



كلية العلوم

القسم : الفيزياء

السنة : الثالثة

المادة : حالة صلبة ١

المحاضرة : الخامسة / نظري /

{{ مكتبة A to Z }}

مكتبة A to Z : Facebook Group

كلية العلوم ، كلية الصيدلة ، الهندسة التقنية

8

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

6-3 التركيب الذري للبلورات ATOMIC STRUCTURE OF CRYSTALS

تتأثر الخصائص الفيزيائية للمواد البلورية بالشكل الهندسي للبلورة وكما تتأثر أيضا بالتركيب الذري لها. يقصد بالتركيب الذري للبلورة شكل ترتيب الذرات فيها بالإضافة إلى عدد الذرات في وحدة الخلية والتي تؤثر بشكل كبير في حجم وكثافة الخلية وبالتالي معظم الخصائص البلورية.

1-6-3 عدد الذرات في وحدة الخلية

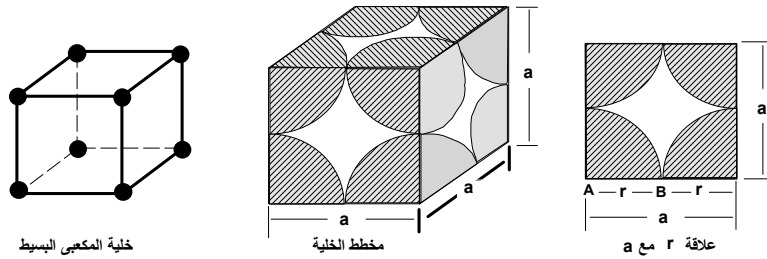
لتعيين عدد الذرات في وحدة الخلية يجب معرفة الشكل الهندسي للخلية ونصف القطر الذري لها. يعرف نصف القطر الذري على أنه نصف المسافة بين أقرب ذرتين متجاورتين في بلورة عنصر نقي مع مراعاة أن أقرب ذرتين متجاورتين يجب أن تلامس كل منهما الأخرى، كما سنبين لاحقا.

تأتي أهمية دراسة شبكات المكعبى بوجه عام والمتمركز الجسم والأوجه بوجه خاص لأن أغلب عناصر الجدول الدوري تتبلور مكونة شبكة بلورية مكعبة، ولهذا سنولى هذه الفصيلة مزيدا من الاهتمام في هذا الفصل.

أ- المكعبى البسيط SIMPLE CUBIC, SC

في حالة المكعبى البسيط، SC، توجد ذرة عند كل ركن من أركان الخلية الثمانية وتشارك هذه الذرة ثمانية خلايا مجاورة. يكون نصيب كل خلية من هذه الذرة هو $\frac{1}{8}$ ذرة.

وحيث أن لكل خلية 8 أركان فإن عدد الذرات في وحدة الخلية في هذه الحالة هو $1 = 8 \times \frac{1}{8}$ أي ذرة واحدة. ويمكن حساب نصف قطر الذرة في المكعب البسيط، بالرجوع إلى الشكل 8-3 كالآتي. طبقا للتعريف، تكون المسافة AB هي نصف القطر الذري، ومن الشكل يتضح أن $r = \frac{a}{2}$ ، حيث a هو طول ضلع الخلية المكعبة.



الشكل 8-3 شكل الذرات في خلية المكعب البسيط

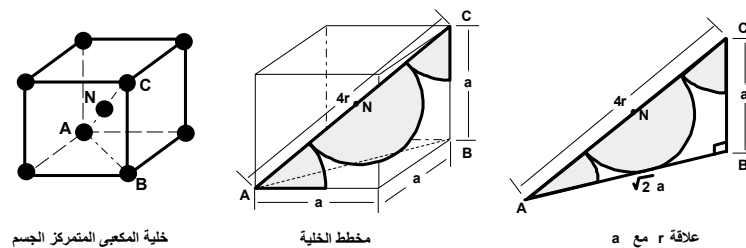
BODY CANTERED CUBIC, BCC

ب- المكعب المتمركز الجسم

في هذه الحالة، بالإضافة إلى الثماني ذرات الموجودة عند الأركان توجد ذرة كاملة عند مركز الخلية وعلى ذلك يكون عدد الذرات في وحدة الخلية هو $2 = 1 + 8 \times \frac{1}{8}$ ، أي ذرتين فقط. ولحساب نصف القطر الذري في هذه الحالة نشير إلى الشكل 9-3. يتضح من الشكل أن الذرتين C و N هما أقرب الجيران كل منهما للآخر. ومن هندسة

