ومركـزه وكـذلك محـاور تماثـل دورانيـة ثنائيـة وتمـاثلاً انعكاسيا بمرآتين متعامدتين (2mm) عند منتصفات أضلاع المربع.

ح. شبيكة سداسية Hexagonal lattice يمكن تشكيل شبيكة سداسية من شبيكة مائلة ذات مواصفات خاصة فاذا جعلنا أطوال محاور شبيكة مائلة متساوية ($\vec{a} = \vec{b}$) والزاوية Øبينهما ($120°$) فسوف نحصل على شبيكة سداسية. ويمكن القول كذلك بان الشبيكة السداسية هي حالة خاصة من شبيكة مستطيلة متمركزة عندما تكون خليتها الأولية معينية الشكل (rhombus) بمواصفات $\vec{a} = \vec{b}$ و$\emptyset \neq 60° \; or \; 120°$



الشبائك الفضائية (D3) والانظمة البلورية:

1. شبيكة أولية بدائية (Primitive Lattice): يرمز لها بالرمز (P) وتكون على شكل متوازي مستطيلات فعلى الرغم من وجود نقطة شبكية (ذرة) عند الاركان النمائية لوحدة الخلية البدائية، الا أن كل نقطة ركنية من هذه النقاط مشتركة بين ثماني خلايا بدائية متجاورة فان $\frac{1}{8}$ يتبع الخلية البدائية الواحدة وبالتالي تسهم النقاط الواقعة عند الاركان الثمانية بما يساوي نقطة شبيكية واحدة أذن كل خلية البدائية تحتوي على نقطة شبيكة واحدة أو ذرة (نقطة$1 = 8*\frac{1}{8}$)
2. شبيكة ممركزة الجسم Body - centered cell: يرمز لها بالرمز (I) ويحتوي على نقطة شبكية واحدة متمركزة بالإضافة الى وجود نقطة شبيكية عند كل نقطة ركنية بين ثماني شبائك بدائية متجاورة أذن كل شبيكة ممركزة الجسم تحتوي على نقطتين شبكيتين (نقطة$2 = 8*\frac{1}{8} + 1$)
3. شبائك ممركزة الاوجه" Face cent real cell": ويرمز لها بالرمز (F) ويحتوي هذا النوع من الشبائك بالإضافة الى وجود نقطة شبكية عند مركز كل وجه من الاوجه المحيطة بجسم متوازي السطوح، وحيث أن كل وجه يكون مشتركا بين شبيكتين متلاصقتين فعليه فأن ($\frac{1}{2}$)، وبالتالي تسهم النقاط الواقعة عند مركز كل وجه بما يساوي ثلاثة نقاط شبيكية

(نقطة$4 = 8*\frac{1}{8} + 6 * \frac{1}{2}$) وكما مبين في الشكل أدناه تحتوي كل خلية متمركزة الاوجه على أربعة نقاط شبيكية.

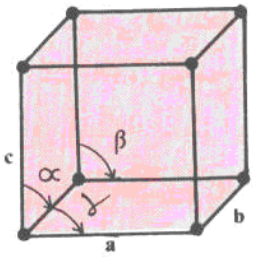
4. خلية متمركزة الجانب والقاعدة Baser & Centered Lattice: يرمز لها بالرمز (C) ويحوي هذا النوع من الشبائك بالإضافة الى وجود نقطة شبكية عند كل نقطة ركنية مشتركة بين ثماني شبائك بدائية متجاورة، على عند كل نقطة شبيكة عند مركز وجهين متقابلين وبما انه كل وجه مشتركا بين شبيكتين متلاصقتين، فعليه فان (2/1) النقطة يتبع الشبيكة الواحدة وبالتالي تسهم النقطتين الواقعتين عند مركز الوجهين المتقابلين بما يساوي نقطة شبكية واحدة (1=2*$\frac{1}{2}$) اذن كل خلية متمركزة الوجهين المتقابلين تحوي على نقطتين شبكية. (نقطة $2 = 8*\frac{1}{8} + 2 * \frac{1}{2}$).
5. شبائك معينية الاوجه Lattice Rhombohedral

وهي حالة خاصة من الشبائك الاولية ويرمز لها بالرمز R ويكون شكل الخلية معينية الوجوه لكن المحاور الثلاثة غير متعامدة

$(\alpha = \beta = \gamma) \neq 90°$ و $\vec{a} = \vec{b} = \vec{c}$

توزع الأنظمة الخمسة من الشبائك الأساسية على سبعة أنظمة بلورية تتفرع منها 14 شبيكة برافيزية وفيما يلي الأنظمة البلورية والشبائك البرافيزية الـ 14.

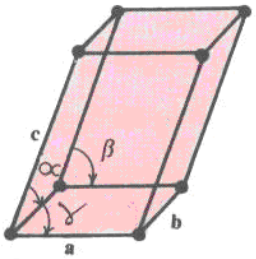
النظام	طـــــــول الوحدة	الزوايا
المكعب cubic	a=b=c	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$
رباعي الأوجه Tetragonal	a=b≠c	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$
سداسي الأوجه Hexagonal	a=b≠c	$\alpha = \beta = 90°, \gamma = 120°$
ثلاثـــــــــي الأوجـــــــــه Rhombohedral	a=b=c	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90°$
المعيني Orthorhombic	A≠b≠c	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$
احادي الميل Monoclinic	A≠b≠c	$\alpha = \gamma = 90°, \beta \neq 90°$
ثلاثي الميل Triclinic	A≠b≠c	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$



CUBIC

$a = b = c$

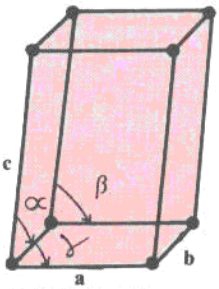
$\propto = \beta = \gamma = 90^{\circ}$



TRICLINIC

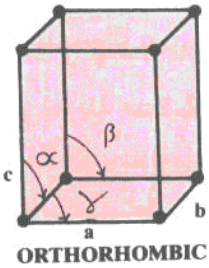
$a \neq b \neq c$

$\propto \neq \beta \neq \gamma \neq 90^{\circ}$



MONOCLINIC

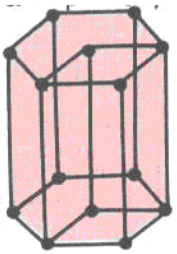
$a \neq b \neq c$



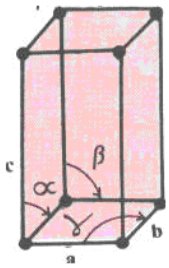
ORTHORHOMBIC

$a \neq b \neq c$

$\propto = \beta = \gamma = 90^{\circ}$



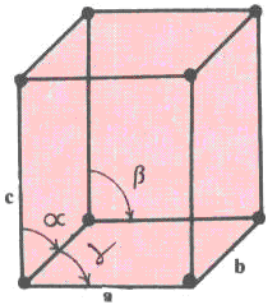
OR



HEXAGONAL

$a = b \neq c$

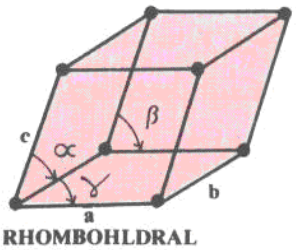
$\propto = \beta = 90^{\circ}; \gamma = 120^{\circ}$



TETRAGONAL

$a = b \neq c$

$\propto = \beta = \gamma = 90^{\circ}$



RHOMBOHLDRAL

$a = b = c$

$\propto = \beta = \gamma \neq 90^{\circ}$

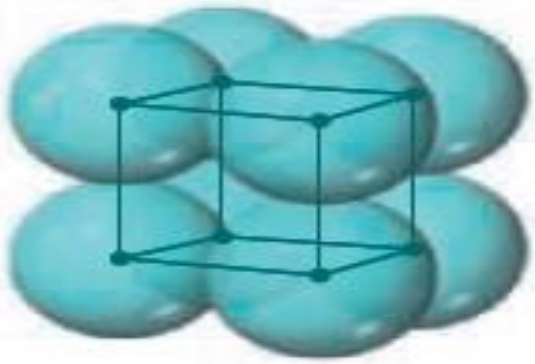
مميزات الشبائك المكعبة:

يعتبر نظام المكعب من ابسط الأنظمة البلورية وأكثرها تماثلا ولهذا النظام ثلاثة أنواع:

1- نظام المكعب البسيط (Simple-cubic) ويرمز له عادة بالرمز (SC) تحوي وحدة الخلية فيه على ذرة واحدة فقط حيث تتشارك كل ذرة موجودة في أحد زوايا المكعب مع ثمان خلايا متجاورة أو ملاصقة وهذا يعني ثمان ذرات في الزوايا الثمان لوحدة الخلية المكعبة تكافئ ذرة واحدة فقط كالآتي:

$(8*\frac{1}{8}=1)$

Primitive cubic lattice



(a) Primitive cubic metal

س/ اثبت ان حجم خلية الوحدةالاولية لشبيكة SC تساوي L^3؟

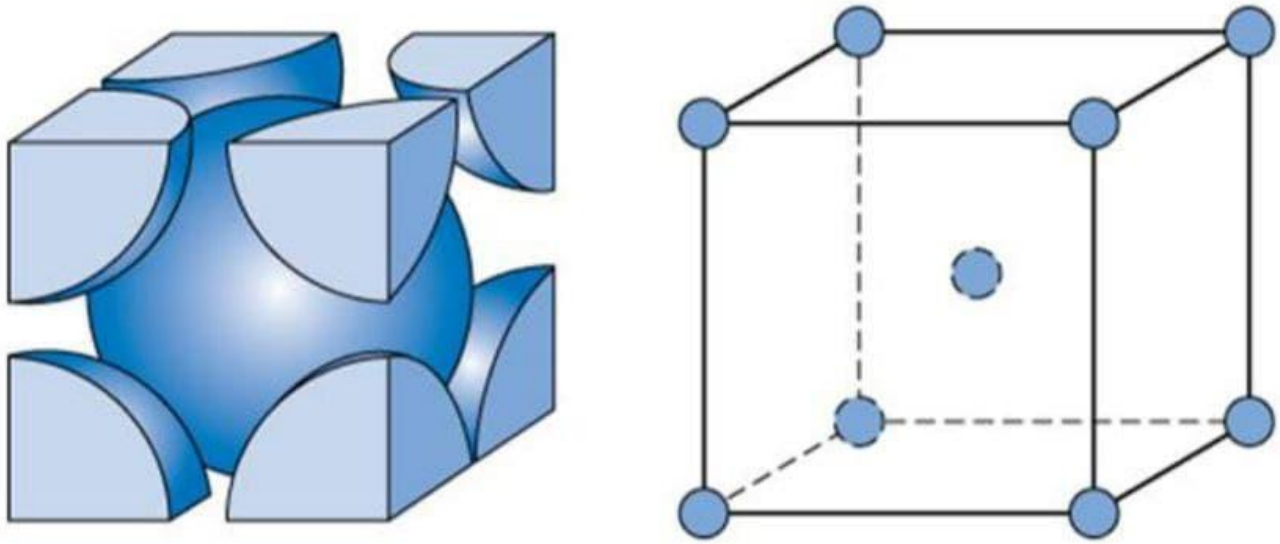
بما ان محاورشبيكة SC تعطى بالمعادلة الاتية

$\overrightarrow{a_1}=L\hat{x}$ $\overrightarrow{a_2}=L\hat{y}$ $\overrightarrow{a_3}=L\hat{z}$

$V=|\overrightarrow{a_1}\cdot\overrightarrow{a_2}\times\overrightarrow{a_3}|$

$=|L\hat{x}\cdot L\hat{y}\times L\hat{z}|=|L\hat{z}.L^2\hat{z}|=|L^3|=L^3$

المكعب المتمركز الجسم (Body-centered cubic): يرمز له بالرمز (bcc) الذي يحوي ذرتين الأولى في المركز والثانية في الزوايا، كما مبين في الشكل (4).



الشكل (4)

ويمكن حساب المتجهات الأولية ومن ثم خلية الوحدة الأولية برسم ثلاث محاولا من نقطة الأصل ويتم رسم ثلاث محاور من نقطة الأصل (مركز المكعب) لتصل إلى ثلاث نقاط واقعة عند أركان المكعب كما في الشكل (5) ثم إكمال الرسم لنحصل على خلية أولية بشكل معيني الأوجه طول ضلعه ($3^{1/2}$L/2) محاوره (a_1, a_2, a_3) وبين محاوره زوايا مقدارها (109°) .

