



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي



جامعة محمد خيضر بسكرة

كلية العلوم الدقيقة وعلوم الطبيعة والحياة

قسم علوم المادة

ميدان علوم المادة، شعبة الفيزياء، إختصاص فيزياء المواد

مطبوعة بيداغوجية في مادة:

فيزياء الجسم الصلب 1

موجهة لطلبة السنة الثالثة ليسانس فيزياء المواد

من إعداد الأستاذة: غنية بن شعبان

السنة الجامعية 2020-2021

الفهرس

1	مدخل
	الفصل الأول: المبادئ الأساسية لعلم البلورات
3	1 مقدمة
4	2 تعاريف على البنية البلورية
4	1.2 البلور المثالي
4	2.2 الشبكة البلورية
4	3.2 القاعدة
4	4.2 البنية البلورية
4	5.2 أشعة أساس الشبكة
5	6.2 الخلية
5	1.6.2 تعريف الخلية
5	2.6.2 أنواع الخلايا
6	3.6.2 أنواع الخلية المتعددة
7	4.6.2 خلية فيكنر-رايتس
8	3 تصنيف الشبكات البلورية
9	1.3 دراسة الشبكة المكعبة
9	1.1.3 الشبكة المكعبة البسيطة (CS)
9	2.1.3 الشبكة المكعبة الممركزة (CC)
10	3.1.3 الشبكة المكعبة الممركزة الوجوه (CFC)
12	2.3 مصطلحات
12	1.2.3 العدد التناسقي
12	2.2.3 الشعاع الذري
14	3.2.3 كثافة التعبئة
14	4 أمثلة على بعض البنيات البلورية البسيطة والشهيرة
14	1.4 البنية CFC
15	2.4 البنية CC
15	3.4 البنية السداسية المتراسة HC
16	4.4 البنية من النوع CsCl
17	5.4 البنية من النوع NaCl
17	6.4 بنية الماس
18	7.4 بنية ZnS

19	5 الاتجاهات البلورية والمستويات البلورية
19	1.5 مقدمة
20	2.5 قرائن الاتجاهات (قرائن فيس)
20	3.5 عائلة الأشعة المتكافئة
21	4.5 قرائن المستويات (قرائن ميلر)
22	5.5 عائلة المستويات المتكافئة
22	6.5 معاملات ميلر للشبكات السداسية
23	7.5 الاتجاه المكثف والمستوى المكثف
23	6 الشبكة المعكوسة
24	1.6 أشعة أساس الشبكة المعكوسة
24	2.6 خواص الشبكة المعكوسة
25	3.6 منطقة بريلوان
27	تمارين الفصل الأول
	الفصل الثاني: إنعراج الأشعة السينية في البلورات
30	1 مقدمة
30	2 إنتاج الأشعة السينية
31	1.2 طيف الأشعة السينية
31	1.1.2 الأشعة الاستيعافية
32	2.1.2 الأشعة المميزة
35	3 إمتصاص الأشعة السينية
36	1.3 مخطط تغير معامل الامتصاص الكتلي بدلالة طول موجة الأشعة X
38	2.3 تطبيقات الامتصاص
39	4 إنعراج الأشعة السينية في البلورات
39	1.4 ظاهرة الانعراج
39	2.4 قانون براغ
41	3.4 تفسير لاوي لإنعراج الأشعة السينية
43	4.4 تكافؤ شرط براغ وشرط لاوي
44	5.4 بناء إيوالد
45	6.4 شدة الأشعة المنعرجة ومعامل البنية
46	1.6.4 حساب معامل البنية للشبكة المكعبة
47	5 الطرق التجريبية لإنعراج الأشعة X في البلورات
47	1.5 مقدمة
48	2.5 طريقة المسحوق أو طريقة "ديباي-شرر"

49	1.2.5 طريقة الفيلم
50	2.2.5 طريقة العداد
51	3.5 تحليل صورة الانعراج
56	تمارين الفصل الثاني
	الفصل الثالث: الروابط البلورية
59	1 مقدمة
59	2 طاقة الربط
60	3 أنواع الروابط البلورية
60	1.3 البلورات الجزيئية
60	1.1.3 طاقة ربط بلورات الغازات الخاملة
64	2.1.3 معامل المرونة الحجمية
66	2.3 البلورات الأيونية
67	1.2.3 طاقة مادلونك
69	2.2.3 طاقة ربط البلورات الأيونية
70	3.3 البلورات التساهمية
71	4.3 البلورات المعدنية
72	5.3 البلورات ذات الرابطة الهيدروجينية
73	تمارين الفصل الثالث
	الفصل الرابع: خواص المرونة للأجسام الصلبة
76	1 مقدمة
76	2 الإجهاد الميكانيكي
77	3 ممتد التشوه
82	4 قانون هوك
83	5 طاقة المرونة
83	6 معاملات مرونة البلورات المكعبة
85	7 معاملات تجريبية لمرونة الأجسام
85	1.7 معامل يونغ
86	2.7 معامل بواسن
86	3.7 معامل الانضغاط الحجمي
88	تمارين الفصل الرابع
90	المراجع

مدخل

بسم الله والحمد لله والصلاة والسلام على رسول الله، وبعد،

تعتبر فيزياء الحالة الصلبة أو فيزياء الجوامد من أهم فروع فيزياء المواد المكثفة. يهتم هذا الفرع من الفيزياء بدراسة مجموعة واسعة من ظواهر وتطبيقات الفيزياء الكلاسيكية وفيزياء الكم وذلك على المستوى الذري، الميكروسكوبي والعياني. لهذه الأسباب إهتم الباحثون منذ عقود عديدة على تطوير تطبيقات تكنولوجية مهمة لهذا الفرع من فيزياء المواد، خاصة منها ماتعلق بخصائص المواد الصلبة البلورية، الحالات الإلكترونية في المواد الصلبة، خصائص أنصاف النواقل،... ومن التطبيقات المباشرة نذكر على سبيل المثال تكنولوجيا الترنزستورات وأنصاف النواقل وماواكبها من تطور في علوم الإلكترونيات والحاسوب.

تقدم هذه المطبوعة البيداغوجية دروس مادة فيزياء الجسم الصلب 1، الموجهة لطلبة السنة الثالثة ليسانس (السداسي الخامس - نظام ل . م . د)، ميدان علوم المادة، شعبة الفيزياء، تخصص فيزياء المواد وذلك وفقا للبرنامج المقرر من وزارة التعليم العالي والبحث العلمي الجزائرية والمحدث عدة مرات منذ 2008. وتعتبر هذه المطبوعة تحيين وتطوير لدروس مقياس فيزياء المادة المكثفة الموجهة لطلبة السنة الثالثة دراسات عليا فيزياء التي قمنا بإعدادها وتدريسها في قسم الفيزياء جامعة محمد خيضر بسكرة خلال الموسم الجامعي 2004-2007.

تحتوي هذه المطبوعة على أربعة فصول بالإضافة إلى مجموعة من التمارين التدعيمية في نهاية كل فصل. يشمل الفصل الأول المبادئ الأساسية لعلم البلورات بينما يعرض الفصل الثاني إنعراج الأشعة السنية في البلورات. يعالج الفصل الثالث أنواع الروابط البلورية ويهتم الفصل الرابع والأخير بدراسة خصائص المرونة للأجسام الصلبة.

الفصل الأول

المبادئ الأساسية لعلم البلورات

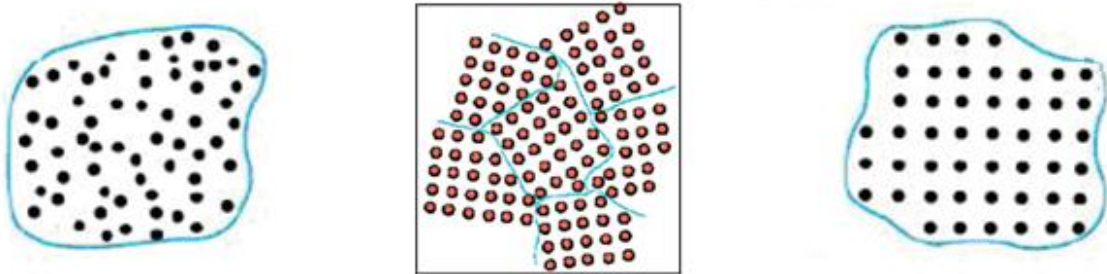
1 مقدمة

تعتبر الحالة الصلبة الحالة الفيزيائية التي تتمتع بها معظم المواد الكيميائية في الشروط الاعتيادية من الضغط الجوي والحرارة. ونميز بشكل أساسي حالتين للجسم الصلب هما:

(أ) **أجسام بلورية:** وفيها ينتظم ترتيب الذرات في الفراغ بحيث تشكل نمطا هندسيا دوريا. وعندما ينتشر هذا النمط ليشغل كل أجزاء المادة فإن هذا يعني أن لدينا "بلورة وحيدة" (الشكل 1.1.أ)، أما إذا توقفت دورية النمط الهندسي عند حدود الحبيبات فإن المادة حينئذ تكون "متعددة البلورات" (الشكل 1.1.ب) أي تتكون من مجموعات صغيرة جدا من الحبيبات أو البلورات الأحادية الصغيرة في إتجاهات مختلفة.

(ب) **أجسام غير بلورية:** وتضم المواد الصلبة التي تتخذ ذراتها أو جزيئاتها توزيعا عشوائيا (الشكل 1.1.ج) مثال الزجاج ، الشمع والبلاستيك.

يقوم علم البلورات بدراسة الشكل الخارجي، البنية الداخلية، الخواص الفيزيائية ونمو البلورات. إهتم الباحثون بشكل كبير بعلم البلورات خلال القرن التاسع عشر، حيث أعطى العالم برافي في سنة 1848 تصورا ووصفا دقيقا للبناء الهندسي للحالة البلورية قبل تطور الأساليب العلمية لدراسة المادة والذرة. ومع إكتشاف إنعراج الأشعة السينية في البلورات من قبل العالم فون لاوي عام 1912 تم التحقق المباشر للطبيعة الدورية للترتيب البلوري وبذلك أصبح تعيين البنية البلورية للمادة حقيقة ملموسة. وهكذا بمعرفة البنية البلورية أصبح بمقدورنا وصف الجسم البلوري من وجهة نظر كيميائية، كتحديد ماهية الروابط بين الذرات والجزيئات، كما أصبح المجال مفتوحا أما المختصين في دراسة الجسم الصلب لربط الخواص الفيزيائية والكيميائية للمركبات الصلبة ببنيتها البلورية.



(ج) جسم غير بلوري

(ب) متعدد البلورات

(أ) أحادي البلورة

الشكل 1.1: حالات التبلور.

2 تعاريف على البنية البلورية

يستخدم في لغة علم البلورات عدد من المفاهيم والمصطلحات التي تساعد على وصف وتحليل التركيب الداخلي للمادة. وسنقدم هنا بعض التعريفات الأساسية لأهم المفاهيم والمصطلحات البلورية.

1.2 البلور المثالي

هو ترتيب منتظم ودوري في الفضاء للذرات أو الجزيئات.

2.2 الشبكة البلورية

هي توزيع منتظم للنقاط (العقد) المماثل لتوزيع الذرات أو الجزيئات في البلورات أي باستبدال ذرات الجسم الصلب أو جزيئاته بعقد تتكون الشبكة البلورية.

3.2 القاعدة

هي الذرة أو مجموعة الذرات المكونة لوحدة البناء البلوري والمتواجدة في كل عقد الشبكة.

4.2 البنية البلورية

البنية البلورية تعبر عن تتابع منتظم للقاعدة المتوضعة في عقد الشبكة البلورية الموزعة بشكل دوري في الفضاء. وبشكل مختصر نكتب: شبكة بلورية + قاعدة = بنية بلورية (الشكل 2.1).

5.2 أشعة أساس الشبكة

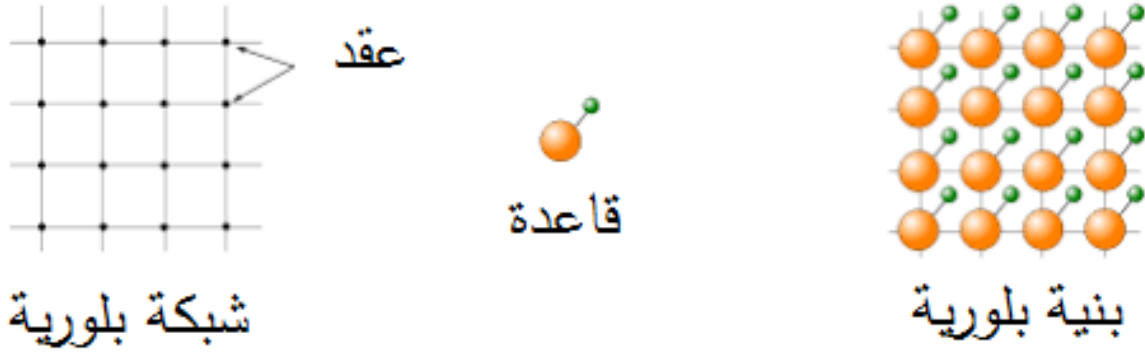
يتم الانتقال في الشبكة من عقدة إلى عقدة أخرى مكافئة باستعمال شعاع الانسحاب \vec{T} المعروف كمايلي:

$$\vec{T} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c} \quad (1.1)$$

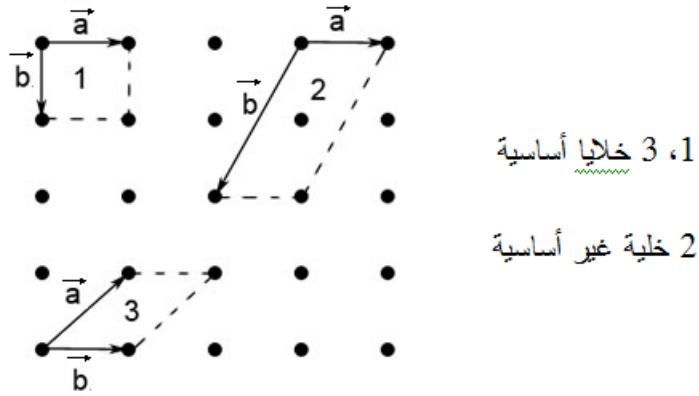
حيث: $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ أشعة مستقلة خطيا تسمى أشعة أساس الشبكة.

m, n, p أعداد صحيحة.

نقول أن الأشعة $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ أنها أشعة إنسحاب أساسية إذا كانت نهايات الشعاع \vec{T} (بأخذ قيم صحيحة للأعداد m, n, p) تحدد كل عقد الشبكة.



الشكل 2.1: بنية بلورية مستوية.



الشكل 3.1: أشعة أساس الشبكة.

ملاحظة: توجد عدة طرق لتحديد أشعة الانسحاب الأساسية لشبكة معينة.

6.2 الخلية

1.6.2 تعريف الخلية

هي متوازي السطوح المتشكل من الأشعة $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ والذي نستطيع بتكراره توليد البنية البلورية. حجم الخلية يعطى بالعلاقة:

$$V = |(\vec{a} \wedge \vec{b}) \cdot \vec{c}| \quad (2.1)$$

2.6.2 أنواع الخلايا

نميز نوعين من الخلايا:

أ) **الخلية البسيطة**: وتسمى أيضا خلية بدائية "maille primitive" يرمز لها بالرمز "P" وهي خلية متشكلة من الأشعة الأساسية $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ للشبكة البلورية ويعتبر حجمها أصغر حجم يمكن تشكيله في الشبكة. أبعادها الأساسية هي: a, b, c حيث: $|\vec{a}| = a, |\vec{b}| = b, |\vec{c}| = c$ وزواياها الأساسية هي α, β, γ حيث: $\alpha = (\widehat{\vec{b}, \vec{c}}), \beta = (\widehat{\vec{a}, \vec{c}}), \gamma = (\widehat{\vec{a}, \vec{b}})$.

تحتوي هذه الخلية عقدا عند الزوايا الركنية فقط (الشكل 4.1)، وينتسب للخلية البدائية عقدة واحدة وذلك لأن العقد الثمانية للخلية البدائية تشترك مع ثمانية خلايا بدائية متجاورة أي: عقدة $1 = 8 \times \frac{1}{8}$.
 ب) **الخلية المتعددة**: هي خلية مختارة من الشبكة البلورية تركز على أشعة $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ غير أساسية، تحتوي إضافة إلى العقد عند الزوايا الركنية على عقد بداخلها أو على وجوهها. نختار هذا النوع من الخلية لكون تناظرها يماثل تناظر الشبكة والذي لا تمتلكه الخلية الأساسية.

حجم الخلية المتعددة يكون أكبر من حجم الخلية البدائية وتحتوي على أكثر من عقدة.

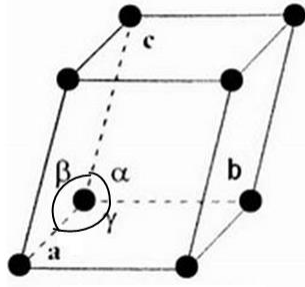
3.6.2 أنواع الخلية المتعددة

نميز ثلاث أنواع من الخلية المتعددة:

أ) **الخلية الممركزة**: يرمز لها بالرمز 'I'، وتحتوي على عقد عند الزوايا الركنية وعقدة في وسط الخلية (الشكل 1.5.1 أ)، عدد العقد = 2 لأن: $2 = 1 + 8 \times \frac{1}{8}$.

ب) **الخلية الممركزة الوجوه**: يرمز لها بالرمز 'F'، تحتوي على عقد عند الزوايا الركنية وعقدة في وسط كل من وجوهها الستة (الشكل 1.5.1 ب)، عدد العقد = 4 لأن: $4 = 1 + 6 \times \frac{1}{2} + 8 \times \frac{1}{8}$.

وذلك لأن كل عقدة من العقد الستة عند الوجوه تشترك مع خليتين متجاورتين.



الشكل 4.1: خلية بسيطة.

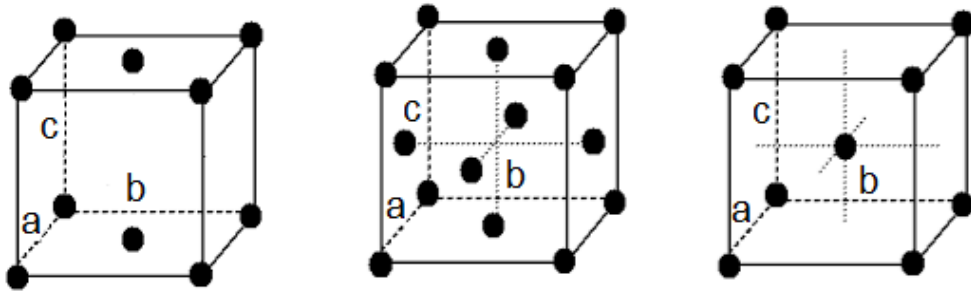
(ج) الخلية الممركزة القاعدتين: تحتوي على عقد عند الزوايا الركنية وعقدة في وسط وجهين متقابلين فقط وحسب الحالات الثلاثة الممكنة نصطلح التسميات التالية:

- الخلية ممركرة القاعدة نوع A: إذا كانت العقدة في الوجه المقابل للضلع a.
- الخلية ممركرة القاعدة نوع B: إذا كانت العقدة في الوجه المقابل للضلع b.
- الخلية ممركرة القاعدة نوع C: إذا كانت العقدة في الوجه المقابل للضلع c (الشكل 5.1.ج).

$$\text{عدد العقد} = 2 \text{ لأن: } 2 \times \frac{1}{2} + 8 \times \frac{1}{8} = 2$$

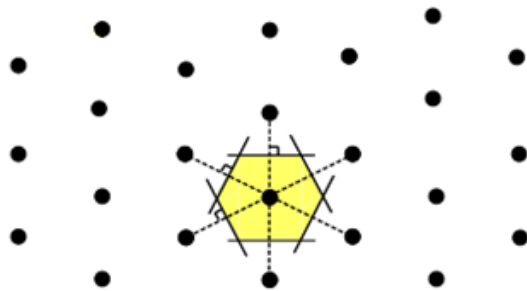
4.6.2 خلية فيكنر-زايتمس

يمكن إختيار خلية أساسية لأي شبكة بطريقة فيكنر-زايتمس، الخلية عبارة عن متعدد وجوه مقام حول عقدة ما من عقد الشبكة محدود بمستويات عمودية على منصفات المستقيمت الواصلة بين هذه العقد والعقد المجاورة لها. خلية فيكنر-زايتمس لها نفس تناظر الشبكة التي هي جزء منها. الشكل 6.1 يمثل خلية فيكنر-زايتمس في شبكة مستوية.



(أ) خلية ممركرة ا (ب) خلية ممركرة الوجوه F (ج) خلية ممركرة القاعدتين C

الشكل 5.1: أنواع الخلية المتعددة.