الشكل نجد أن $r = \frac{CN}{2}$ وحيث أن

$$AC = \sqrt{AB^2 + BC^2} = \sqrt{(\sqrt{2}a)^2 + a^2} = \sqrt{3}a$$



الشكل 9-3 شكل الذرات في خلية المكعب المتمركز الجسم

ويكون نصف القطر الذري هو

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

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

أو

FACE CENTERED CUBIC, FCC

ج- المكعبى المتمركز الأوجه

في المكعبى المتمركز الأوجه توجد ذرة واحدة في مركز كل وجه وتكون هذه الذرة مشاركة بين خليتين متجاورتين، هذا بالإضافة إلى الثماني ذرات الموجودة عند الأركان. مما سبق يتضح أن عدد الذرات في وحدة الخلية في هذه الحالة هو $4 = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2}$ ، أي أربع ذرات.

من الشكل 3-10 يمكن تعيين العلاقة بين نصف القطر الذري و أبعاد الخلية كما

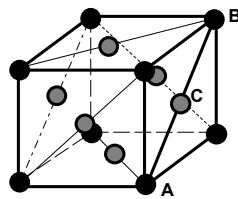
يلى: يتضح أن الذرتين A و C هما أقرب الجيران كل منهما للآخر وبالتالي يكون نصف

القطر الذري هو

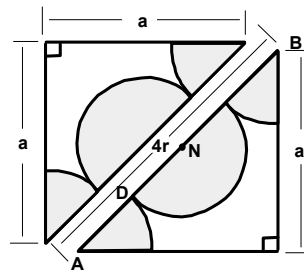
$$r = AD = \frac{AC}{2} = \frac{AB}{4}$$

$$\therefore AB = \sqrt{2} a$$

$$\therefore r = \frac{\sqrt{2} a}{4} \quad \& \quad a = \frac{4r}{\sqrt{2}}$$



خلية المكعبى المتمركز الوجه



علاقة r مع a

الشكل 3-10 شكل الذرات في المكعبى المتمركز الأوجه

من الشكل 3-10 يتضح أنّ القطر AB يساوي أربعة أمثال نصف القطر الذرى.

من الدراسة السابقة (في الباب السابق)، نلاحظ أن الخلايا الأولية لشبكات

المكعبى المتمركزة الأوجه والمتمركزة الجسم ليس لها تماثل (تتناظر) المكعب أو أن

تماثلها أقل من تماثل المكعب. وطالما أن تماثل المكعب هو نفس تماثل الشبكة المكعبة

سواء كانت متمركزة الأوجه أو الجسم فإنه عادة يتم التعامل مع خلايا الوحدة غير الأولية

لأنها مكعبة الشكل. في الجدول 3-1 نوجز بعض الخصائص المهمة للشبكة المكعبة.

الجدول 3-1 بعض خصائص الشبكة المكعبة

الخصائص	المكعبى البسيط	المكعبى المتمركز الجسم	المكعبى المتمركز الأوجه
حجم خلية الوحدة	a^3	a^3	a^3
حجم الخلية الأولية	a^3	$\frac{a^3}{2}$	$\frac{a^3}{4}$
عدد العقد لكل وحدة خلية	1	2	4
عدد العقد لوحدة الحجم	$\frac{1}{a^3}$	$\frac{2}{a^3}$	$\frac{4}{a^3}$
العدد التناسقى	6	8	12
عدد العقد المجاورة للجوار المباشر	12	6	6
المسافة بين أقرب عقدتين	A	$\frac{\sqrt{3}}{2} a = 0.86 a$	$\frac{a}{\sqrt{2}} = 0.7a$

مثال 3-9

إذا كان الوزن الجزيئ للحديد هو ($W = 55.85$) وكثافته هي 7.86 جم/سم³ أوجد

طول ضلع الخلية إذا كان الحديد يتواجد في صورة مكعبى متمركز الجسم. (عدد

أفوجادرو $N = 6.02 \times 10^{23}$ /gm/mole).