$\overrightarrow{\boldsymbol{a_1}}$=L/2($\hat{x}$+$\hat{y}$-$\hat{z}$)

$\overrightarrow{\boldsymbol{a_2}}$=L/2($\hat{y}$+ $\hat{z}$-$\hat{x}$)

$\overrightarrow{\boldsymbol{a_3}}$=L/2($\hat{z}$+ $\hat{x}$-$\hat{y}$)

الشكل (5) خلية وحدة أولية في شبيكة متمركزة الجسم

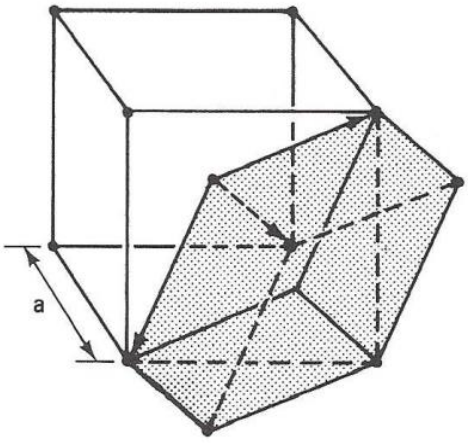
ويمكن حساب المتجهات الاولية ومن ثم خلية الوحدة الاولية لشبيكة متمركزة الجسم bcc وكما ياتي

نقوم برسم ثلاثة متجهات تصدر او تبدأ من نقطة شبيكة في مركز المكعب وتعتبر هذه النقطة هي نقطة الاصل بحيث تنتهي هذه المتجهات الثلاثة عند ثلاث نقاط من تقع عند اركان المكعب وكما موضح في الشكل الاتي ثم نقوم بإكمال رسم الشكل المعيني الاوجه لنحصل على خلية وحدة اولية ذات متجهات اولية طول ضلعالشكل المعيني ($3^{1/2}$L/2) ومحاوره (a_1, a_2, a_3) وبين محاوره زوايا مقدارها (109°) .

$\overrightarrow{\boldsymbol{a_1}}$=L/2($\hat{x}$+$\hat{y}$-$\hat{z}$)

$\overrightarrow{\boldsymbol{a_2}}$=L/2($\hat{y}$+ $\hat{z}$-$\hat{x}$)

$\overrightarrow{\boldsymbol{a_3}}$=L/2($\hat{z}$+ $\hat{x}$-$\hat{y}$)



س/ برهن ان حجم خلية الوحدةالاولية لشبيكة bcc تساوي نصف حجم الخلية الاعتيادية لتلك الشبيكة ؟

باستخدام العلاقات الاتية

$\overrightarrow{\boldsymbol{a_1}}$=L/2($\hat{x}$+$\hat{y}$-$\hat{z}$)

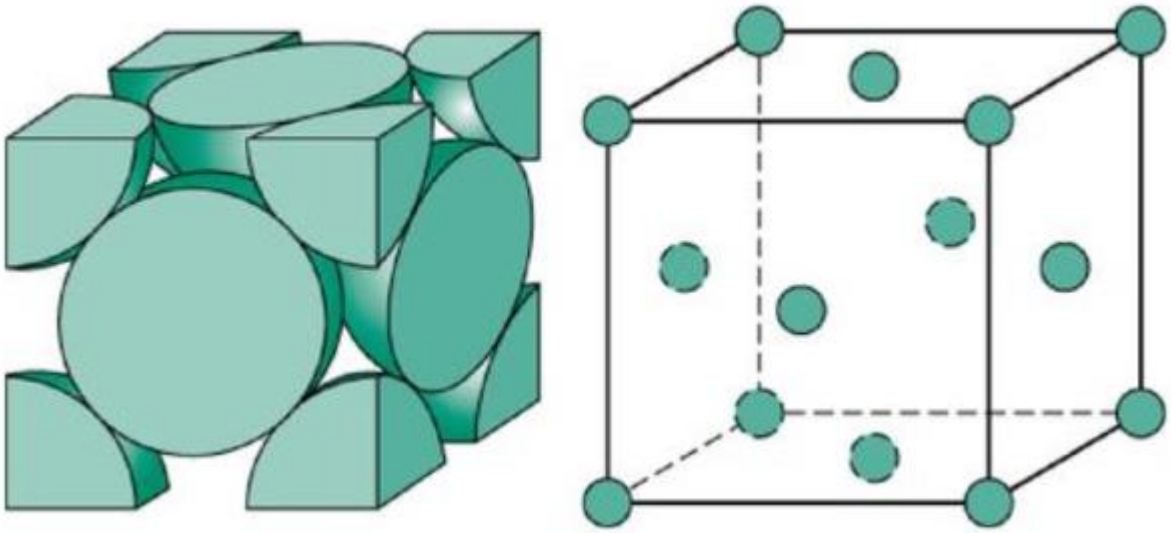
$\overrightarrow{\boldsymbol{a_2}}$=L/2($\hat{y}$+ $\hat{z}$-$\hat{x}$)

$\overrightarrow{\boldsymbol{a_3}}$=L/2($\hat{z}$+ $\hat{x}$-$\hat{y}$)

$$V= |\overrightarrow{a_1}.\overrightarrow{a_2}\times\overrightarrow{a_3}| = (\frac{L}{2})^3 \begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{vmatrix} = \frac{L^3}{8}|1*2+1*2-1*0| = \frac{L^3}{8}|4| = \frac{L^3}{2}$$

نظـام المكعـب المتمركـز الأوجـه (Face centered cubic): يرمـز لـه بـالرمز (fcc)، كمـا الشـكل (6) الـذي يحـوي أربعـة ذرات واحـدة فـي الزوايـا وذرة فـي مركـز كـل وجـه مـن أوجـه المكعـب السـتة حيـث تتشارك كل ذرة من هذه الذرات بمقدار النصف ، كالآتي :

6*1/2+1=4



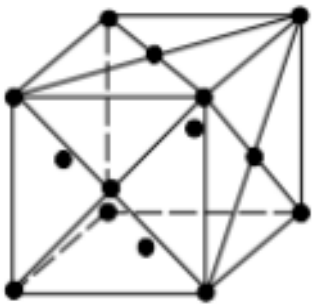
الشكل (6)

وللحصـول علـى المتجهـات الأوليـة يـتم رسـم ثـلاث محـاور مـن نقطـة الأصـل (نقطـة علـى أحـد أركـان المكعـب) لتصـل إلـى ثـلاث نقـاط واقعـة عنـد مراكـز الأوجـه كمـا فـي الشـكل (7)، ثـم إكمـال الرسـم لنحصـل علـى خليـة أوليـة بشـكل معينـي الأوجـه بطـول ضـلع (2) محـاوره (a_1, a_2, a_3) وبـين محـاوره زوايـا مقـدارها (60°).

$\overrightarrow{a_1}$=L/2($\hat{x}$+$\hat{y}$)

$\overrightarrow{a_2}$=L/2($\hat{y}$+ $\hat{z}$)

$\overrightarrow{a_3}$=L/2($\hat{z}$+ $\hat{x}$)



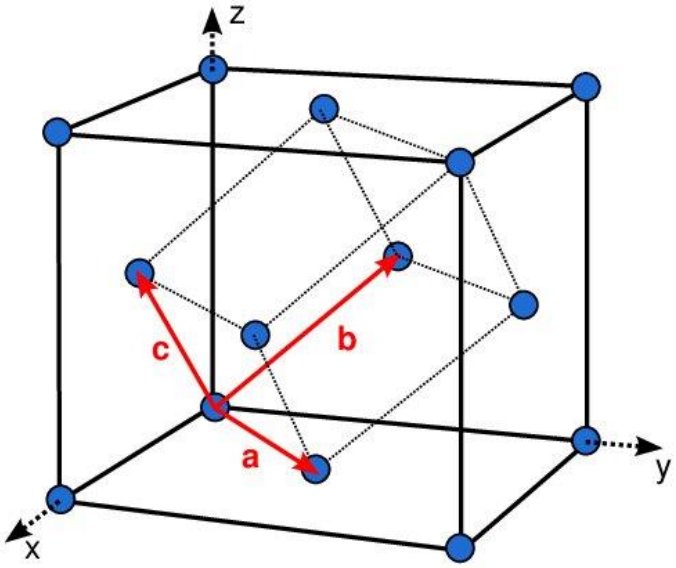
الشـكل (7) خليـة وحـدة أوليـة فـي شـبيكة متمركـزة الأوجـه

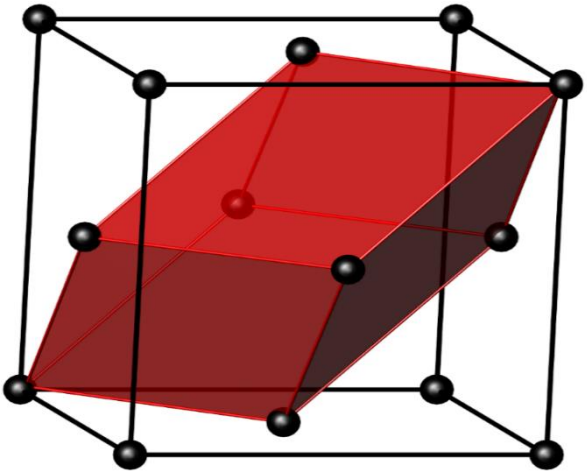
وللحصول على المتجهات الأولية يتم رسم ثلاث محاور من نقطة الأصل (نقطة على أحد أركان المكعب) لتصل إلى ثلاث نقاط واقعة عند مراكز الأوجه كما في الشكل الاتي، ثم إكمال الرسم لنحصل على خلية أولية بشكل معيني الأوجه بطول ضلع (2) محاوره (a_1, a_2, a_3) وبين محاوره زوايا مقدارها (60°).

$\overrightarrow{a_1}$=L/2($\hat{x}$+$\hat{y}$)

$\overrightarrow{a_2}$=L/2($\hat{y}$+ $\hat{z}$)

$\overrightarrow{a_3}$=L/2($\hat{z}$+ $\hat{x}$)





س/ برهن ان حجم خلية الوحدةالاولية لشبيكة fcc تساوي ربع حجم الخلية الاعتيادية لتلك الشبيكة ؟

باستخدام العلاقات الاتية

$\overrightarrow{a_1}$=L/2($\hat{x}$+$\hat{y}$)

$\overrightarrow{a_2}$=L/2($\hat{y}$+ $\hat{z}$)

$\overrightarrow{a_3}$=L/2($\hat{z}$+ $\hat{x}$)

$$V= |\overrightarrow{a_1}.\overrightarrow{a_2}\times\overrightarrow{a_3}| = (\frac{L}{2})^3 \begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \frac{L^3}{8}|1*1+1*1-0*1| = \frac{L^3}{8}|2| = \frac{L^3}{4}$$

خلية ويكنر – سيتز Wigner Seitz Primitive Cell

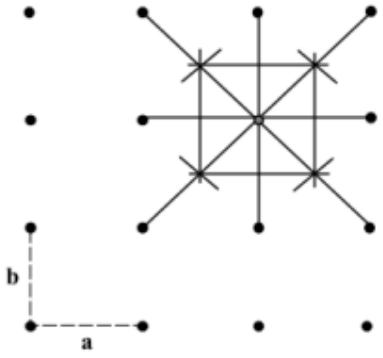
هناك طريقة أخرى لاختيار الخلية البدائية وتعرّف بأسم مكتشف هذه الطريقة وهي خلية ويكنر – سيتز. حيث انه اقترح طريقة بسيطة يمكن بواسطتها اختيار وحدة الخلية، وذلك باجراء الخطوات التالية:

١–نرسم نقاط الشبيكة البرافيزية.

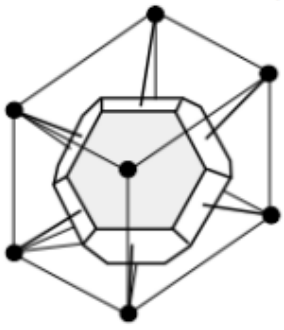
٢–نختار نقطة معينة من نقاط الشبيكة، نرسم خطوطا من هذه النقطة لتوصيلها بالنقاط المجاورة لها.

٣–نرسم خطوط عمودية و تمر بمنصفات الخطوط المرسومة في الخطوة السابقة.

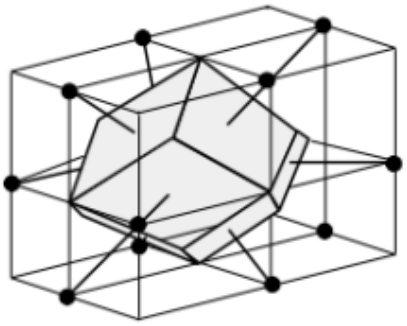
٤–فنحصل على خلية ويكنر–سيتز، وهي اصغر مساحة ناتجة (في حالة البعدين) او اصغر حجم ناتج (في الابعاد الثلاثة) من التقاطعات المستحصلة اعلاه.



