كلية العلوم

القسم : الفيزياء

السنة : الثالثة

المادة : حالة صلبة1

المحاضرة:الاولى/نظري/

{{ مكتبة A to Z }}

Facebook Group : مكتبة A to Z

الباب الثاني

التركيب البلوري

Crystalline Structure

المحتوى

2-1 الانتظام المحدود والانتظام الممتد للذرات. 2-2 الحالة المتبلورة.

2-3 تعريفات أساسية. 2-4 الأنظمة البلورية السبعة.

2-5 خلية فيجنر-زايتس الأولية. 2-6 عناصر التماثل في البلورات.

2-7 أنظمة المستويات المهمة في فصيلة المكعبى. 2-8 أدلة ميلر للمستويات البلورية.

الأهداف

بعد استكمال دراسة هذا الباب يجب أن يكون الدارس قادرا على:

- تعريف والمقارنة بين المادة غير المتبلورة والمادة المتبلورة.
- التمييز بين الشبيكة البرافية والشبيكة غير البرافية.
- التفريق بين الخلية الأولية وغير الأولية.
- تقسيم الأنظمة البلورات إلى سبعة أنظمة تتكون من أربع عشرة شبيكة برافية مختلفة.
- تعريف وتعيين خلية فيجنر-زايتس الأولية.
- تعريف عناصر التماثل الداخلية والخارجية في البلورة.
- تحديد مجموعات المستويات المهمة في فصيلة المكعبى.
- وصف المستويات البلورية بواسطة أدلة ميلر.

تقديم

كما ذكرنا فى الباب السابق، يمكن تصنيف المواد الصلبة إلى نوعين: مواد صلبة متبلورة كما هو الحال في المعادن وأغلب المركبات الكيميائية والسبائك ومواد صلبة غير متبلورة كالزجاج والشمع. كما أن بعض المواد السائلة والغازية تتحول إلى مواد متبلورة عند تجمدها مثل الثلج والغازات الخاملة.

تتركب المواد الصلبة من وحدات أساسية محددة هي الذرات أو المجموعات الذرية. تتوزع هذه الذرات أو هذه المجموعات الذرية في التركيب البنائى للمواد غير المتبلورة بشكل عشوائي، بينما تكون الذرات أو المجموعات الذرية في المواد المتبلورة موزعة بشكل منتظم. يشار إلى كل مجموعة من الذرات أو المجموعات الذرية المرتبة في المواد المتبلورة بالبلورة والتي يمكن أن توجد على شكل منفصل. تتميز البلورات بأن لكل مها شكل هندسي منتظم وأسطح متشابهة ومتوازية وملساء. يوجد العديد من أنواع التراكيب البلورية يعتمد كل منها على هندسة الترتيب وانتظام الذرات في كل البلورة وهذا يؤثر بشكل كبير في الخصائص الفيزيقية المختلفة للجسم الصلب.

سنتعرف في هذا الباب، بشكل مفصل، على أنواع الانتظام الذرى فى المواد المتبلورة كما سنتعرف على معنى التركيب البلوري وعلى الأنظمة البلورية المختلفة وعناصر التماثل فى التركيب البلوري وبعض التعبيرات الرياضية التي تستخدم في وصف هذه التراكيب البلورية. هذا بالاضافة الى دراسة تعريف وكيفية تحديد خلية فيجنر-زايتس الأولية ووصف المستويات البلورية بواسطة أدلة ميلر و تحديد مجموعات المستويات المهمة في فصيلة المكعبى.

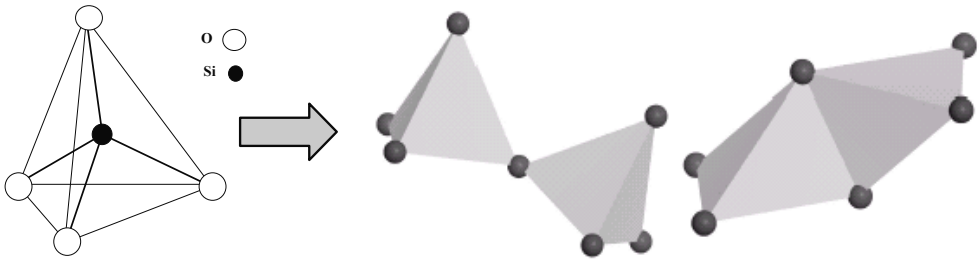
2-1 الانتظام الممتد والانتظام المحدود LONG RANGE AND SHORT RANG ORDER

بشكل عام، تختلف المواد غير المتبلورة عن المواد المتبلورة فـــي شـــكل انتظـــام الذرات في المادة حيث يغيب الانتظام في النـــوع الأول (أي تتـــوزع الـــذرات بشـــكل

عشوائي)، بينما يوجد هذا الانتظام في النوع الثاني من المواد الصلبة. بالرغم أن هذا المفهوم صحيح إلى حد كبير إلاّ أنّه يوجد فى بعض المواد غير المتبلورة مزيج من العشوائية والانتظام للذرات. يوجد نوعان من الانتظام هما الانتظام من النوع المحدود (أي قصير المدى) والانتظام الممتد (أى طويل المدى). في الانتظام المحدود تكون الذرات أو المجموعات الذرية موجودة على هيئة مرتبة ومتكررة على المدى القصير، أما على المدى الطويل فإن التركيب البنائى يظهر توزيعا غير منتظم ويغيب الانتظام الشامل وتسمى المادة الصلبة في هذه الحالة بمادة غير متبلورة (noncrystalline) أو أمورفية (amorphous)، ويسمى التركيب البنائى في مثل هذه المواد تركيبا ذا انتظاما قصير المدى أو محدود.