الحل

يكون عدد ذرات الحديد لوحدة الخلية هو $n = 8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$ ومن العلاقة

حيث ρ هو الكثافة و W هو الوزن الجزيئي و n هو عدد الذرات لوحدة الخلية $a^3 \rho = \frac{WA}{N}$

و a هو طول ضلع الخلية نحصل على،

$$a^3 \times 7.86 = \frac{2 \times 55.85 W}{6.02 \times 10^{23}}$$

$$a = 2.87 \times 10^{-8} \text{ cm} = 2.87 \text{ \AA}$$

مثال 3-10

أحسب طول ضلع خلية الوحدة لكل من :

(أ) شبكة الفضة المتمركز الأوجه إذا كان نصف قطر ذرة الفضة هو 1.441 أنجستروم.

(ب) شبكة النحاس المتمركز الأوجه إذا كان نصف قطر ذرة النحاس هو 1.276 أنجستروم.

أنجستروم.

الحل

(أ) في حالة الفضة يكون

$$a = \frac{4r}{\sqrt{2}} = \frac{4 \times 1.441}{\sqrt{2}} = 3.078 \text{ \AA}$$

(ب) في حالة النحاس يكون

$$a = \frac{4r}{\sqrt{2}} = \frac{4 \times 1.276}{\sqrt{2}} = 3.08 \text{ \AA}$$

3-6-2 الكثافة الذرية لمستويات البلورة ATOMIC DENSITY OF CRYSTAL PLANES

لدراسة الخصائص الميكانيكية (وخاصة السلوك اللدن) لبلورات المعادن، يجب معرفة كثافة الذرات الواقعة على المستويات البلورية المختلفة وذلك لتحديد إمكانية انزلاق المستويات على بعضها بعض من عدمه. تعرف الكثافة الذرية للمستوى البلوري بأنها عدد الذرات لوحدة المساحات في مستوى بلوري معين. يمكن توضيح كيفية حساب الكثافة الذرية للمستوى بواسطة الأمثلة الآتية:

مثال 3-11

في بلورة الرصاص، أحسب الكثافة الذرية للمستويات: أ- (100) ، ب- (111) و ج- (110)، إذا علمت أن الرصاص يتبلور على شكل مكعبي متركز الأوجه وله $a = 4.93 \text{ \AA}$.

الحل

(أ) في المستوى (100) يكون توزيع الذرات كما هو مبين بالشكل 3-11 (أ). يحتوى هذا المستوى على ذرتين اثنتين $\left(2 = 1 + 4 \times \frac{1}{4}\right)$ وبالتالي تكون الكثافة الذرية لهذا المستوى ، $\rho_{(100)}$ ، بأنها تساوى عدد الذرات مقسوم على المساحة، أي

$$\rho_{(100)} = \frac{2 \text{ atoms}}{(a \text{ mm})^2} = \frac{2 \text{ atoms}}{(4.93 \times 10^{-7})^2 \text{ mm}^2} = 8.23 \times 10^{12} \text{ atoms/mm}^2$$

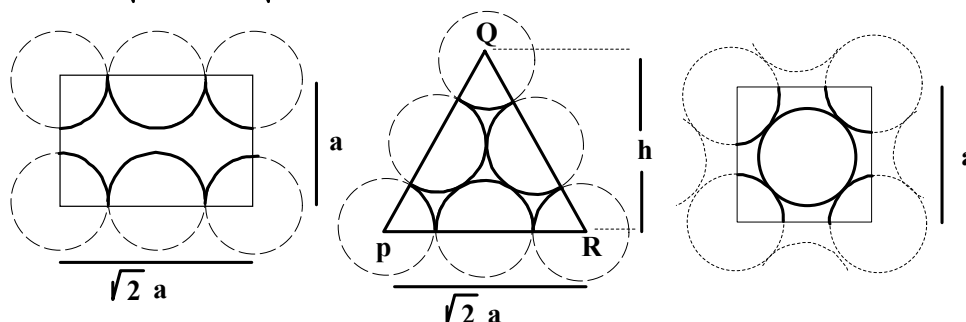
(ب) في المستوى (111) يكون توزيع الذرات كما هو مبين بالشكل 3-11 (ب). يحتوى هذا

المستوى على ذرتين اثنتين $\left(2 = 3 \times \frac{1}{6} + 3 \times \frac{1}{2}\right)$ لكل مثلث PRQ، ارتفاعه $h = \sqrt{2} a \cos 30^\circ$