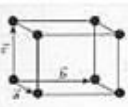


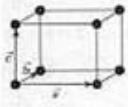
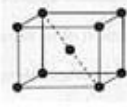
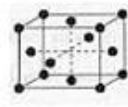
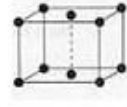
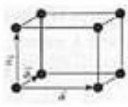
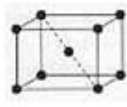

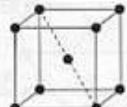
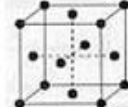
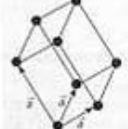
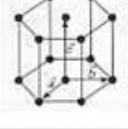


الشكل 6.1: خلية فيكنر-زايتمس في شبكة مستوية.

3 تصنيف الشبكات البلورية

ينتسب إلى عالم البلورات الفرنسي "برافي" تصنيف الشبكات البلورية إلى أربع عشرة شبكة موزعة على سبعة أنظمة بلورية (الجدول 1.1) هذه الشبكات والأنظمة البلورية محدد بعدد الطرق الممكنة لترتيب النقاط أو العقد بحيث تكون البيئة المحيطة بأي نقطة منها مماثلة تماما للبيئة المحيطة بأي نقطة أخرى. وتكون شبكة برافي بسيطة إذا كانت نقاطها عند الأركان فقط ويرمز لها بالحرف (P)، وعندما تشمل على نقاط إضافية في مواضع خاصة فإنها تكون ممركرة الأوجه (F) أو ممركرة الجسم (I) أو ممركرة القاعدتين (C).

جدول 1.1 : شبكات برافي.

الغثة البلورية	بسيطة (P)	ممركرة الجسم (I)	ممركرة الأوجه (F)	ممركرة القاعدتين (C)
ثلاثية الميل Triclinique $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$				
أحادية الميل Monoclinique $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$				
المعينية المستقيمة Orthorhombique $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				
الرباعية Quadratique $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				
المكعبة Cubique $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				
الثلاثية المتساوية الأحرف Rhomboédrique $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$				
السداسية Hexagonal $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$				

1.3 دراسة الشبكة المكعبة

وهي الشبكة التي خليتها الاصطلاحية عبارة عن مكعب: $(\alpha = \beta = \delta = 90^\circ, a = b = c)$
توجد ثلاث أنواع من هذه الشبكات:

1.1.3 الشبكة المكعبة البسيطة (CS)

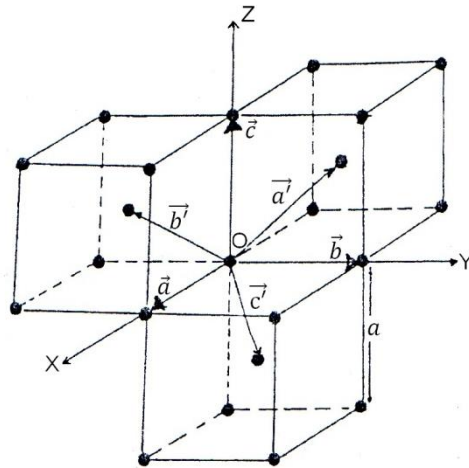
تحتوي فقط على عقد عند الزوايا الركنية للمكعب أي أن المكعب هو خلية أساسية: حجم الخلية الأساسية $V = a^3$. عدد العقد المنسوبة للخلية المكعبة = 1، إحداثياتها: $(0,0,0)$.

2.1.3 الشبكة المكعبة الممركزة (CC)

تحتوي على عقدة وسط المكعب بالإضافة للعقد الثمانية عند الزوايا الركنية، عدد العقد المنسوبة للخلية المكعبة = 2، إحداثياتها: $(0, 0, 0), (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$.

• إيجاد خلية أساسية للشبكة المكعبة الممركزة CC (الشكل 7.1).

أشعة الانسحاب الأساسية $(\vec{a}', \vec{b}', \vec{c}')$ للشبكة CC بدلالة الأشعة $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ (أشعة غير أساسية) المنطبقة على أحرف المكعب الذي طول ضلعه a هي:



الشكل 7.1: أشعة الانسحاب الأساسية للشبكة المكعبة الممركزة (CC).

$$\begin{cases} \vec{a}' = \frac{1}{2}(-\vec{a} + \vec{b} + \vec{c}) \\ \vec{b}' = \frac{1}{2}(\vec{a} - \vec{b} + \vec{c}) \\ \vec{c}' = \frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b} - \vec{c}) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \vec{a}' = \frac{a}{2}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{b}' = \frac{a}{2}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{c}' = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}) \end{cases} \quad (3.1)$$

($\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$) أشعة الوحدة المنطبقة على المحاور (OX, OY, OZ) على الترتيب.

الخلية الأساسية للشبكة CC والتي ترتكز على الأشعة ($\vec{a}', \vec{b}', \vec{c}'$) هو متوازي سطوح طول ضلعه:

$$|\vec{a}'| = |\vec{b}'| = |\vec{c}'| = \frac{a}{2}\sqrt{3}$$

وزاويته تحسب: (الشكل 8.1)

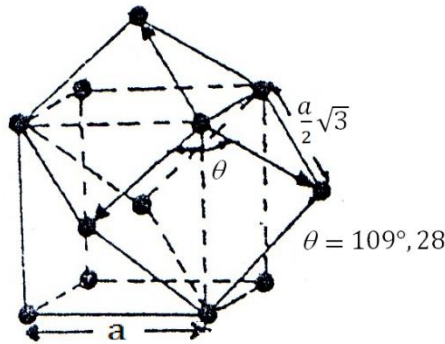
$$\cos \theta = \frac{\vec{a}' \cdot \vec{b}'}{|\vec{a}'| \cdot |\vec{b}'|} = \frac{\frac{a^2}{4}(-1 - 1 + 1)}{\frac{a}{2}\sqrt{3} \cdot \frac{a}{2}\sqrt{3}} = \frac{-a^2/4}{\frac{3}{4} \cdot a^2} = \frac{-1}{3} \rightarrow \theta = 109^\circ, 28$$

حجم الخلية الأساسية للشبكة CC: $V' = |(\vec{a}' \wedge \vec{b}') \cdot \vec{c}'|$

نجد: $\frac{1}{2} = V' = \frac{a^3}{2}$ حجم الخلية الاصطلاحية (تحتوي على عقدتين).

3.1.3 الشبكة المكعبة الممركزة الوجوه (CFC)

تحتوي على عقدة وسط كل سطح من السطوح الستة للمكعب بالإضافة للعقد الثمانية عند زواياه



الشكل 8.1: الخلية الأساسية للشبكة المكعبة الممركزة (CC).

الركنية. عدد العقد المنسوبة للخلية المكعبة = 4، إحداثياتها :

$$(0, 0, 0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right), \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

• إيجاد خلية أساسية للشبكة (CFC) (الشكل 9.1).

أشعة الانسحاب الأساسية $(\vec{a}', \vec{b}', \vec{c}')$ بدلالة الأشعة $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ (أشعة غير أساسية) المنطبقة على أحرف المكعب:

$$\begin{cases} \vec{a}' = \frac{1}{2}(\vec{b} + \vec{c}) \\ \vec{b}' = \frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{c}) \\ \vec{c}' = \frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b}) \end{cases}$$

ومنه:

$$\begin{cases} \vec{a}' = \frac{a}{2}(\vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{b}' = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{k}) \\ \vec{c}' = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j}) \end{cases} \quad (4.1)$$

$(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ أشعة الوحدة في اتجاه المحاور (OX, OY, OZ) على الترتيب.

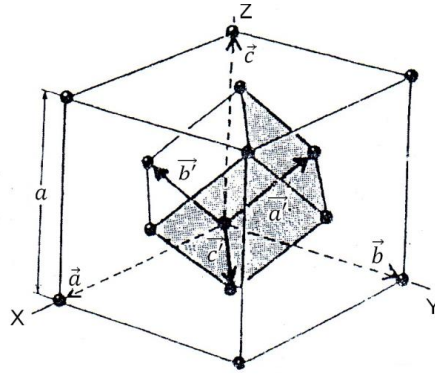
الخلية الأساسية للشبكة CFC المرتكزة على الأشعة $(\vec{a}', \vec{b}', \vec{c}')$ هو متوازي سطوح أضلاعه متساوية
 $|\vec{a}'| = |\vec{b}'| = |\vec{c}'| = \frac{a\sqrt{2}}{2}$ وزاويته تحسب من العلاقة:

$$\cos \theta = \frac{\vec{a}' \cdot \vec{b}'}{|\vec{a}'| \cdot |\vec{b}'|} = \frac{\frac{a^2}{4}}{\frac{a\sqrt{2}}{2} \cdot \frac{a\sqrt{2}}{2}} = \frac{a^2/4}{\frac{a^2}{2}} = \frac{1}{2} \rightarrow \theta = 60^\circ$$

بنفس الطريقة نجد: $(\vec{b}', \vec{c}') = (\vec{a}', \vec{c}') = 60^\circ$.

حجم الخلية الأساسية للشبكة CFC: $V' = |(\vec{a}' \wedge \vec{b}') \cdot \vec{c}'|$

نجد: $\frac{1}{4} = V' = \frac{a^3}{4}$ حجم الخلية الاصطلاحية (تحتوي على 4 عقد).



الشكل 9.1: الخلية الأساسية للشبكة المكعبة الممركزة الوجوه (CFC).

2.3 مصطلحات

1.2.3 العدد التناسقي

يسمى أيضا عدد الجوار المباشر وهو عدد الذرات التي تقع في أقرب جوار لذرة ما في تركيب بلوري.

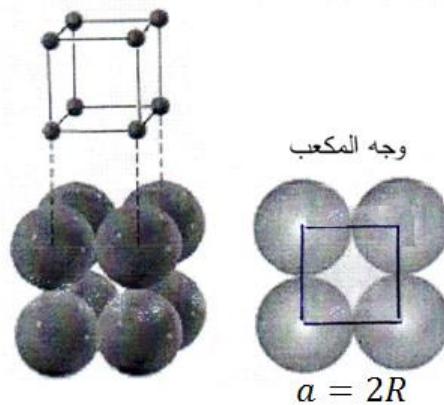
2.2.3 الشعاع الذري

نفترض أن الذرات عبارة عن كرات مصممة متماثلة وغير قابلة للانضغاط نصف قطرها R وأن مراكز هذه الكرات عقدا. ترتب هذه الكرات للحصول على شبكة مكعبة CS، CC و CFC. نحصل على مايلي:

• البنية CS:

عند تعبئة البنية CS فإن الذرات تتلامس في إتجاه أحرف المكعب كما هو موضح في الشكل 10.1.

$$a = 2R \rightarrow R = \frac{a}{2} \quad (5.1)$$

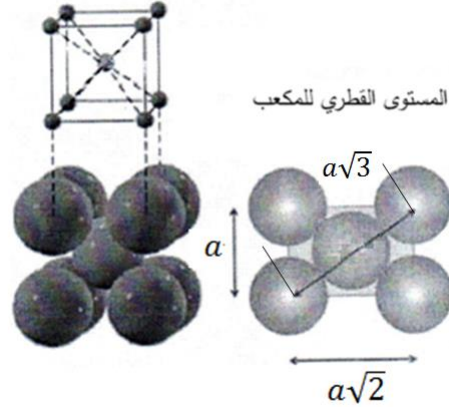


الشكل 10.1: تلامس الذرات في البنية CS.

• البنية CC:

عند تعبئة البنية CC فإن الذرات تتلامس في الاتجاه القطري للمكعب (الشكل 11.1).

$$4R = a\sqrt{3} \rightarrow R = \frac{a\sqrt{3}}{4} \quad (6.1)$$

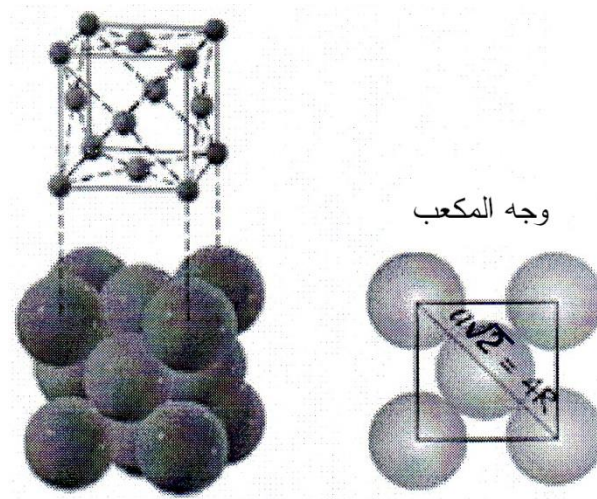


الشكل 11.1: تلامس الذرات في البنية CC.

• البنية CFC:

عند تعبئة البنية CFC تتلامس الذرات في الاتجاه القطري لكل وجه من الوجوه الستة للمكعب كما هو

موضح في الشكل 12.1.



الشكل 12.1: تلامس الذرات في البنية CFC.

$$4R = a\sqrt{2} \rightarrow R = \frac{a\sqrt{2}}{4} \quad (7.1)$$

3.2.3 كثافة التعبئة

هي نسبة الحجم المعبأ من طرف ذرات الخلية على حجم الخلية.

$$c = \frac{nV_{atome}}{V_{maille}} = \frac{n \cdot \frac{4}{3}\pi R^3}{V_{maille}} \quad (8.1)$$

n: هو عدد الذرات في الخلية، V_{atome} حجم الذرة، R نصف قطرها.

• البنية CS:

$$c = \frac{1 \times \frac{4}{3}\pi R^3}{a^3} = \frac{\frac{4}{3}\pi \left(\frac{a}{2}\right)^3}{a^3} = 0,52 = 52\%$$

معنى هذا أن الذرات تشغل فقط 52% من حجم الخلية المكعبة.

• البنية CC:

$$c = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi R^3}{a^3} = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi \left(\frac{a\sqrt{3}}{4}\right)^3}{a^3} = 0,68 = 68\%$$

معنى هذا أن الذرات تشغل فقط 68% من حجم الخلية المكعبة.

• البنية CFC:

$$c = \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi R^3}{a^3} = \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi \left(\frac{a\sqrt{2}}{4}\right)^3}{a^3} = 0,74 = 74\%$$

الذرات تشغل 74% من حجم الخلية المكعبة.

الجدول 2.1 يلخص خواص الشبكة المكعبة.

4 أمثلة على بعض البنيات البلورية البسيطة والشهيرة

1.4 البنية CFC

تتبلور معظم العناصر الكيميائية بشبكات غير معقدة، فيوجد حوالي 20 عنصرا يتبلور مكونا شبكة

CFC (قاعدتها ذرة واحدة) من بينها الغازات النادرة Ne, Ar, Kr, Xe وبعض المعادن مثل: Pt,

....Pb, Ca, Fe_δ, Cu, Al

الجدول 2.1: خواص الشبكة المكعبة.

CFC	CC	CS	نوع الشبكة
a^3	a^3	a^3	حجم الخلية الاصطلاحية
$a^3/4$	$a^3/2$	a^3	حجم الخلية الأساسية
4	2	1	عدد العقد في الخلية الاصطلاحية
12	8	6	العدد التناسقي Z
$\frac{a}{\sqrt{2}}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}a$	a	المسافة بين أقرب عقدتين
$a\frac{\sqrt{2}}{4}$	$a\frac{\sqrt{3}}{4}$	$\frac{a}{2}$	الشعاع الذري R
74	68	52	كثافة التعبئة (%)

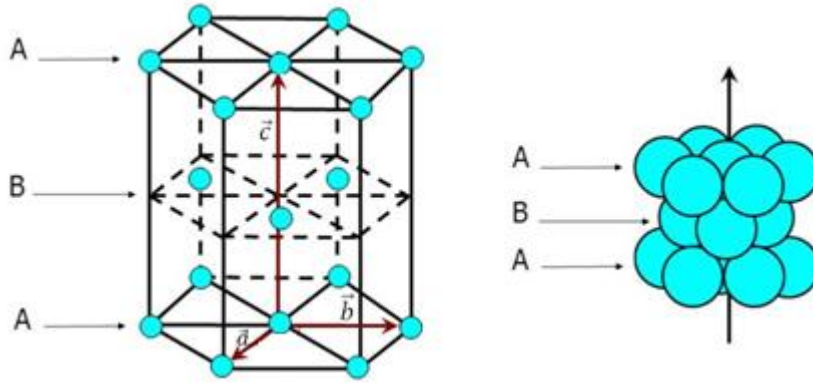
2.4 البنية CC

من بين العناصر المتبلورة في البنية CC نذكر المعادن القلوية: Li, Na, K, Rb, Cs ومن المعادن الانتقالية: V, Cr, Fe $_{\alpha}$.

3.4 البنية السداسية المتراسة HC

البنية السداسية المتراسة HC عبارة عن تسلسل طبقات ... AB, AB. ففي الطبقة A تلامس كل ذرة ست ذرات أخرى تحيط بها، أما الطبقة B تكون بنفس الكيفية بشرط أن تلامس كل ذرة فيها ثلاث ذرات من الطبقة A (الشكل 13.1).

الخلية الموشورية السداسية تحتوي على ثلاثة خلايا أولية وعند أخذ القاعدة عبارة عن ذرة واحدة نتحصل على شبكة ليست برافية ولكن عند أخذ قاعدة تتكون من ذرتين إحداثياتها: $(0,0,0), (\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2})$ تتكون شبكة سداسية بسيطة (شبكة برافية)، خليتها الأساسية مكونة من الأشعة الأساسية $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ حيث $|\vec{a}| = |\vec{b}| = a$ ، $|\vec{c}| = c$ و $\widehat{(\vec{a}, \vec{b})} = 120^\circ$ والشعاع \vec{c} عمودي على المستوى المتكون من الشعاعين \vec{a} و \vec{b} .



الشكل 13.1: البنية السداسية المتراسة HC.

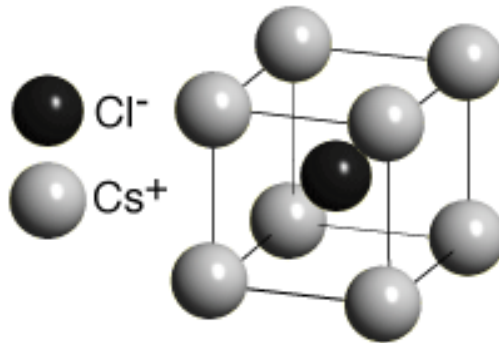
في البنية السداسية المتراسة، العدد التناسقي $Z=12$ ، كثافة التعبئة $C=74\%$ والنسبة $\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}}$ من بين العناصر التي تتبلور في التركيب HC: Be, Mg, Zn, Cd,

4.4 البنية من النوع CsCl

خلية التركيب البلوري لكلوريد السيزيوم CsCl مكعبة ثابتتها $a = 4,12 \text{ \AA}$ ، تحتوي على أيونات Cs^+ في رؤوس المكعب وأيون Cl^- في مركز المكعب (الشكل 14.1). يحيط بكل أيون من نوع معين 8 أيونات من النوع الآخر ($Z=8$).

شبكة برافي لكلوريد السيزيوم مكعبة بسيطة قاعدتها مكونة من أيونين:

$$\text{Cs}^+(0,0,0), \text{Cl}^-\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$



الشكل 14.1: بنية CsCl.

ومن المركبات التي لها بنية CsCl نذكر: CsBr, LiHg, CsI, BeCo, BeNi.

5.4 البنية من النوع NaCl

خلية التركيب البلوري لملاح الطعام (كلوريد الصوديوم) NaCl مكعبة ثابتتها $a = 5,64 \text{ \AA}$ بحيث كل أيون Na^+ يكون محاطا بشكل متناظر بستة أيونات Cl^- والعكس بالعكس ($Z=6$) (الشكل 15.1). تحتوي خلية التركيب البلوري لكلوريد الصوديوم على 4 جزيئات NaCl أيوناتها تحتل المواقع التالية:

$$\text{Cl}^- (0,0,0), \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$$

$$\text{Na}^+ \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2}, 0, 0\right), \left(0, \frac{1}{2}, 0\right), \left(0, 0, \frac{1}{2}\right)$$

أما شبكة برفاي لكلوريد الصوديوم فهي مكعبة ممركة الوجوه CFC قاعدتها متكونة من أيونين:

$$\text{Cl}^- (0,0,0), \text{Na}^+ \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

من بين المركبات الكيميائية التي تتبلور في صورة NaCl نذكر البلورات الأيونية: LiF, LiH, KCl, MgO, CaO, PbS, KBr, AgBr.

