كلية العلوم

القسم : الكيمياء

السنة : الرابعة

المادة : كيمياء البلورات

المحاضرة : الخامسة/نظري/

{{ مكتبة A to Z }}

Facebook Group : مكتبة A to Z

كلية العلوم ، كلية الصيدلة ، الهندسة التقنية

2025

يمكنكم طلب المحاضرات برسالة نصية (SMS) أو عبر(What's app-Telegram)على الرقم 0931497960

الفصل السادس

رموز الوجوه في البلورات

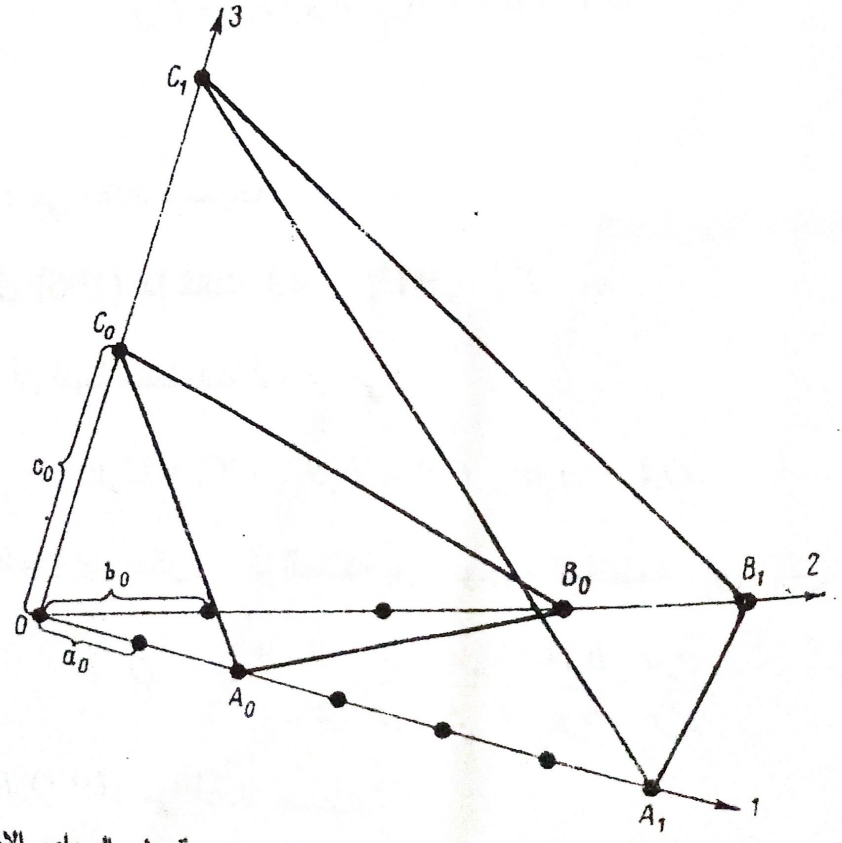
6-1- قانون آيو (قاعدة الأعداد الصحيحة):

استنتج العالم الفرنسي آيو في الفترة الواقعة ما بين عامي (1743-1822) قانوناً يسمى قانون الأعداد الصحيحة في البلورات، وينص:

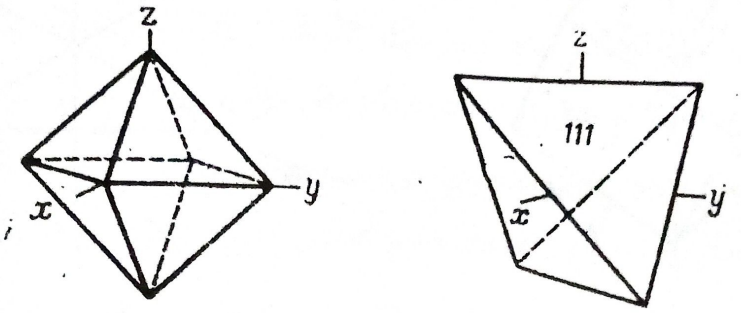
"إن العلاقة النسبية المضاعفة للمسافات المقتطعة بوجهين ما على أضلاع بلورة تساوي العلاقة النسبية لأعداد صحيحة غير كبيرة" .