وطول قاعدته تساوى $\sqrt{2} a$ وبالتالي تكون مساحته تساوى $\frac{1}{2} \times \sqrt{2} a \times \sqrt{2} a \times \cos 30^\circ = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2$

و تكون الكثافة الذرية لهذا المستوى تساوى

$$\rho_{(111)} = \frac{4 \text{ atoms}}{\sqrt{3} a^2} = \frac{4 \text{ atoms}}{\sqrt{3} (4.93 \times 10^{-7})^2 \text{ mm}^2} = 9.5 \times 10^{12} \text{ atoms/mm}^2$$



ج- المستوى (110)

ب- المستوى (111)

أ- المستوى (100)

الشكل 3-11 توزيع الذرات في المستويات المطلوبة.

(ج) فى المستوى (110) يكون توزيع الذرات كما هو مبين بالشكل 3-11 (ج). يحتوى هذا

المستوى على ذرتين اثنتين $\left(2 = 4 \times \frac{1}{4} + 2 \times \frac{1}{2}\right)$ لكل وجه من أوجه خلية الوحدة وبالتالي

تكون الكثافة الذرية لهذا المستوى هي

$$\rho_{(110)} = \frac{2 \text{ atoms}}{\sqrt{2} a^2 \text{ mm}^2} = \frac{2 \text{ atoms}}{\sqrt{2} (4.93 \times 10^{-7})^2 \text{ mm}^2} .$$

$$= 5.82 \times 10^{12} \text{ atoms/mm}^2$$

3-6-3 عدد التناسق للذرة ATOMIC COORDINATION NUMBER

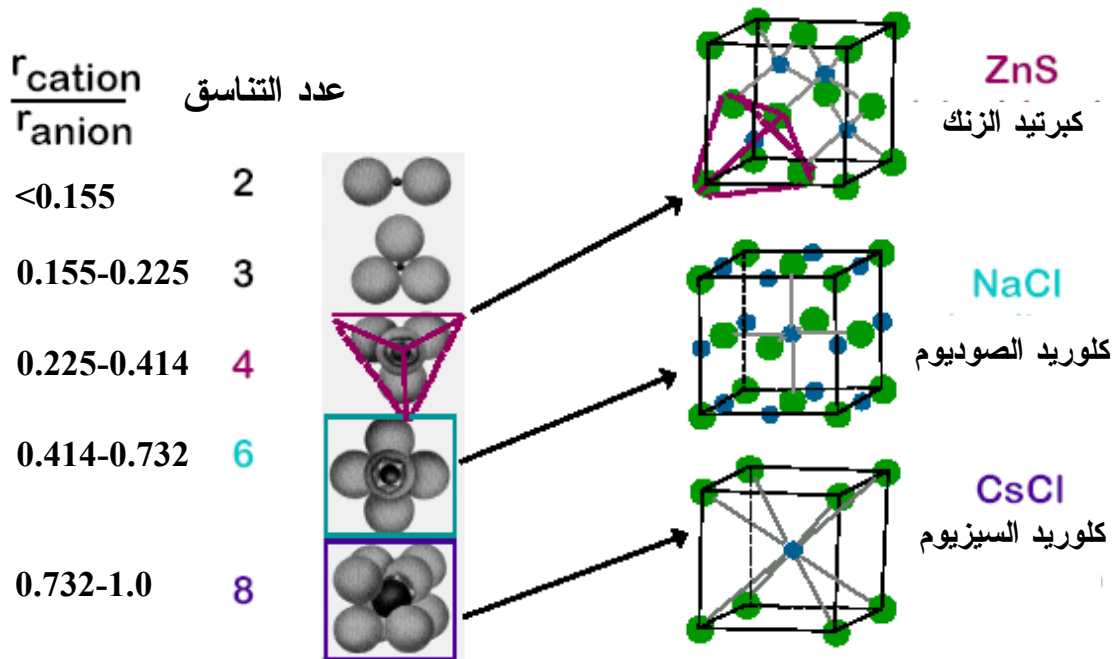
يمثل عدد التناسق لعقدة فى الشبكة (الذرة) مدى قدرة تراص الذرات فى الشبكة

البلورية ويعرف بأنه عدد أقرب العقد فى الشبكة بالنسبة لعقدة معينة، أي أنه عدد أقرب

العقد المجاورة لتلك العقدة. وحيث أن العقد فى الشبكة البرافية متماثلة من ناحية التوزيع

الفضائي مع ما يحيط بكل عقدة من بقية العقد فإن عدد التناسق يكون هو نفسه لكل عقد شبكة معينة أو يكون خاصية من خصائص تلك الشبكة. في المكعب البسيط نجد أن عدد التناسق هو ستة، كما يتبين في الشكل 3-12. كذلك، يكون عدد التناسق في المكعب المتمركز الجسم هو 8 ، بينما يكون 12 في المكعب المتمركز الأوجه.