على الجانب الأخر، إذا أبدت المادة الصلبة انتظاما في توزيع الذرات أو المجموعات الذرية ويمتد هذا الانتظام إلى مدى طويل فإنه يقال أن تركيب المادة ذا انتظاما ممتدا ويؤدى مثل هذا الانتظام إلى تكوين البلورات. يوجد الكثير من المواد الصلبة التي يمكن أن تتواجد على الحالة المتبلورة أو على الحالة غير المتبلورة و يعتمد ذلك على ظروف التحضير. المثال الجيد لمثل هذه المواد، والذي يمكن فيه عمل مقارنة بين الانتظام المحدود والانتظام الممتد هو رمل الصحراء المألوف لنا جميعا. رمل الصحراء هو ثاني أكسيد السليكون، الذي بواسطته يمكن الحصول على أكثر من شكل للمادة الصلبة مثل الزجاج (وهو مادة غير متبلورة) أو الكوارتز (وهو مادة متبلورة).

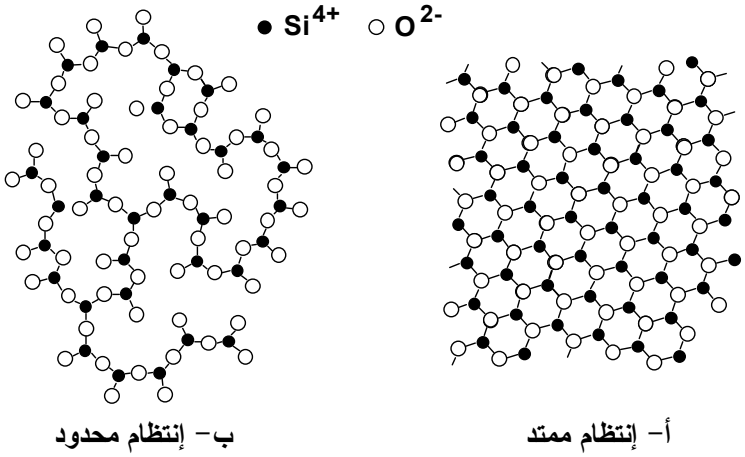
تتكون الوحدة البنائية لثاني أكسيد السليكون فى الحالة الصلبة من ذرة سليكون رباعية التكافؤ ترتبط مع أربع ذرات أكسجين مكونة شكل هرمي يمثل وحدة التركيب البنائى للجسم الصلب. في هذه الوحدة البنائية تحتل ذرة السليكون قلب الهرم الثلاثي بينما تكون ذرات الأكسجين عند رؤوس الهرم، مكونة أربع روابط تساهمية مع ذرة السليكون. تتصل الوحدات البنائية بعضها مع بعض عند رؤوس الهرم أو الحواف فقط، كما هو موضح في الشكل 2-1.



الشكل 2-1 يتكون جزئ ثاني أكسيد السليكون من ذرة سليكون يحاط بها أربعة ذرات أكسيجين مكونة هرم ثلاثي.

عند صهر ثاني أكسيد السيلكون وتبريده يتحول المصهور إلى مادة صلبة ذو تركيب بنائي يختلف باختلاف معدل التبريد، على النحو الآتي: 1- عند التبريد البطيء للمصهور تتكون مادة صلبة متبلورة وتعرف هذه المادة بالكوارتز، يكون لها تركيب بنائي منتظم وممتد على المدى الطويل ، كما هو مبين فى الشكل 2-2(أ) .2- عند التبريد المفاجئ للمصهور تتكون مادة صلبة غير متبلورة، تعرف هذه المادة بالزجاج، يكون لها تركيب بنائي عشوائي يتخلله انتظام محدود أي قصير المدى، كما هو موضح في الشكل 2-2(ب).

في ضوء ما سبق، يمكن تعريف الانتظام المحدود للذرات بأنه انتظام يكون موجوداً فى المدى القصير ويغيب على المدى الطويل. يتواجد هذا النوع من الانتظام في المواد غير المتبلورة (الأمورفية). على الجانب الآخر، يكون الانتظام الممتد للذرات هو الترتيب الذي يتكرر على المدى الطويل ليشمل كل التركيب البنائى للمادة مكونا ما يسمى بشبكة بلورية، ويتواجد هذا النوع من الانتظام في المواد المتبلورة.

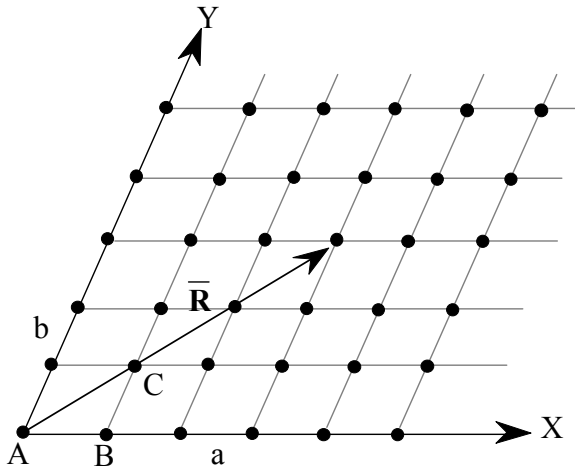


الشكل 2-2 التركيب البنائى للكوارتز والزجاج، حيث يظهر انتظاما ممتدا أو انتظام محدودا.