أي يوضح هذا القانون العلاقة المتبادلة بين توضع الوجوه والأضلاع في البلورات، وذلك بمساعدة رموز الوجوه، ورموز الأضلاع (التي سيتم عرضها لاحقاً).

يمثل $(AoBoCo)$ و $(A_1B_1C_1)$ وجهين في البلورة كما في الشكل (6-1).



الشكل (6-1) يوضح العلاقة بين المسافات المقتطعة بالأوجه البلورية على المحاور الإحداثية وفق مفهوم آيو



الشكل (6-9) توجيه البلورات في الفئة المكعبة من النمط $(\bar{4}3m),(m3m)$

الجدول (6-1) معطيات عن البارامتريات والزوايا والثوابت الهندسية في الزمر البلورية الثلاث:

البنية البلورية	البارامترية	الزوايا بين المحاور البلورية	الثوابت الهندسية
الثلاثية	$a_o \neq b_o \neq c_o$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$	$a,1,c;\alpha,\beta,\gamma$
أحادية الميل	$a_o \neq b_o \neq c_o$	$\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$	$a,1,c,\beta$
المعينية	$a_o \neq b_o \neq c_o$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a,1,c,\beta$
الرباعية	$a_o = b_o \neq c_o$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	c
السداسية	$a_o = b_o \neq c_o$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	c
الثلاثية	$a_o = b_o \neq c_o$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	α
المكعبية	$a_o = b_o = o$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	—

6-3- رموز الوجوه البلورية:

يوضح الشكل (6-10) المحاور الإحداثية (oz،oy،ox) هي ثلاثة محاور، بلورية، والوجه القياسي عليها هو $A_oB_oC_o$، والوحدات القياسية لهذا الوجه هي OA_o, OB_o, OC_o على المحاور البلورية الثلاثة، وبفرض يوجد وجه آخر $A_1B_1C_1$ يقطع هذه المحاور أيضاً، والمطلوب: تحديد رموز هذا الوجه أو تعيينها، لذا يجب أولاً: أن نحدد المسافات، أو القطع التي يقتطعها هذا الوجه مع المحاور الإحداثية الثلاثة، وهي وفق كل محور كالآتي: وفق المحور (ox) هي $\frac{OA_1}{OA_o}$، وفق المحور (oy) هي $\frac{OB_1}{OB_o}$، وفق المحور Oz هي $\frac{OC_1}{OC_o}$، ولنأخذ مقلوب هذه النسب فتكون على الترتيب على المحاور محددة بالعلاقة الآتية، وذلك حسب قانون آيو:

$$\frac{OA_o}{OA_1} : \frac{OB_o}{OB_1} : \frac{OC_o}{OC_1} = h : k : L$$

حيث (h,k,L) أعداد صحيحة، وهي رموز الوجه البلوري المطلوب، وتُكتب رموز الوجه بين قوسين (hkL)، ولتحديد رموز وجه بلوري ما يجب أن نتبع القواعد الآتية:

1- نوجه البلورة بشكل صحيح.