نعلم أن المركبات الأيونية تتركب من ايونات مختلفة حيث يرتبط كل كاتيون مع أنيون وهكذا. يتكرر هذا الشكل من الارتباط وتتكون بلورات هذه المواد. لذلك فإن للمركبات الأيونية عدنان للتناسق، يكون العدد الأول عدد التناسق للكاتيونات ويكون الثاني عدد التناسق للأنيونات. وبشكل عام، يزداد عدد التناسق في المركبات الأيونية مع زيادة النسبة بين نصف قطر الكاتيون ونصف قطر الأنيون $(\frac{r_{cation}}{r_{anion}})$ ، بمعنى كم من الأنيونات يمكنك ترتيبها حول الكاتيون. يبين الشكل 3-12 المفهوم السابق وبعض أمثلة التركيب.



الشكل 3-12 بعض الأمثلة على العدد التناسق

مثال 3-12

بناء على نصف القطر الأيوني المسجل في الجدول التالي، ما التركيب البلوري

الذي تتوقعه لأكسيد الحديد، FeO؟

نصف القطر الأيوني للأنيونات $a_{anion}(nm)$		نصف القطر الأيوني للكاتيونات $r_{cation}(nm)$	
0.140	O^{2-}	0.053	Al^{3+}
0.181	Cl^{-}	0.077	Fe^{2+}
0.133	F^{-}	0.069	Fe^{3+}
--	---	0.100	Ca^{2+}

الحل

بالتعويض عن أنصاف الأقطار وتعيين النسبة نجد

$$\frac{r_{cation}}{r_{anion}} = \frac{r_{Fe}}{r_O} = \frac{0.077}{0.140} = 0.55$$

بناء على النسب المعطاة في الشكل 3-12 يكون العدد التناسقي = 6 ويكون

التركيب البلوري مماثل لتركيب بلورة كلوريد الصوديوم، أي مكعبي متمركز الوجه.

مثال 3-13

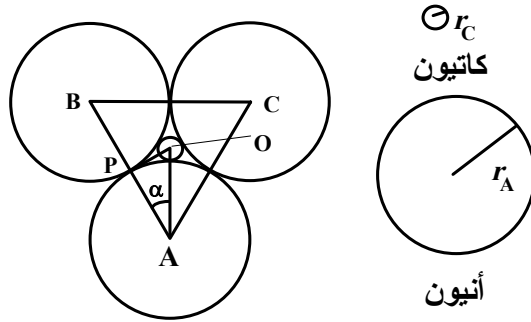
اثبت أن أقل نسبة بين نصف قطر الكاتيون ونصف قطر الأنيون للعدد التناسقي

3 هي 0.155.

الحل

بفرض أن نصف قطر الكاتيون هو r_c و نصف قطر الأنيون هو r_a كما يبين

الشكل 3-13



الشكل 3-13

$$\therefore \overline{AP} = r_A \text{ \& } \overline{AO} = r_A + r_C$$

$$\therefore \frac{\overline{AP}}{\overline{AO}} = \frac{r_A}{r_A + r_C} = \cos \alpha = \cos 30^\circ = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