خلية ويكنر – سيتز في بعدين، a=b



خلية ويكنر–سيتز في الابعاد الثلاثة



مكعب متمركز الجسم BCC

مكعب متمركز الاوجه FCC

نسبة الملء fraction Filling او نسبة الرص :Fraction Packing

هـي النسـبة بـين حجـم الـذرات الموجـودة فـي خليـة الـى حجـم تلـك الخليـة وتختلـف الشـبائك فـي نسـبة مـلء كـل منهـا. ولغرض

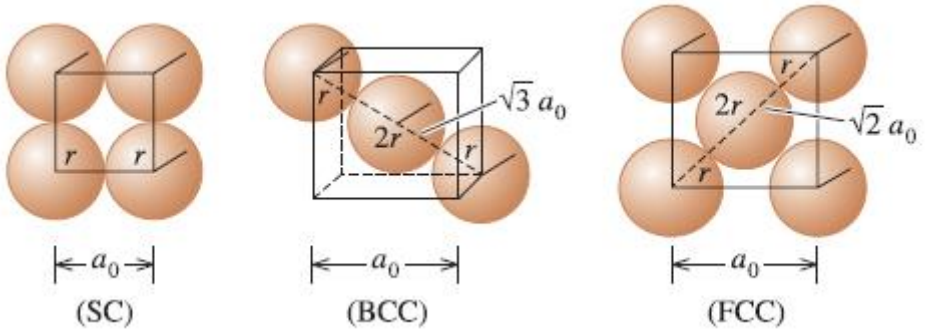
حسـاب نسـبة المـلء نفتـرض ان الـذرات المتجـاورة جـدا فـي حالـة تلامـس، اي ان أقصـر مسـافة بـين نقطتـي شـبيكة تمثل

قطر الذرة) مسافة أقرب الجوار = r2) وتحسب نسبة الرص كالآتي

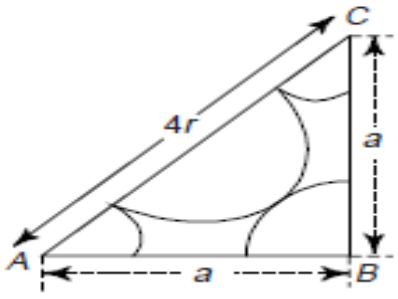
$$\text{نسبة الرص (الملء)} = \frac{\text{حجم الذرة الواحدة} * \text{عدد الذرات في خلية الوحدة}}{\text{حجم خلية الوحدة}} * 100\%$$

$$P.F = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3 * N}{V} * 100\% = \frac{4}{3}\pi r^3 * \frac{N}{V} * 100\% \quad \text{..... (1)}$$

r : نصف قطر الذرة , 2r : قطر الذرة ويمثل مسافة اقرب الجوار



فـي حالـة المكعـب البسـيط كمـا فـي الشـكل (8) عـدد الـذرات الكلـي فـي وحـدة الخليـة هـي واحـدة (N=1) كمـا سـتكون أقصـر مسـافة تفصـل بـين ذرتـين متجـاورتين (الجـوار الاقصـر أو الأقـرب) هـي طـول ضـلع المكعـب نفسـه فيكون(a=2r)بذلك تكون نسبة الملء (0.52).



$$a = 2r$$

$\therefore$ $$r = a/2$$

Area $$a^2 = 4r^2$$

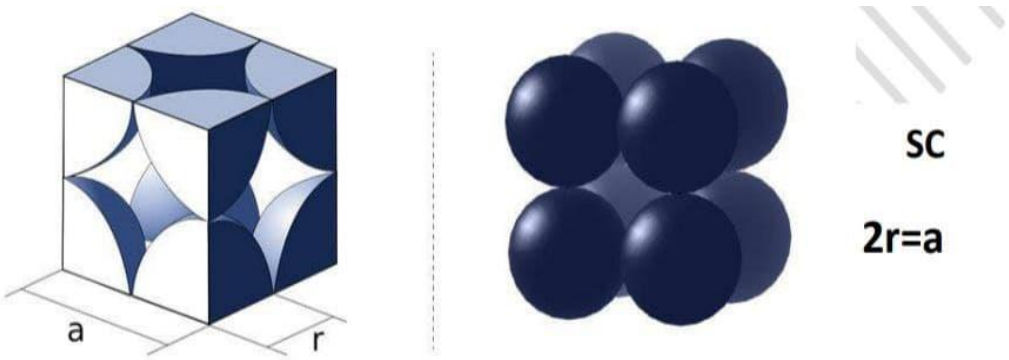
$$\text{APF} = \frac{\text{No. of atoms} \times \text{volume of one atom}}{\text{volume of unit cell}} = \frac{v}{V} \qquad (2)$$

In a simple cubic cell, no. of atoms in all corners

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

Radius of an atom = r and volume of cubic cell = $a^3 = (2r)^3$ $(\because\ a = 2r)$

$\therefore$ $$\text{APF} = \frac{1 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{(2r)^3} = \frac{\pi}{6}\ (= 0.52) = 52\%$$



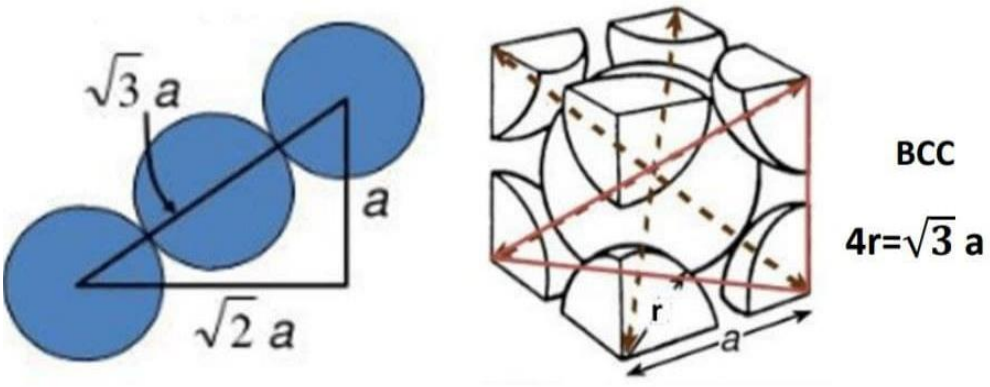
الشكل (8) مكعب بسيط

في حالة المكعب المتمركز الجسم (N 2) وبالاستفادة من الشكل (9) نلاحظ أن الذرات المتماسة هي الذرة في المركز مع الذرتين الموجودتين على نفس الخط مع الذرة التي في المركز والذي يسمى محور المكعب وتعتبر هذه المسافة هي الاقصر بين الذرات في هذا النظام من المكعب.

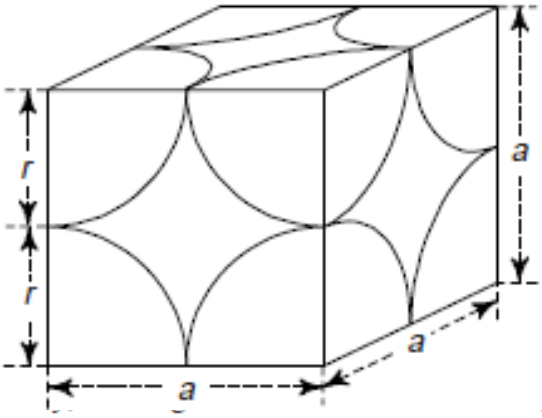
$$4R=a\sqrt{3}$$

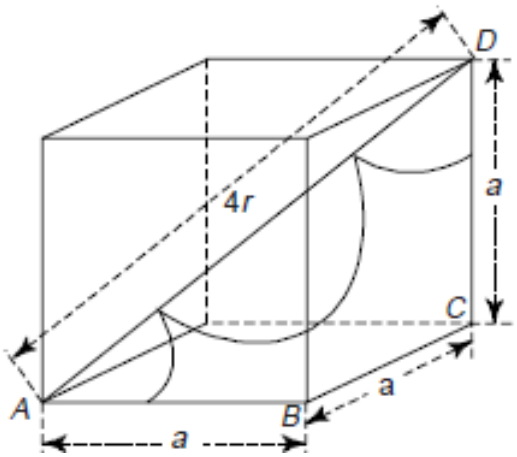
$$V_c=a^3=\left[\frac{4R}{\sqrt{3}}\right]^3$$

وبتطبيق معادلة رقم 1 تكون نسبة الملء 0.68



الشكل (9) مكعب متمركز الجسم





$$AC^2 = AB^2 + BC^2 = a^2 + a^2 = 2a^2$$

$$AD^2 = AC^2 + CD^2 = 2a^2 + a^2 = 3a^2$$

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

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

$\therefore \quad r = \frac{a\sqrt{3}}{4}$

area $$a^2 = \frac{16r^2}{3}$$

the share of each cube = $\frac{1}{8}$th of each corner atom.

$\therefore$ Total no. of atoms = $\frac{1}{8} \times 8 = 1$ atom

BCC crystal has one atom at the centre = 1 atom

$\therefore$ Total atoms in BCC unit cell = 1 + 1 = 2 atoms

(Body diagonal)^2 = Sum of the squares of all the three sides

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

or $$a = \sqrt{\frac{16r^2}{3}} = \frac{4r}{\sqrt{3}}$$

$$\text{Volume} = 2 \times \frac{4}{3} \pi r^3$$

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

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

$$\text{Volume of unit cell} = a^3 = \left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^3$$

$\therefore$ $$\text{APF} = \frac{(\text{Number of atoms}) \times (\text{Volume of one atom})}{\text{Volume of unit cell}}$$

$$= \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{\left(4r/\sqrt{3}\right)^3} = \frac{\sqrt{3}}{8}\pi = 0.68$$

أما في حالة المكعب متمركز الوجه سيكون هناك أربع ذرات (N 4) وان أقرب جوار للذرات المتماسة اي أقصر مسافة بين الذرات المتجاورة أو المتماسة والتي تقع في هذا النوع من النظام على محور واحد وهو محور وجه المكعب كما في الشكل(10) ، وبتطبيق معادلة نسبة الملء بنفس الطريقة السابقة، سيكون نسبة الملء هي (0. 74) وهي أعلى نسبة لتراص الذرات أو الجزيئات في وحدة الخلية المكعبة ويسمى التركيب البلوري من هذا النوع بالمكعب المتماسك أو المقفل الملء، الا ان بعض المعادن لا تتبلور بمثل هذا التركيب بل بتركيب آخر يسمى بالتركيب السداسي المتماسك والذي يمتلك نسبة الملء ذاتها (0. 74) .

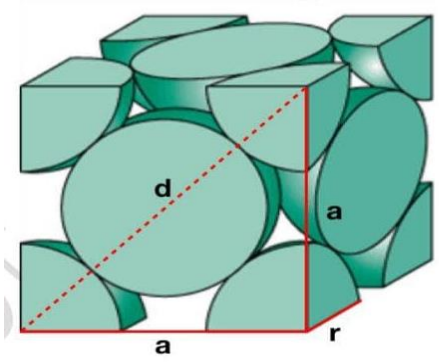
$$AC^2 = AB^2 + BC^2$$

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

$$\therefore \quad r^2 = \frac{2a^2}{16}$$

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

and area $$= a^2 = 8r^2$$



FCC

$4r=\sqrt{2}\,a$

No. of atoms in all six faces $= \frac{1}{2} \times 6 = 3$

No. of atoms in all corners $= \frac{1}{8} \times 8 = 1$

$\therefore$ Total atoms in FCC unit cell = 1 + 3 = 4 atoms

From the geometry of FCC structure

$$a^2 + a^2 = 4r^2$$

$$\therefore \quad a = \sqrt{8}\,r = 2\sqrt{2}\,r$$

$$\text{Volume of 4 atoms} = 4 \times \frac{4}{3}\pi r^3$$

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

$$= \frac{16}{3}\pi a^3 \times \frac{2\sqrt{2}}{64} = \frac{\pi}{6}\sqrt{2}\,a^3$$

$$\therefore \quad \text{APF} = \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{\left(2\sqrt{2}\,r\right)^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0.74$$

الشكل (10) مكعب متمركز الأوجه

التركيب السداسي.

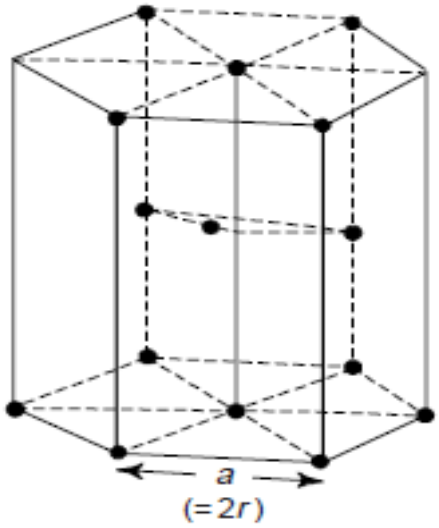
Each corner atom is shared by six other unit lattices or each corner has 1/6 atom.

Number of atoms in upper hexagonal plane

$$= \frac{1}{6} \times 6 = 1$$

Number of atoms in lower hexagonal plane

$$= \frac{1}{6} \times 6 = 1$$



We note that each central atom is shared by two unit cells which means upper and lower planes contain $\frac{1}{2}$ atom each.

$\therefore$ Total number of central atoms in both, upper and lower planes $= \frac{1}{2} \times 2 = 1$

and there are three intersititial atoms.

$\therefore$ Total number of atoms in HCP crystal = 1 + 1 + 1 + 3 = 6

$$\text{APF} = \frac{2(4/3)\pi r^3}{a(a \sin 60°)c}$$

where r is the atomic radius. Using $c = 1.633a$ and $a = 2r$, one obtains,

$$\text{APF} = \frac{\pi\sqrt{2}}{6} = 0.74$$

واجب بيتي : أوجد في التركيب السداسي للماس النسبة (c/a=1.633).