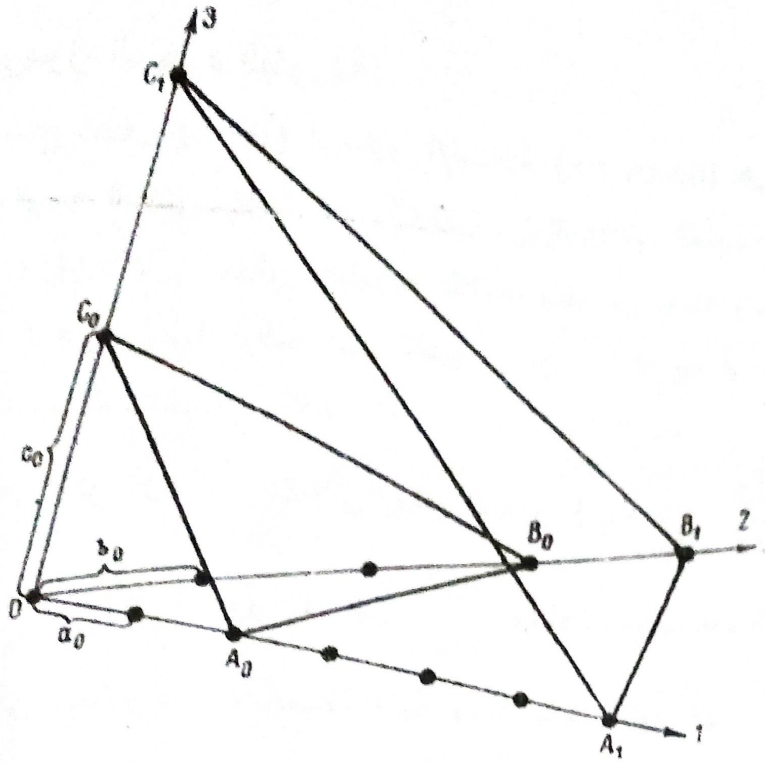
2- نحدد المسافات، أو القطع القياسية التي يقتطعها الوجه على المحاور الإحداثية الثلاثة.

3- نأخذ مقلوب النسب المضاعفة للقطع المقتطعة.

يتحدد الوجه القياسي عندما يقتطع المحاور البلورية بالقرائن 1,1,1، وتكون العلاقة النسبية العكسية لها هي1:1:1، ويسمى الوجه الذي يملك هذه القرائن بالوجه القياسي، ورمزه (111). ولنفرض أن الوجه البلوري يقطع المحور (ox) بالقيمة $x = 4$، والمحور (oy) بالقيمة $y = 1$، والمحور Oz بالقيمة $z = 2$، فتكون العلاقة العكسية للمسافات المقتطعة هي:

$$\frac{1}{4} : 1 : \frac{1}{2} = 1 : 4 : 2$$

ويكون رمز الوجه البلوري في هذه الحالة هو (142)، إن قرائن الوجه البلوري عادة لا تكون أكبر من 6، وبشكل استثنائي تصل إلى الرقم (10) عشرة.



الشكل (6-10) يوضح رموز الوجوه البلورية

6-4- العلاقة بين بارامتريات الوجوه البلورية،وقرائنها،ونماذج رموزها:

تتحدد العلاقة بين بارامتريات الوجوه البلورية، وقرائنها، ورموزها بالحالات الآتية:

I- إذا اقتطع ضلع ما من أحد المحاور البلورية مقداراً كبيراً، وأكبر من بقية المحاور تكون قرائن هذا الوجه المنطبقة على ذلك المحور صغيرة، وأصغر من القرائن التي تنطبق على المحاور الأخرى، وبالعكس أيضاً، كما وضحت الفقرة السابقة إن هذه العلاقة ستستخدم عند تحديد رموز الوجوه البلورية.

II- إذا كان الوجه البلوري موازياً للمحاور الإحداثية عندئذ لا يتقاطع معها وتكون المسافات التي يقتطعها الوجه من المحاور تساوي لانهاية (∞)، ولندع وجهاً ما يقطع المحاور الإحداثية وفق المسافات الآتية: $x = \infty$، أي موازياً للمحور ox و $oy = p$، $oz = q$، وحسب العلاقة النسبية العكسية نحصل على البارامتريات الآتية :

$$\frac{1}{\infty}:\frac{1}{p}:\frac{1}{\alpha}=0:k:L$$

وتكون رموز الوجه الموازي للمحور ox هي $(0KL)$، وإذا كان الوجه موازياً للمحاور الإحداثية فيساوي رمزه دوماً الصفر (000).