2-2 الحالة المتبلورة THE CRYSTALLINE STATE

بدأ الاهتمام الفعلي لدراسة البلورات عام 1912 على يد مجموعة من العلماء (لاو Lau، فريدريك Friedrich وكنبنج Knipping) والذين أكدوا إمكانية دراسة التركيب الداخلي للبلورات بواسطة تشتت الأشعة السينية. وبعد فترة وجيزة ظهر علم البلورات الذي يعرف بأنه العلم الذي يختص بدراسة التركيب الهندسي والخصائص الفيزيائية المختلفة للأجسام الصلبة المتبلورة وذلك بواسطة العديد من التقنيات على رأسها الأشعة السينية والأشعة الالكترونية والنيوترونية وتقنيات أخرى.

يقال أن المادة الصلبة متبلورة عندما تكون فيها الذرات أو الجزيئات مرتبة بالشكل الذي يجعل أماكنها تتكرر بانتظام تام في نموذج ثلاثي الأبعاد طويل المدى (يسمى بالشبيكة)، بحيث تكون فيه كل ذرة أو جزئ أو مجموعة ذرات متواجدة في نقطة محددة وعلى بعد واتجاه محددين من جميع الذرات أو الجزيئات أو المجموعات الذرية الأخرى المحيطة به، كما يبين الشكل 2-3.



الشكل 2-3 تمثيل ثنائي البعد لتركيب صلب متبلور وفيه تظهر جميع الذرات مرتبة بشكل دوري.

في الشكل 2-3 يتضح المبدأ السابق، حيث تكون المسافة بين أي ذرتين متجاورتين على امتداد المحور X هي a وعبر المحور Y هي b وليس بالضرورة ان تكون المحاور متعامدة. تحافظ البلورة التامة على هذا الانتظام (بالتكرار) على مدى المحورين X و Y من $-\infty$ إلى $+\infty$. ينتج من هذا الانتظام أن تكون الذرات A و B و C متكافئة، ويمكن القول بأن البلورة تظهر للناظر كما هي تماما عند النظر إليها من أي موضع من هذه المواضع الذرية. يمكن التعبير عن الفكرة نفسها بالقول بأنه يمكن تمثيل

البلورة بشبيكة فراغية تظهر تماثل انتقالي في جميع الاتجاهات، بمعنى أنه إذا انتقلت البلورة بواسطة أي متجه ($\vec{R}$ مثلا) فإن البلورة تبدو تماما كما كانت قبل الانتقال، كما هو واضح في الشكل.

لا يمكن تجهيز بلورة تامة التبلور (نموذجية) نظرا للعديد من الصعوبات التي تواجه ذلك، فمثلا، يعتبر سطح البلورة نوع من أنواع التشوه وذلك بسبب تعطل التكرار عند السطح، حيث ترى الذرات القريبة من السطح بيئة محيطة مختلفة عن الذرات الموجودة في عمق البلورة وبالتالي تسلك سلوكا مختلفا. المثال الثاني لذلك هو الاهتزاز الحراري للذرات حول مواضع اتزانها عند درجة حرارة أكبر من الصفر المطلق، حيث يسبب هذا الاهتزاز تشوها للبلورة (على هيئة تغير مواضع الذرات بسبب الاهتزاز) بدرجة تعتمد على درجة الحرارة. والمثال الثالث هو وجود الشوائب. لاحظ أن البلورة غالبا تحتوى على بعض الذرات الغريبة (الشوائب) حتى عند تحضيرها بواسطة أفضل وسائل النمو البلوري تبقى بعض الشوائب (بتركيز $\sim 10^{12}\ cm^{-3}$) داخل البلورة وهذه الشوائب تجعل من الصعب تعيين التركيب البلوري.

2-3 تعريفات أساسية BASIC DEFINITIONS

لكي نتحدث بدقة عن التراكيب البلورية يجب أن ندخل بعض المفاهيم (التعريفات) الأساسية في هذا المجال والتي سوف تخدم الدراسة كنوع من المصطلحات اللغوية في علم البلورات. فيما يلى، نقدم هذه التعريفات بشئ من التفصيل.