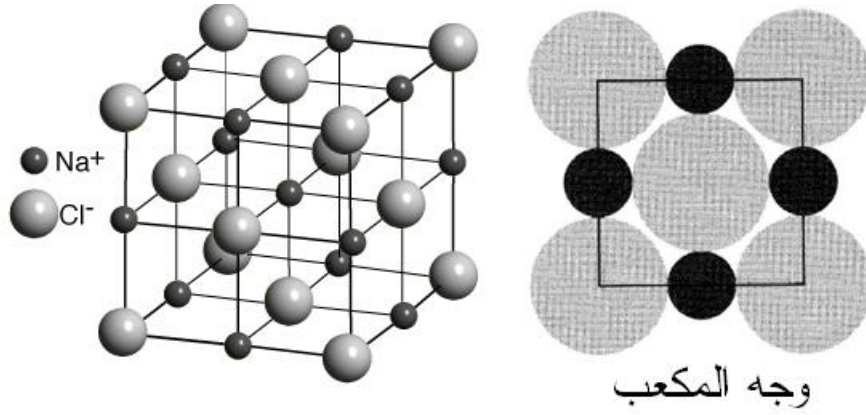
6.4 بنية الماس

الماس هو كربون متبلور، الخلية الاصطلاحية للتركيب البلوري للماس مكعبة تحتوي على ثمانية ذرات كربون، حيث تشغل ذرات الكربون رؤوس المكعب ومراكز وجوهه قاسمة إياه إلى ثمانية مكعبات صغيرة وتحتل أربع ذرات كربون مراكز أربعة من هذه المكعبات، وفي هذه الحالة تحاط كل ذرة كربون بأربع ذرات مجاورة (الشكل 16.1).

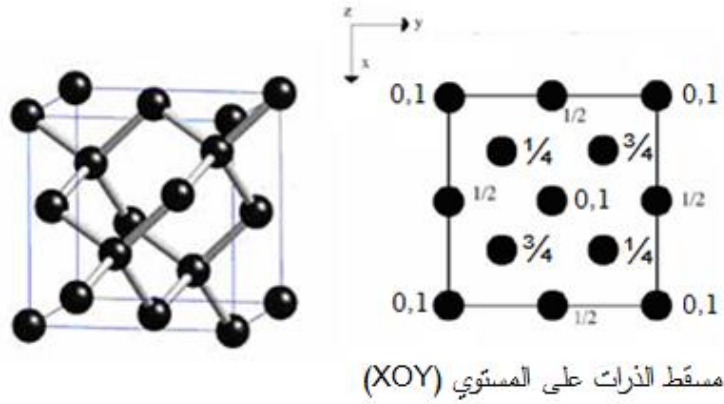
إحداثيات هذه الذرات :

$$(0,0,0), \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$$

$$\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right), \left(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}\right), \left(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right), \left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}\right)$$



الشكل 15.1: بنية NaCl.



الشكل 16.1: بنية الماس.

شبكة الماس ليست برفافية عندما تستبدل كل ذرة بعقدة ولكن يمكن إعتبارها كشبكة برفافي مع قواعد عقدية.

شبكة برفافي للماس هي CFC ومع كل عقدة ترتبط قاعدة متكونة من ذرتين إحداثياتهما: $(0,0,0), \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$.

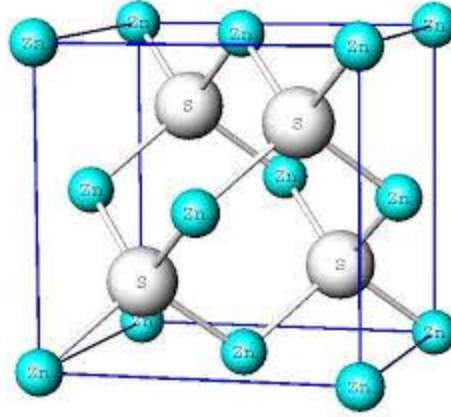
من بين العناصر التي تتبلور في هيئة الماس C (الكربون): Si، Ge.

7.4 بنية ZnS

خلية التركيب البلوري لكبريتيد الزنك ZnS مكعبة تحتوي على 4 ذرات من Zn و 4 ذرات S (الشكل

$$(17.1) \text{ إحداثياتها: } Zn: (0,0,0), \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$$

$$S: \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right), \left(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}\right), \left(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right), \left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}\right)$$



الشكل 17.1: بنية ZnS (blende).

بنية ZnS هي CFC مع قاعدة تتكون من ذرتين: $Zn (0,0,0), S \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)$.

من بين المركبات ذات الصيغة AB التي تتبلور في هيئة الماس نذكر ZnS، CdS، InAs، SiC،... في هذه المركبات تصبح شبكة برفاي هي CFC قاعدتها مشكلة من ذرتين: ذرة صنف A تقع في إحدى مواقع شبكة CFC وذرة من الصنف B تقع أحد مواقع شبكة CFC ثانية مزاحة بالنسبة للشبكة الأولى وبإتجاه قطرها بمقدار ربع القطر.

ملاحظات:

تعرف ظاهرة التآصل في علم البلورات بوجود العنصر في أكثر من شكل بلوري.

- يتبلور المركب ZnS وفق شكلين بلوريين: blende ذو بنية مكعبة وفورترزيت (Wurtzite) ذو بنية سداسية.
- يتبلور الكربون C وفق شكلين: الغرافيت ذو بنية سداسية والماس ذو بنية مكعبة.

5 الاتجاهات البلورية والمستويات البلورية

1.5 مقدمة

إن الخواص الفيزيائية ليست واحدة لجميع الاتجاهات لذلك كان من الضروري إيجاد طريقة لتعيين الاتجاهات ولتحديد المستويات البلورية. هذه الطريقة تعتمد على إختيار محاور بلورية (OX,OY,OZ) بحيث أن مبدأه منطبق على إحدى العقد منطبقة أو موازية إلى أحرف الخلية الاصطلاحية.

2.5 قرائن الاتجاهات (قرائن فيس)

يحدد إتجاه الشعاع البلوري الذي تقع بدايته في مبدأ المحاور بإحداثيات أول عقدة يمر بها. هذه الإحداثيات تسمى بقرائن الاتجاه أو الشعاع. إذا كانت إحداثيات العقدة (uvw) فإن الاتجاه يرمز له $[uvw]$.

ملاحظات:

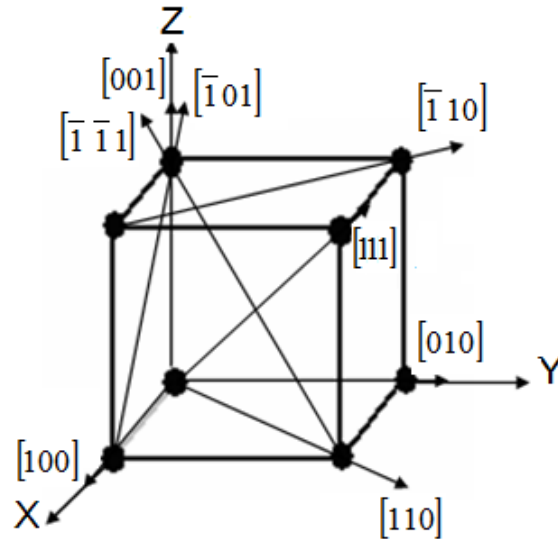
1. إذا تعامد الشعاع مع محور بلوري فإن معامل فيس الموافق له يساوي الصفر.
2. إذا كان مسقط الشعاع على محور معين سالبا يكون معامل فيس الموافق له سالبا.

3.5 عائلة الأشعة المتكافئة

عائلة الأشعة المتكافئة هي الأشعة التي تنطبق على بعضها عند إجراء عملية تناظر خاصة بالبلورة المدروسة. ويستعمل الرمز $\langle uvw \rangle$ للإشارة إلى عائلة الأشعة المتكافئة.

مثال: العائلة $\langle 111 \rangle$ تحتوي على الاتجاهات:

$$\langle 111 \rangle : [111], [\bar{1}11], [1\bar{1}1], [11\bar{1}], [\bar{1}\bar{1}\bar{1}], [\bar{1}1\bar{1}], [1\bar{1}\bar{1}], [1\bar{1}\bar{1}]$$



الشكل 18.1: بعض الاتجاهات البلورية.

4.5 قرائن المستويات (قرائن ميلر)

معاملات ميلر هي طريقة رياضية وصفية لتوجه المستوى البلوري أو مجموعة المستويات البلورية ضمن الشبكة البلورية المتعلقة بخلية الوحدة والتي ابتكرتها العالم ميلر. هذه المعاملات مفيدة لفهم العديد من الظواهر في علم المواد مثل العيوب البلورية وحركتها التي تحدد الخواص الميكانيكية للمادة. تعين معاملات ميلر كما يلي:

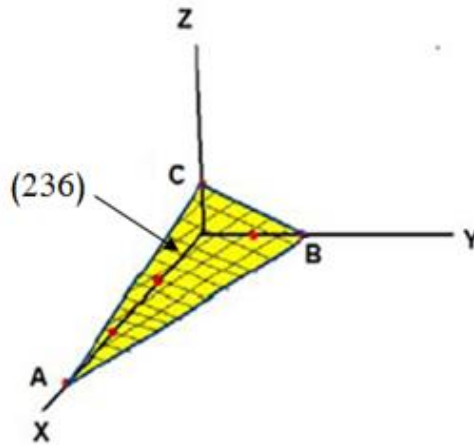
1. تحدد تقاطع المستوى البلوري مع المحاور البلورية (OX, OY, OZ) ونعبر عن إحداثياتها كأعداد بواسطة أطوال المتجهات $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ ولتكن هذه الإحداثيات (m, n, p).
2. نأخذ مقلوب هذه المقاطع $(\frac{1}{m}, \frac{1}{n}, \frac{1}{p})$ ثم نضربها بمضاعفها المشترك الأصغر والنتيجة تمثل قرائن ميلر (hkl) للمستوى البلوري.

مثال:

نقاط تقاطع المستوى مع المحاور (OX, OY, OZ) هي النقاط: A, B, C بنسب 3a, 2b, 1c نأخذ مقلوب هذه الأعداد: 1, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{3}$ وبضرب المقلوبات بمضاعفها المشترك الأصغر 6 نحصل على معاملات ميلر h=2, k=3, l=6 أي: (hkl)=(236) (الشكل 19.1).

ملاحظات:

1. إذا وازى المستوى (hkl) محورا معينا فإن معامل ميلر الموافق لهذا المحور يساوي صفرا.
2. إذا قطع مستوى محور معين من جهته السالبة يكون معامل ميلر الموافق له سالبا ويكتب مثلا \bar{h} .



الشكل 19.1: مثال لتعيين قرائن ميلر لمستوى بلوري.

3. المستوى (200) هو المستوى الموازي لـ (100) ويقطع المحور X في $\frac{a}{2}$.
4. المستوى (hkl) هو مستوى عمودي على الاتجاه البلوري [hkl].

5.5 عائلة المستويات المتكافئة

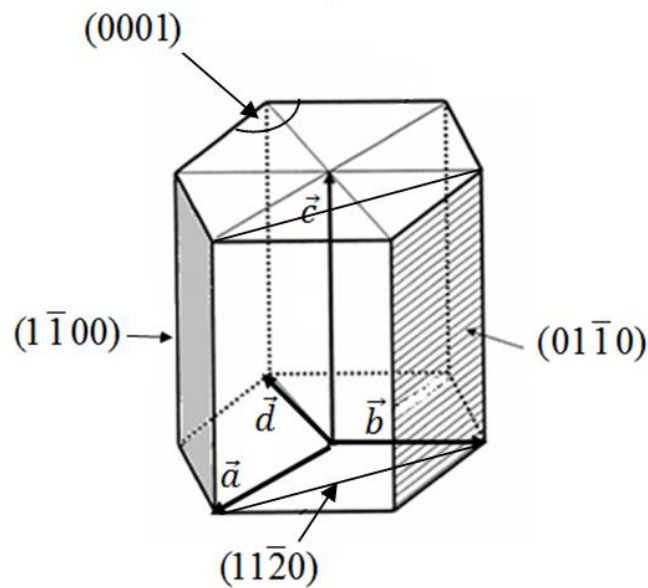
يستعمل الرمز {hkl} لعائلة المستويات المتكافئة (مستويات تشترك مع بعضها بعناصر تناظر خاصة بالبلورة).

مثال: أوجه المكعب تكون العائلة {100} وتشمل المستويات:

$$(100), (010), (001), (\bar{1}00), (0\bar{1}0), (00\bar{1})$$

6.5 معاملات ميلر للشبكات السداسية

تستعمل قرائن ميلر لكافة بلورات الشبكات ما عدا بلورات الشبكة السداسية فإنها توصف باستعمال أربعة قرائن (hkil) موافقة لاستعمال أربعة أشعة $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}, \vec{d})$ حيث الشعاع الإضافي \vec{d} معرف كما يالي: $\vec{d} = -(\vec{a} + \vec{b})$ وتكون الزوايا بين الأشعة $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{d})$ فيما بينها تساوي 120° أما الشعاع \vec{c} فيبقى عمودي على المستوي الحامل $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{d})$ (الشكل 20.1). أما المعاملات فتسمى هنا معاملات (ميلر-برافي) ونستخدم فيها نفس الطريقة السابقة في الحساب لإيجاد معاملات ميلر وقيمة i تكون بالمقابل $i = -(h + k)$.



الشكل 20.1: بعض المستويات البلورية في البنية السداسية.

7.5 الاتجاه المكثف والمستوى المكثف

نسمي الاتجاه المكثف كل اتجاه يحتوي على أكبر عدد ممكن من العقد مقارنة مع الاتجاهات الأخرى وعادة ما يكون في الاتجاه المكثف تلامس للذرات. كما نسمي المستوى المكثف المستوى الحاوي على أكبر عدد من العقد مقارنة بمستويات أخرى.

مثال: في الشبكة المكعبة الممركزة CC فإن $\langle 111 \rangle$ هي عائلة الاتجاه المكثف و $\{110\}$ هي عائلة المستويات الأكثر كثافة.

6 الشبكة المعكوسة

تتمتع الشبكات البلورية بخاصية الدورية الفضائية الناتجة من التناظر الانسحابي. هذه الدورية تشمل التوزيع الإلكتروني لكل ذرة والتوزيع الذري وتوزيع الجهد الكهروستاتيكي داخل البلورة.

لنعتبر الدالة الدورية $f(\vec{r})$ داخل الشبكة والتي تصف خاصية التوزيع الذري، \vec{r} يمثل موضع أي عقدة من العقد.

شروط التناظر الانسحابي للدالة $f(\vec{r})$ يعطى بالعلاقة:

$$f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{T}) \quad (9.1)$$

\vec{T} : شعاع الانسحاب.

حسب نظرية فورييه الفضائية فإن الدالة الدورية $f(\vec{r})$ يمكن أن تكتب على الشكل التالي:

$$f(\vec{r}) = \sum_G F_G e^{i\vec{G}\vec{r}} \quad (10.1)$$

\vec{G} شعاع في فضاء فورييه يسمى شعاع الشبكة المعكوسة وهو يحدد مواقع عقد شبكة معينة تسمى بالشبكة المعكوسة لشبكة برافي (الشبكة المباشرة).

$$f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{T}) \quad \text{لدينا:}$$

$$\begin{aligned} \sum_G F_G e^{i\vec{G}\vec{r}} &= \sum_G F_G e^{i\vec{G}(\vec{r}+\vec{T})} \\ \Rightarrow e^{i\vec{G}\cdot\vec{T}} &= 1 \Rightarrow \vec{G}\cdot\vec{T} = 2\pi q \end{aligned} \quad (11.1)$$

q: عدد صحيح.

1.6 أشعة أساس الشبكة المعكوسة

أشعة أساس الشبكة المعكوسة تعطى بالعلاقات التالية:

$$\begin{cases} \vec{a}^* = \frac{2\pi}{V} (\vec{b} \wedge \vec{c}) \\ \vec{b}^* = \frac{2\pi}{V} (\vec{c} \wedge \vec{a}) \\ \vec{c}^* = \frac{2\pi}{V} (\vec{a} \wedge \vec{b}) \end{cases} \quad (12.1)$$

حيث: $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ الأشعة الأساسية للشبكة المباشرة.

$$V = |(\vec{a} \wedge \vec{b}) \cdot \vec{c}|$$

حجم الخلية الأساسية:

يكتب شعاع الشبكة المعكوسة \vec{G} بدلالة أشعة الأساس:

$$\vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^* \quad (13.1)$$

حيث: h, k و l أعداد صحيحة.

العلاقات: (12.1) تحقق:

$$\begin{cases} \vec{a} \cdot \vec{a}^* = \vec{b} \cdot \vec{b}^* = \vec{c} \cdot \vec{c}^* = 2\pi \\ \vec{a} \cdot \vec{b}^* = \vec{a} \cdot \vec{c}^* = \vec{b} \cdot \vec{a}^* = \vec{b} \cdot \vec{c}^* = \vec{c} \cdot \vec{a}^* = \vec{c} \cdot \vec{b}^* = 0 \end{cases} \quad (14.1)$$

2.6 خواص الشبكة المعكوسة

1. الأشعة $(\vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*)$ تحدد الخلية الأساسية للشبكة المعكوسة (ينتسب لها عقدة واحدة من عقد

الشبكة المعكوسة) حجمها:

$$V^* = \frac{(2\pi)^3}{V} \quad (15.1)$$

2. إذا كان \vec{T} شعاع من الشبكة المباشرة و \vec{G} شعاع من الشبكة المعكوسة فإن: $\vec{T} \cdot \vec{G} = 2\pi q$ عدد

صحيح (العلاقة 11.1).

البرهان:

$$\begin{aligned}\vec{T} &= m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c} \\ \vec{G} &= h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^* \\ \vec{T} \cdot \vec{G} &= (m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}) \cdot (h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*) \\ &= 2\pi(m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}) = 2\pi q\end{aligned}$$

وذلك بإستعمال العلاقات (14.1) و q: عدد صحيح.

3. الشعاع $\vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$ من الشبكة المعكوسة عمودي على المستوى (hkl) من الشبكة المباشرة لجميع شبكات برافي.

4. طول الشعاع $\vec{G}_{(hkl)}$ تساوي $\frac{2\pi}{d_{hkl}}$ حيث d_{hkl} هي المسافة بين المستويات البلورية المتوازية (hkl) العمودية على $\vec{G}_{(hkl)}$.

$$|\vec{G}_{hkl}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}} \quad (16.1)$$

5. الشبكة المعكوسة للشبكة المعكوسة هي الشبكة المباشرة.

3.6 منطقة بريلوان

منطقة بريلوان هي خلية فيكنر-زايتس في فضاء الشبكة المعكوسة وهي خلية أساسية تصميمها يشبه تماما تصميم خلية فيكنر-زايتس في الشبكة المباشرة.

مثال تطبيقي: أوجد الشبكة المعكوسة للشبكة المكعبة الممركزة CC ثم عين منطقة بريلوان الأولى.

الأشعة الأساسية للشبكة المعكوسة تعطى بالعلاقات:

$$\begin{cases} \vec{a}^* = \frac{2\pi}{V} (\vec{b} \wedge \vec{c}) \\ \vec{b}^* = \frac{2\pi}{V} (\vec{c} \wedge \vec{a}) \\ \vec{c}^* = \frac{2\pi}{V} (\vec{a} \wedge \vec{b}) \end{cases} \quad (17.1)$$

$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ الأشعة الأساسية للشبكة CC و V حجمها.

$$\begin{cases} \vec{a}' = \frac{a}{2}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{b}' = \frac{a}{2}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{c}' = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}) \end{cases} \quad (18.1)$$

$$V = \left| (\vec{a}' \wedge \vec{b}') \cdot \vec{c}' \right| = \frac{a^3}{2}$$

بتعويض عبارات $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ (العلاقات 18.1) في العلاقات (17.1) نجد:

$$\begin{cases} \vec{a}^* = \frac{2\pi}{a}(\vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{b}^* = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} + \vec{k}) \\ \vec{c}^* = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} + \vec{j}) \end{cases} \quad (19.1)$$

الأشعة $\vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*$ هي الأشعة الأساسية لشبكة CFC ولكن طول ضلع خليتها الأولية (المكعبة) هو

$$\frac{4\pi}{a}$$

ومنه الشبكة المعكوسة للشبكة CC هي شبكة CFC ثابتها $\frac{4\pi}{a}$.