III- إذ قطع الوجه البلوري أحد المحاور الإحداثية في النهاية السالبة ستكون القرائن في هذه الحالة سالبة، وتوضع إشارة سالب فوق العدد مثلاً $\bar{2},\bar{1},\frac{\bar{1}}{2}$، وهكذا، ويكون رمز الوجه البلوري $(h\bar{k}L)$ إذا قطع الوجه البلوري المحور oy بالنهاية السالبة.

IV- إذا كانت رموز الوجه البلوري تجعله ينحرف باتجاه المحاور البلورية بالنسبة للوجه القياسي، ولكن لا ينحرف الوجه عن مبدأ الإحداثيات على المحاور البلورية، تكون جميع المسافات المقتطعة التي يقتطعها على المحاور الإحداثية، أصغر، أو أكبر بالمقدار نفسه.

يُبسط انتقال الوجوه البلورية المسافات المقتطعة، وتتحدد على المحاور ،ويكون الانتقال الموازي للوجوه البلورية متساوياً بالضرب، أو بالتقسيم على الرقم نفسه على جميع المسافات المقتطعة، ولا تتعلق رموز الوجوه البلورية المتماثلة بأبعاد البلورات التي تحتوي على مادة واحدة، أو مواد متعددة، التي لها بنى متماثلة، أو مختلفة عند شروط ترموديناميكية متماثلة، وعند شروط توجيه البلورات نفسها.

يمكن أن نصنف رموز الوجوه البلورية بالنسبة للمحاور الإحداثية في ستة نماذج وفق الآتي:

1- الوجه القياسي: هو الوجه الذي تقتطعه المحاور البلورية بالعدد (1)، واحد ويأخذ الرموز الآتية: وذلك بحسب توضع الوجه القياسي بالنسبة للمحاور الإحداثية وفق البارامتريات الآتية :

2- إذا تقاطع الوجه القياسي مع محور واحد فقط، والمحوران الآخران موازيان له يأخذ الرموز الآتية: $(\bar{1}00),(001),(010),(100),(00\bar{1}),(0\bar{1}0)$.

3- إذا تقاطع الوجه القياسي مع محورين و يوازي محور واحد فقط عندها يأخذ الرموز الآتية: ... $(\bar{1}10),(011),(101),(110)$.

4- إذا وازى الوجه أحد المحاور ،وتقاطع مع المحورين الآخرين بمقتطعات مختلفة يأخذ الرموز الآتية: ... $(hk\bar{o}),(hol),(okL),(hko)$.

5- إذا تقاطع الوجه القياسي مع المحاور الثلاثة بمقتطعات مختلفة، ويتقاطع مع اثنين منها بشكل متساوٍ تكون رموزه $(hhL),(hkh),(hkk),(h\bar{k}h)$ حيث: $h \succ L$ أو $h \prec L$.

6- إذا قطع الوجه القياسي المحاور البلورية بمقتطعات مختلفة أخذ وضعاً عاماً تكون رموزه وفق الآتي: .... $(hk\bar{L}),(\bar{h}kL),(\bar{h}kL),(hkL)$.

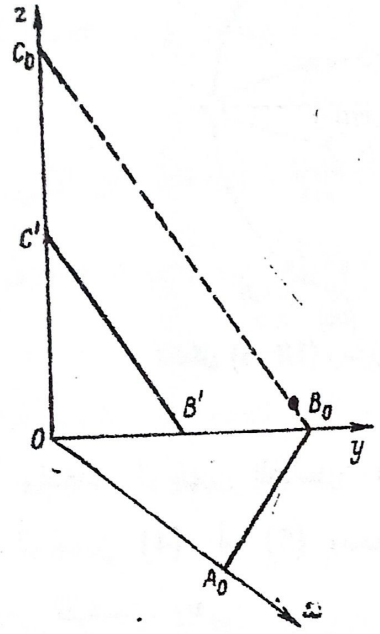
6-5- أمثلة على تعين رموز الوجوه البلورية:

يبين الشكل (6-11) مسقط بنية ثنائي الهرم المعيني، حيث تتقاطع وجوه الهرم مع جميع المحاور البلورية بشكل متساوٍ، وبذلك يمكن أن نعد هذا الوجه الذي يتقاطع مع المحاور البلورية في هذه الحالة وجهاً قياسياً، ومن الشكل يتضح أن رموز الوجوه السفلى تنطبق على رموز الوجوه العليا.