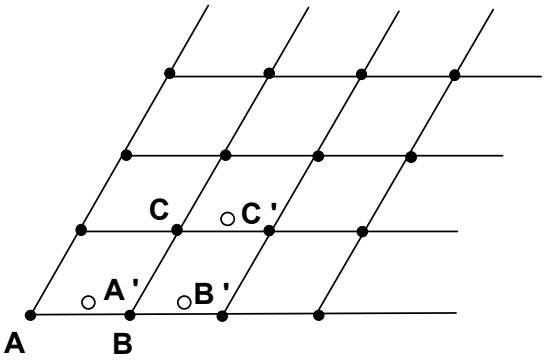
2-3-1 الشبيكة الفراغية SPACE LATTICE

يكون التركيب الداخلي لكافة بلورات المواد المتبلورة عبارة عن توزيع فضائي للذرات أو الجزيئات أو تجمعاتها. فالذرة الواحدة أو الجزئ الواحد أو التجمع الذرى الواحد أو التجمع الجزيئى الواحد عند تكراره في الفضاء يكون طرازاً أو نموذجاً نطلق عليه التركيب البلوري. إن وحدة الطراز التي عند تكرارها تكون الطراز كله تسمى الأساس (أو القاعدة basis). يختلف شكل و تركيب الأساس من بلورة إلى بلورة أخرى. من الممكن للقاعدة أن تحتوى على ذرة واحدة كما في حالة بلورات المعادن مثل النحاس والذهب والفضة والغازات الخاملة. ومن الممكن أن يحتوى الأساس على عدد كبير من الذرات (قد تربو على الألف)، كما هو الحال في المواد الكيميائية والعضوية. على كل حال، يوجد الأساس في الفراغ عند نقاط محددة تسمى نقاط الشبيكة الفراغية التي تتميز بخصائص تماثل تظهر فيما يلى. يوجد نوعين من شبيكات النقاط الفراغية هما: شبيكات برافية (نسبة إلى العالم برافيه Bravais) و شبيكات غير برافية. يوصف التركيب البلوري للأجسام الصلبة في معظم الأحيان بشبيكات برافية.

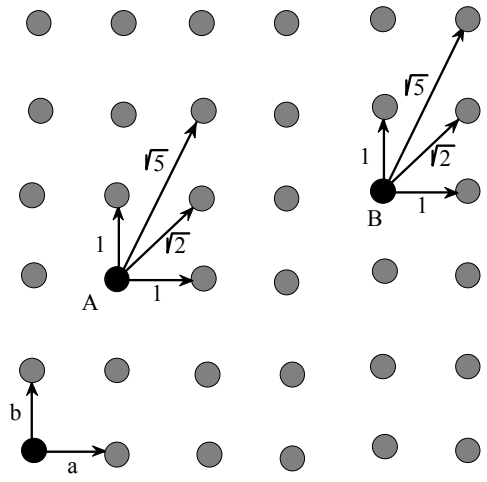
إذا ترتب في الفراغ عدد لانهائي من النقاط بحيث يكون لكل نقطة نفس الجيران فإنها تكون شبيكة فراغية. فى هذه الشبيكة يكون لكل نقطة نفس عدد الجيران على نفس الأبعاد والاتجاهات. فمثلا باعتبار ترتيب ثنائي الأبعاد من النقاط، كما هو موضح بالشكل 2-4، فإنه من الواضح أن النقطة A والنقطة B لهما نفس الجيران وهذا صحيح أيضا

لكل النقاط الأخرى الموجود فى هذا الترتيب ثنائي البعد وهذا يحقق التعريف السابق للشبيكة الفراغية ولكن في بعدين. وبناء على ما سبق، يمكن تعريف الشبيكة البرافية بأنها تركيب دوري لانهائي يتكون من عقد (نقاط فراغية) منفصلة موزعة في فضاء الشبيكة بأسلوب منتظم. وبالتالي، في الشبيكات البرافية تكون كل نقاط الشبيكة متعادلة وبناء علية تكون كل الذرات المكونة للبلورة من نفس النوع. أما في الشبيكة غير البرافية فتكون بعض نقاط الشبيكة غير متعادلة، كما يتضح في الشكل 2–4.

في الشكل 2–4 نجد أن النقاط A و B و C تكون متكافئة فيما بينها وتكون شبيكة برافية واحدة وبالمثل تكون النقاط A' و B' و C' متكافئة فيما بينها وتكون شبيكة برافية أخرى. نلاحظ أن النقطتين A و A' غير متكافئة سواء كانتا عبارة عن ذرات مختلفة (مثل H و Cl مثلا) أو كانتا من نفس نوع الذرات (ذرتين H مثلا).



الشكل 2–4 شبيكة غير برافية ثنائية البعد.



الشكل 2–5 شبيكة برافية ثنائية البعد

يشار أحيان إلى الشبيكة غير البرافية بالشبيكة ذات الأساس. كما ذكرنا من قبل، يشير مصطلح "الأساس" إلى مجموعة الذرات التي توجد بالقرب من كل نقطة من نقاط الشبيكة

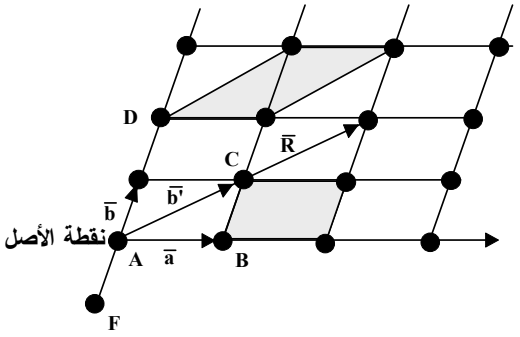
البرافية. يمكن اعتبار أن الشبيكة غير البرافية هي إتحاد شبيكتين برافيتين أو أكثر لهما اتجاهات ثابتة بالنسبة إلى بعضهما بعض. يمثل الشكل 2-4 شبيكة غير برافية مرسومة في بعدين، بينما يمثل الشكل 2-5 شبيكة برافية مرسومة في بعدين، أيضا.

2-3-2 متجهات الأساس BASIS VECTORS

لتوضيح مفهوم متجهات الأساس، نفترض شبيكة كالمبينة بالشكل 2-6. دعنا نختار نقطة أصل الإحداثيات عند نقطة معينة في الشبيكة ولتكن النقطة A. الآن يمكن كتابة متجه الموضع لأي نقطة من نقاط الشبيكة على الصورة:

$$\vec{R}_n = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} \qquad 1\text{-}2$$

حيث $\vec{a}$ و $\vec{b}$ هما متجهين، كما هو مبين بالشكل و $(n_2\ ,\ n_1)$ هما زوج أعداد تعتمد قيمتهما على هندسة الشبيكة النقطية. هكذا تكون إحداثيات النقطة B هي $(n_1,n_2)=(1,0)$ والنقطة D هي $(n_1,n_2)=(0,2)$ والنقطة F هي $(n_1,n_2)=(0,-1)$.