الجدول يمثل بعض مميزات شبائك نظام المكعب وهي FCC , BCC , SC حيث (a=L)

fcc	bcc	sc	
L^3	L^3	L^3	حجم الخلية الاعتيادية
4	2	1	عدد نقاط الشبيكة لكل خلية اعتيادية
$\frac{1}{4}L^3$	$\frac{1}{2}L^3$	L^3	حجم الخلية الوحدة الاولية
$\frac{4}{L^3}$	$\frac{2}{L^3}$	$\frac{1}{L^3}$	عدد نقاط الشبيكة لكل وحدة حجم $\left(\frac{N}{V}\right)$
12	8	6	عدد الجوار الأول (العدد التناسقي)
$\frac{1}{\sqrt{2}}L$	$\frac{\sqrt{3}}{2}L$	L	مسافة الجوار الاول
6	6	12	عدد الجوار الثاني
L	L	$\sqrt{2}L$	مسافة الجوار الثاني
0.74	0.68	0.52	نسبة الملء
0.26	0.32	0.48	نسبة الجزء الفارغ

حساب الكثافة النظرية

يمكن حساب كثافة البلورة النظرية (ρ) من خلال استخدام المعادلة (2).

$$\rho = \frac{nA}{V_c \mathrm{N}_A}$$

حيث تمثل n: عدد الذرات في وحدة الخلية.

A: الوزن الذري.

V_c: حجم وحدة الخلية.

N_A أفوكادو ($6.023*10^{23}$) ذرة / المول.

مثال2-1: احسب الكثافة النظرية لبلورة الكروم من نوع (bcc) لها نصف قطر ذرة (0.125) نانو متر ووزن ذري 52.00gm / mole

يمكن إيجاد كثافة البلورة من خلال تطبيق المعادلة (2).

$$P\ c_r = n\ A\ c_r / V_c\ N_A$$

حيث أن عدد الذرات في وحدة الخلية من نوع متمركزة الأوجه هي أربعة

n = 2 atoms/ unit cell

$a = 4R / (3)^{1/3} = 0.2887$

وبذلك ستكون كثافة البلورة $7.18g/cm^3$

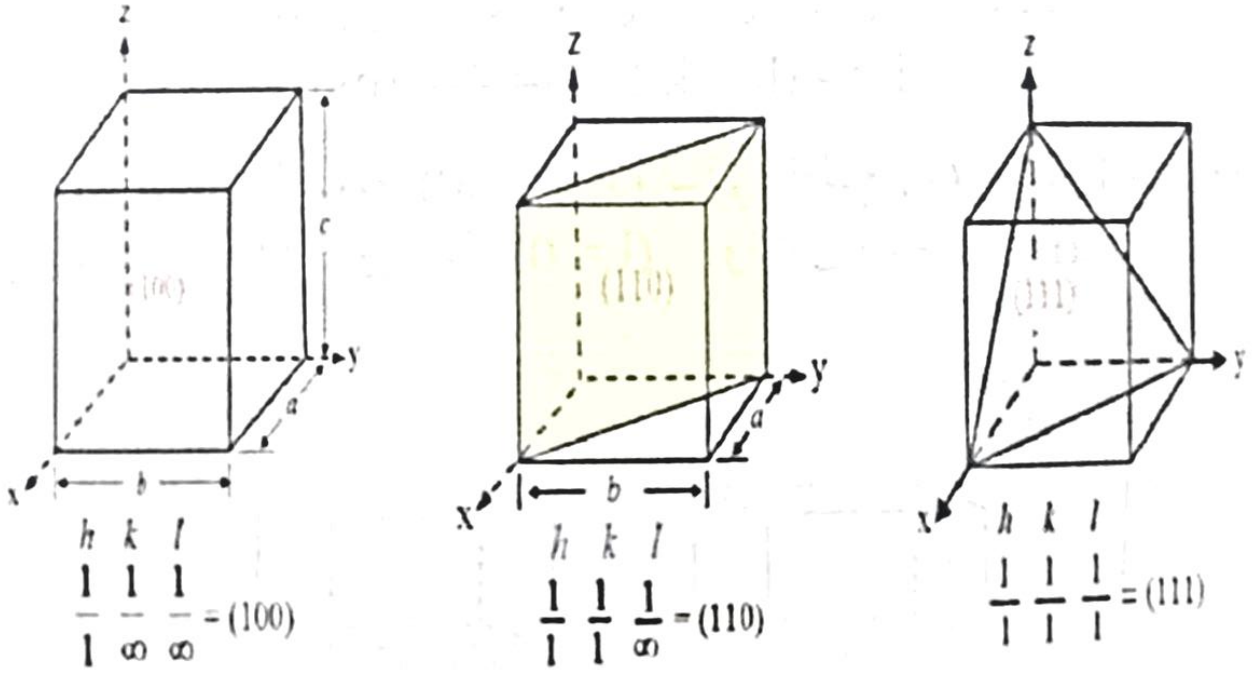
معاملات ميلر

يمكن إيجاد معاملات ميلر لأي سطح داخل البلورة بتحديد تقاطع السطح مع المحاور البلورية ثم قلبها فاذا كانت المقلوبات:

1- أعداد صحيحة توضع بين قوسين وهي تمثل معاملات ميلر، كمثال على ذلك السطح الذي يقطع محور (x) عند (a=1) ومحور (y) عند (b=1) وموازي لمحور (z) اي انه يتقاطع مع في اللانهاية كما في الجدول أدناه بذلك سيكون السطح هو (110) والذي يمكن تمثيله أيضا كما في الشكل (1-39).

ويمكن تمثيل السطوح الأخرى الموجودة في الشكل (11) بنفس الأسلوب.

X (a)	Y (v)	Z (c)
1	1	∞
1/1	1/1	=0∞1/
1	1	0
(110)		



الشكل (11) بعض الأوجه البلورية

إذا ظهرت اعداد كسرية نقوم بأخذ أصغر عامل مشترك بينها لتكون الاعداد جميعها صحيحة.

ويمكن إعطاء مثال على ذلك السطح الذي يقطع محور(x) عند (a=1) ومحور (٢) عند (b=3/4) ومحور (z) عند (c=1/4) ، كما في الجدول أدناه سيكون في أحد المقلوبات عدد كسري وهذا يتطلب اخذ قاسم مشترك أصغر لجعل كل المعاملات اعداد صحيحة فيكون السطح بمعاملات ميلر (3 4 12) .

X (a)	Y (v)	Z (c)
1	¾	¼
1	4/3	4
3	4	12
(3 4 12)		

بعض الحالات تكون معاملات ميلر سالبة وهذا يعني أن تقاطع السطح أصبح في الاحداثيات البلورية السالبة، حيث يتم تحديد أو اختيار نقطة الأصل بطريقة تظهر القيمة السالبة للمعامل السالب كما في السطحين

(1-11) (11-1) في الشكل (12) الذي يظهر فيه أيضا بعض أوجه المكعب وهي الاسطح الثلاث (100) (010) (001) بالإضافة الى القم السالبة (-100) (0-10) (00-1) التي تمثل الأوجه الثلاث الأخرى للمكعب، فتمثل الأوجه الستة للمكعب بالشكل ((100)) أو بالشكل{100}.

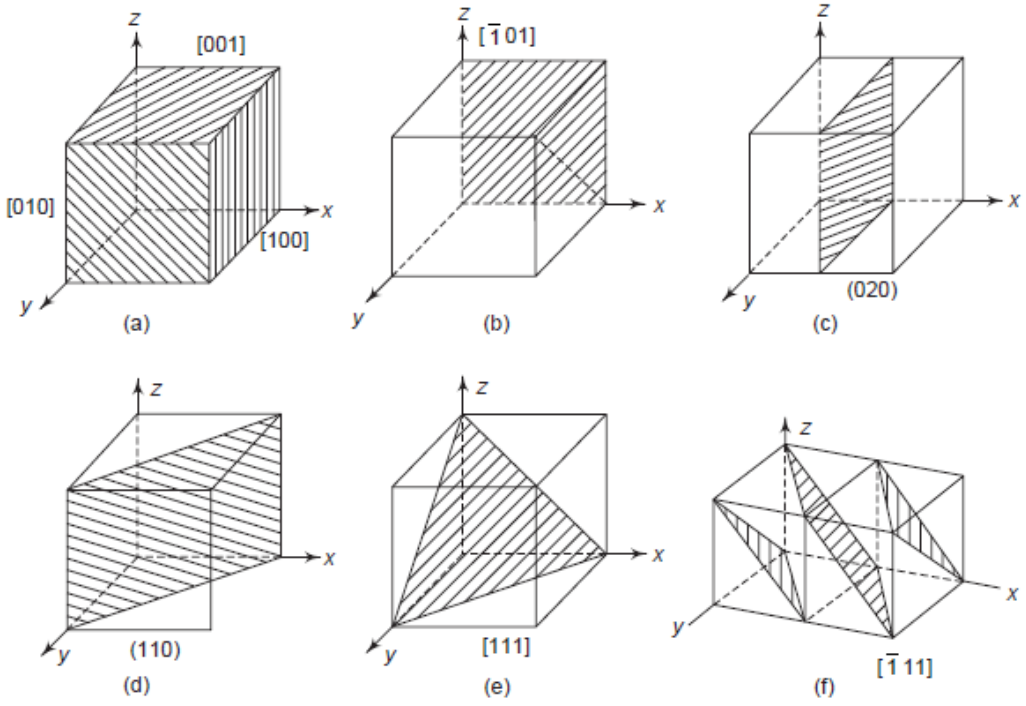
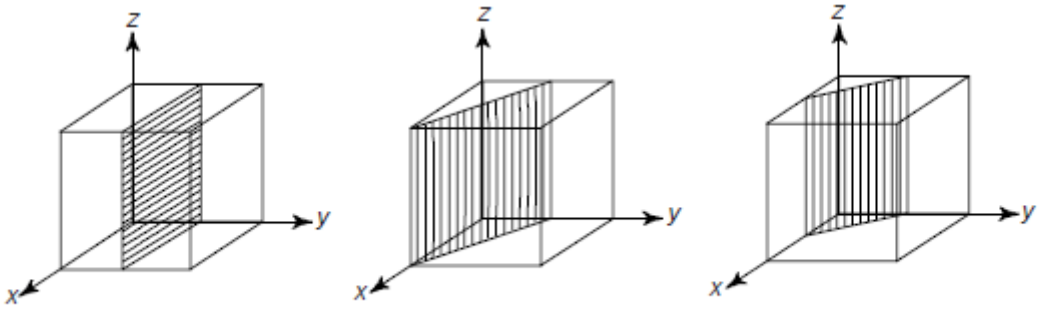
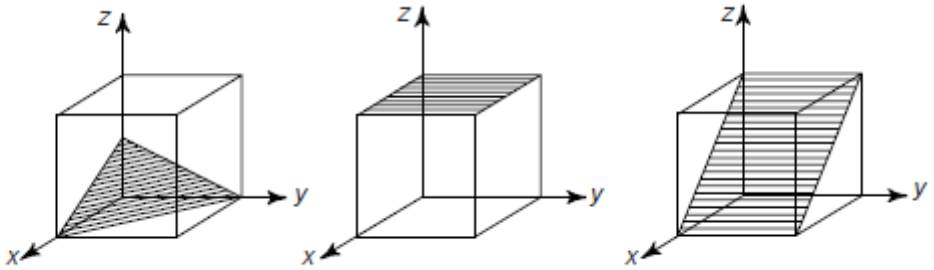


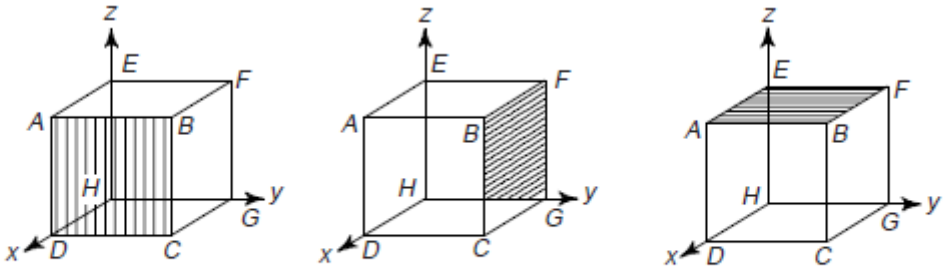
Fig. 3.27 Lattice planes in a cubic system. Negative intercepts are indicated on negative coordinates



(a) Plane (020) (b) Plane (120) (c) Plane (220)



(a) Plane (112) (b) Plane (001) (c) Plane (101)



(a) Plane (100) (b) Pane (010) (c) Plane (001)