ويوضح الشكل (6-12) البنية البلورية للفئة الثلاثية الميل التي يتشكل فيها ثلاثة أشكال بسيطة (بيناكويد)، والمطلوب: تعين رموز وجوه الأشكال البسيطة (بيناكويد). نمدد المحاور البلورية بحيث تكون موازية للأضلاع، ولتحديد الوجه القياسي في فئة ثلاثية الميل غير ممكن وفق المحاور البلورية، ولكن لتحديد الوجه القياسي نفترض أن وجهاً يتقاطع مع المحور oz بعدة مقتطعات، ولتكن (n)، و تكون موازية للمحورين $(oy،ox)$، أي لا يقطع هذان الوجهان المحورين $(oy،ox)$، وتكون قرائنه ∞,∞,n ، وبأخذ مقلوب العلاقة النسبية نحصل على $\frac{1}{n}:0:0=1:0:0$، ويكون رمز الوجه هو (001)، وبالطريقة نفسها نحصل على رموز الوجوه الأخرى، وهي كالآتي: $(\bar{1}00),(100),(0\bar{1}0),(010),(00\bar{1})$.

6-6- الوجهان القياسيان في البلورات:

ينعدم الوجه القياسي في بعض الأشكال البلورية ،ولتحديد الوجه القياسي في مثل هذه الأشكال البلورية يمكن أن نأخذ وجهين قياسيين يكون لهما أحد الرمزين(110)، أو (101)، أو (011)، ويُسميان في هذه الحالة بالوجهين القياسيين بحيث يتقاطع كل منهما مع محورين، ويتقاطعان بعضهما مع بعض على المحاور البلورية الثلاثة، (oz،oy،ox) الموضحة على الشكل (6-17).



الشكل(6-17)الوجهان القياسيان في البلورات

يتقاطع الوجه البلوري الأول مع المحورين الأول والثاني بينما يكون موازياً للمحور الثالث. ويوازي الوجه الثاني المحور الأول، ويتقاطع مع المحورين الثاني والثالث في النقطتين B' و C'، ويمكن استعمال هذين الوجهين كوجهين قياسيين، إن المسافات التي يقتطعها الوجه الأول هي OB_0, OA_0 على

المحورين (oy،ox)، ويمكن أن نعده وجهاً قياسياً، ومن أجل الحصول على الوجه القياسي الثاني يجب أن يقطع المحور الثالث، والفكرة الأساسية في هذه الحالة أنه يجب أن ننقل هذا الوجه موازياً لنفسه حتى يتقاطع مع المحور الثاني بالاقتطاع OB_0 الذي استُعمل كمقتطع للوجه القياسي الأول، ومن ثم يُنقل الوجه الثاني ليقطع المحور الثالث بالنقطة C_0، ويكون الاقتطاع على المحور الثالث هو OC_0، وتكون قرائن كلا الوجهين 0,1,1، وبالنتيجة يقطع الوجهان المحاور البلورية الثلاثة، كما هو واضح بالشكل(6-17).