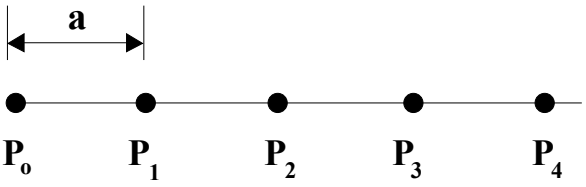
الشكل 2-6 المتجهين $\vec{a}$ و $\vec{b}$ هما متجهان أساس.

يكون المتجهين $\vec{a}$ و $\vec{b}$ (الواجب عدم كونهما على استقامة واحدة) مجموعة من المتجهات تسمى متجهات الأساس في الشبيكة، وبدلالتهما يمكن التعبير بشكل مناسب عن مواضع كل نقطة من نقاط الشبيكة باستخدام التعبير الرياضي كما في المعادلة 2-1.

ويقال عادة أن الشبيكة لها تماثل انتقالي لكل الانتقالات الموصوفة بواسطة متجهات الشبيكة $\vec{R}_n$. لا يكون اختيار متجهات الأساس السابق هو الاختيار الأوحد، ويمكن أخذ المتجهات $\vec{a}$ و $\vec{b}'$ بدلا من المتجهات $\vec{a}$ و $\vec{b}$ حيث $\vec{b}'=\vec{a}+\vec{b}$. من الواضح أن هذا الاختيار هو أحد الاختيارات الممكنة. عادة يكون الاختيار طبقا للصلاحية والأكثر مناسبة.

2-3-3 الشبيكة البلورية CRYSTAL LATTICE

غالبا، يوصف التركيب البلوري بواسطة شبيكة بلورية عبارة عن شبيكة برافية تتمتع بخاصيتين أساسيتين هما: الانتظام اللانهائي للعقد (للنقاط) في الفراغ، والتماثل الانتقالي. وفيما يلى توضيح لهذا المفهوم. تتركب البلورة المثالية من ذرات مرتبة في شبيكة ويمكن تحديد كل ذرة بثلاث متجهات انتقالية أساسية هي $\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$. فعلى سبيل المثال نفترض أن المطلوب هو تحريك النقطة p_o في الشكل 2-7 على امتداد خط مستقيم بمسافة انتقالية a إلى المواضع p_1 وp_2 و p_3....الخ، فإنه يمكن تمثيل المسافة الانتقالية a بمتجه له اتجاه محدد وقيمة عددية تساوى a وهذه القيمة العددية تسمى فترة الانتقال. من الواضح أن متجه الانتقال $\vec{a}$ يمكن استخدامه لتمييز انتقالات أخرى موازية مثل $2\vec{a}$ و $3\vec{a}$ و ....و $n\vec{a}$ وهكذا.

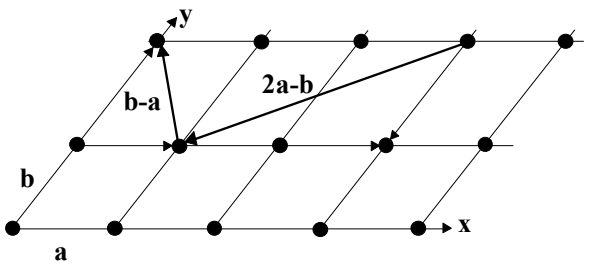


الشكل 2-7 انتقال في بعد واحد.

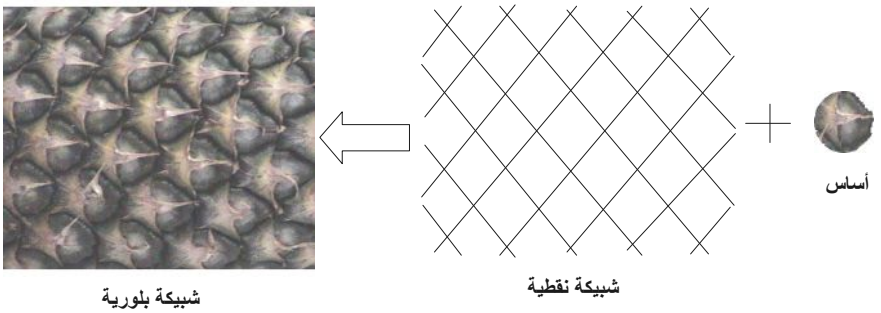
بنفس الأسلوب يمكن التأثير على النقطة p_o بمتجهى انتقال $\vec{a}$ و $\vec{b}$ فنحصل على

الشبيكة المستوية (في بعدين)، كما هو موضح بالشكل 2–8، ويمكن تحديد موضع أي نقطة في الشبيكة بالمجموع الإتجاهى $\vec{T} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b}$ ، حيث n_1 و n_2 هي أعداد صحيحة تتضمن الصفر. وإذا كان التأثير على النقطة p_o بثلاث متجهات انتقالية مختلفة مثل $\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$ فإننا نحصل على شبيكة فى الفراغ ويمكن تحديد موضع أي نقطة فيها بالمجموع الإتجاهى $\vec{T} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}$.