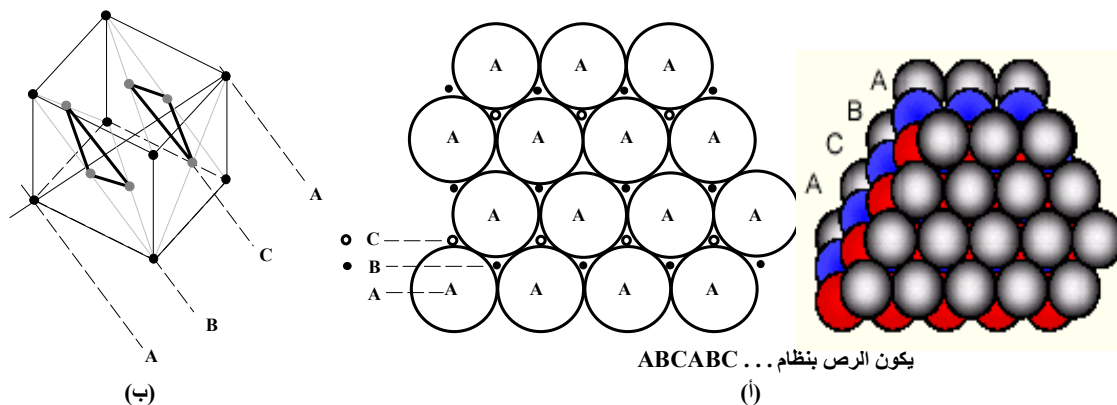
$$\therefore \frac{r_C}{r_A} = \frac{1 - \frac{\sqrt{3}}{2}}{\frac{\sqrt{3}}{2}} = 0.155$$

7-3 العبوة المتراسة المكعبة والسداسية CUBIC AND HEXAGONAL CLOSE-PACKED

لدراسة التركيب البلوري للمواد يتم استبدال الذرات أو المجموعات الذرية بنقط فراغية أو عقد ليتكون هيكل نظري يعتبر بمثابة الشبكة البرافية. الفرق بين هذه الشبكة النظرية والتركيب البلوري الحقيقي هو أن الذرات لا تمثل نقط منفصلة ولكنها تكون مرتبة بالشكل الذي يملأ فراغ البلورة كما إنها تكون قريبة بعضها من بعض بحيث تبدو كأنها متلامسة. سندرس الآن نموذجاً نظرياً للتركيب البلوري وسنفترض أن الذرات كرات مصمتة غير قابلة للانضغاط.

عند تعبئة كرات متشابهة (لها نصف القطر r) في وعاء كبير، فإن مراكز هذه

الكرات تكون بمثابة نقط فراغية وتكون شبكة، ولكي يكون الرص جيدا يجب أن يكون الفراغ المتروك (الحجم الخالي) بين الكرات أقل ما يمكن، نرتب في البداية مجموعة من الكرات لتكون طبقة متراسة نسميها الطبقة A، كما بالشكل 3-14(أ)، بحيث تتماس كل كرة مع ستة كرات مجاورة. نقوم بتعبئة طبقة ثانية من الكرات (B) فوق الطبقة الأولى. لاحظ أن كل كرة من الطبقة B ستقع في الفجوات بين الكرات A وتتماس مع ثلاث كرات من الطبقة A. عند وضع الطبقة الثالثة على الطبقة الثانية هناك احتمالين لترتيب الطبقة الثالثة:



الشكل 3-14

الأول : أن تشغل كرات الطبقة C (التي تقع فوق كرات الطبقة B) موقعا يقع مباشرة فوق الفجوات (بين كرات الطبقة A). تقع كرات الطبقة الرابعة تماما فوق كرات الطبقة A، وهكذا نحصل على توزيع للكرات على الصورة (ABCABC...) الذي يكون وحدة خلية مكعبة متمركزة الأوجه. تشغل طبقات الكرات المستويات العمودية على القطر الجسمي للمكعب (الاتجاه (111))، كما هو مبين بالشكل 3-14(ب). تسمى هذه الخلية المكعبة بالعبوة المكعبة المتلاصقة الرص.

تعرف كثافة الرص (Packing Density, PD) بأنها النسبة بين الحجم المشغول

بالذرات إلى حجم الخلية. في المكعبى المتمركز الأوجه تحتوى الخلية على أربع ذرات

$(4 = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2})$ ويكون نصف القطر الذرى هو $\frac{\sqrt{2}}{4} a$ ، وحيث أن حجم الذرة هو

$\frac{4}{3}\pi r^3$ فإن الحجم الفعلي للذرات الأربعة يكون $4 \times \frac{4}{3}\pi (\frac{\sqrt{2}}{4} a)^3 = 0.74 a^3$ بناء على ما