حدود منطقة بريلوان هي منتصفات الأشعة:

$$\frac{2\pi}{a}(\pm\vec{i}, \pm\vec{j}), \frac{2\pi}{a}(\pm\vec{j}, \pm\vec{k}), \frac{2\pi}{a}(\pm\vec{i}, \pm\vec{k})$$

يوجد 12 شعاع يحدد منطقة بريلوان للشبكة CC على هيئة إثني عشرة معيني (أي له 12 سطحاً

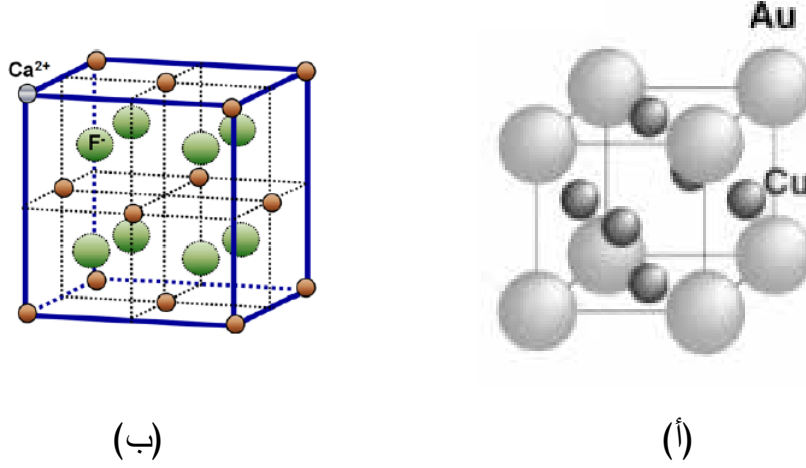
متشابهة بهيئة معين).

تمارين الفصل الأول

التمرين الأول

ليكن التركيبان البلوريان الموضحان في الشكلين (أ) و (ب). المطلوب:

1. معرفة شبكة برافي وإيجاد إحداثيات الذرات المكونة للقاعدة.
2. كتابة الصيغة الكيميائية.



التمرين الثاني

ليكن الجدول الآتي:

العنصر	الكتلة المولية (g/mol)	الكتلة الحجمية (g/cm ³)	نوع الشبكة
Ca	40.1	1.55	CFC
Fe	55.85	7.93	CC

أحسب ثابت الشبكة a (طول ضلع المكعب الأولي) ونصف قطر الذرة r للعنصرين الموجودين في الجدول.

التمرين الثالث

أحسب كثافة التعبئة للتركيبين البلوريين التاليين:

(أ) الماس (ب) التركيب السداسي المتراص (Hcp) مبينا القيمة النظرية للنسبة c/a .

التمرين الرابع

يتبلور كلوريد السيزيوم CsCl في الفئة المكعبة حيث تشغل الأيونات Cl^- الزوايا الركنية للمكعب والأيونات Cs^+ مركز المكعب.

1. ماهي شبكة برافي وإحداثيات الذرات المكونة للقاعدة؟
2. إذا أخذنا الأيون Cs^+ كمرجع فما هو عدد الجوار الأقرب الأول و الثاني وعلى أي مسافة وما هو نوعها.
3. بين أنه لكل بنية من نوع CsCl تتحقق العلاقة: $\frac{r^+}{r^-} > 0.732$ حيث r^+ ، r^- هما نصفي قطر

- الأيون الموجب والسالب على الترتيب.
4. أحسب الكتلة الحجمية للمركب CsCl.

معطيات:

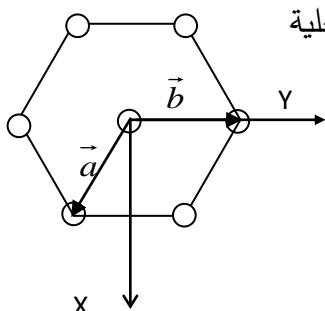
$$r(\text{Cl}^-)=1.81\text{Å}, r(\text{Cs}^+)=1.69\text{Å}, M(\text{Cl})=35.5\text{g/mol}, M(\text{Cs})=132.8\text{g/mol}$$

التمرين الخامس

1. أوجد علاقة عامة لحساب الفواصل بين المستويات المتوازية d_{hkl} في الفئات البلورية المختلفة.
2. إستنتج عبارة d_{hkl} للشبكات الآتية: المكعبة، المعينية المستقيمة، السداسية.
3. أحسب فاصلة المستويات d_{hkl} : (100), (110), (111), (220), (222) بالنسبة للشبكة المكعبة.

التمرين السادس

الخلية الأساسية للشبكة السداسية البسيطة محددة بالوسيطين a و c حيث: $|\vec{a}| = |\vec{b}| = a$ و \vec{c} عمودي على المستوي المتكون من الشعاعين \vec{a}, \vec{b} .



1. إستخرج عبارة الأشعة الأساسية $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ في المعلم (OXYZ) وأحسب حجم الخلية الأساسية.

2. أعط إحداثيات العقد الستة المحاطة بالمركز بالنسبة للأشعة $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$.
3. استخرج عبارة الأشعة الأساسية $\vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*$ للشبكة المعكوسة.
4. مثل الشبكة المعكوسة على نفس المعلم، ماذا تستنتج؟
5. صف وعين منطقة بريلمان الأولى.

الفصل الثاني

إنعراج الأشعة السينية في البلورات

1 مقدمة

يمكن التعرف على التركيب البلوري لمادة ما ودراسة الترتيب الذري في الشبكة البلورية أو حتى تصويره باستخدام أشعة ذات طول موجي يقع في حدود المسافة البينية للذرات والتي تصل لبضع أنغسترومات ($1\text{\AA} = 10^{-10}\text{m}$) وأنسب الموجات لهذا الاستخدام هي موجات الأشعة السينية والموجات المصاحبة للإلكترونات والنيوترونات.

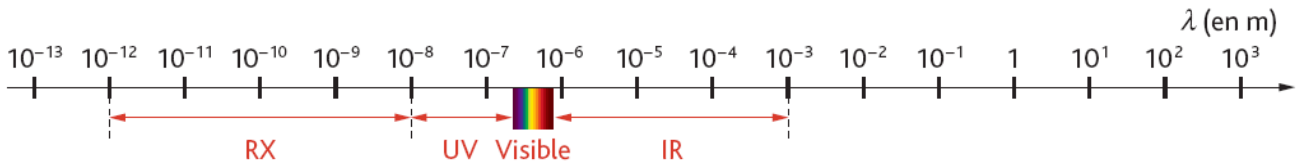
تعتبر طريقة إنعراج الأشعة السينية حتى الآن المصدر الرئيسي لتحديد التركيب الداخلي للبلورات. الأشعة السينية هي نوع من الإشعاعات الكهرومغناطيسية الشديدة النفاذ التي تتميز بطول موجة قصيرة جدا تقع في حدود الانغستروم (الشكل 1.2).

يمكن تقسيم الأمواج السينية المستعملة في التطبيقات إلى نوعين (الشكل 2.2):

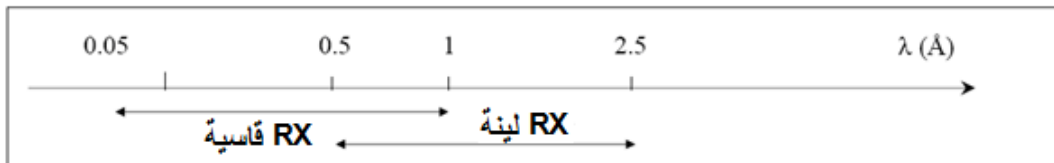
- (أ) الأشعة X القاسية: أطوال موجاتها تتراوح بين $0,1-1\text{\AA}$ ، وتستعمل في المجال الطبي.
 (ب) الأشعة X اللينة: أطول موجاتها تتراوح بين $0,5-2,5\text{\AA}$ وتستعمل في دراسة البلورات.

2 إنتاج الأشعة السينية

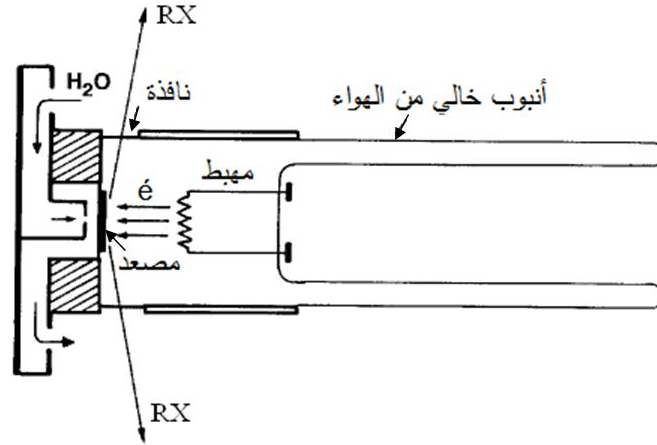
مبدأ إنتاج الأشعة X هو قذف معدن بجزمة من الإلكترونات السريعة، عمليا يتحقق هذا داخل أنبوب خالي من الهواء يحتوي على شعيرة من التانغستان التي تطلق الإلكترونات عند تسخينها بواسطة تيار كهربائي (الشكل 3.2). هذه الإلكترونات تعجل بطاقة حركية جد عالية تحت تأثير فرق جهد مسلط



الشكل 1.2: مخطط الأمواج الكهرومغناطيسية.



الشكل 2.2: مجالات طول موجة RX القاسية واللينة.



الشكل 3.2: أنبوب الأشعة X.

بين قطبين كهربائيين السالب المتصل بالشعيرة والموجب المتصل بالمصعد (عبارة عن معدن ثقيل) عادة: Cu, Co, Al, Cr, Fe, Mo, ... أثناء تصادم الإلكترونات بالمصعد فإنها تفقد أغلب طاقتها الحركية التي تتحول

إلى حرارة مما يؤدي إلى إرتفاع كبير في درجة حرارة المصعد لذلك يبرد هذا الأخير بواسطة الماء الجاري حسب الشكل 3.2. عند إنبعاث الأشعة X من المصدر نترك نوافذ صغيرة تصنع عادة من المعادن الخفيفة (Be) لاستعمالها حسب الطلب.

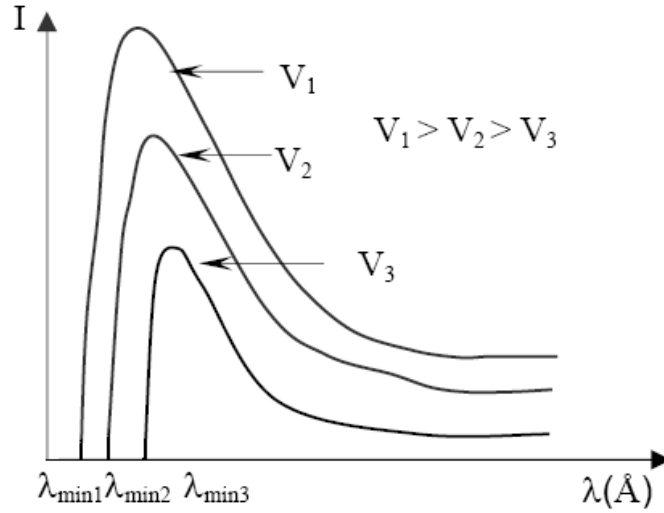
1.2 طيف الأشعة السينية

طيف الأشعة X هي مجموعة أطوال الموجات الصادرة من المصعد. الطيف الناتج تحت جهد مرتفع يتكون من تراكم نوعين من الأشعة السينية: الأشعة الإستيعافية والأشعة المميزة.

1.1.2 الأشعة الإستيعافية

تحت جهد معين يصدر المصعد سلسلة مستمرة من أطوال الموجات X. منحني توزيع شدة الأشعة X بدلالة طول الموجة يأخذ الشكل الموضح في الشكل 4.2.

الإلكترون المسرع تحت فرق جهد V يكتسب طاقة حركية مقدارها eV وعند إصطدامه بالمصعد ودخوله إلى مادته سيعاني تباطؤ كبيراً ويصبح بذلك مصدر لإشعاع الموجات الكهرومغناطيسية، يسمى هذا الإشعاع بإشعاع التباطؤ أو الإستيعاف.



الشكل 4.2: تغيرات طيف الأشعة الاستيعافية بدلالة الجهد المطبق.

المنحنيات $I = f(\lambda)$ تقطع المحور λ عند قيم λ_{min} معينة التي تعتمد على الجهد V المطبق ويفسر هذا بأن طاقة الإشعاع المنبعث لا تكون أكبر من طاقة الإلكترون الابتدائية.

$$h\nu \leq eV$$

$$\frac{hc}{\lambda} \leq eV$$

$$\lambda \geq \frac{hc}{eV}$$

$$\Rightarrow \lambda_{min} = \frac{hc}{eV} \quad (1.2)$$

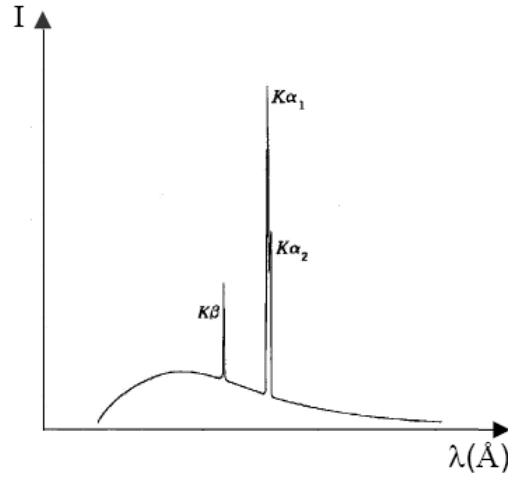
(h: ثابت بلانك: $h = 6,62 \times 10^{-34} J \cdot s$; c: سرعة الضوء $c = 3 \times 10^8 m/s$).

$$\lambda_{min}(A^\circ) \approx \frac{12400}{V(volts)} \quad (2.2)$$

الطيف المستمر له نفس الشكل العام بالنسبة لجميع أنواع المصاعد.

2.1.2 الأشعة المميزة

بزيادة سرعة الإلكترونات القاصفة يمكن أن تظهر أشعة سينية أخرى ناتجة عن تهيج ذرات مادة المصعد لذا تسمى بالأشعة X المميزة. طيف هذه الأشعة متقطع (غير مستمر) نتيجة مصدرها الذري وشدة الأشعة X المميزة تكون كبيرة (الشكل 5.2).



الشكل 5.2: طيف الأشعة X الصادرة من المصعد.

التفسير:

الإلكترون ذو الطاقة العالية عند اصطدامه بذرات مادة المصعد فإنه يقوم بإخراج إلكترون الطبقة K (أو L أو M) وبالتالي سيسقط إلكترون من طبقة أعلى طاقويا (L أو M) ليحل محل الإلكترون المنتزع وأثناء هذا الانتقال يصدر إشعاعا كهرومغناطيسيا طاقته: $\Delta E = h\nu$ ويتم إنتقال الإلكترونات بين الطبقات حسب قواعد الاصطفاء:

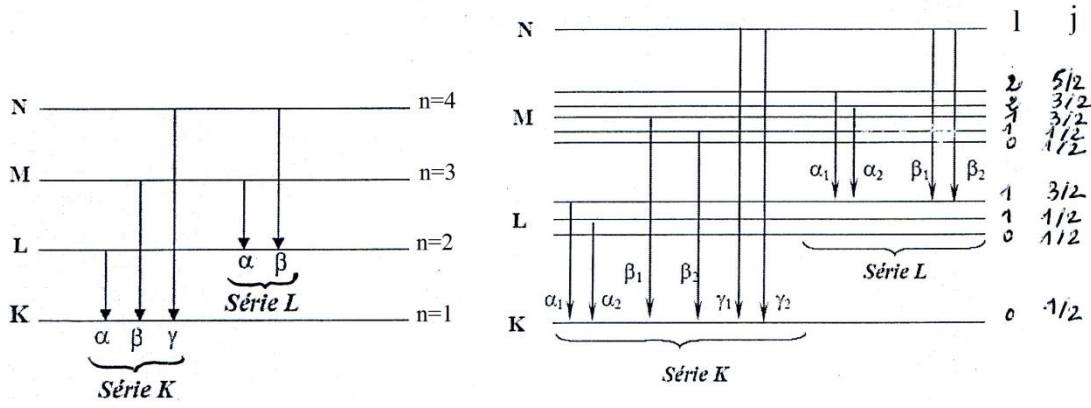
$$\Delta n \geq 1; \Delta l = \pm 1; \Delta j = 0, \pm 1$$

n: العدد الكمي الرئيسي $n = 1, 2, \dots$

l: العدد الكمي المداري $l = 0, \dots, n - 1$

$$j = l + S \text{ الكلي المداري الكمي: } \begin{pmatrix} l = 0, & j = \frac{1}{2} \\ l \neq 0, & j = l \pm \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

إلكترونات المدارات L، M، N، ... التي تسقط إلى الطبقة K تصدر أشعة سينية نسميها سلسلة K عناصرها تسمى حسب مصدر إنتقال الإلكترون أي حسب زيادة تردد الإشعاع بالأحرف α, β, δ (الشكل 6.2). أي خط طيفي من خطوط سلسلة ما يتكون من خطين دقيقين منفصلين أو أكثر تسمى هذه الحالة بحالة التركيب الدقيق وهذا ناتج عن انقسام سوى الطاقة L أو M إلى عدة سويات طاقة فرعية التي توصف بالأعداد الكمية: n, l, j (أنظر الشكل 6.2).



الشكل 6.2: مخطط الإنتقالات الإلكترونية الصادرة للأشعة المميزة.

الجدول 1.2 يعطي قيم أطوال الموجات للسلسلة K للأشعة المميزة الصادرة عن المعادن المستعملة في أنبوب الأشعة X.

جدول 1.2: أطوال موجات السلسلة K لبعض المعادن المستعملة في أنبوب الأشعة X.

العنصر	$K_{\alpha 1}(A^\circ)$	$K_{\alpha 2}(A^\circ)$	$K_{\alpha}(A^\circ)$	$K_{\beta 1}(A^\circ)$
Ag	0.55941	0.56380	0.56084	0.49707
Mo	0.70930	0.71359	0.71073	0.63229
Cu	1.54056	1.54439	1.54184	1.39222
Ni	1.65791	1.66175	1.65919	1.540014
Co	1.78897	1.79026	1.79026	1.62079
Fe	1.93604	1.93998	1.93998	1.75661
Cr	2.28970	2.29100	2.29100	2.08487

$$\lambda K_{\alpha} = \frac{2\lambda K_{\alpha 1} + \lambda K_{\alpha 2}}{3} \quad (3.2)$$

3 إمتصاص الأشعة السينية

عند مرور حزمة من الأشعة X شدتها I_0 عبر مادة سمكها L يحدث نقصان في شدة الأشعة وذلك بسبب إمتصاص المادة لها.

تعطى عبارة الشدة النافذة I عبر السمك L بالعلاقة:

$$I = I_0 e^{-\mu L} \quad (4.2)$$

μ : معامل الامتصاص الخطي وحدته cm^{-1} .

I_0 : الشدة الابتدائية.

I : الشدة النافذة.

L : سمك المادة.

نميز صيغ أخرى لمعامل الامتصاص.

• معامل الامتصاص الكتلي:

$$\mu_m \left(\frac{\text{cm}^2}{\text{g}} \right) = \frac{\mu}{\rho} \quad (5.2)$$

• المعامل الذري للامتصاص:

$$\mu_a \left(\frac{\text{cm}^2}{\text{atome}} \right) = \frac{\mu}{\rho} \cdot \frac{M}{Na} \quad (6.2)$$

حيث:

M : الكتلة المولية، Na : عدد أفوقادرو، ρ : الكتلة الحجمية.

• المعامل المولي للامتصاص:

$$\mu_{\text{mol}} \left(\frac{\text{cm}^2}{\text{mol}} \right) = \frac{\mu}{\rho} \cdot M \quad (7.2)$$

المعاملات السابقة مرتبطة مع بعضها بالعلاقة:

$$\mu = \mu_m \cdot \rho = \mu_a \cdot \rho \left(\frac{Na}{M} \right) = \mu_{\text{mol}} \cdot \frac{\rho}{M} \quad (8.2)$$

ومن هذه المعاملات يستعمل μ_m بكثرة وهو لا يتعلق بحالة المادة (غاز-سائل-صلب).

عند أخذ خليط من المادة فإن معامل امتصاصها يعطى بالعلاقة:

$$\begin{aligned} (\mu_m)_{A,B\dots} &= C_A(\mu_m)_A + C_B(\mu_m)_B + \dots \\ &= \sum_k C_k(\mu_m)_k \end{aligned} \quad (9.2)$$

C_k : التركيز الكتلي للعنصر k .

توجد جداول تعطى μ_m لمختلف العناصر في حالة مركبات بسيطة.

معامل الامتصاص الكتلي خاصية ذرية تعتمد على طول موجة الأشعة X وعلى العدد الذري للمادة الممتصة.

يرجع سبب نقصان شدة الأشعة X عند مرورها خلال مادة إلى ثلاث ظواهر: الظاهرة الكهروضوئية، ظاهرة أوجي "Auger" وحدوث إنحراف للأشعة وخروجها من الحزمة. ففي ظاهرة الإنحراف لا يمتص فوتون الأشعة السينية الساقطة حقيقة بل ينحرف عند مسار حزمته. أما الظاهرة الكهروضوئية فيتم إمتصاص الفوتونات من طرف إلكترونات ذرات المادة وبالتالي ستتطلق من مداراتها فتعوض بنزول إلكترونات أخرى من طبقات عليا فتشع عندئذ أشعة سينية متقلورة (ثانوية) والتي يمكن أن تمتص من طرف إلكترون آخر لينطلق بعيدا عن مداره يسمى بالإلكترون أوجي.