إذا استبدلنا كل ذرة في الشبيكة البلورية بنقطة فإن كل هذه النقاط الناتجة تسمى بالشبيكة النقطية. يمكن الحصول على التركيب البلوري وذلك بوضع نفس الأساس (القاعدة) من الذرات عند كل نقطة من نقاط الشبيكة وبذلك يمكن كتابة العلاقة بين الشبيكة النقطية والأساس والتركيب البلوري على النحو الآتي: شبيكة نقطية + أساس = شبيكة بلورية (تركيب بلوري). يمكن توضيح هذا المفهوم من خلال الشكل 2–9 والمثال التالي.



الشكل 2–8 انتقال في بعدين (في مستوى واحد).



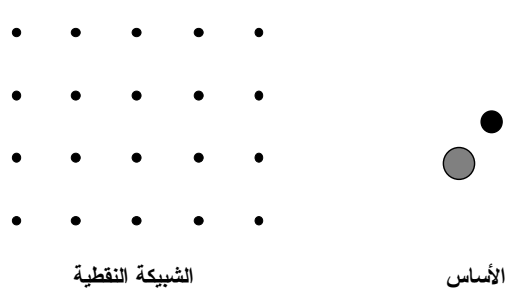
الشكل 2–9 مفهوم العلاقة بين الشبيكة النقطية والأساس والتركيب البلوري

مثال 2-1

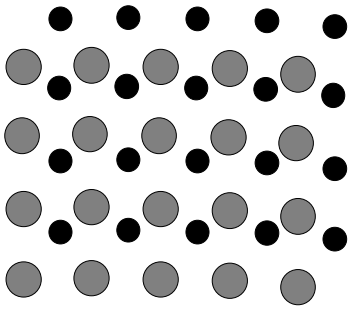
إذا كان الأساس عبارة عن ايونين مختلفين والشبيكة النقطية المبينة بالشكل 2-10، عينّ الشبيكة البلورية التي تمثل هذا النظام (التركيب البلوري)؟

الحل

بتطبيق العلاقة السابقة التي تنص على " شبيكة نقطية + الأساس = تركيب بلوري" نحصل على التركيب البلوري كما هو موضح بالشكل 2-11.



الشكل 2-10



الشكل 2-11 التركيب البلوري للشبيكة الموصوفة.

2-3-4 خلية الوحدة UNIT CELL

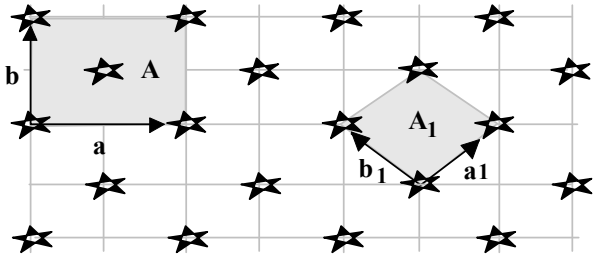
تسمى مساحة متوازي الأضلاع الذي له جوانب عبارة عن متجهات الأساس $\vec{a}$ و $\vec{b}$ (أو الشكل المجسم الذي نحصل عليه، في الأبعاد الثلاثة، بمتجهات الأساس: $\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$) خلية الوحدة أو وحدة البناء البلوري وتكون هذه الوحدة، عادة، أصغر شكل هندسي يمكن بتكراره الحصول على الشبيكة البلورية. لا يكون اختيار خلية الوحدة لنفس الشبيكة الواحدة اختيارا وحيدا وذلك بسبب وجود أكثر من اختيار لمتجهات الأساس، كما ذكرنا من قبل. بالرجوع إلى الشكل 2-6 نجد أن أي من المناطق المظللة في الشكل تصلح

كخلية وحدة. ولذلك توجد بعض الملاحظات يجب أخذها في الاعتبار عند اختيار خلية الوحدة نلخصها كالآتي: 1- كل خلايا الوحدة لها نفس المساحة، أي أن مساحة خلية الوحدة هو مقدار فريد حتى لو لم يكن الشكل وحيدا. 2- إذا كنت مهتما بعدد نقاط الشبيكة في خلية الوحدة، فإن خلية الوحدة المتكونة في بعدين تحتوى على أربع نقاط عند أركان الشكل وتشارك كل نقطة في أربع خلايا مجاورة أي أن كل خلية وحدة تحتوى على نقطة واحدة. (وكذلك، فإن خلية الوحدة المتكونة في ثلاثة إبعاد تحتوى على ثماني نقاط عند رؤوس متوازي المستطيلات وكل نقطة تشارك في ثماني خلايا مجاورة أي أن كل خلية وحدة تحتوى على نقطة واحدة أيضا.)

2-3-5 الخلايا الأولية وغير الأولية PRIMITIVE AND NONPRIMITIVE CELLS

من الممكن أن تكون خلية الوحدة التي تمت مناقشتها من قبل خلية أولية أو غير أولية، حيث يكون من المفيد أحياناً اختيار خلية وحدة كبيرة تظهر بعض خصائص الشبيكة (مثل التماثل) بشكل أوضح. في هذه الحالة، لا تكون خلية الوحدة هي الخلية الأولية. ولتوضيح ذلك نعتبر الشبيكة البرافية المبينة في الشكل 2-12. تكون خلية الوحدة هي الخلية ذات متجهات الأساس $\vec{a}$ و $\vec{b}$ وتكون لها المساحة A. لاحظ أن هذه الخلية تحتوى على نقطة شبيكة في المركز بالإضافة إلى النقاط عند الرؤوس (أي أن العدد الكلى للنقاط داخل الخلية لا يساوى واحد). وبالرغم انه بتكرار هذه الخلية يمكن الحصول على الشبيكة البرافية (أي أنها خلية وحدة) إلا إنها خلية غير أولية. وعند اختيار