6-7- القرينة الرابعة في الفئتين البلوريتين السداسية ،والثلاثية:

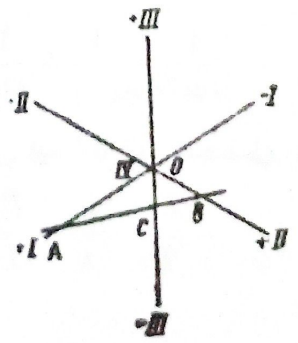
يبين الشكل (6-19) أن الوجه القياسي يتقاطع مع المستوي الأفقي بالخط AB ،ويتقاطع مع المحاور الثلاثة بالنقاط $(1,1,1)$، ومع المحور oy بالنقطة $\left(-\frac{1}{2}\right)$ ،ويتقاطع الوجه القياسي مع المحاور الثلاثة (oz،oy،ox) بشكل مثلث قائم الزاوية، فيه $A\hat{Z}K = 30^\circ$ ، و $ZK = \frac{AZ}{2}$ ، فيكون مقلوب العلاقة النسبية للمقتطعات التي يقتطعها الوجه القياسي من المحاور هي $1:1:\bar{2}:1$، ويكون رمز الوجه $(11\bar{2}1)$، ويمكن أن يكون رمز الوجه القياسي $(11\bar{2}1)$، أو $(10\bar{1}1)$.

وتتحدد العلاقة بين رموز الفئتين السداسية، والثلاثية $(hk\bar{i}L)$ وفق الآتي :

أن مجموع قرينتين من قرائنهما الثلاث الأولى من رموزها تساوي القرينة الثالثة ، التي هي دوماً الصفر، مثال:

ليكن لدينا الرمز $(20\bar{2}1)$، أي أن $0 = 2 - 2$، والصفر هو القرينة الثانية في هذه الحالة. أي تكون القرينة الثالثة هي مجموع القرينتين الأوليتين ،وإنما بإشارة معاكسه ،ونبرهن صحة ذلك كالآتي:

بفرض لدينا وجهاً في بلورة من بلورات الفئة الثلاثية ،أو السداسية ،ورموزه هي $(P_1P_2P_3P_4)$. ولنبرهن أن $P_1 + P_2 + P_3 = 0$.



الشكل (6-19) تكون حصيلة القيم الجبرية للقرائن الثلاث الأول تساوي الصفر في بلورات فئتي التناظر السداسية والثلاثية

نلاحظ من الشكل (6-19) أن الوجه AB يقطع المحاور الثلاثة الأفقية بالمسافات OC,OB,OA، والمسافة على المحور الثالث سالبة، وبما أن المسافات القياسية متساوية على المحاور الثلاثة نحصل على مقلوب النسبة المضاعفة لهذه المقتطعات وفق الآتي:

$$P_1 : P_2 : P_3 = \frac{1}{OA} : \frac{1}{OB} : -\frac{1}{OC}$$

ومنه:

$$P_1 = \frac{k}{OA}, P_2 = \frac{k}{OB}, P_3 = -\frac{k}{OC}$$

حيث k العامل النسبي:

$$\frac{1}{OA} = \frac{P_1}{k}, \frac{1}{OB} = \frac{P_2}{k}, \frac{1}{OC} = -\frac{P_3}{k}$$

من المثلثات:

$$\overset{\Delta}{AOB} = \overset{\Delta}{BOC} + \overset{\Delta}{AOC}$$

أي:

$$\overset{\Delta}{AOB} = \frac{1}{2} OA.OB \sin 120^\circ = \frac{1}{2} OA.OB \sin 60^\circ$$

$$\overset{\Delta}{BOC} = \frac{1}{2} OB.OC \sin 60^\circ$$

$$\overset{\Delta}{AOC} = \frac{1}{2} OA.OC \sin 60^\circ$$

$$OA.OB = OB.OC + OA.OC$$

نقسم طرفي المعادلة الأخيرة على الجداء $(OA.OB.OC)$ فنحصل على العلاقة الآتية:

$$\frac{1}{OC} = \frac{1}{OA} + \frac{1}{OB}$$

نستبدل قيم OC,OB,OA من قيم القرائن فنحصل على العلاقة الآتية:

$$-\frac{P_3}{k} = \frac{P_1}{k} + \frac{P_2}{k}$$

أي:

$$-P_3 = P_1 + P_2$$

وبالنتيجة نحصل على العلاقة: $P_1 + P_2 + P_3 = 0$ التي تعبر عن مجموع القرائن في البنيتين السداسية والثلاثية تساوي الصفر.