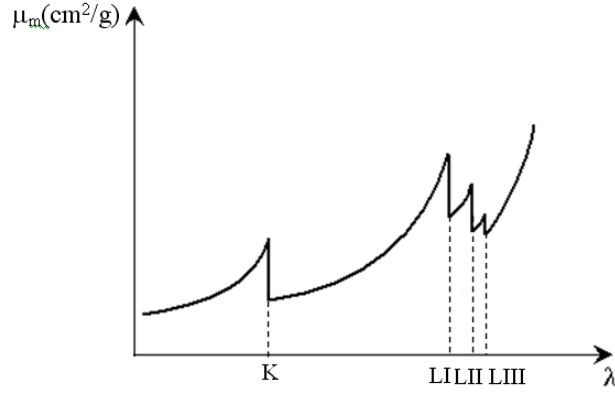
1.3 مخطط تغير معامل الامتصاص الكتلي بدلالة طول موجة الأشعة X

مخطط معامل الامتصاص الكتلي μ_m بدلالة λ لمادة ممتصة يأخذ الشكل 7.2.

نلاحظ من المنحنى ما يلي:

- نقصان الإمتصاص بنقصان طول الموجة (لأن زيادة طاقة الأشعة X يزيد من قابليتها على إختراق المواد).

- تقطعات حادة في الإمتصاص عند زيادة طول الموجة وتوافق جميع هذه التقطعات (الحافات) طول موجة الأشعة السينية القادرة على نزع إلكترون من الطبقة K (تسمى عندئذ الحافة K) أو الطبقات L_I, L_{II}, L_{III} تسمى (الحافة L_I, L_{II}, L_{III}).



الشكل 7.2: مخطط تغير μ_m بدلالة طول موجة الأشعة X.

معامل الامتصاص الكتلي لمادة يتغير مع طول الموجة λ وعددها الذري Z وفق علاقة براغ-بيرس:

$$\frac{\mu}{\rho} \propto Z^4 \lambda^3 \quad (10.2)$$

الجدول 2.2 يعطي قيم معامل الامتصاص الكتلي لبعض العناصر بدلالة طول الموجة $\lambda k_\alpha(Cu)$ و $\lambda k_\alpha(Mo)$.

الجدول 2.2: قيم معامل الامتصاص الكتلي μ_m لبعض العناصر.

Z	العنصر	$\mu_m \left(\frac{\text{cm}^2}{\text{g}} \right)$	
		$\lambda k_\alpha(Cu) = 1.54 \text{ \AA}$	$\lambda k_\alpha(Mo) = 0.71 \text{ \AA}$
4	Be	1.5	0.3
5	B	2.39	0.39
13	Al	48.6	5.16
47	Ag	218	25.8
48	Cd	231	27.5
82	Pb	232	120

2.3 تطبيقات الامتصاص

تستخدم ظاهرة إمتصاص الأشعة X ووجود حافات الامتصاص لصناعة المرشحات التي تهدف إلى فصل خط سيني معين (ذو طول موجة معينة) من الخطوط السينية المجاورة له.

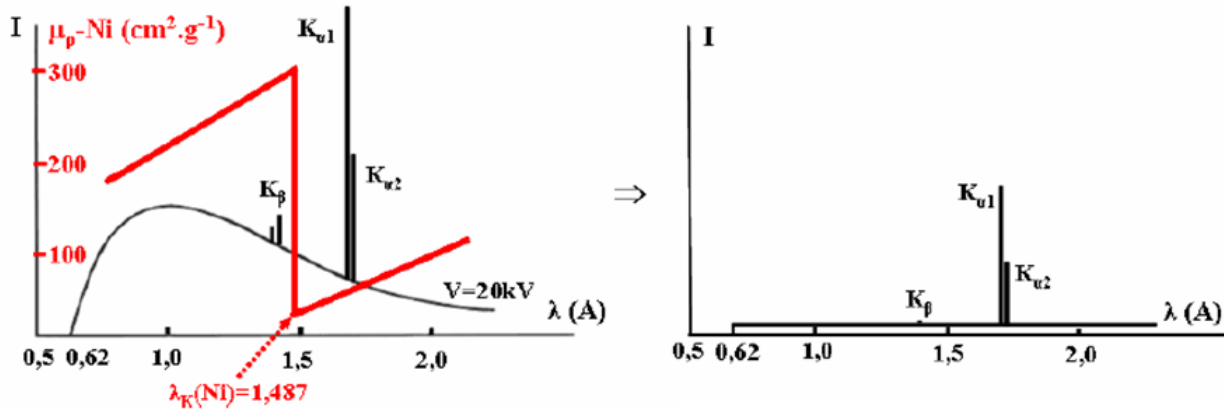
مثال: نستخدم طيف الأشعة السينية لمصدر النحاس يحتوي على الخطين:

صفيحة مرشحة مادتها هو عنصر له حافة امتصاص أقل بقليل من الخط k_{β} لو نأخذ معدن Ni فإن: $k_{\alpha} < \lambda_k(Ni) < k_{\beta}$ فإنه يقوم بامتصاص الخط k_{β} تاركاً الخط k_{α} يمر بدون امتصاص كبير (الشكل 8.2).

عادة نأخذ:

$$Z_{\text{مرشح}} = Z_{\text{مصدر}} - 1 \quad (11.2)$$

$$\text{إذن: } Z_{Ni}(28) = Z_{Cu}(29) - 1$$



طيف الأشعة السينية لمصدر Cu قبل إستعمال المرشح Ni

طيف الأشعة السينية لمصدر Cu بعد إستعمال المرشح Ni

الشكل 8.2: مبدأ ترشيح الأشعة السينية.

4 إنعراج الأشعة السينية في البلورات

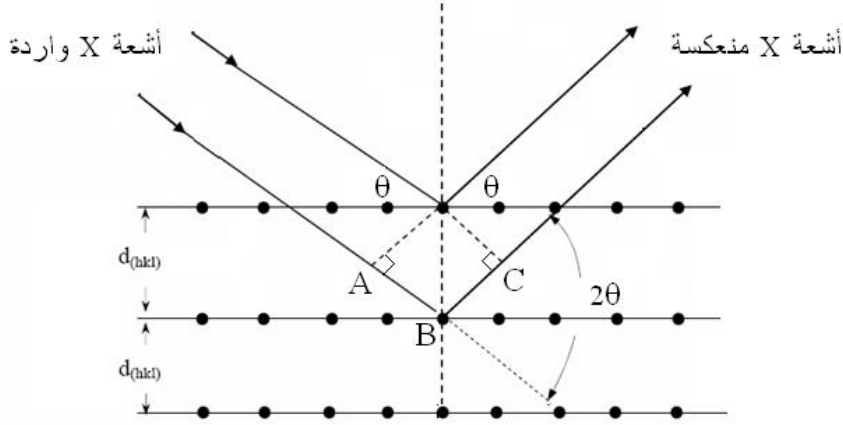
1.4 ظاهرة الانعراج

من بين تفاعلات الأشعة X مع المادة نأخذ الإنتشار المرن التي تبقى فيه طاقة الأشعة X محفوظة ($\lambda = Cste$) يحدث هذا التفاعل على النحو التالي:

- إهتزاز إلكترونات المادة بفعل الحقل الكهرومغناطيسي للأشعة X.
- بهذا الفعل تصبح كل ذرة من المادة منبع للأشعة X بنفس طول الموجة λ .
- إن شدة أشعة X المنتشرة من ذرة من المادة متناهية في الصغر مقارنة بأشعة X الواردة ولها عدة إتجاهات حيث لا يمكن ملاحظتها عمليا.
- عند أخذ جميع ذرات المادة فيمكن للأموح المنتشرة منها (بنفس طول الموجة) أن تتداخل فيما بينها تداخلا بناءا لتعطي أشعة يمكن رؤيتها عمليا، يحدث هذا عند إتجاهات معينة دون سواها وتسمى هذه الظاهرة بإنعراج الأشعة X.

2.4 قانون براغ

تمكن براغ من فرض نموذج بسيط للتركيب البلوري يمكن بواسطته معرفة إتجاه حيود الأشعة السينية من البلورة بعد سقوطها عليها. وفي هذا النموذج إفترض براغ أن المستويات المختلفة التي تتكون من ذرات البلورة يمكن أن تعكس الأشعة السينية مثلما تنعكس الأشعة العادية عن مرآة مستوية (زاوية السقوط تساوي زاوية الانعكاس) وإن كل مستو ذري لا يعكس سوى جزء صغير من الإشعاع الوارد، وهذا يتفق مع ما هو معروف من قدرة الأشعة السينية على النفوذ داخل البلورة. وتكون شدة الأشعة المنعكسة في إتجاه معين على المستويات المتوازية قوية إذا كانت أمواجها متفقة في الطور، أي كانت فروق المسير بينها مساوية عددا صحيحا من طولها الموجي ($\Delta = n\lambda$)، لأنها تتداخل عندئذ تداخلا بناءا يؤدي إلى زيادة شدتها. أما الأشعة التي لا تحقق هذا الشرط فتكون شدتها ضعيفة ولا ترصد.



الشكل 9.2: مبدأ قانون براغ للإنعراج.

$$\begin{aligned}
 \Delta &= AB + BC \\
 &= d_{hkl} \sin \theta + d_{hkl} \sin \theta \\
 &= 2 d_{hkl} \sin \theta \\
 \Rightarrow 2 d_{hkl} \sin \theta &= n\lambda \quad (12.2)
 \end{aligned}$$

تسمى هذه المعادلة بقانون براغ حيث:

θ : زاوية سقوط الأشعة.

λ : الطول الموجي للأشعة.

n : عدد صحيح يسمى رتبة الانعكاس.

d_{hkl} : المسافة بين المستويات المتوازية (hkl) .

ملاحظات:

1. من المعادلة: $2 d_{hkl} \sin \theta = \lambda$ ونعلم أن: $\lambda \leq 2 d_{hkl} \leftarrow \sin \theta \leq 1$ وبما أن d_{hkl} في

حدود الأنغستروم (A°) فإن $\lambda \approx A^\circ$ وهذا يتحقق من أجل الأشعة السينية.

2. تسمى العلاقة $2 d_{hkl} \sin \theta = \lambda$ بالانعراج من الرتبة 1 وهذا الانعراج ناتج عن المستويات

المتوازية (hkl) والتي فاصلتها d_{hkl} .

يمكن للمستويات (nh, nk, nl) أن تعطي نفس الإنعراج بحيث: $2 d \sin \theta = \lambda$ (الفاصلة بين المستويات $(nh nk nl)$ و $d = \frac{d_{hkl}}{n}$)

إذن: $2 \frac{d_{hkl}}{n} \sin \theta = \lambda$ ومنه: $2 d_{hkl} \sin \theta = n\lambda$

بما أن λ وحيدة اللون فإن الإنعراجات من الرتبة n تظهر إذا غيرنا θ .

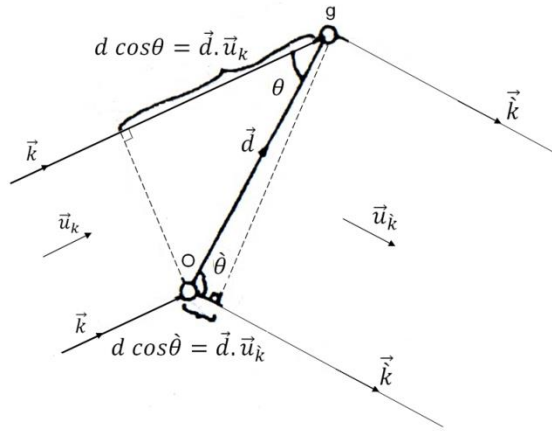
وبصفة عامة يحدث الإنعكاس من الرتبة n من مجموعة مستويات توازي المستويات (hkl) والمسافة بينها $d = \frac{d_{hkl}}{n}$ وقرائنها $(nh nk nl)$.

مثلا: إنعكاسات الرتبة 2 من المستويات (100) تعود إلى الانعكاسات (200).

3.4 تفسير لاوي لإنعراج الأشعة السينية

عند سقوط الأشعة السينية على عقد الشبكة البلورية التي تسمى هنا مراكز التشتت فإنها تمتص ويعاد إشعاعها في جميع الإتجاهات فتتداخل مع بعضها فإذا كان التداخل الناشئ من هذه الإشعاعات المتشنتة من كل عقدة في البلورة تداخلا بناءا عندئذ تظهر هذه على لوحة الإنعراج كقمة نسميها إنعكاس براغي.

ندرس أولا مركزين للتشتت (g, o) المسافة بينهما d تكتب شعاعيا \vec{d} (الشكل 10.2) شعاع الموجة السينية الساقطة $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{u}_k$ حيث \vec{u}_k وحدة شعاع \vec{k} ونفرض أن \vec{k} هو شعاع الموجة المنعكسة في إتجاه معين وهو يساوي $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{u}_k$ حيث \vec{u}_k وحدة الشعاع \vec{k} .



الشكل 10.2: تفسير لاوي لإنعراج الأشعة السينية.

وشرط التداخل البناء بين موجتين يعتمد على فرق المسار Δ بينهما ومن الشكل 10.2 يتبين أن فرق المسار بين الموجتين المنعكستين في اتجاه $\vec{u}_{\vec{k}}$ هو:

$$\Delta = |\vec{d}\vec{u}_k - \vec{d}\vec{u}_{\vec{k}}| = |\vec{d} \cdot (\vec{u}_k - \vec{u}_{\vec{k}})| \quad (13.2)$$

وفرق الطور يساوي:

$$\varphi = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta = |\vec{d} \cdot (\vec{k} - \vec{k})| = \vec{d} \cdot \Delta \vec{k} \quad (14.2)$$

وشرط التداخل البناء هو أن يكون فرق المسار مساويا عددا صحيحا من طول الموجة $\Delta = m\lambda$ حيث m عدد صحيح ومنه:

$$\vec{d} \cdot \Delta \vec{k} = 2\pi m \quad (15.2)$$

وينتج من الشرط (15.2) أن التداخل البناء يحدث بإتجاهات معينة للأشعة المنعرجة.

وبما أن عقد الشبكة مزاحة عن بعضها البعض بالأشعة \vec{T} لذلك يمكن تعميم المعادلة (15.2) وكتابة شرط التداخل البناء بالصورة:

$$\vec{T} \cdot \Delta \vec{k} = 2\pi m \quad (16.2)$$

إن الشعاع $\Delta \vec{k}$ يحقق الشرط (16.2) إذا تحققت في نفس الوقت المعادلات الثلاثة التالية:

$$\begin{cases} \vec{a} \cdot \Delta \vec{k} = 2\pi h \\ \vec{b} \cdot \Delta \vec{k} = 2\pi k \\ \vec{c} \cdot \Delta \vec{k} = 2\pi l \end{cases} \quad (17.2)$$

وهي معادلات لاوي للإنعراج حيث h, k, l هي أعداد صحيحة تحقق المعادلة:

$$\vec{T} = n_1 \cdot \vec{a} + n_2 \cdot \vec{b} + n_3 \cdot \vec{c} \quad \text{و} \quad hn_1 + kn_2 + ln_3 = m$$

وشرط التداخل البناء المعادلة (16.2) أو (17.2) يمكن أن يكتب بالصورة التالية:

$$e^{i(\vec{T} \cdot \Delta \vec{k})} = 1 \quad (18.2)$$

لأن : $e^{i2\pi m} = 1$ حيث m عدد صحيح. وبمقارنة المعادلة (18.2) مع المعادلة $e^{i(\vec{T} \cdot \vec{G})} = 1$ المحددة للأشعة الأساسية للشبكة المعكوسة يتضح أن شرط حدوث التداخل البناء (أي حل معادلات لاوي) هو:

$$\vec{G} = \vec{k} - \vec{k} \Rightarrow \vec{\Delta k} = \vec{G} \quad (19.2)$$

ومن هنا يتضح شرط التداخل البناء هو ضرورة تساوي التغير بشعاع الموجة نتيجة الإنعراج مع أحد أشعة الشبكة المعكوسة \vec{G} .

حيث: $\vec{G} \cdot \vec{T} = 2\pi m = 2\pi(hn_1 + kn_2 + ln_3)$ لكي يكون $\vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$

وبما أن الشعاع \vec{G} من الشبكة المعكوسة عمودي على المستوى (hkl) لذلك فإن الأعداد الصحيحة h, k, l في معادلات لاوي هي بالذات قرائن ملر للمستويات البلورية.

4.4 تكافؤ شرط براغ وشرط لاوي

يمكن إستنتاج تكافؤ تفسيرات براغ ولاوي لإنعراج الأشعة السينية في البلورات من علاقة الشعاع الأساسي للشبكة المعكوسة ومجموعة المستويات البلورية. من شرط التداخل البناء للاوي هو:

$$\vec{\Delta k} = \vec{G}_{hkl} \text{ حيث } k = \vec{k} \text{ ونعلم أيضا أن } \vec{G}_{hkl} \perp (hkl).$$

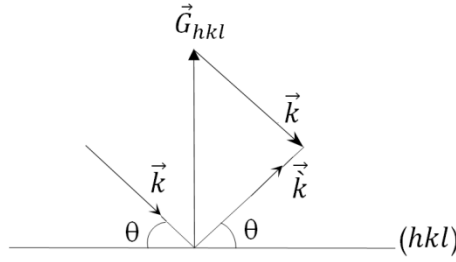
من الشكل (11.2) يمكن إستنتاج أن الشعاعين \vec{k} و \vec{k} يشكلان نفس الزاوية مع المستوى (hkl) العمودي على الشعاع \vec{G}_{hkl} . لهذا يمكن النظر إلى الإنعراج بطريقة لاوي كعملية إنعكاس المرآة عن المستويات البلورية المتوازية والعمودية على \vec{G}_{hkl} . مثل هذا الإنعكاس إفترضه براغ.

من الشكل (11.2) نجد:

$$k = \vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\frac{G_{hkl}}{2} = k \sin\theta$$

$$G_{hkl} = 2k \sin\theta \Rightarrow G_{hkl} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin\theta$$



الشكل 11.2: تكافؤ شرط براغ وشرط لاوي.

ونعلم أن شعاع الشبكة المعكوسة \vec{G} أكبر بعدد صحيح من المرات من الشعاع \vec{G}_0 أصغر شعاع للشبكة المعكوسة يوازي \vec{G} ويحقق المعادلة $G_0 = \frac{2\pi}{d_{hkl}}$ حيث d_{hkl} فاصلة المستويات المتوازية العمودية على \vec{G} أو \vec{G}_0 ، أي أن:

$$G_{hkl} = \frac{2\pi n}{d_{hkl}} \quad (20.2)$$

حيث n عدد صحيح.

إذن:

$$\frac{n2\pi}{d_{hkl}} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin\theta$$

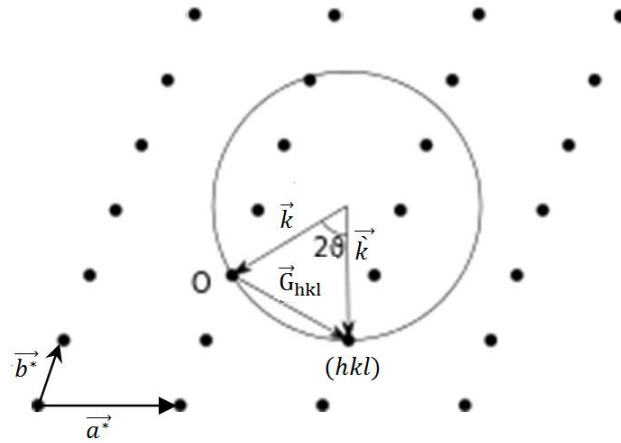
$$\Rightarrow 2d_{hkl} \sin\theta = n\lambda$$

ومنه نستنتج أن فرضيات براغ ومعادلته موجودة ضمناً في شرط لاوي للإنعراج.

5.4 بناء إيوالد

عمل إيوالد بناءاً هندسياً يستخدم النتائج التجريبية في توزيع القيم العظمى لمخطط إنعراج الأشعة السينية لغرض الحصول على التركيب البلوري للمواد.

بناء إيوالد يتلخص فيما يلي : نصمم الشبكة المعكوسة للتركيب البلوري المدروس ونأخذ إحدى عقدها كمركز للشبكة المعكوسة "O" منطبقاً على رأس الشعاع \vec{k} للموجة الساقطة الذي طوله $\frac{2\pi}{\lambda}$ وإتجاهه هو نفس إتجاه الأشعة السينية الساقطة على البلورة المدروسة. يرسم في فضاء الشبكة المعكوسة كرة (تسمى كرة الإنعكاس) مارة بالعقدة "O" ومركزها منطبق على بداية الشعاع \vec{k} أي نصف قطرها $\frac{2\pi}{\lambda}$ (الشكل 12.2).