Fig. 3.29 Crystal planes of a cubic unit cell

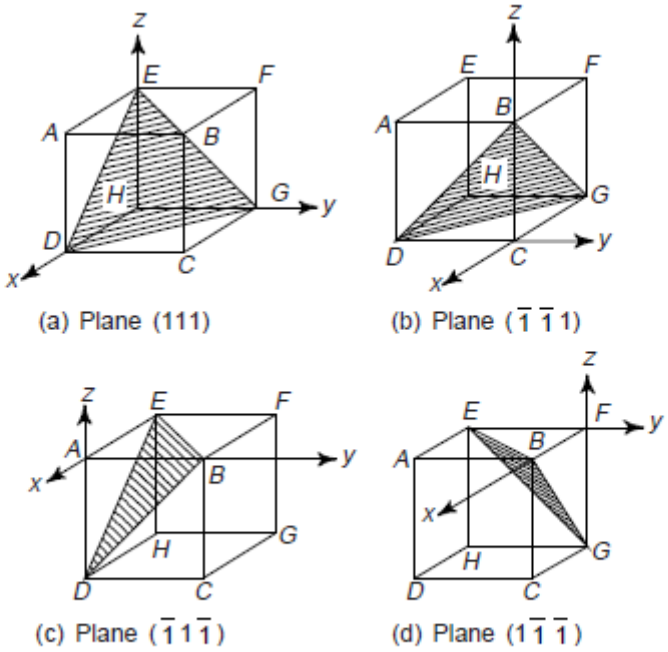


Fig. 3.32 Crystal planes corresponding to {111}

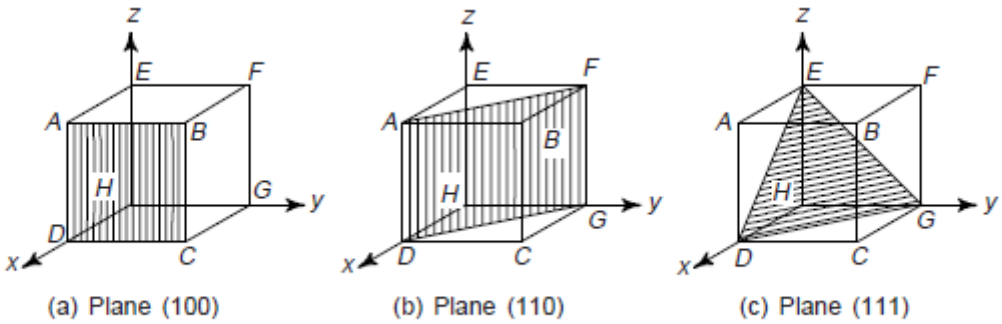
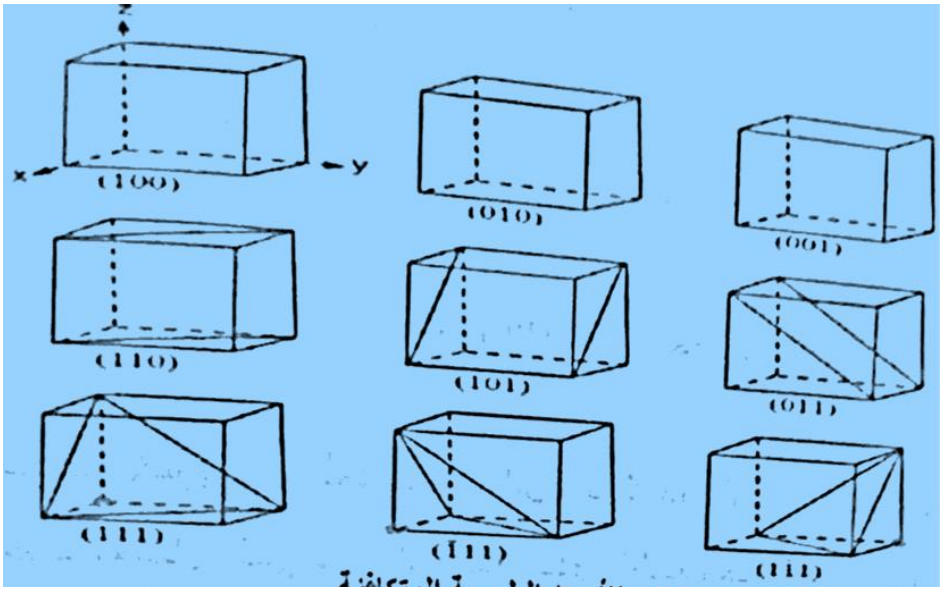


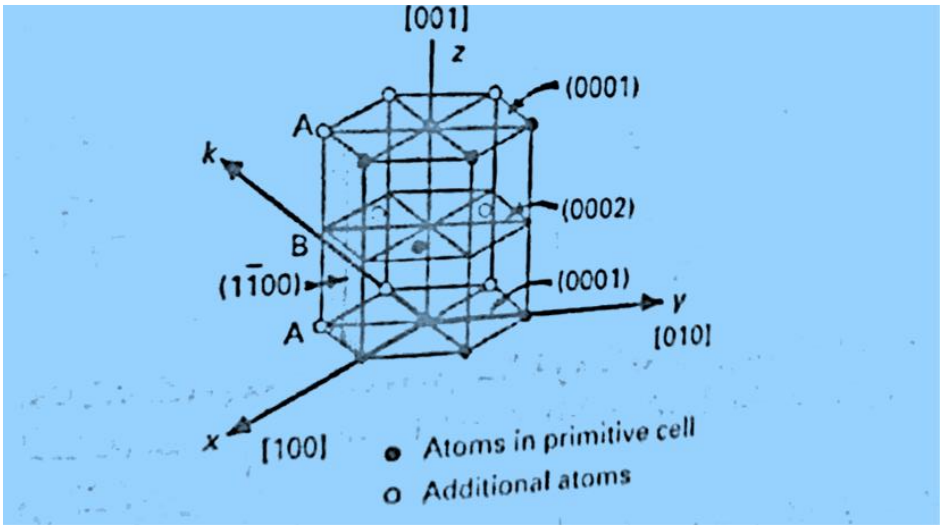
Fig. 3.34 Common planes in a simple cubic structure

فـي التركيـب السداسـي توجـد اربعـة محـاور بلوريـة وهـي (x, y, k, z) حيـث (x +y) - = k او فـي بعـض الأحيـان يرمـز للمحـاور الأربعـة (a1, a2, a3, c) حيـث (a1+ a2) - = a3 ويحـدد السـطح بـأربع معـاملات ميلـر (hkil) حيث يشير i = - (h + k)

الشـكل (13) يوضـح السـطح (1 1 00) الـذي يقطـع (x) عنـد (a=1) ومحـور () عنـد (1 = -b) ومـوازي لمحور (2) فتكون قيمة (0 = 1) وتكون قيمة (i= 0)



الشكل (12) بعض الأوجه البلورية المتكافئة



الشكل (13) بعض السطوح المتوازية في الشكل السداسي

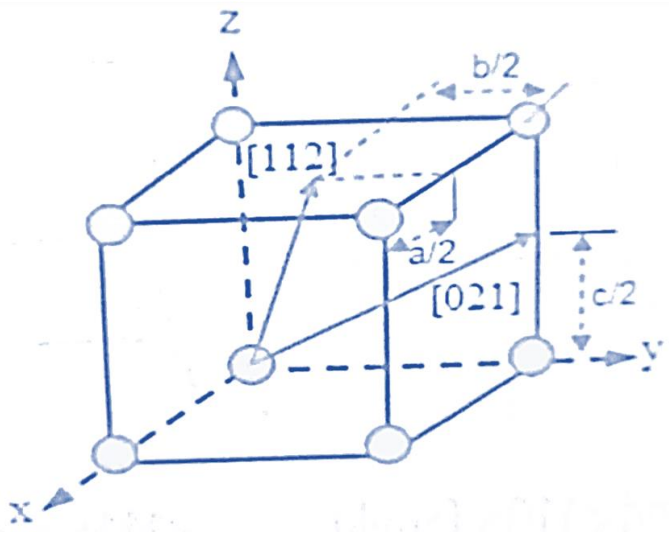
الاتجاهات البلورية Crystal direction

لتعيين اي اتجاه داخل بلورة تستخدم ثلاث من المعلمات تكتب بالشكل [uvw] وهي اعداد صحيحة.

الشكل (14) يبين المتجه [112] حيث أن أعلى قيمه لمعلمات الاتجاه هي الواحد، لذلك يتم جميع المعلمات على 2 فيكون قيمه الاتجاه على محورx (1/2) وعلى محورy (1/2) وعلى محور z (1).

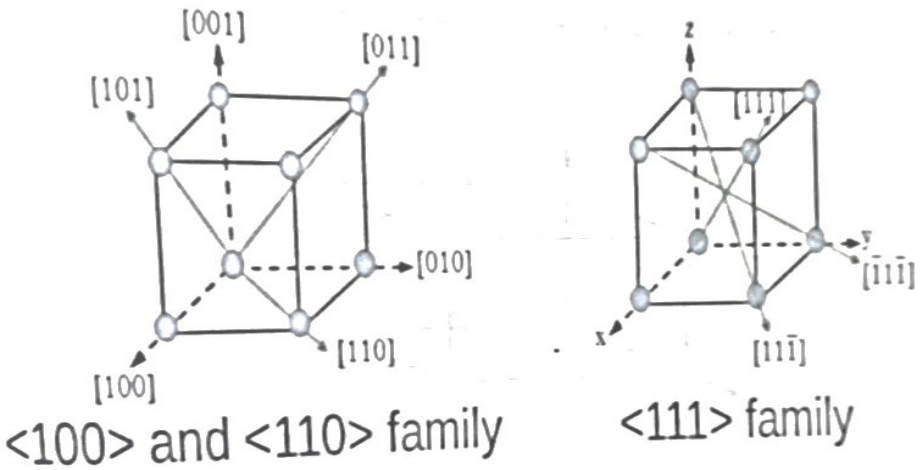
ونفس الطريقة للمتجه [021] فيكون قيمه الاتجاه صفرا على محور x واحد على محور y ونصف على محور Z.

الشكل (14) تحديد اتجاهات لموقع داخل المكعب



وفي خلية الوحدة المكعبة يمثل المحور السيني [100] والمحور الصادات [010] ومحور الثالث العمودي على المحورين السيني والصادي له الاتجاه [001].

كما تمثل < uww> جميع الاتجاهات المتكافئة للاتجاه [uvw]، كما مبين في الشكل (15) الذي يوضح فيه الاتجاهات المتكافئة للمتجه [111] والمتجه [110] بالإضافة إلى اتجاهات محور وحدة الخلية



الشكل (15) الاتجاهات البلورية المتكافئة داخل المكعب

TABLE 3-3 ■ *Directions of the form ⟨110⟩ in cubic systems*

$$\langle 110\rangle = \begin{cases} [110]\ [\bar{1}\bar{1}0] \\ [101]\ [\bar{1}0\bar{1}] \\ [011]\ [0\bar{1}\bar{1}] \\ [1\bar{1}0]\ [\bar{1}10] \\ [10\bar{1}]\ [\bar{1}01] \\ [01\bar{1}]\ [0\bar{1}1] \end{cases}$$

تشير الاتجاهات البلورية إلى اتجاه معين لبلورة واحدة أو مادة متعددة البلورات موجهة. إن معرفة كيفية وصف هذه الاتجاهات يمكن أن تكون مفيدة في العديد من التطبيقات. منها تتشوه المعادن ، على سبيل المثال، في الاتجاهات التي تكون فيها الذرات على اتصال وثيق.

مثال آخر في الحقيقة هو اعتماد الخصائص المغناطيسية للحديد والمواد المغناطيسية الأخرى على الاتجاهات البلورية. لذلك من الأسهل بكثير مغنطة الحديد في اتجاه [100] مقارنة بالاتجاهين [111] أو [110]. هذا هو السبب في أن الحبيبات في فولاذ Fe-Si المستخدم في التطبيقات المغناطيسية (على سبيل المثال، نوى المحولات) موجهة في اتجاه [100] أو ما يعادله. في حالة المواد المغناطيسية المستخدمة في وسائط التسجيل، يتعين علينا التأكد من محاذاة لحبيبات في اتجاه بلوري معين بحيث لا يتم محو المعلومات المخزنة بسهولة. وبالمثل، يتم محاذاة البلورات المستخدمة في صنع شفرات التوربينات على طول اتجاهات معينة للحصول على خصائص ميكانيكية أفضل.