خلية أخرى ذات متجهات الأساس $\vec{a}_1$ و $\vec{b}_1$، مثلاً، نحصل على خلية وحدة أخرى تحتوى على أربع نقاط عند الرؤوس ولها المساحة A_1. بتكرار هذه المساحة يمكن تغطية كل الشبيكة البرافية. أيضا، لاحظ أن هذه الخلية لا تحتوى على نقاط شبيكية بداخلها، أي أنها تحتوى فقط على أربعة نقاط عند الأركان تشارك الخلايا المجاورة ويكون نصيب هذه الخلية هو نقطة واحدة فقط. تسمى هذه الخلية (A_1) بخلية أولية، بينما تسمى الخلية A بخلية غير أولية. وبناء على ما سبق، يمكن تعريف خلية الوحدة الأولية بأنها أصغر خلية وحدة يمكن بتكرارها تغطية الشبيكة البرافية وتحتوى على عقدة واحدة (نقطة واحدة).



الشكل 2-12 الخلية A_1 هي خلية أولية، بينما A هي خلية غير أولية، بالرغم أن كل منهما تمثل خلية الوحدة.

تذكر أنه بالامكان دائما اختيار خلية أولية (تحقق التماثل الانتقالي وتنتمي لها عقدة (ذرة أو مجموعة ذرات) واحدة ولها أصغر حجم يمكن اختياره. يحدث أحيانا أن يكون تماثل الخلية الأولية لا يماثل تماثل الشبيكة الأم وفى هذه الحالة ربما نكون مجبرين على اختيار خلية وحدة أخرى (تحتوى على عقد بداخلها وليس عند الأركان) بحيث تحقق هذه الخلية تماثل متماثل مع الشبيكة الأم. تكون الخلية في هذه الحالة غير أولية، وعلى كل حال عند اختيار خلية وحدة تعبر عن الشبيكة يجب اخذ الملاحظات الآتية في الاعتبار:

1- تكون مساحة الخلية غير الأولية مضاعف صحيح لمساحة الخلية الأولية.

2- لا يجب رسم خطوط توصيل بين الخلايا غير الأولية والخلايا غير البرافية. يشير التعبير الأول إلى اختيار معين لمتجهات الأساس (ويكون أحيانا اختيارا عشوائياً)، بينما يشير التعبير الثاني (غير برافية) إلى الحقيقة الفيزيقية للمواقع غير المتكافئة لنقاط الشبيكة.

3- يكون حجم الخلية الأولية في الأبعاد الثلاثة والمحددة بمتجهات الأساس $\vec{a}_1$ و $\vec{b}_1$ و $\vec{c}_1$ هو

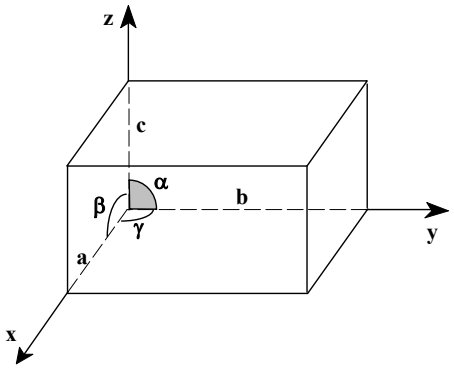
$$V = \left|\vec{a_1} \times \vec{b_1} . \vec{c_1}\right| = \left|\vec{b_1} \times \vec{c_1} . \vec{a_1}\right| = \left|\vec{c_1} \times \vec{a_1} . \vec{b_1}\right| . \qquad 2\text{-}2$$

2-3-6 متغيرات الشبيكة لوحدة الخلية LATTICE PARAMETERS OF A UNIT CELL

لكي تتحدد البلورة في الفراغ بشكل صحيح، لابد وأن تكون ثلاثة أوجه منها مسندة إلى مجموعة من المحاور الإحداثية تتقاطع عند أحد أركان البلورة أو عند مركزها، ويمكن اختيار اتجاهات وأطوال المحاور بحيث تتفق مع اتجاهات وأطوال أحرف الخلية a و b و c. تسمى a و b و c بالمحاور البلورية كما تسمى الزوايا بين هذه المحاور، α و β و γ، بالزوايا بين الأوجه، كما هو موضح بالشكل 2-13.

تكون الزاوية α محصورة بين المحورين b و c وتكون الزاوية β محصورة بين المحورين a و c والزاوية γ محصورة بين المحورين a و b. تسمى المحاور a و b و c و الزوايا α و β و γ بمعاملات الشبيكة لوحدة الخلية والتي يمكن بواسطتها معرفة شكل

الخلية الهندسي وحساب حجمها، كما سوف نبين لاحقا.



الشكل 2-13 متغيرات الشبيكة لوحدة الخلية.

2-4 الأنظمة البلورية السبعة THE SEVEN CRYSTAL SYSTEMS

يتميز الشكل الخارجي لبلورات المواد بأسطحها المستوية والملساء والتي تسمى أوجه البلورة. ويختلف مظهر بلورات المواد المختلفة باختلاف أشكال الأوجه أو باختلاف الزوايا بين هذه الأوجه وبالتالي باختلاف تماثلها. ويعكس المظهر الخارجي للبلورة طبيعة التركيب الداخلي أو وحدات البناء الداخلية التي تكون هذه البلورة. والآن سوف ندرس، بشئ من التفصيل، التركيب البنائى للأنواع المختلفة للشبيكات الفراغية لبلورات المواد الصلبة.