الشكل 12.2: بناء إيوالد في الشبكة المعكوسة.

بصورة عامة، لا يمر سطح هذه الكرة بأية عقدة أخرى عدا العقدة "O" ولكن عند تحقق شرط لاوي تقع على سطح هذه الكرة عقدة أخرى إحداثياتها في الفضاء العكسي هي (hkl) . الشعاع الرابط بين العقدين هو شعاع الشبكة المعكوسة \vec{G}_{hkl} . وطبقا للمعادلة (19.2) نحدد إتجاه الموجة المنعرجة \vec{k} المحقق لشرط التداخل البناء أي إستنتاج وجود إنعكاس براغي من مجموعة المستويات المتوازية (hkl) (في الشبكة المباشرة) العمودية على \vec{G}_{hkl} .

6.4 شدة الأشعة المنعرجة ومعامل البنية

تعطى شدة الأشعة المنعرجة I_{hkl} عن مستوى (hkl) بالعلاقة النظرية:

$$I_{hkl} = |F_{hkl}|^2 \cdot LP(\theta) \cdot D(\theta) \cdot A \cdot m_{hkl} \quad (21.2)$$

حيث:

m_{hkl} : معامل التكرار.

LP : معامل لونتز - الإستقطاب حيث:

$$LP(\theta) = \frac{1 + \cos^2 2\theta}{\sin^2 \theta \cdot \cos \theta} \quad (22.2)$$

D : معامل درجة الحرارة:

$$D = \exp\left(-\beta_j \frac{\sin^2 \theta}{\lambda^2}\right) \quad (23.2)$$

β_j : عامل ديبياي - ويلر للاهتزاز الحراري للذرة j .

A : معامل الامتصاص.

F_{hkl} : معامل البنية.

يعطى F_{hkl} بالعلاقة:

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^S f_j \exp 2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j) \quad (24.2)$$

S : عدد الذرات في الخلية.

(x_j, y_j, z_j) : إحداثيات الذرة j في الخلية.

f_j : معامل التشتت الذري للذرة j (بتغيير بدلالة θ و λ).

1.6.4 حساب معامل البنية للشبكة المكعبة

يمكن حساب معامل البنية F_{hkl} للبنيات البلورية باستعمال العلاقة (24.2). لنحسب هذا المعامل من

أجل شبكات الفئة المكعبة: Cs، CC، CFC.

(أ) في حالة Cs:

عدد الذرات في الخلية: $S=1$ إحداثياتها $(0,0,0)$.

$$F_{hkl} = f \exp 2\pi i (h.o + k.o + l.o)$$

$F_{hkl} \neq 0$ إذن تنعرج الأشعة X عن جميع المستويات (hkl) .

(ب) في حالة CC:

عدد الذرات في الخلية: $S=2$ إحداثياتها $(0,0,0), (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

$$F_{hkl} = f_1 \exp 2\pi i (h.o + k.o + R.o) + f_2 \exp 2\pi i (\frac{h}{2} + \frac{k}{2} + \frac{R}{2})$$

بما أن الذرات متماثلة: $f_1 = f_2 = f$

$$\begin{aligned} F_{hkl} &= f + f \exp 2\pi i (h + k + l) \\ &= f(1 + \exp 2\pi i (h + k + l)) \end{aligned}$$

$$= f(1 + (-1)^n)$$

حيث: $n = h + k + l$ (n : عدد صحيح).

نميز حالتين:

$$F_{hkl} = \begin{cases} 2f: \text{عدد زوجي } n \\ 0: \text{عدد فردي } n \end{cases}$$

إذن في التركيب CC تختفي الانعكاسات عن المستويات البلورية عندما يكون مجموع قرائنها عددا فرديا.

(ج) حالة CFC:

عدد الذرات في الخلية هو $S=4$ وإحداثياتها: $(0,0,0), (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}), (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}), (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$

$$\text{نجد: } F_{hkl} = f(1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)})$$

نميز حالتين:

• h, k, l مختلطة (أي أن أحد القرائن فردي والباقيان زوجيان أو العكس). فإن

$$F_{hkl} = 0$$

• h, k, l غير مختلطة (أي كلها أعداد زوجية أو كلها فردية) فإن: $F_{hkl} = 4f$.

5 الطرق التجريبية لإنعراج الأشعة X في البلورات

1.5 مقدمة

يستخدم إنعراج الأشعة X بواسطة البلورات لتعيين تركيبها البلوري، وتعتمد الطرق التجريبية المختلفة على تطبيق قانون براغ حيث يجب أن يتوافر مدى متصل من قيم λ أو θ ، ولما كان بالإمكان تعيين الطول الموجي λ للأشعة السينية بطريقة مستقلة وقياس θ مباشرة من تجربة الانعكاس حيث أنها تساوي نصف الزاوية بين الأشعة الساقطة والمنعرجة كما هو موضح في الشكل 9.2 فإنه يمكن من تحليل صورة إنعراج الأشعة X الحصول على معلومات كافية عن البنية البلورية.

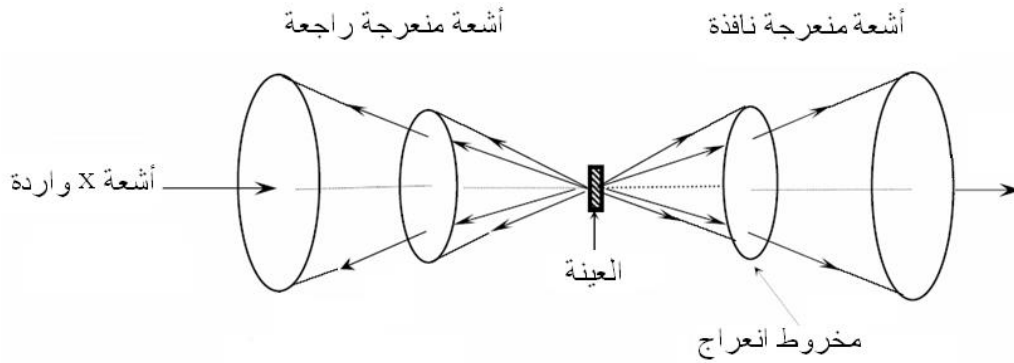
أهم الطرق التجريبية المستعملة في هذا المجال ملخصة في الجدول 3.2.

الجدول 3.2: أهم الطرق التجريبية لانعراج الأشعة X.

الطريقة	أشعة ×	وضع العينة	العينة
طريقة المسحوق	أحادية اللون	ثابتة أو دوارة	متعدد البلورات
طريقة لاوي	بيضاء اللون	ثابتة	أحادي البلورة
طريقة البلورة الدوارة	أحادية اللون	دوارة	

2.5 طريقة المسحوق أو طريقة "ديباي-شرر"

نستعمل في هذه الطريقة عينة على شكل مسحوق ناعم موجود داخل أنبوبة شعيرية مكونة من مجموعة كبيرة من البلورات الأحادية ذات توجهات عفوية في الفضاء، وتسقط على العينة حزمة من الأشعة السينية الوحيدة اللون ولما كانت العينة المدروسة هنا تتألف من عدد كبير من البلورات الدقيقة فإن شرط براغ يتحقق لكل مجموعة من المستويات المتوازية يكون توجهها مناسباً. ولما كان توجه هذه البلورات الدقيقة في المسحوق عشوائياً، فإن الأشعة المنعكسة عن مختلف المستويات في مختلف البلورات بزوايا براغ معينة تشكل مع الحزمة الواردة زاوية 2θ في كل الاتجاهات الممكنة، وهذا يؤدي إلى بروز حزمة على شكل مخروط دوراني (الشكل 13.2) رأسه البلورة ونصف زاويته 2θ ومحوره الحزمة الواردة. ويحدث نفس الشيء لمستويات أخرى تحقق شرط براغ بزوايا أخرى تؤدي إلى بروز حزم مخروطية أخرى.



الشكل 13.2: إتجاهات الأشعة المنعرجة.

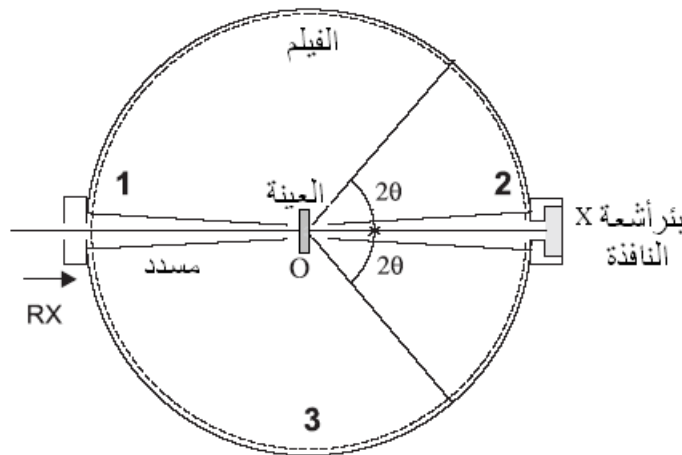
يتم استقبال الأشعة المنعرجة حسب الجهاز المستعمل:

- استقبال على فيلم فوطوغرافي: ترسم أشعة X المنعرجة صورة على الفيلم الحساس تكون على شكل أقواس دوائر متحدة المركز.
- استقبال كهربائي (عداد): يتم بواسطة عدادات أشعة X حيث تحول الأشعة إلى إشارات كهربائية وعند تضخيمها تسجل على شكل مخطط.

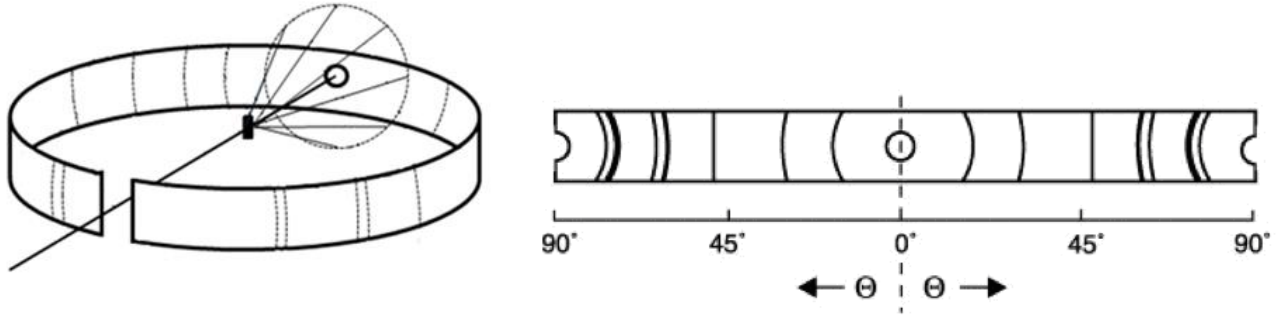
1.2.5 طريقة الفيلم

تدخل أشعة X الوحيدة اللون إلى حجرة الانعراج الأسطوانية من الفتحة A وجزئها الذي لا ينعرج يستمر خارجا من الحجرة عبر النقطة B. توضع العينة في مركز الحجرة "O" وهي في غالب الأحيان تدور حول محورها لزيادة التوجهات العفوية بالنسبة للأشعة الساقطة. ولتسجيل صورة الانعراج يوضع فيلم فوطوغرافي على شكل أسطوانة حسب شكل الحجرة (الشكل 14.2). توجد ثلاث طرق لتثبيت نهايتي الفيلم داخل حجرة ديباي- شرر، ففي الطريقة 1 نتحصل على صورة إنعراج كما هو موضح في الشكل 15.2، الأشعة المنعرجة تكون بهيئة مخاريط رأسها عند العينة "O"، هذه المخاريط تسجل على الفيلم بصورة أقواس دوائر متمركزة.

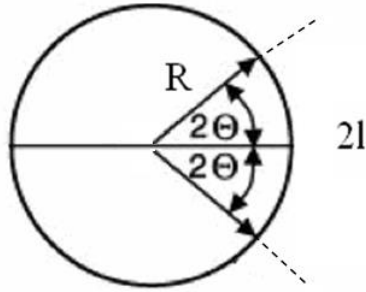
بعد إجراء صورة الانعراج على الفيلم يقاس قطر كل قوسين متقابلين (جزئي حلقة واحدة) على الفيلم حسب ما يلي (الشكل 16.2):



الشكل 14.2: حجرة ديباي-شرر.



الشكل 15.2: صورة انعراج الأشعة X على الفيلم.



الشكل 16.2: طريقة حساب زاوية الانعراج.

$$4\theta R = 2l$$

$$4\theta = \frac{2l}{R} (\text{rad})$$

$$4\theta = \frac{2l}{R} \times \frac{360^\circ}{2\pi}$$

$$\theta^\circ = \frac{l}{\pi R} \cdot 90^\circ \quad (25.2)$$

R : نصف قطر حجرة ديبياي.

l : نصف قطر حلقة الإنعراج.

2.2.5 طريقة العداد

الطريقة الحديثة لتسجيل طيف الانعراج هو إستعمال عدادا بدلا من الفيلم.

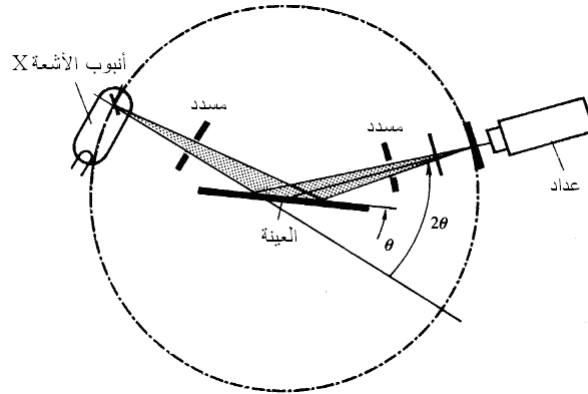
يثبت العداد على ساعد يدور حول العينة ويقوم بتسجيل شدة الأشعة المنعرجة في مختلف الاتجاهات. تدار العينة والعداد بشكل تكون معه سرعة دوران العينة مساوية نصف سرعة دوران العداد، ليتلقى العداد دوماً الأشعة المنعرجة عن المستويات البلورية الموازية لسطح العينة (الشكل 17.2). عند وصل العداد بمسجل فإننا نحصل على مخطط الانعراج للعينة المدروسة (الشكل 18.2).

3.5 تحليل صورة الانعراج

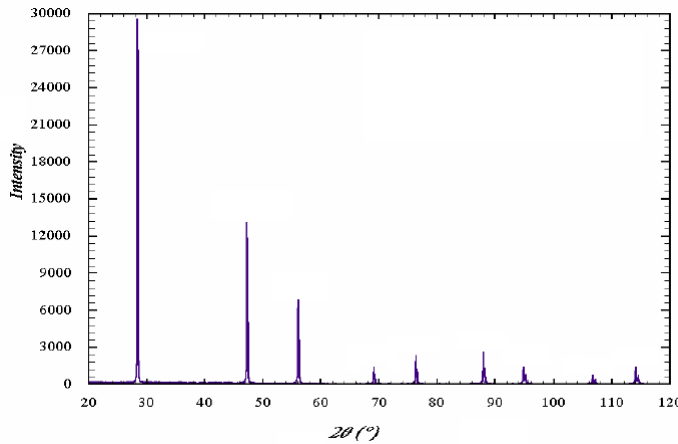
بعد الحصول على مخطط الانعراج للعينة المدروسة نقوم بحساب الزوايا 2θ الموافقة لكل قيم الانعراج ومن ثم نستنتج قيمة θ (زاوية براغ).

أما إذا استعملنا طريقة الفيلم فإن زوايا الانعراج θ تحسب من العلاقة (25.2).

$$2d_{hkl} \sin \theta = \lambda$$



الشكل 17.2: مبدأ جهاز انعراج الأشعة X.



الشكل 18.2: مخطط انعراج الأشعة X على مسحوق من السيليسيوم Si.

إذا كان الجسم البلوري المدروس ذو بنية مكعبة فإن:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \quad (26.2)$$

$$2 \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \sin \theta = \lambda$$

ونكتب المعادلة على الشكل: $\frac{2\sin \theta}{\lambda} = \frac{1}{a^2} \sqrt{h^2+k^2+l^2}$

بتربيع الطرفين: $\frac{4\sin^2 \theta}{\lambda^2} = \frac{1}{a^2} (h^2+k^2+l^2)$

نضع: $N = h^2 + k^2 + l^2$ حيث N عدد صحيح قيمته التصاعدية حسب الجدول 4.2.

الجدول 4.2: قيم N الممكنة والقرائن (hkl) الموافقة لها.

N	(hkl)	N	(hkl)
1	(100)	13	(320)
2	(110)	14	(321)
3	(111)	15	-
4	(200)	16	(400)
5	(210)	17	(410),(322)
6	(211)	18	(411),(330)
7	-	19	(331)
8	(220)	20	(420)
9	(300), (221)	21	(421)
10	(310)	22	(332)
11	(311)	23	-
12	(222)	24	(422)

نلاحظ غياب الأرقام: 7، 15، 23... وهي تقابل $N = 4^p(8n + 7)$ حيث: n, p عددين صحيحين.

ولتعيين البنية البلورية للعينة المدروسة سواء من مخطط الانعراج أو إنطلاقاً من الفيلم نتبع الخطوات التالية:

1. تقاس زوايا الانعراج θ° عملياً وتدرج في العمود الأول من الجدول أسفله.
2. نحسب كل القيم $\frac{4 \sin^2 \theta}{\lambda^2}$ حيث λ طول موجة الأشعة السينية المستعملة وتوضع القيم في العمود 2 من الجدول (5.2).
3. عند تقسيم قيم العمود 2 على قاسم مشترك $(\frac{1}{a^2})$ فالنواتج تكون قريبة من أعداد صحيحة N . لذلك يجب أن نبحث عن القاسم المشترك (a^{-2}) للحصول على قيمة λ قريبة من عدد صحيح. عملياً نقسم جميع قيم العمود 2 على أقل قيمة لهذا العمود إذا لم نجد قيم صحيحة λ N نقسم مرة ثانية على: $\frac{\text{أقل للعمود قيمة 2}}{2}$ ثم $\frac{\text{أقل قيمة للعمود 2}}{3}$ وهكذا حتى نحصل على قيم صحيحة λ N ثم نضعها في الجدول في العمود 3.
4. انطلاقاً من قيم N نستنتج قيم (hkl) (أي تأشير الانعكاسات) حيث $N = h^2 + k^2 + l^2$. تدرج قيم (hkl) في العمود 4 من الجدول (5.2).
5. باستخدام المعادلة: $4 \frac{\sin^2 \theta}{\lambda^2} = \frac{N}{a^2}$ نجد قيم "a" وندرجها في العمود 5 من الجدول (5.2) مع العلم أن أدق قيمة لـ "a" توافق زوايا براغ الكبيرة. ولاستنتاج نوع الشبكة المكعبة (CS أو CC أو CFC) نستند على شروط ظهور وإختفاء الانعكاسات (hkl) في هذه الشبكات والملخصة في الجدول 6.2.

الجدول 5.2: طريقة وضع النتائج لتعيين البنية البلورية.

1	2	3	4	5
$\theta(^\circ)$	$\frac{4 \sin^2 \theta}{\lambda^2}$	N	(hkl)	$a(A^\circ)$

نلاحظ من الجدول 6.2 أن الانعكاسات المسموحة تحقق الشروط التالية:

(أ) البنية **CS**: جميع الانعكاسات مسموحة (لا يوجد شروط على القرائن h, k, l).

(ب) البنية **CC**: الانعكاسات المسموحة تحقق الشرط: $h + k + l = 2n$.

(ج) البنية **CFC**: القرائن h, k, l من نفس النوع (كلها زوجية أو كلها فردية).

(د) بنية الماس:

• h, k, l زوجية مع $h + k + l = 4n$.

• h, k, l فردية.

الجدول 6.2: المستويات المنعرجة في جميع أنواع الشبكة المكعبة من أجل $N \leq 24$

N	(hkl)	CS	CC	CFC	الماس
1	(100)	1			
2	(110)	2	2		
3	(111)	3		3	3
4	(200)	4	4	4	
5	(210)	5			
6	(211)	6	6		
8	(220)	8	8	8	8
9	(300), (221)	9			
10	(310)	10	10		
11	(311)	11		11	11
12	(222)	12	12	12	
13	(320)	13			
14	(321)	14	14		
16	(400)	16	16	16	16
17	(410), (322)	17			
18	(411), (330)	18	18		
19	(331)	19		19	19
20	(420)	20	20	20	
21	(421)	21			
22	(332)	22	22		
24	(422)	24	24	24	24

تمارين الفصل الثاني

التمرين الأول

1. قارن بين شدة أشعة X النافذة عبر طبقة من الهواء وطبقة من معدن Ti سمك كل واحدة $x=12$ cm مستعينا بالجدول التالي:

العنصر	التركيز (%)	معامل الإمتصاص الكتلي (cm^2/g)	الكتلة الحجمية (g/cm^3)
الهواء	N	8.5	1.13×10^{-3}
	O	12.7	
	Ar	113	
Ti	100	204	4.32

2. إستنتج سمك طبقة الهواء وسمك طبقة معدن Ti الكافية لامتصاص معظم أشعة X الواردة

$$\text{حيث: } \frac{I}{I_0} \approx 10^{-3}$$

التمرين الثاني

- باستعمال مصعد النحاس Cu لوحظ إنعراج من أجل الزاوية $10^\circ 27'$ وباستعمال مصعد من المولبدان Mo لوحظ نفس الإنعراج (نفس المستوي البلوري) من أجل الزاوية $4^\circ 48'$.