ان معاملات ميلر (h k 1) للسطح المنتمي الى نطاق معاملات ميلر محوره [uvw] يجب ان تخضع للعلاقة الجبرية

hu + kv + lw = 0 .... (1) مثلا: ($00\bar{1}$) مع [110] او ($0\bar{1}0$) مع [101] وهذا يعني ان أي

سـطح (h k 1) يحـوي الاتجـاه [uvw] إذا تحققـت المعادلـة (1) ويمكـن حسـاب معـاملات محـور النطـاق [uvw] لسطحين متقاطعين مثل (h_1 k_1 l_1) و (h_2 k_2 l_2) كالآتي:

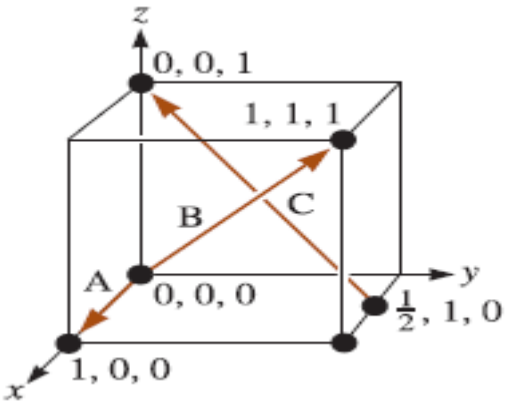
$$u = k_1 l_2 - k_2 l_1$$
$$v = l_1 h_2 - l_2 h_1$$
$$w = h_1 k_2 - h_2 k_1$$
…2

ان جميع السطوح التي تكون معاملات ميلر بشكل (h k 0) تنتمي الى نطاق واحد محوره [001]

يمكـن اسـتخدام المعـادلات (2) لايجـاد معـاملات ميلـر (h k 1) للسـطح الـذي يحـوي الاتجـاهين [u_1 v_1 w_1] و [u_2 v_2 w_2] كما يلي:

$$h = v_1 w_2 - v_2 w_1$$
$$k = w_1 u_2 - w_2 u_1$$
$$I = u_1 v_2 - u_2 v_1$$
…3

مثال: حدد معاملات مليـر من المتجهات Aو BوC في الشكل ادناه



المتجه A
1- النقاط هي 1,0,0 و 0,0,0
2- 1,0,0 - 0,0,0 = 1,0,0
3- لا توجد كسور لمسحها او اعداد صحيحة لتقليصها
4- [100]

المتجه B
1- النقاط هي 1,1,1 و 0,0,0
2- 1,1,1 -0,0,0 = 1,1,1
3- لا توجد كسور لمسحها او اعداد صحيحة لتقليصها
4- [111]

المتجه C
1- النقاط هي 0,0,1 و 1,0 , ½
2- 0,0,0 - ½ ,1,0 = -1/2 ,-1,1
3- 2 (-1/2 ,-1,1) = -1,-2,2
4- $[\bar{1}\bar{2}2]$

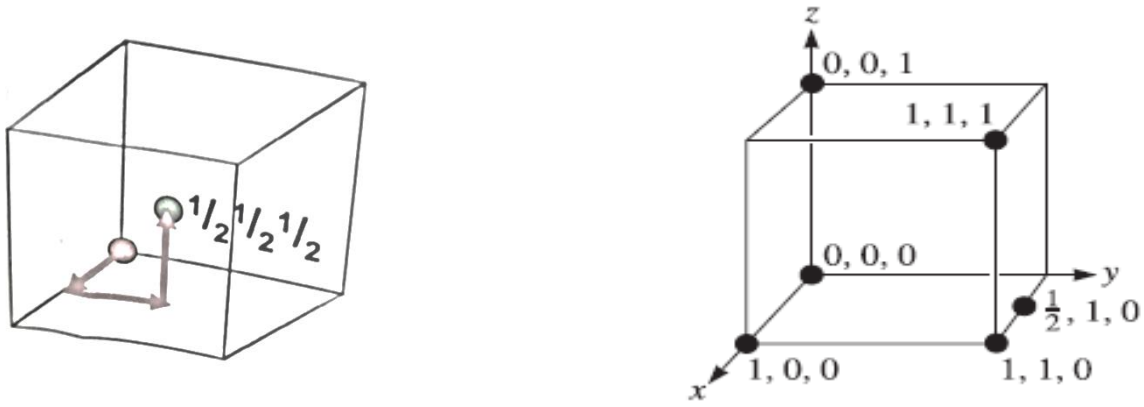
حساب الزاوية المحصورة بين سطحين ∅

يمكن حساب الزاوية ∅ بين السطحين (h_1 k_1 l_1) و (h_2 k_2 l_2) في بلورة مكعبة وهي تمثل الزاوية المحصورة بين العمودين على هذين السطحين كالاتي:

$$\emptyset = cos^{-1} \left\{ \left(\frac{(h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2)}{\left[(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)\right]^{\frac{1}{2}}} \right) \right\}$$

موقع الذرات في خلية الوحدة Position of atoms in unit cell

يعين موقع اي ذرة داخل خلية الوحدة بثلاث من قيم uvw وتكون هذه القيم كسرية وأعلى قيمة لها هي الواحد، حيث تكتب نقطة الأصل 000 أما ركن المكعب البعيد عن نقطة الأصل 111 والذي يكافئ نقطة الأصل، والنقطة ½ ½ ½ تقع في مركز المكعب، كما مبين في الشكل (16)



الشكل (16) تحديد موقع نقطة في خلية الوحدة

فسحة السطوح d_{hkl} Planes Spacing

أن فسحة السطوح هي المسافة بين المستويات البلورية المتوازية ويرمز لها (d_{hkl}) وهي مهمة لتعيين الصفات الفيزيائية والكيمائية للمادة الصلبة ، ويمكن إيجاد فسحة السطوح لخلية وحدة مكعبة ذات طول ضلع (a) ، كما في المعادلة (1-9) .

$$d_{hkl}=\frac{a}{\sqrt{h_1^2+k_1^2+l_1^2}}\ldots..$$

يتبين من المعادلة (1-9) إن فسد تعتمد على قيم معاملات ميلر فكلما كبرت قيم المعاملات صغرت قيمة فسحة السطوح كما يتبين أيضا أن فسحة السطوح لا تعتمد على إشارات معاملات ميلر. ومن الجدير بالذكر أن هناك بعض مثل (511) (333) لها نفس قيم فسحة السطوح بالرغم من امتلاكها للمعاملات ميلر مختلفة.

كما يمكن تحديد فسحة السطوح لجميع الانظمة البلورية، كما يلي حيث يتبين قيم $(1/d_{hkl})$ للمكعب ولبقية الأنظمة البلورية.

مكعب

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

الرباعي

$$\frac{h^2+k^2}{a^2}+\frac{l^2}{c^2}$$

معيني قائم

$$\frac{h^2}{a^2}+\frac{k^2}{b^2}+\frac{l^2}{c^2}$$

السداسي

$$\frac{4}{3}(\frac{h^2+k^2+l^2}{a^2})++\frac{l^2}{c^2}$$

تمتاز السطوح الذرية ذات معاملات ميلر الصغيرة بما يأتي:

1- عرض الفسح بين السطوح d_{hkl} تكون كبيرة وتزداد كلما صغرت معاملات ميلر.

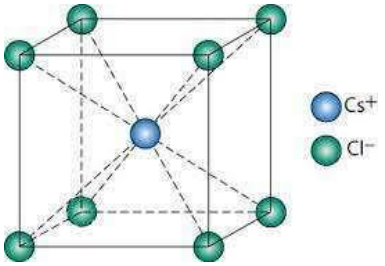
2- ضخامة كثافة الذرات لكل وحدة مساحة.

3- لها اهمية في تعيين الصفات الفيزيائية والكيميائية للمواد الصلبة.

تراكيب بلورية بسيطة Structure Crystal Simple

تركيب كلوريد السيزيوم Cesium Chlorid Structure (CsCl)

الشكل (17) يبين تركيب كلوريد السيزيوم ذو وحدة الخلية الأولية، حيث توجد جزيئة واحدة في وحدة الخلية ، يكون الكلور في الموقع % % % في حين يكون أيون السيزيوم في الموقع 000) والمسافة بين هذين الايونين هي نصف قطر خلية الوحدة وبذلك سيكون شكل وحدة الخلية مشابه لوحدة الخلية ذات تركيب (bcc) . هناك العديد من البلورات التي تشابه بلورة كلوريد السيزيوم مثل بلورات AgMg, BeCu, NH CI وغيرها.



الشكل (17) بلورة كلوريد السيزيوم

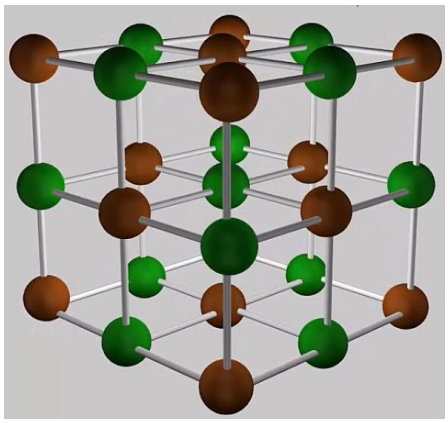
تركيب كلوريد الصوديوم Sodium Chloride NaCl

بلورة كلوريد الصوديوم مبينة في الشكل (18) بتركيب (fcc) والأساس مكون من ايون Na^+ وايون Cl^- بينهما مسافة نصف قطر خلية الوحدة المكعبة وتتوزع الايونات بحيث يكون كل ايون محاط بستة ايونات مخالفة له كجوار اول أما مواقع الايونات كالآتي:

Na: 000; ½ ½ 0 ; ½ 0 ½ ; 0 ½ ½

Cl: ½ ½ ½ ; 00 ½ ; 0 ½ 0 ; ½ 00

وتتبلور الكثير من المركبات بشكل مشابه لهذا التركيب مثلMgO, KBr, KCl, PbS, MnO وغيرها



الشكل (18) بلورة كلوريد الصوديوم

تركيب الماس Dimond Structure

تمتلك بعض المواد مثل الكاربون واشباه الموصلات مثل السيلكون والجرمانيوم تركيب الماس الذي هو ببساطة عبارة عن شبيكة من نوع (fcc) تمتلك ذرتي كاربون المسافة بينهما ربع قطر وحدة الخلية المكعبة فتكون الأولى في الموقع 000 أما الثانية فتحتل الموقع ¼ ¼ ¼.

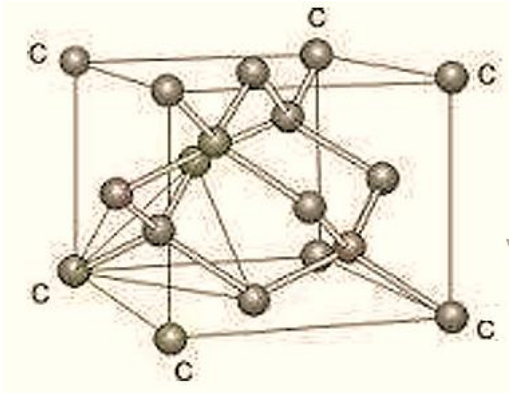
يمكن وصف تركيب الماس كما في الشكل (19) باثنين من الشبائك (fcc) الأولى ثابته في مكانها تحوي أربع ذرات ذات المواقع

000 ½ ½ 0 0 ½ ½ ½ 0 ½

وشبيكة ثانية من نوع (fcc) تنزاح عن الأولى بمقدار ربع قطر المكعب وبنفس اتجاهه وتحوي أيضا على أربع ذرات وبذلك تكون مواقعها كالآتي:

¼ ¼ ¼ ¾ ¾ ¼ ¼ ¾ ¾ ¾ ¼ ¾

وتكون نسبة الملء هي 0.34 وهي نصف نسبة الملء لشبكة من نوع (fcc).



الشكل (19) الازاحة الشبكية لمكعب متمركز الأوجه في بلورة الماس

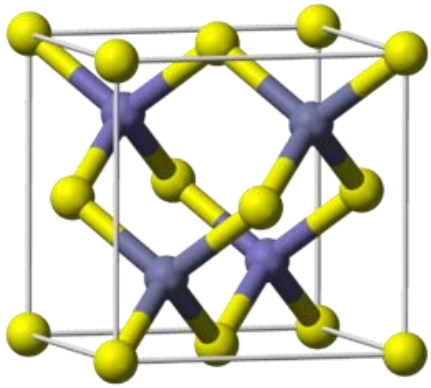
التركيب المكعبي لكبريتيد الزنك Cubic Zinc Structure ZnS

هذا التركيب يشبه إلى حد بعيد تركيب الماس، حيث توجد أربع ذرات من الخارصين (Zn) في الشبكية (fcc) الثابتة وأربع اخرى من الكبريت (S) في الشبيكة المزاحة ولكن الفرق هو أن الماس يمتلك تماثل عند منتصف المسافة للجوار الأول بتماثل من نوع مركز الانقلاب كون الذرات متشابهة، ذرتي الكاربون، في حين لا يوجد هذا التماثل في تركيب (ZnS) بسب اختلاف نوع الذرات، الشكل (20) يوضح أن مواقع الذرات هي

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

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

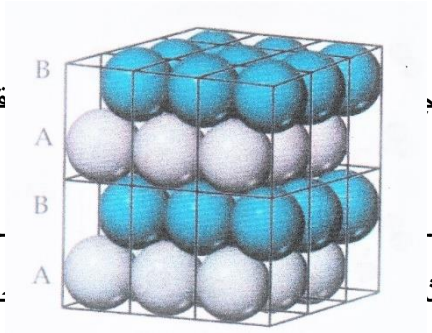
هناك العديد من البلورات للمواد التي تمتلك تركيب كبريتيد الزنك مثل Gap، SiC، GaAS