تمكن العالم برافيه (Bravais) عام 1848 من إدخال مفهوم الشبيكة إلى علم البلورات وذلك لتسهيل دراسة التركيب البلوري للمواد الصلبة. وقد تمكن برافى من تصميم أربع عشرة شبيكة فقط تصف التراكيب البلورية جميع المواد الصلبة مصنفة في مجموعات رئيسية أو أنظمة. يأتي هذا العدد الصغير (14 شبيكة) بسبب أن عدد حالات التماثل الانتقالي في الشبيكة يكون محدوداً، فمثلا يستحيل بناء شبيكة ذات خلية وحدة لها

شكل خماسي منتظم. تأتى الاستحالة من أنه بالرغم من إمكانية رسم الشكل الخماسي المنتظم بسهولة إلاّ إنّه لا يمكن تغطية مساحة معينة تماما بتكرار هذا الشكل الخماسي المنتظم. وبالتالي نجد أن متطلبات التماثل الانتقالي في بعدين اثنين (على سبيل المثال) تحدد عدد الشبيكات الممكن بنائها إلى خمسة فقط هم: متوازي الأضلاع المائل، المربع القائم، السداسي، المستطيل البسيط والمستطيل المتمركز. في الأبعاد الثلاثة، يبلغ عدد الشبيكات البرافية أربع عشرة شبيكة فقط، بينما يبلغ عدد الشبيكات غير البرافية 230 شبيكة. في الأبعاد الثلاثة تكون كل شبيكة برافية خلية وحدة عبارة عن متوازي مستطيلات له جوانب تكون عبارة عن متجهات الأساس $\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$ وله الزوايا α و β و γ، كما هو موصوف في الجدول 2–1.

تصنف الأربع عشرة شبيكة البرافية إلى سبع أنظمة (مجموعات أو فصائل) هي : المكعبى، الرباعي القائم، المستطيل القائم، ثلاثي التماثل، أحادى الميل، ثلاثي الميل والسداسي. توجد أنوع مختلفة من الشبيكات منها البسيط وغير البسيط.

في الشبيكة البسيطة (simple) تكون النقاط عند رؤوس الشكل فقط، وبذلك تمثل الخلية البسيطة خلية وحدة أولية. بينما في الشبيكة المتمركزة الجسم (م. الجسم body centered) توجد نقطة إضافية عند مركز الجسم بينما في الشبيكة المتمركزة الأوجه (م. الأوجه face centered) توجد نقطة في مركز كل وجه وفى الشبيكة المتمركز القاعدتين توجد نقطة في مركز كل قاعدة، هذا بالإضافة إلى النقاط الموجودة عند الرؤوس في كل

الأنواع السابقة . تذكر انه في الشبيكات غير البسيطة تكون خلية الوحدة غير أولية. يبين الجدول 2–1 والشكل 2–14 الوصف التفصيلي والخصائص الهندسية لكل نظام من الأنظمة السبعة.

الجدول 2–1 الخصائص التركيبية لوحدة الخلية للأربعة عشر شبيكة برافية.

الفصيلة	الخصائص	عدد الأنواع	النوع	الرمز	خصائص عناصر التماثل
فصيلة المكعبي Cubic	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	ثلاثة	مكعبي البسيط، SC مكعبي م. الجسم، BCC مكعبي م. الأوجه، FCC	P I F	أربعة محاور دوران ثلاثية الرتبة
فصيلة الرباعي القائم Tetragonal	$a=b\neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	نوعان	رباعي بسيط رباعي م. الجسم	P I	محور دوران ثلاثي الرتبة
فصيلة المستطيل القائم Orthorhombic	$a\neq b\neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	أربعة أنواع	مستطيل قائم بسيط مستطيل قائم م. الجسم مستطيل قائم م. الأوجه مستطيل قائم م. القاعدتين	P I F B	ثلاثة محاور دوران ثنائية الرتبة
فصيلة الثلاثي Trigonal	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma\neq90^\circ$	نوع واحد	خلية أولية	-	محور دوران ثلاثي الرتبة
فصيلة أحادى الميل Monoclinic	$a\neq b\neq c$ $\alpha=\beta=90^\circ\neq\gamma$	نوعان	أحادى الميل البسيط أحادى الميل م. القاعدتين	-	محور دوران ثنائي الرتبة
فصيلة ثلاثي الميل Triclinic	$a\neq b\neq c$ $\alpha\neq\beta\neq\gamma\neq90^\circ$	نوع واحد	ثلاثي الميل البسيط	-	لا يوجد
فصيلة السداسي Hexagonal	$a=b\neq c$ $\alpha=\beta=90^\circ$ & $\gamma=120^\circ$	نوع واحد	السداسي البسيط	-	محور دوران ثلاثي الرتبة

كما سوف نرى فيما بعد، يمكن تحويل بعض الإشكال إلى أشكال أخرى، فعلى سبيل المثال، يمكن تحويل الرباعي القائم المتمركز القاعدتين إلى رباعي قائم بسيط عند اعتبار خلية وحدة جديدة، كما هو مبين بالشكل 2–15، ويمكن معالجة بعض الحالات الأخرى بالمثل.