سبق، نجد أن كثافة الرص في المكعبى المتمركز الأوجه هي،

$$PD = \frac{0.74 a^3}{a^3} = 0.74 \quad \text{or} \quad 74\%$$

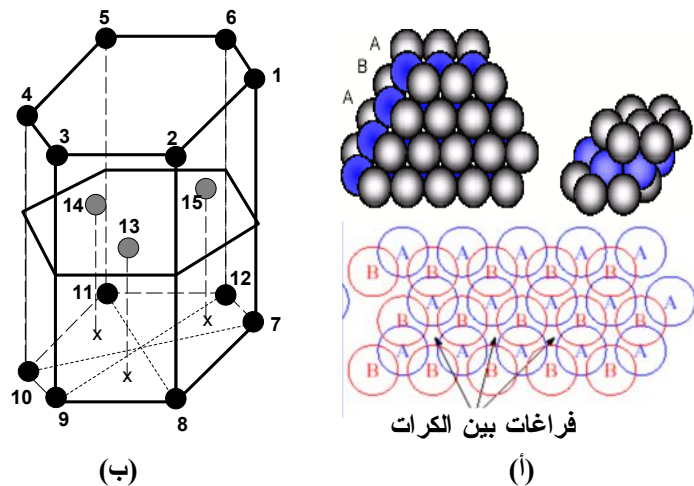
الثاني: أن تشغل كرات الطبقة الثالثة (C) مكانا يقع تماما فوق كرات الطبقة A،

ولذلك تسمى الطبقة الثالثة A أيضا. نلاحظ في هذه الحالة وجود فراغات بين الكرات،

كما يتبين من الشكل 3-15 (أ). بهذا الأسلوب نحصل على توزيع للكرات على الصورة

(ABABAB...) وهذا النوع من الرص يكون وحدة خلية سداسية الشكل، كما هو مبين

بالشكل 3-15 (ب).



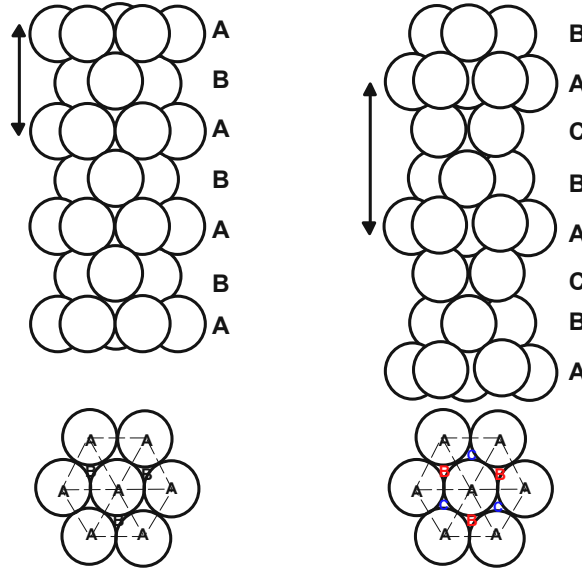
الشكل 3-15

تسمى هذه الخلية المتكونة بهذه الصورة بالعبوة السداسية المتلاصقة الرص.

تحتوى هذه العبوة على أربع ذرات $(4 = 12 \times \frac{1}{12} + 3 \times 1)$ وتكون كثافة الرص لهذه الخلية

هي نفسها كما في الحالة الأولى وتساوى 74 % تقريبا. يبين الشكل 3-16 مقارنة بين

تركيب المكعب المتراصق الرص والسداسي المتراصق الرص.



الشكل 3-16 مقارنة بين تركيب المكعب المتراصق الرص والسداسي المتراصق الرص.

ولاستنتاج الخلية الأولية في السداسي نتبع الأسلوب التالي: من نموذج رص

الكرات نجد العلاقة بين ارتفاع الخلية السداسية، c ، (المسافة بين أقرب طبقتين متشابهتين)