أحسب طول موجة الإشعاع $\lambda K\alpha(Mo)$ علما أن طول موجة الإشعاعات X التي يعطيها النحاس $\lambda K\alpha(Cu) = 1.54 \text{ \AA}$.

التمرين الثالث

إستخدم نموذج بور لإيجاد طبيعة المصعد في أنبوبة الأشعة السينية اللازم إستعماله لإعطاء خط طيفي $\lambda K\alpha$ يستطيع أن ينعكس براغيا عن المستويات (110) لبلورة مكعبة ثابتها $a = 3.6 \text{ \AA}$.

التمرين الرابع

1. أحسب معامل بنية الماس وشروط إنعدامه.
2. طبق ماجاء أعلاه على بلورة ZnS.

التمرين الخامس

استخدمت حزمة أشعة سينية من مصعد حديدي Fe أطوال موجة أشعته المميزة تساوي $\lambda K\alpha = 1.939A^\circ$ و $\lambda K\beta = 1.757A^\circ$. مررنا هذه الحزمة عبر مرشح من المنغنيز له حافة الإمتصاص للطبقة $K: A^\circ = 1.896$.

علما أن الحزمة النافذة استعملت لدراسة بلورة مكعبة (غير ماسية) ثابت شبكتها $a = 5.42A^\circ$.

1. ماهو طول موجة الشعاع النافذ من المرشحة.
2. ماهي زاوية براغ θ_1 الموافقة للانعكاس (300).
3. في الحقيقة لا يظهر هذا الإنعكاس، ماذا تستنتج؟
4. عند استعمال نفس الحزمة دون إمرارها بالمرشح يظهر إنعكاس عند الزاوية θ_1 ، فماهي قرائن المستويات المحدثة له.
5. ماهو التركيب البلوري للبلورة المستعملة.

التمرين السادس

نريد قياس ثابت الشبكة المكعبة a لفلاناديوم V ، إستخدما الأشعة السينية $\lambda K\alpha(Cu) = 1.54A^\circ$ ، لاجراء إنعراج ديبياي- شرر فحصلنا على المعلومات التالية:

رقم الحلقة	1	2	3	4	5	6	7
θ°	21.1	30.5	38.5	46	53.5	61.7	72

أحسب ثابت الشبكة a وعين نوعها.

التمرين السابع

أجريت تجربة انعراج ديبياي- شرر لمسحوق مكعب التركيب البلوري، وكانت أقطار دوائر مخطط الانعراج D بالملمتر:

192.9	182	155.8	126.6	120	99	67.4	57.7	$D(\pm 0.05 \text{ mm})$
-------	-----	-------	-------	-----	----	------	------	--------------------------

طول موجة أشعة X المستخدمة يساوي $1.54A^\circ$ ومحيط حجرة ديبياي 240 mm .

1. أشر على المستويات المنعرجة واستنتج نوع الشبكة أحسب ثابتها.
2. إستخرج عبارة دقة القياس لثابت الشبكة a وإستنتج الزوايا التي تعطي أفضل النتائج.

الفصل الثالث

الروابط البلورية

1 مقدمة

درسنا في الفصل الأول كيفية تصنيف المواد الصلبة على أساس تناظر البلورات. عند دراسة الخواص الفيزيائية للبلورات وجد أن هذه الخواص لا تتعلق بالتصنيف البلوري، والتصنيف الممكن إستحداثه يعتمد على تركيب وتوزيع إلكترونات التكافؤ الذرية بسبب دورها الأساسي عند دخول الذرة في التفاعلات مكونة الجسم الصلب بخلاف الإلكترونات القلبية الجد مرتبطة بأنوية الذرات بحيث يكون تأثيرها مهمل عند دخول الذرة الحرة في تفاعلات لتكوين البلورة، إذن تصنف المواد الصلبة على أساس الروابط البلورية.

2 طاقة الربط

يمكن للذرات في شروط محددة أن تشكل مع بعضها البعض جزيئات وبلورات مستقرة. تبين هذه الشروط ضرورة وجود قوى تجاذب تكافؤ على مسافة من رتبة الأنغستروم قوى تدافع، إذن طبيعة هذه القوى ذات أساس كهربائي.

من قوانين الترموديناميك تكون مجموعة من الذرات مستقرة عندما تؤول طاقتها الحرة F إلى أقل قيمة ممكنة لها:

$$F = U - TS \quad (1.3)$$

U : الطاقة الداخلية الكلية (الطاقة الكامنة والحركية).

T : درجة الحرارة.

S : الأنتروبي.

وعند درجات حرارة منخفضة فإن TS مهمل.

لكي يتكون الجسم الصلب من ذرات حرة يجب أن يكون مجموع الطاقة الداخلية للجسم الصلب أقل من مجموع طاقة الذرات المنفصلة وتساوي طاقة الربط الفرق بين هاتين الطاقتين. فعندما يعطى الجسم الصلب طاقة بقدر طاقة تكوينه فإنه يتحول إلى ذرات منفصلة غير متفاعلة. معنى هذا أن الطاقة الكامنة للجسم الصلب عند درجات الحرارة المنخفضة جدا (أي بإهمال الطاقات الحركية لذراته) تساوي طاقة الربط.

يمكن تصنيف المواد البلورية تبعا لطبيعة الروابط الذرية إلى الأنواع الآتية:

- أ) البلورات الجزيئية.
- ب) البلورات الأيونية.
- ج) البلورات التساهمية.
- د) البلورات المعدنية.
- هـ) البلورات ذات الرابطة الهيدروجينية.

3 أنواع الروابط البلورية

1.3 البلورات الجزيئية

ومن أمثلتها الشمع وبعض المركبات العضوية وجزيئات الغازات الخاملة، وتتميز بترابط ضعيف من نوع القوى الكهروستاتيكية قصيرة المدى التي افترضها "فان-در-والز" لتفسير بعض قوانين الغازات ولهذا فإن درجة إنصهار مثل هذه المواد تكون منخفضة، كما أنها رديئة التوصيل للحرارة والكهرباء.

1.1.3 طاقة ربط بلورات الغازات الخاملة

سندرس فيما يلي بلورات الغازات الخاملة، فعند درجات الحرارة المنخفضة تتجمد بلورات الغازات الخاملة مكونة بلورات من نوع CFC.

فسرت طبيعة القوى بين ذرات الغازات الخاملة على أساس التفاعل بين ثنائيات القطب الكهربائيّة وهذه القوى تسمى بقوى "فان-در-والز". ندرس تفاعل ذرتين متعادلتين ومتماثلتين تبعدان عن بعضهما بالمسافة r أكبر بكثير من نصف قطر الذرة. كل ذرة متكونة من نواة محاطة بغيمة إلكترونية بحيث أن مركز الشحنة السالبة (الإلكترونات) منطبق على مركز الشحنة الموجبة (النواة) ولكن هذا الإنطباق يتم في الحالة المتوسطة فبسبب حركة الإلكترونات في السحبة الإلكترونية فإن مركز الشحنة السالبة لا ينطبق على مركز الشحنة الموجبة حيث يتولد بشكل آني عزم ثنائي قطب كهربائي في الذرة.

إن طاقة التفاعل بين ثنائيات القطب الكهربائيّة للذرتين (1) و(2) تعطى بالعلاقة:

$$U_{1,2} = U_{\text{att}} = -\frac{C}{r^6} \quad (2.3)$$

C: ثابتة، r : البعد بين الذرتين.

الإشارة (-) دليل على أن قوة هذا التفاعل تجاذبية.

لكن عند تقارب الذرتين من بعضهما البعض فإن الطبقات الالكترونية للذرات تتداخل وتتولد قوة نافرة يمكن تمثيلها على النحو التالي:

$$U_{\text{rep}} = \lambda e^{-\frac{r}{\rho}} \quad (3.3)$$

أو

$$U_{\text{rep}} = \frac{\beta}{r^{12}} \quad (4.3)$$

حيث: β, ρ, λ ثوابت تحسب عمليا.

وتكتب الطاقة الكامنة لترابط زوج من الذرات i و j كما يلي:

$$U_{ij} = U_{\text{att}} + U_{\text{rep}} = \frac{-c}{r_{ij}^6} + \frac{\beta}{r_{ij}^{12}} \quad (5.3)$$

تكتب الثوابت c و β بالصورة:

$$\begin{cases} c = 4\epsilon\sigma^6 \\ \beta = 4\epsilon\sigma^{12} \end{cases} \quad (6.3)$$

حيث: ϵ و σ تقاس تجريبيا.

ومنه:

$$U_{ij}(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^6 \right] \quad (7.3)$$

تسمى هذه المعادلة بكمون ليونار - جونس (الشكل 1.3).

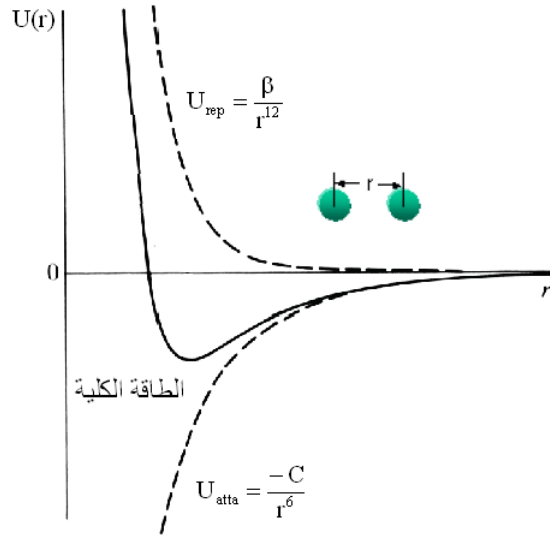
طاقة ربط البلورة تساوي الطاقة الكامنة للذرات في البلورة بإهمال الطاقة الحركية عند درجات الحرارة المنخفضة وطريقة حسابها كما يلي:

أولا نحسب طاقة ربط ذرة i بمجموع ذرات البلورة:

$$U_i = \sum_{i \neq j} U_{ij} \quad (8.3)$$

وبضرب هذا المجموع في عدد ذرات البلورة N نحصل على ضعف طاقة ربط البلورة إذن:

$$U_{\text{tot}} = \frac{N}{2} \sum_{i \neq j} U_{ij} \quad (9.3)$$



الشكل 1.3: منحنى تغيرات طاقة الربط الكلية بدلالة البعد r بين الذرتين في بلورات الغازات الخاملة.

يمكن كتابة العلاقة (7.3) على الشكل:

$$U_{ij}(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{R}{r_{ij}} \right)^{12} \left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{R}{r_{ij}} \right)^6 \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right] \quad (10.3)$$

حيث: R فاصلة الجوار الأقرب.

بالتعويض العلاقة (10.3) في العلاقة (9.3) نجد:

$$U_{tot} = 2N\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} A_{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 A_6 \right] \quad (11.3)$$

وذلك بوضع:

$$\left\{ \begin{array}{l} r_{ij} = RP_{ij} \\ A_{12} = \sum_{i \neq j} P_{ij}^{-12} \\ A_6 = \sum_{i \neq j} P_{ij}^{-6} \end{array} \right. \quad (12.3)$$

وإذا وضعنا:

$$A_n = \sum_{i \neq j} P_{ij}^{-n} \quad (13.3)$$

فإن A_n تعتمد على التركيب البلوري، وكلما كانت n كبيرة كلما إقتربت A_n من قيمة عدد الجوار الأقرب للتركيب البلوري كما هو موضح في الجدول (1.3). معنى هذا أنه كلما أخذنا n كبيرة (المأخوذة من طاقة التنافر العلاقة (4.3) كلما كان فعل التنافر يخص فقط الجوار الأقرب.

بما أن أغلب الغازات الخاملة تتبلور في التركيب CFC فإنه بالإمكان حساب فاصلة الجوار الأقرب R_0 عند التوازن لأن:

$$\left(\frac{dU_{tot}}{dR}\right)_{R=R_0} = 0 \quad (14.3)$$

نجد:

$$\frac{R_0}{\sigma} = \left(\frac{2A_{12}}{A_6}\right)^{\frac{1}{6}} = 1.09 \quad (15.3)$$

وهي قيمة نظرية ولكن عمليا نجد أن النسبة $\frac{R_0}{\sigma}$ تنقص كلما زاد العدد الكتلي للعنصر (الجدول 2.3). هذا الاختلاف ناتج عن تأثير الطاقة الحركية للذرات عند درجات الحرارة الواطئة والتي أهملناها في الحسابات ويكون لها تأثير أكبر كلما قلت كتلة الذرة في البلورة.

جدول 1.3: قيم A_n ($n=6, 12, 16$) من أجل بنيات مختلفة.

البنية	A_6	A_{12}	A_{16}
CS	8.40	6.20	6.05
CC	12.25	9.11	8.61
CFC	14.45	12.13	12.03

الجدول 2.3: قيم $\frac{R_0}{\sigma}$ بالنسبة لبعض الغازات الخاملة.

العنصر	Ne	Ar	Kr	Xe
$\frac{R_0}{\sigma}$	1.14	1.11	1.10	1.09

وطاقة الربط عند التوازن تعطى بالعلاقة:

$$U_{tot}(R_0) = 2N\varepsilon \left[A_{12} \left(\frac{\sigma}{R_0} \right)^{12} - A_6 \left(\frac{\sigma}{R_0} \right)^6 \right] \quad (16.3)$$

باستعمال قيمة $\frac{R_0}{\sigma}$ المعطاة في العلاقة (15.3) وقيم A_6 و A_{12} (الجدول 1.3) نجد:

$$U_{tot}(R_0) = -8,6N\varepsilon \quad (17.3)$$

الجدول (3.3) يعطي قيم طاقة ربط ذرة واحدة $\frac{U_{tot}(R_0)}{N}$ النظرية والتجريبية لبلورات الغازات الخاملة. نلاحظ من خلال هذه القيم أنه كلما كانت الذرة ثقيلة كلما كان تأثير الطاقة الحركية أقل ويكون عندئذ توافق بين القيم النظرية والتجريبية.

2.1.3 معامل المرونة الحجمية

إن معرفة طاقة الربط (طاقة البلورة الكلية بإهمال الطاقة الحركية للذرات) يسمح بحساب معامل المرونة نظريا الذي يمكن حسابه عمليا ومن ثم يتم تقييم النموذج النظري المعتمد.

يعرف معامل المرونة بالعلاقة:

$$B = -V \left(\frac{dP}{dV} \right)_T \quad (18.3)$$

حيث: V هو الحجم، و P : الضغط.

ومن قوانين الديناميكا الحرارية عند ثبوت درجة الحرارة:

الجدول 3.3: قيم طاقة ربط ذرة واحدة (النظرية والتجريبية) لبلورات الغازات الخاملة

العنصر	$\varepsilon(eV)$	$U_{tot}(eV)$ النظرية	$U_{tot}(eV)$ التجريبية
Ne	0.003	0.026	0.020
Ar	0.010	0.086	0.080
Kr	0.014	0.210	0.116
Xe	0.020	0.172	0.170

$$dU = TdS - PdV \quad (19.3)$$

وعند $T = 0K^\circ$ فإن S ثابتة وتصبح العلاقة (19.3):

$$dU = -PdV \Rightarrow P = \frac{-dU}{dV} \quad (20.3)$$

ومنه:

$$\left(\frac{dP}{dV}\right)_T = -\left(\frac{d^2U}{dV^2}\right)_T \quad (21.3)$$

نعوض العلاقة (21.3) في العلاقة (18.3) نجد:

$$B = V\left(\frac{d^2U}{dV^2}\right)_T \quad (22.3)$$

وعند حساب B يكفي كتابة $U_{tot}(R)$ بدلالة V حيث يكون لدينا:

$$V = Na^3 \text{ و } R=a : \text{CS البلورة ذات بنية}$$

$$V = \frac{a^3}{2}N \text{ و } R = \frac{\sqrt{3}}{2}a : \text{CC البلورة ذات بنية}$$

$$V = \frac{a^3}{4}N \text{ و } R = \frac{\sqrt{2}}{2}a : \text{CFC بلورة ذات بنية}$$

بما أن الغازات الخاملة تتبلور في البنية CFC نأخذ V و R لـ CFC ويكون:

$$V = \frac{R^3N}{\sqrt{2}} \Rightarrow R = \left(\frac{V\sqrt{2}}{N}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (23.3)$$

نعوض العلاقة (23.3) في العلاقة (11.3) نجد:

$$U_{tot} = \frac{b_{12}}{V^4} - \frac{b_6}{V^2} \quad (24.3)$$

حيث:

$$\begin{cases} b_{12} = \frac{1}{2}(12.13)N^5\varepsilon\sigma^{12} \\ b_6 = (14,45)N^3\varepsilon\sigma^6 \end{cases} \quad (25.3)$$

نقوم بحساب B عند التوازن فيكون:

$$\left(\frac{dU_{tot}}{dV}\right)_{V=V_0} = 0 \Rightarrow V_0 = N\sigma^3 \sqrt{\frac{A_{12}}{A_6}} \quad (26.3)$$

$$B = \left(V \frac{d^2 U_{\text{tot}}}{dV^2} \right)_{V=V_0} = 20 \frac{b_{12}}{V_0^5} - 6 \frac{b_6}{V_0^3} \quad (27.3)$$

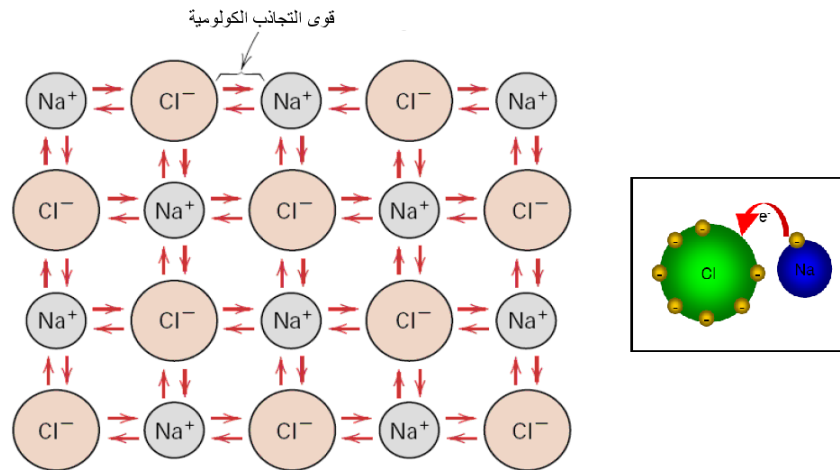
نعوض العلاقات (25.3) و(26.3) في العلاقة (27.3) نجد:

$$B = \frac{4\epsilon}{\sigma^3} \frac{A_6^{\frac{5}{2}}}{A_{12}^{\frac{3}{2}}} = \frac{4\epsilon (14.45)^{\frac{5}{2}}}{\sigma^3 (12.13)^{\frac{3}{2}}} = 75,15 \frac{\epsilon}{\sigma^3} \quad (28.3)$$

2.3 البلورات الأيونية

تعد الرابطة الأيونية من أقوى الروابط، ويعد كلوريد الصوديوم NaCl أحد الأمثلة النموذجية للبلورات الأيونية. فعندما تقترب ذرة صوديوم من ذرة كلور حتى تصبح المسافة الفاصلة بينهما مناسبة ينتقل الكترون التكافؤ في ذرة الصوديوم كما في الشكل (2.3) إلى الغلاف الخارجي لذرة الكلور. وتسمى ذرة الصوديوم التي فقدت إلكترونات أيونا موجبا وتسمى ذرة الكلور التي إكتسبت إلكترونات أيونا سالبا، وتنتج قوى كولومية من تجاذب الشحنات الكهربائية المختلفة فتعمل على إقتراب الأيونات من بعضها البعض إلى مسافات معينة، وتنشأ أيضا قوى تنافر من النوع الكولومي نتيجة تداخل السحب الالكترونية (أو القشرات الأيونية). وتحدد قوتا التجاذب والتنافر بين أيونين بعد كل أيون عن الآخر والشكل النهائي الذي ترتب عليه الأيونات في البلورة.