الشكل (20) التركيب البلوري لكبريتيد الزنك

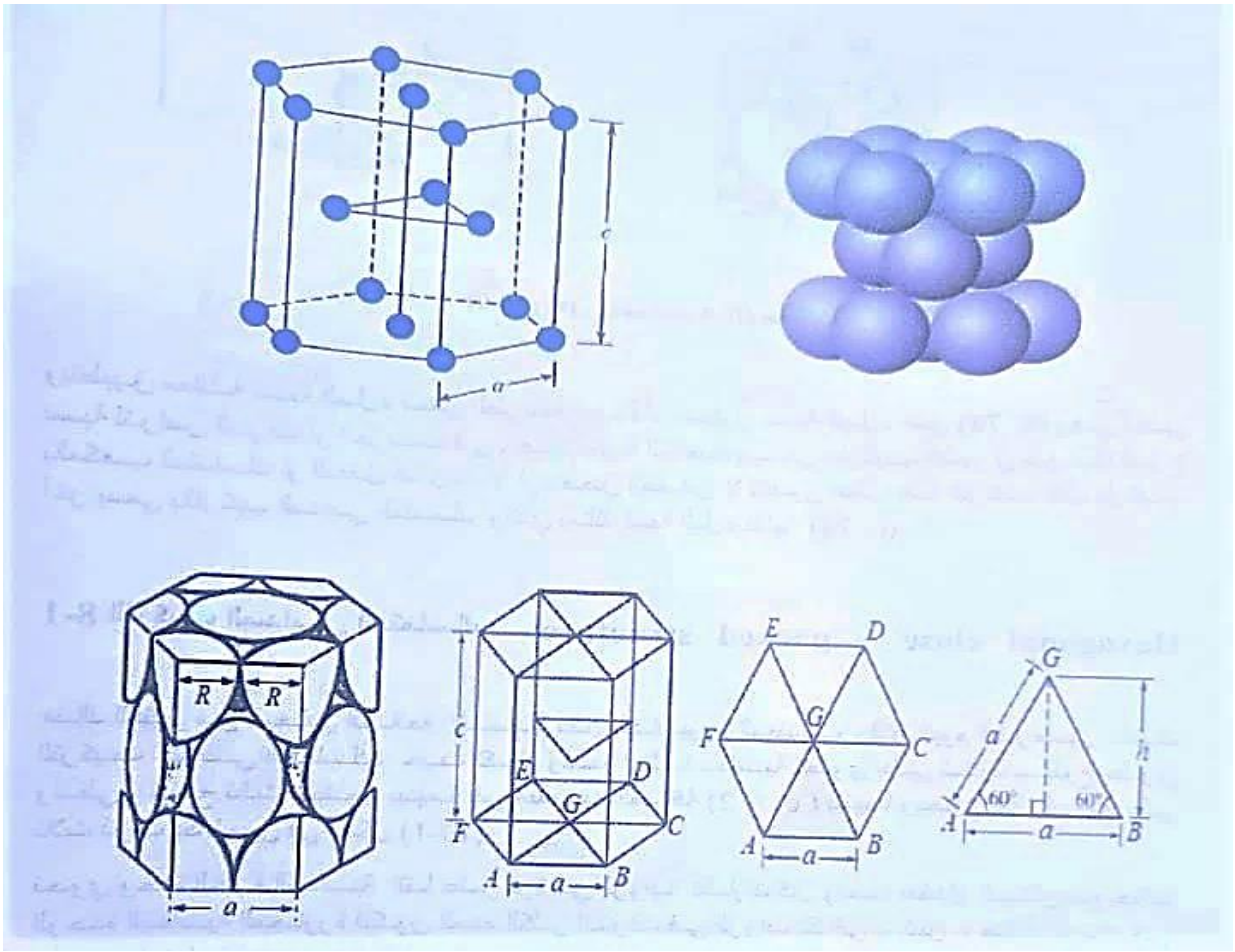
التركيب السداسي المقفل الملء والمتماسك hcp والمكعب المقفل الملء (ccp)

هنالك الكثير من المعادن الشائعة الاستخدام مثل الكادميوم والمغنسيوم والتيتانيوم الخارصين التركيب السداسي المتماسك، حيث تكون وحدة الخلية سداسية تحوي على ثلاث سطوح علوي وسفلى وسطح ثالث محشور بينهما في منتصف المسافة (c / 2) بينهما ويحوي هذا السطح على ثلاث ذرات، كما مبين في الشكل (1-19). تحوي وحدة الخلية السداسية اثنا عشر ذرة في الزوايا تشارك كل واحدة بمقدار السدس مع خلايا الوحدة السداسية المجاورة فيكون العدد الكلي للذرات في الزوايا تكافئ ذرتين وهنالك ذرتان في الأوجه تشارك كل ذرة بمقدار النصف مع الوجه الملاصق لوجه الخلية السداسية المتجاورة،



لـذلك هـذه الـذرتين فـي منتصـف الأوجـ قـط وهنـاك ثـلاث ذرات داخليـة لـذلك سيكون العدد الكلي للذرات هو ستة.

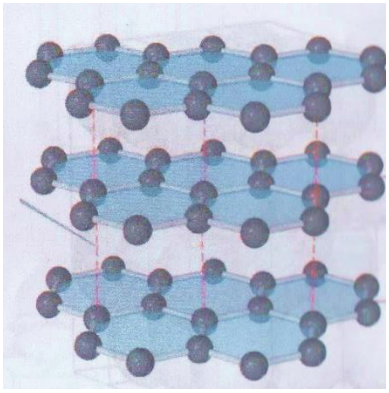
ولتحديـد حجـم وحـدة الخليـة السداسـ ـزاء ثـم حسـاب حجـم جـزء واحـد وضـربه فـي سـته وبالاسـتفادة مـن الشـ ـجـم يسـاوي مسـاحة القاعـدة (مثلـث) فـي الارتفـاع (طـول المحـور) فيكـون الحجـم ا للكلـي مسـاويا {6 × 2/1 (a h c)} وهـذا يسـاوي ($3a^2C$ sin60).



الشكل (21) التركيب السداسي

يمكـن تمثيـل هـذا النـوع مـن التركيـب، أمـا بطريقـة السداسـي المتماسـك أو المقفـل (hcp) بحيـث تترتـب الاسـطح بشـكل دوري، كمـا فـي الشـكل (22) بطبقـة A مـن الـذرات تعقبهـا طبقـة B مـن الـذرات بحيـث تكـون مركزهـا موجـودة علـى فرغـات الطبقـة A ثـم الطبقـة الثالثـة B التـي تقـع مراكـز ذراتهـا علـى مراكـز ذرات الطبقة A فنقول ببساطة أن هذا التركيب هو .ABABAB

كمـا يتشـكل الكرافيـت بهـذه الطريقـة أيضـا، حيـث تحـوي شـبيكته السداسـية الأوليـة علـى أربـع ذرات فـي وحـدة الخليـة تقـع عنـد $0\frac{1}{2}\frac{1}{3}$, $\frac{2}{3}\frac{1}{3}0$, 000 والتـي يمكـن تصـورهـا علـى أنهـا شـبيكتي (hexagonal) مفصـولتين عنـد النقطـة 1/2 00، كمـا مبـين فـي الشـكل (23)، وهـذا يعنـي أنهمـا طبقتـين مرصوصـة بالتركيـب السداسـي المتماسـك بحيـث تكـون الـذرات متماسكـة بشـكل كبيـر ضـمن الطبقـة الواحـدة أو المستوي الواحد، وهنـاك تجـانب ضعيف بين المستويات وهذا الذي يفسر الطبيعة التي يكون عليها الجرافيت.



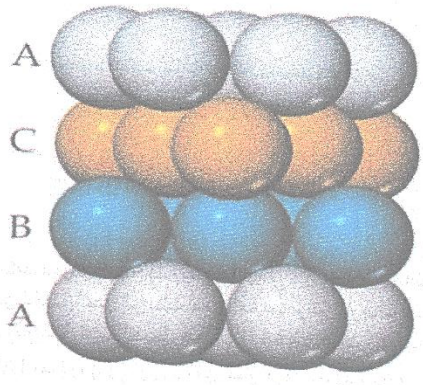
الشكل (23) التركيب الخاص بالجرافيت

أمـا المعـادن مثـل الألمنيـوم والنحـاس والفضـة التـي تتبلـور بتركيـب المكعبـي المقفـل المـلء (ccp) فترتـب فيـه الـذرات بشـكل ثـلاث طبقـات الأولـى A ثـم الطبقـة الثانيـة B حيـث تكـون مراكـز ذراتهـا علـى الفراغـات الموجـودة بـين ذرات الطبقـة الأولـى A أمـا الطبقـة الثالثـة C سـتكون مراكـز ذراتهـا علـى الفجـوات للذرات المتماسة للطبقتين A، B

وبذلك سيكون الترتيب.....ABCABC، كما في الشكل (24)

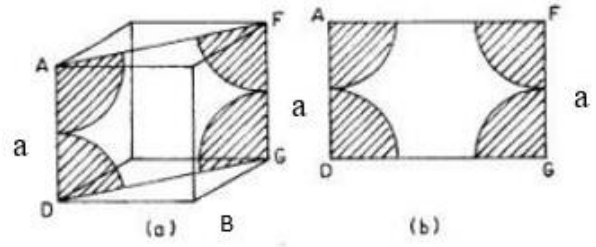
فـي خليـة الوحـدة السداسـية توجـد ذرتـين الأولـى فـي الموقـع 000 والثانيـة عنـد 1/2 2/3 1/3 وهـذا يعنـي عنـد تـراص الطبقـات فـإن الطبقة A عند 000 تليهـا الطبقـة B عند 1/2 2/3 1/3 والطبقة C عند 001

عنـد درجـات حـرارة معينـة قـد يتحـول التركيـب السداسـي المتماسـك الـى المكعبـي المتماسـك أو بـالعكس علـى اعتبـار أن كلا التركيبين يملكون عدد الذرات ذاته ونسبة الملء ذاتها.



الشكل (24) التركيب المكعبي المتماسك

- حساب كثافة المستوي (110) لشبيكة SC



1- عدد نقاط للمستوي هي

$$N = 4 * \frac{1}{4} = 1$$

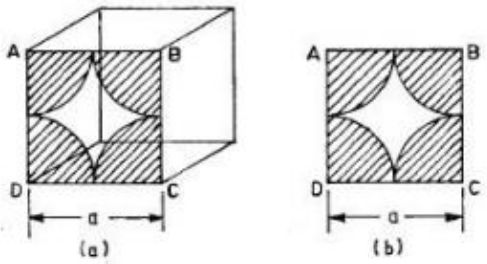
2- مساحة المستوي

في المثلث DGB نجد طول DG حسب نظرية فيثاغورس

$$DG^2 = a^2 + a^2 = 2a^2 \rightarrow DG = a\sqrt{2}$$

$$D = \frac{N}{A} = \frac{1}{a.a\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}\,a^2}\ atom/mm^2$$

س/ احسب كثافة المستويات (111) ,(110), (100) لشبيكة SC؟



- لحساب كثافة المستوي (100) لشبيكة SC
نلاحظ الشكل الاتي

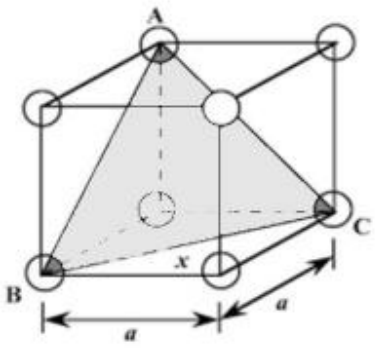
1- عدد نقاط للمستوي هي

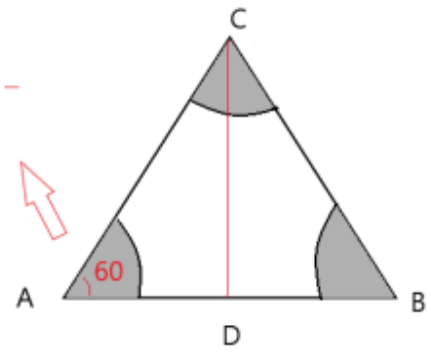
$$N = 4 * \frac{1}{4} = 1$$

2- مساحة المستوي $\mathbf{A = a * a = a^2}$

$$D = \frac{N}{A} = \frac{1}{a^2}\ atom/mm^2$$

- حساب كثافة المستوي (111) لشبيكة SC





$$sin60 = \frac{\sqrt{3}}{2} \rightarrow sin60 = \frac{\text{المقابل}}{\text{الوتر}} = \frac{h}{a\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{3}}{2} \rightarrow h = \frac{a\sqrt{6}}{2} = a\sqrt{\frac{6}{4}} \rightarrow \quad h = a\sqrt{\frac{3}{2}}$$

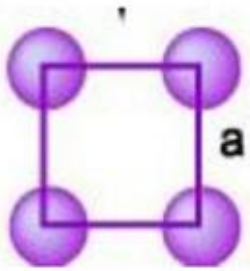
$$A = \frac{1}{2} * AB * h = \frac{1}{2} * a\sqrt{2} * \ a\sqrt{\frac{3}{2}} \ = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2$$

$$D = \frac{N}{A} = \frac{3*\frac{1}{6}}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2} = \frac{\frac{1}{2}}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2} = \frac{1}{a^2\sqrt{3}} \ atom/mm^2$$

س/ احسب كثافة المستويات (111), (110), (100) لشبيكة BCC؟

- لحساب كثافة المستوي (100) لشبيكة BCC نلاحظ الشكل الاتي

For Plane (100):



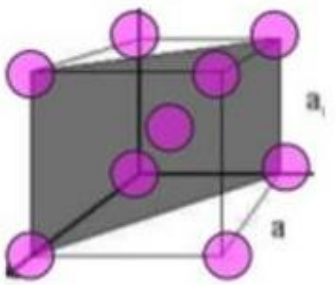
$$D = \frac{N}{A} = \frac{1}{a^2}\ atom/mm^2$$

Number of atoms on (100) plane=4x$\frac{1}{4}$ = 1

Area=a^2

- لحساب كثافة المستوي (110) لشبيكة BCC نلاحظ الشكل

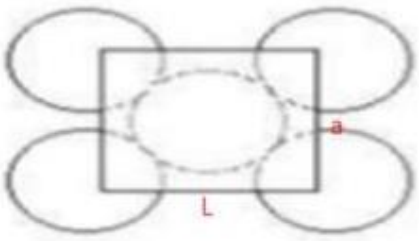
For Plane (110):