وطول ضلع القاعدة، a ، تكون على النحو،

$$c = \left(\frac{8}{3}\right)^{\frac{1}{2}} a = 1.633 a \quad 12-3$$

نلاحظ أن الخلية السداسية تمثل ثلاث خلايا وحدة غير أولية كل منهم عبارة عن

الجزء المظلل بالشكل 3-17(أ). تكون خلية الوحدة التي تم اختيارها متشابهة مع الشبكة

السداسية، من ناحية التناظر. بالرجوع إلى الشكل، نجد أن شبكة التركيب السداسية لا

تمثل شبكة برافية لسبيين: أولهما، لأنها تختلف عن بعضها من ناحية التوزيع الفضائي

لما يحيط بكل عقدة من بقية العقد. والسبب الثاني، لأنه لا يمكن ضبط المتجه الانتقالي الأصلي (الذي يمثل شبكة السداسي) بالشكل $\vec{R} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}$ الذي يمكنه أن يعين كل عقد الشبكة. ولكن يمكن أن نعبر عن شبكة السداسي كشبكة برافية باختيار قاعدة (أساس) جديدة بحيث تتكون كل قاعدة من عقدتين. لتحقيق ذلك، نأخذ المتجهات $\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$ كمتجهات أساسية بحيث تكون الزاوية بين $\vec{a}$ و $\vec{b}$ تساوى 120° وأطوالها هي a و b و c على وجه الترتيب، بحيث $a = b \neq c$ والمتجه $\vec{c}$ عمودي على المتجهين الآخرين، كما هو موضح بالشكل 17-3 (ب). وبناء على الافتراض السابق فإن القاعدة تتكون من العقدتين (000) و $\left(\frac{2}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{3}\right)$. نجد الشبكة المتكونة بواسطة هذه القواعد العقدية تكون شبكة سداسي برافية وهي عبارة عن شبكة خليتها الأولية سداسي بسيط، كما هو موضح بالشكل 17-3 (ب).

يمكن تحليل المتجهات الأساسية $\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$ بدلالة الإحداثيات الكارتيزية الموضحة بالشكل 17-3 (أ). ويمكن الحصول على متجهات الأساس الجديدة التي تصف الخلية الأولية كالآتي،

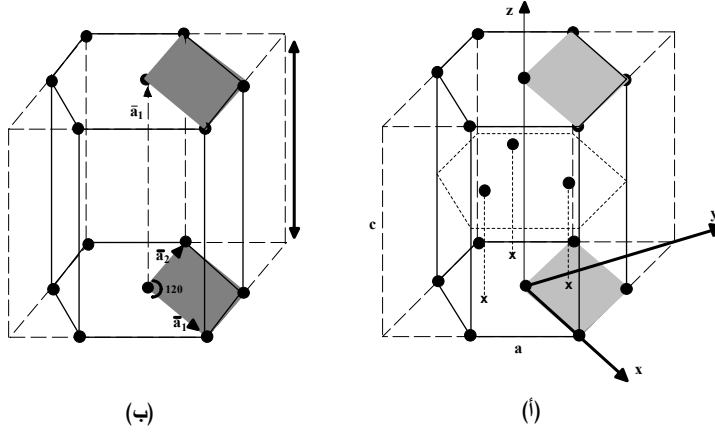
$$\vec{a}_1 = a\vec{i}, \quad \vec{a}_2 = \frac{\sqrt{3}a}{2}\vec{j} - \frac{a}{2}\vec{i}, \quad \vec{a}_3 = c\vec{k} \quad 13-3$$

ومن المعادلة 13-3 فإن حجم الخلية الأولية يساوي

$$v = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)| = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c = \sqrt{2} a^3 \quad 14-3$$

أن الأسلوبين الذين أتبعنا في الرص في هذه الدراسة ليس الأسلوبين الوحيديين للتعبة، بل توجد أساليب أخرى ينتج عن احدهم شبكة مكعبة بسيطة ذات كثافة تعبئة

كثافة رص) تساوى 0.52 أو شبكة مكعبة متمركزة الجسم ذات كثافة تعبئة 0.68 وهذا يفسر كثافة الرص للمكعب المتمركز الأوجه الكبيرة (0.74).



الشكل 3-16

مثال 3-14

أحسب كثافة الرص في حالة المكعبى البسيط.

الحل

بما أن عدد الذرات لوحدة الخلية في المكعبى البسيط يساوى ذرة واحدة وحجم

الذرة هو $\frac{4}{3}\pi r^3$ ، حيث r هو نصف القطر الذرى ويساوى $\frac{a}{2}$ ، كما هو مبين بالشكل 3-

18. فإن حجم الذرة يكون،

$$v = \frac{4}{3}\pi \left(\frac{a}{2}\right)^3 = \frac{\pi a^3}{6}$$

وحيث أن حجم وحدة الخلية المكعبة هو $V = a^3$ فإن كثافة الرص، PD، تكون

$$PD = \frac{v}{V} = \frac{\pi a^3}{6a^3} = \frac{\pi}{6} = 0.52 = 52\%$$