Number of atoms on (110) plane=(4x$\frac{1}{4}$) + 1 = 2

Area=L xa =$\sqrt{2}$a x a=$\sqrt{2}$ a^2 ($L^2=a^2+a^2$ فيثاغورس)

$$D = \frac{N}{A} = \frac{2}{\sqrt{2}\,a^2}\ atom/mm^2$$



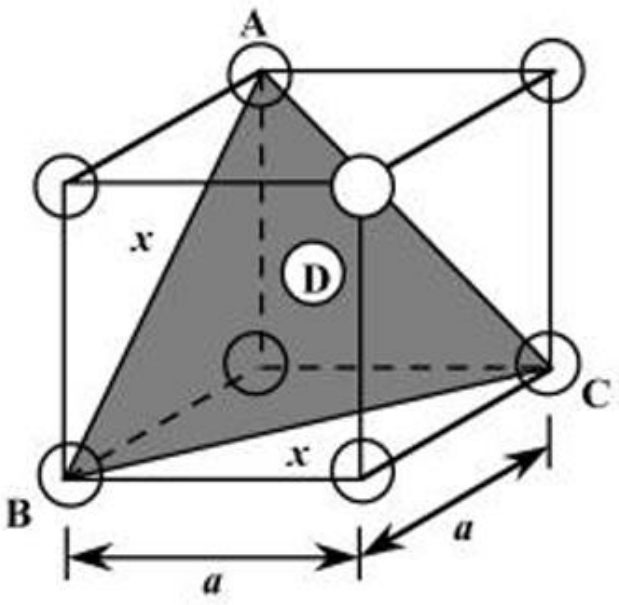
- لحساب كثافة المستوي (111) لشبيكة BCC نلاحظ الشكل

For plan (111)

$$\text{Number of atoms} = \frac{1}{6} * 3 = \frac{1}{2}$$

$$A = \frac{\sqrt{3}}{2}\, a^2$$

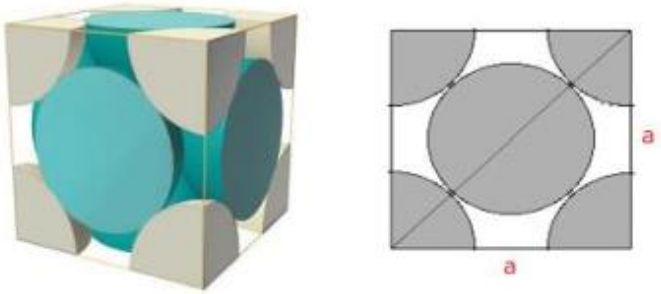
$$D = \frac{N}{A} = \frac{\frac{1}{2}}{\frac{\sqrt{3}}{2}\, a^2} = \frac{1}{a^2\sqrt{3}}\, atom/mm^2$$



س/ احسب كثافة المستويات (100), (110), (111) لشبيكة FCC؟

- لحساب كثافة المستوي (100) لشبيكة FCC نلاحظ الشكل الاتي

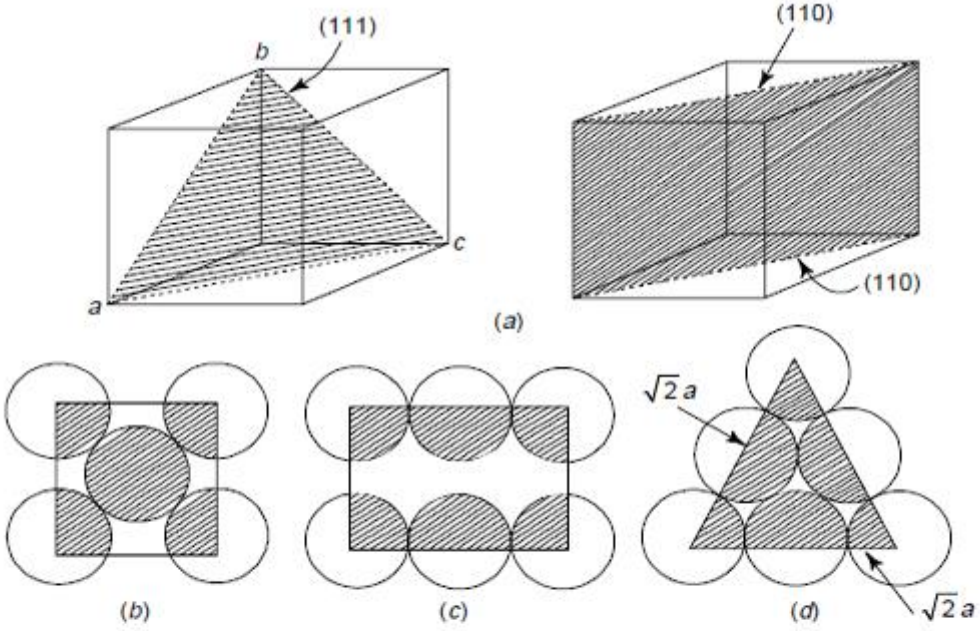
For plane (100):



$$\text{Number of atoms} = \frac{1}{4} * 4 + 1 = 2$$

$\mathbf{A = a * a = a^2}$

$$\boldsymbol{D = \frac{N}{A} = \frac{2}{a^2} = \frac{2}{a^2}\ atom/mm^2}$$



- لحساب كثافة المستوي (110) لشبيكة FCC نلاحظ الشكل (c) اعلاه

Number of atoms on(110)plane

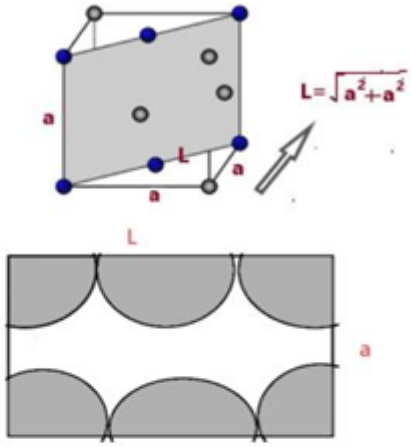
$$= \frac{1}{4} * 4 + 2 * \frac{1}{2} = 2$$

$$L = \sqrt{a^2 + a^2} = a\sqrt{2}$$

A= $a\sqrt{2}$ * **a** = $\sqrt{2}\ a^2$

$$\boldsymbol{D = \frac{N}{A} = \frac{2}{\sqrt{2}\ a^2}\ atom/mm^2}$$

- لحساب كثافة المستوي (111) لشبيكة FCC نلاحظ الشكل (c) اعلاه



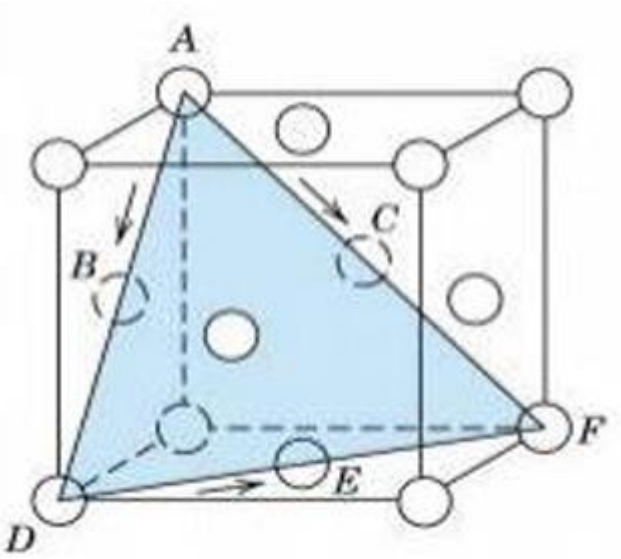
Number of atoms on(111)plane

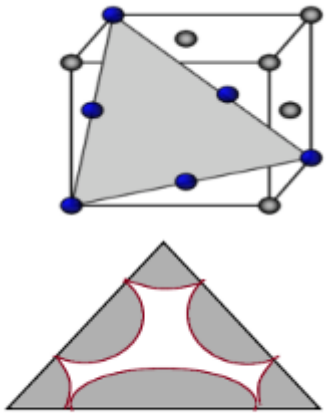
$$= \frac{1}{6} * 3 + 3 * \frac{1}{2} = 2$$

$$L = \sqrt{a^2 + a^2} = a\sqrt{2}$$

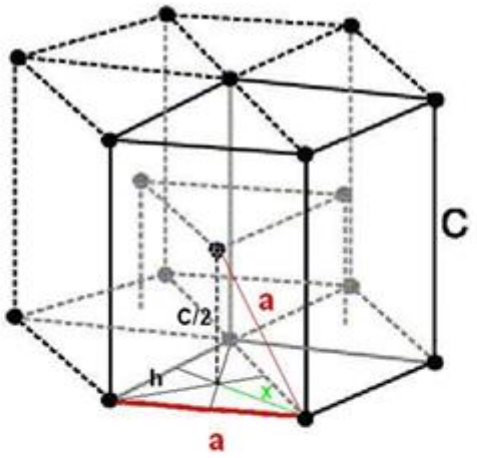
$$A = \frac{\sqrt{3}}{2}\, a^2$$

$$\boldsymbol{D = \frac{N}{A} = \frac{2}{\frac{\sqrt{3}}{2} a^2} = \frac{4}{\sqrt{3}\, a^2}\ atom/mm^2}$$





س/ برهن ان نسبة c/a في التركيب السداسي التلاصق الرص تساوي 1.633؟



h. . .height of the equilateral triangle

a. . .lattice constant

$$h = \sqrt{a^2 - (a/2)^2} = \sqrt{1 - \frac{1}{4}} * a = \sqrt{\frac{3}{4}} * a$$

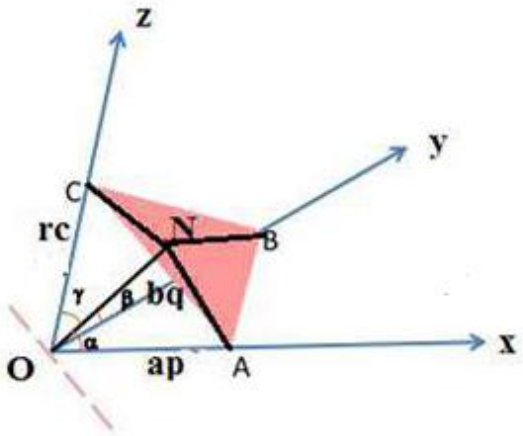
Distance x from an atom to the middle of the triangle:

$$\frac{c}{2} = \sqrt{a^2 - x^2} = \sqrt{a^2 - \frac{1}{3}a^2} = \sqrt{\frac{2}{3}} * a$$

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

س/ اثبت ان $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$ لنظام المكعب ؟

في Δ ONA. $\cos \propto = \frac{ON}{OA}$



ON تمثل المسافة العمودية بين السطح ABC ونقطة الاصل O وهي تمثل d_{hkl}

$$\therefore \cos \propto = \frac{d_{hkl}}{\frac{a}{h}} = \frac{h}{a} d_{hkl}$$

$$\therefore \cos^2 \propto = \left(\frac{h}{a}\right)^2 d^2 hkl \ldots\ldots\ldots (1)$$

ملاحظة : $OA = ap = a * \frac{1}{h} = \frac{a}{h}$

$$\Delta ONB : \cos\beta = \frac{ON}{OB} = \frac{d_{hkl}}{\frac{b}{k}} = \frac{k}{b} d_{hkl} \qquad \therefore \cos^2\beta = \left(\frac{k}{b}\right)^2 d^2{}_{hkl} \ldots\ldots\ldots (2)$$

$$\Delta ONB : \cos\beta = \frac{ON}{OB} = \frac{d_{hkl}}{\frac{b}{k}} = \frac{k}{b} d_{hkl} \qquad \therefore \cos^2\beta = \left(\frac{k}{b}\right)^2 d^2{}_{hkl} \ldots\ldots\ldots (2)$$

$$\Delta ONC = \cos\gamma = \frac{ON}{OC} = \frac{d_{hk}}{\frac{c}{l}} = \frac{l}{c} d_{hkl} \quad \therefore \cos^2\gamma = \left(\frac{l}{c}\right)^2 d^2{}_{hkl} \ldots\ldots\ldots (3)$$

لدينا من المثلثات المتطابقة $\cos^2\alpha + \cos^2\beta + \cos^2\gamma = 1 \quad \ldots\ldots (4)$

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

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

أسئلة متنوعة

أسئلة الفصل الأول

س 1: ارسم المتجهات [100]، [110]، [111] داخل وحدة خلية مكعبة .

س 2: حدد السطوح (0001) (0002) والمتجهات [1120] [0001] داخل وحدة الخلية السداسية .

س 3: أوجد في التركيب السداسي النسبة (c/a).

س 4: ارسم المتجهات [236]، [203] , [211] في وحدة خلية مكعبة.

س 5: إذا كان نصف قطر ذرة الحديد (nm0.124) جد معلمات الشبيكة.

س 6: احسب فسحة السطوح لبلورة الحديد من نوع (bcc) السطح (220) حيث كان حرف وحدة الخلية المكعبة هو0.2866nm