توجد الرابطة الأيونية في بلورات الهاليدات القلوية وتأخذ التركيب البلوري ذو الفئة المكعبة فالأيون الموجب هو أحد ذرات المعادن القلوية ($Li^+, Na^+, K^+, Rb^+, Cs^+$) والأيون السالب هو أحد الهالوجينات (F^-, Cl^-, Br^-, I^-). تتبلور هذه البلورات إما بصورة NaCl أو حسب التركيب CsCl.



الشكل 2.3: الرابطة الأيونية

طاقة ربط أو تكوين البلورة هو مجموع الطاقة المتبادلة بين كل أزواج الأيونات وهذه الأخيرة تحدد بالطاقة الكهروستاتيكية.

1.2.3 طاقة مادلونك

تعطى الطاقة الكولومية المتبادلة بين أيونين شحنتهما $\pm q$ بالعلاقة:

$$U_{ij} = \pm \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \quad (29.3)$$

r_{ij} : المسافة بين الأيونين i و j .

وطاقة الأيون i المتبادلة مع كل أيونات البلورة j تساوي:

$$U_i = \sum_{i \neq j} U_{ij} = \sum_{i \neq j} \pm \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \quad (30.3)$$

بوضع:

$$r_{ij} = R P_{ij} \quad (31.3)$$

حيث: R فاصلة الجوار الأقرب، العلاقة (30.3) تصبح:

$$U_i = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 R} = \sum_{i \neq j} \pm \frac{1}{P_{ij}} \quad (32.3)$$

والطاقة الكهروستاتيكية لكل البلورة المتكونة من $2N$ أيون (N جزيء) تكتب:

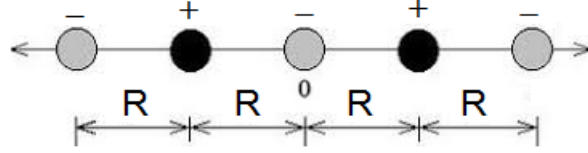
$$U_{\text{tot}} = -N \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 R} \alpha \quad (33.3)$$

حيث α : يسمى ثابت مادلونك ويساوي:

$$\alpha = \sum_{j \neq i} \pm \frac{1}{P_{ij}} \quad (34.3)$$

U_{tot} تسمى بطاقة مادلونك والإشارة (-) في العبارة (33.3) أخذت لكون الجوار الأقرب لأيون i يأخذ شحنة معاكسة وبحكم الدور الأكبر لأيونات الجوار الأقرب في الكمية U_{tot} لذلك تكون هذه الكمية سالبة دائماً.

مثال: حساب ثابت مادلونك لسلسلة لا نهائية من الأيونات المختلفة الإشارة (الشكل 3.3).



الشكل 3.3: سلسلة خطية من الأيونات المتعاكسة الإشارة.

نأخذ الأيون السالب عند (O)، باستعمال العلاقة (34.3) والعلاقة (31.3) ونضرب في 2 لأن السلسلة متناظرة بالنسبة لـ (O) نجد:

$$\alpha = 2\left(+1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \dots\right)$$

ولدينا:

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \dots$$

بأخذ: $x = 1$ فإن:

$$\ln 2 = 1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \dots$$

إذن:

$$\alpha = 2\ln 2$$

وفي حالة حساب α لبلورة تتعدد الحسابات ولكن نستعمل الطريقة الآتية:

مثال: حساب α لبلورة NaCl.

نأخذ الأيون Na^+ مركز الحسابات وهذا الأيون محاط بـ:

• الجوار الأول: 6 أيونات سالبة Cl^- على بعد $\frac{a}{2}$.

• الجوار الثاني: 12 أيون Na^+ على بعد $\frac{a\sqrt{2}}{2}$.

• الجوار الثالث: 8 أيون Cl^- على بعد $\frac{a\sqrt{3}}{2}$.

مع العلم أن: $R = \frac{a}{2}$

$$\alpha = +6 - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} + \dots$$

ومنه:

هذه السلسلة غير متقاربة، القيم الموجبة لا تلغي القيم السالبة.

توجد طريقة أخرى لحساب α تسمى طريقة أيفن وتلخص بما يلي:

1. نأخذ أيون معيناً (i) من التركيب البلوري.
2. نحدد من حوله من الشبكة البلورية الأيونات القريبة منه بحيث يكون مجموع شحنها مع الأيون i كمية معدومة ونحسب حينها α_1 لهذا الجزء من الشبكة.
3. نحدد منطقة 2 يكون كذلك مجموع شحناتها (داخل كل المنطقة) معدوم أيضاً ونحسب α_2 لهذا الجزء من الشبكة.

4. نستمر في هذه العملية ويكون في النهاية: $\alpha = \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \dots$ حيث:

$$\alpha_1 > \alpha_2 > \alpha_3 > \dots$$

ثابت مادلونك لبلورة NaCl يساوي 1,747565 أما في بلورة CsCl فيساوي 1,762675.

2.2.3 طاقة ربط البلورات الأيونية

إضافة إلى طاقة التجاذب الكولومية توجد كذلك طاقة تنافر عند إقتراب الأيونات من بعضها البعض تحاول منع تراكم السحابات الالكترونية للأيونات.

نأخذ عبارة طاقة التنافر بين أيونين i و j من الشكل:

$$U_{ij} = \lambda e \frac{-r_{ij}}{\rho} \quad (35.3)$$

r_{ij} : المسافة بين الأيونين i و j.

ρ , λ : ثوابت تحدد من التجارب حيث: $[\rho] = A^\circ$, $[\lambda] = eV$.

وتساوي طاقة التنافر لأيون i نتيجة تفاعله مع أقرب جيرانه:

$$U_i = \sum_{i \neq j}^Z \lambda e \frac{-r_{ij}}{\rho} = Z \lambda e \frac{-R}{\rho} \quad (36.3)$$

Z : عدد الجوار الأقرب.

R : فاصلة الجوار الأقرب.

وتساوي طاقة التنافر الكلية للبلورة المتكونة من $2N$ أيون:

$$U_{\text{rep,tot}} = NZ\lambda e^{-\frac{R}{\rho}} \quad (37.3)$$

وتكون طاقة الربط للبلورة الأيونية (بإهمال الطاقة الحركية للأيونات عند درجات الحرارة المنخفضة):

$$\begin{aligned} U_{\text{tot}} &= U_{\text{att,tot}} + U_{\text{rep,tot}} \\ &= N\left(\frac{-\alpha q^2}{4\pi\epsilon_0 R} + Z\lambda e^{-\frac{R}{\rho}}\right) \end{aligned} \quad (38.3)$$

وفي حالة الاتزان يكون: $\left(\frac{dU_{\text{tot}}}{dR}\right)_{R=R_0} = 0$

نجد:

$$R_0^2 e^{-\frac{R_0}{\rho}} = \frac{\rho\alpha q^2}{4\pi\epsilon_0 Z\lambda} \quad (39.3)$$

المعادلة (39.3) تعطي فاصلة الجوار الأقرب عند التوازن R_0 بمعرفة ρ و λ .

بتعويض العلاقة (39.3) في العلاقة (38.3) فإن طاقة الربط في التوازن:

$$U_{\text{tot}}(R_0) = \frac{-N\alpha q^2}{4\pi\epsilon_0 R_0} \left(1 - \frac{\rho}{R_0}\right) \quad (40.3)$$

وجد أن: $1 \ll \frac{\rho}{R_0} \ll 1$ ($\rho = 0,1R_0$) بحيث تصبح طاقة البلورة الأيونية تساوي طاقة مادلونك.

تطبيق: أوجد معامل المرونة الحجمية B لبلورة NaCl .

3.3 البلورات التساهمية

تتمتع هذه الرابطة بأهمية خاصة في الكيمياء وعلم البلورات، وتنشأ من التشارك بالإلكترونات بين الذرات المتجاورة حيث أن كل ذرة تساهم بالإلكترون أو أكثر في عملية الربط ونتيجة لهذه المشاركة يكتمل الغلاف الخارجي لكل ذرة بحيث يصبح التشكيل الإلكتروني لها شبيه بالتشكيل الإلكتروني لذرات الغاز الخامل. وتشكل الجزيئات \dots, N_2, O_2, H_2 وكذلك بلورات التركيب الماسي ($\text{C}, \text{Si}, \text{Ge}, \dots$) أمثلة عن هذا النوع من الروابط.

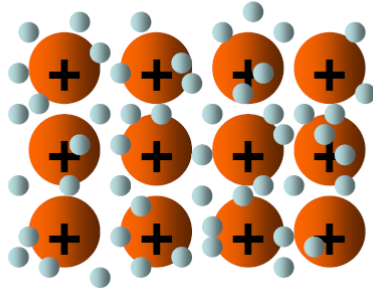
تتميز الرابطة التساهمية بالخصائص التالية:

1. فاصلة الجوار الأقرب تكون صغيرة جدا مقارنة بالرابطة الأيونية ورابطة فان-در-والز.
2. طاقة تكوين البلورة التساهمية كبيرة ومعامل المرونة يكون كذلك.

3. عدد الجوار أقل ما يكون فكل ذرة لها قابلية تكوين أوامر تساهمية مع عدد محدد من الذرات مما يفسر عدد الجوار يساوي 4 في بلورات التركيب الماسي.
4. تتكون الرابطة التساهمية في الإتجاهات التي تكون فيها كثافة توزيع الإلكترونات عالية ويقال أن الرابطة التساهمية ذات طبيعة إتجاهية، وهذا ما يفسر كذلك تموضع ذرات البلورات ذات التركيب الماسي، حيث تفضل ذرات الكربون في بلورة الماس أن تتحد مع بعضها بواسطة أربع روابط تميل كل منها على الأخرى بالزاوية الهرمية الثلاثية ومقدارها $108^{\circ}54'$ بمعنى أن ذرة الكربون تتوسط هرما ثلاثيا وتقع الذرات الأربع المتصلة بها كأقرب جيران عند رؤوس الهرم.
5. تتحقق الرابطة التساهمية الواحدة بالإلكترونين معاكسين السبين. كل إلكترون من ذرة يساهم في تكوين رابطة واحدة والإلكترونين المكونين للرابطة يتموضعان في الفضاء بين الذرتين.
6. بينت التجارب أن المركبات من الشكل $A^{III}B^V$ (من الجدول الدوري) تتبلور بروابط تساهمية ولها خواص شبيهة بعناصر المجموعة IV مثل Si و Ge ومن أشهرها: GaAs، InSb. مركبات وعناصر ذات الرابطة التساهمية ذات خصائص أشباه ناقلات كهربائية.

4.3 البلورات المعدنية

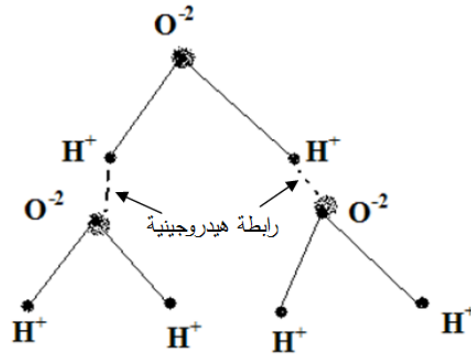
تتميز المعادن بقدرتها على التوصيل الكهربائي والحراري الجيد نتيجة إحتوائها على إلكترونات كثيرة حرة الحركة. وفيما يلي نوضح كيف تنشأ الروابط المعدنية: فكما هو معروف تكون إلكترونات التكافؤ الخارجية لذرات المعادن ضعيفة الارتباط بأنوية هذه الذرات، وهذا يتيح لإلكترونات التكافؤ في المعادن بالتححرر من أنويتها والتجول في الشبكة البلورية المكونة من الأيونات الموجبة، وينشأ عن ذلك قوى تجاذب تحقق الترابط بين ذرات المعدن (الشكل 4.3).



الشكل 4.3: كيفية تشكل الرابطة المعدنية.

5.3 البلورات ذات الرابطة الهيدروجينية

تنشأ هذه الروابط عندما تتحد ذرة الهيدروجين مع ذرات ذات كهروسلبية عالية مثل: O، F، N، Cl... إن هذه الذرات تكون أكثر جذباً للإلكترون ذرة الهيدروجين فتظهر شحنة جزئية موجبة على ذرة الهيدروجين وشحنة جزئية سالبة على ذرات O أو F،... وهذا ما يجعل الجزيئات تتجاذب فيما بينها عبر روابط سميت بالروابط الهيدروجينية (الشكل 5.3) وتعتبر هذه الروابط صغيرة جداً $\sim (0,1 - 0,3eV)$ لكل ذرة الجدول (4.3) يلخص أنواع الروابط البلورية وخصائصها.



الشكل 5.3: تنظيم جزيئات الماء بسبب الرابطة الهيدروجينية.

الجدول 4.3: أنواع الروابط البلورية

درجة الانصهار (C°)	طاقة الربط		البلورة	نوع الرابطة
	kJ/mol (kcal/mol)	eV/Atome Ion, Molécule		
801	640 (153)	3.3	NaCl	أيونية
2800	1000 (239)	5.2	MgO	
1410	450 (108)	4.7	Si	تساهمية
3550>	713 (170)	7.4	C (الماس)	
-39	68 (16)	0.7	Hg	معدنية
660	324 (77)	3.4	Al	
1538	406 (97)	4.2	Fe	
3410	849 (203)	8.8	W	
-189	7.7 (1.8)	0.08	Ar	فان-در-والز
-101	31 (7.4)	0.32	Cl ₂	
-78	35 (8.4)	0.36	NH ₃	هيدروجينية
0	51 (12.2)	0.52	H ₂ O	

تمارين الفصل الثالث

التمرين الأول

بين أن طاقة الربط لذرة واحدة في بلورة الغاز الخامل ذو التركيب CFC أقل مما عليه في التركيب CS و CC.

التمرين الثاني

في بلورة الغاز الخامل ذو البنية CFC، نعتبر أن طاقة التناثر بين ذرتين متجاورتين من الشكل $\lambda e^{-\frac{R}{\rho}}$ حيث: λ و ρ ثوابت، R فاصلة الجوار الأقرب.

1. أوجد عبارة طاقة الربط عند التوازن لهذه البلورة.

2. أوجد عبارة معامل المرونة الحجمية لبلورة الغاز الخامل عند التوازن.

3. تطبيق عددي: تعطى القيم العملية التالية لبلورة غاز Xe:

$$R_0 = 4.33 \text{ \AA}, \frac{U_{tot}}{N} = -0.17 \text{ eV}, B = 3.6 \times 10^{10} \text{ dyne/cm}^2$$

المطلوب حساب λ و ρ .

معطيات:

من أجل دالة $g(x, y)$:

$$\frac{\partial^2 g}{\partial y^2} = \left(\frac{\partial^2 g}{\partial x^2} \right) \left(\frac{\partial g}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial g}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial^2 x}{\partial y^2} \right)$$

التمرين الثالث

نعتبر سلسلة ذرات خطية مكونة من $2N$ أيونا متعاكسة الشحنة $\pm q$. إذا علمت أن طاقة التناثر بين الأيونات المتجاورة مساوية إلى $\frac{A}{R^n}$ حيث A و n ثوابت، R فاصلة الجوار الأقرب فأوجد طاقة الربط عند وضع التوازن.

التمرين الرابع

أحسب ثابت مادلونك لشبكة مستوية لانهائية كالمستوي (100) لبلورة ملح الطعام.

التمرين الخامس

1. لتكن شبكة مستوية لا نهائية كالمستوي (100) لبلورة ملح الطعام NaCl.

إذا كانت طاقة التنافر بين الذرات من الشكل AR^{-n} ($n = 9$) حيث R المسافة بين الذرات. فما هي

العلاقة الرابطة بين فاصلة الجوار الأقرب عند التوازن R_0 والثابت α, A, n .

2. نأخذ بلورة ملح الطعام، باستخدام نفس علاقة طاقة التنافر في السؤال (1)، أحسب النسبة بين فاصلة

الجوار الأقرب للشبكة المستوية $R_0^{(p)}$ وللشبكة البلورية لملاح الطعام $R_0^{(NaCl)}$ علماً أن ثابت مادلونك لبلورة

ملح الطعام $\alpha_{NaCl} = 1.74$ و ثابت مادلونك للشبكة البلورية المستوية $\alpha_{(p)} = 1.74$.

4. استنتج النسبة بين طاقتي التكوين لكل جزيء NaCl للشبكة البلورية المستوية $U_0^{(p)}(R_0)$ وبلورة ملح

الطعام $U_0^{(NaCl)}(R_0)$ عند التوازن.

التمرين السادس

تعطى القيم العملية التالية لبلورة كلوريد السيزيوم CsCl الأيونية:

$$\alpha = 1.7627, a = 4.12A^\circ, R_0 = 3.57A^\circ, B = 0.29 \times 10^{11} N/m^2$$

1. إذا كانت طاقة التنافر من الشكل $\lambda e^{-\frac{R}{\rho}}$ حيث: λ و ρ ثوابت، R فاصلة الجوار الأقرب، أوجد معادلة

لحساب طاقة الربط عند التوازن.

2. أحسب λ و ρ وطاقة ربط جزيئة واحدة عند التوازن.

الفصل الرابع

خواص المرونة للأجسام الصلبة

1 مقدمة

عند التوازن تهتز ذرات الجسم الصلب حول أوضاع توازنها ولكن عند تأثر الجسم بقوى خارجية فإنه سيبدأ بالتشوه حيث تتغير الفاصلة الذرية ويخرج الجسم عن حالة توازنه السابقة، ولكن القوى الداخلية تحاول إعادة وضع توازن الجسم على ما كان عليه أي يتم الصراع بين القوى الداخلية والخارجية للعودة إلى وضع التوازن والقول عن الجسم بأنه مرن إتجاه هاته القوى الخارجية. وعند حدوث تشوه موضعي فإنه سينتقل إلى كامل الجسم على هيئة موجات المرونة بحكم الترابط بين عناصر الجسم.

تدرس عادة خواص مرونة البلورات طبقاً للنموذج التالي:

- البلورة عبارة عن وسط مستمر متجانس غير متمائل المناحي.
- الدراسة النظرية لهذا النموذج تعتمد أساساً على قوانين نيوتن التقليدية وقانون هرك.

2 الإجهاد الميكانيكي

القوى المؤثرة على دقائق الجسم الصلب تصلها عن طريق السطح الخارجي ولها علاقة مع سطح الجسم الذي تؤثر عليه.

القوى تقاس بالنسبة إلى وحدة المساحات وتسمى الإجهاد.

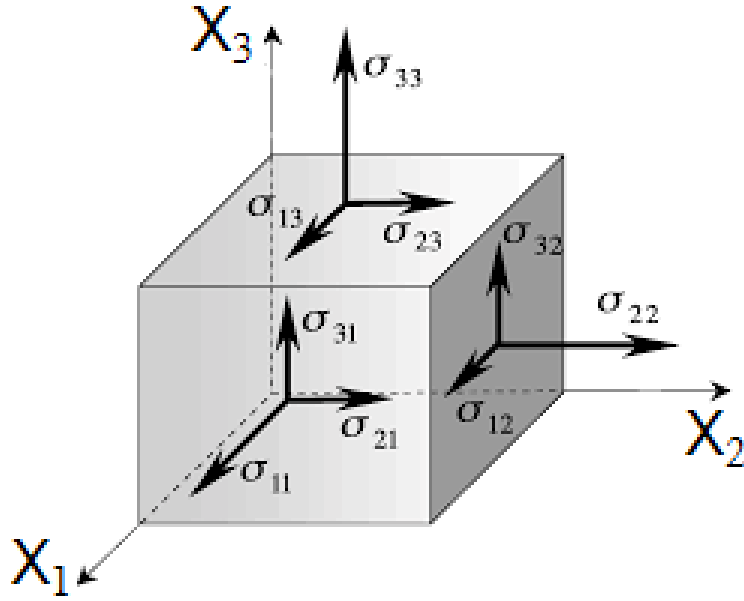
ندرس الحالة التي يكون فيها الإجهاد منتظم في كل الجسم الموجود في حالة توازن ميكانيكي. ندرس من الجسم مكعب أحادي (طول ضلعه وحدة واحدة) وحروفه تنطبق على المحاور الكارتيزية (الشكل 1.4).

القوة المطبقة على كل سطح من سطوح المكعب تتحل إلى 3 مركبات، نرسم للإجهادات الموافقة σ_{ij} حيث i إتجاه القوة المطبقة على وحدة المساحة العمودية على الإتجاه j .

σ_{ii} : تسمى الإجهادات العمودية.

σ_{ij} : تسمى الإجهادات المماسية أو الانزياحية.

مثال: σ_{23} هي مركبة الإجهاد الناتجة عن تأثير مركبة القوة بإتجاه X_2 والتي تؤثر على وحدة المساحات العمودية على X_3 .



الشكل 1.4: تمثيل مركبات الإجهاد الميكانيكي.

شروط التوازن الستاتيكي للمركبات الانزياحية تحقق العلاقة:

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji} \quad (i, j=1, 2, 3) \quad (1.4)$$

إن حالة الإجهاد توصف بـ 6 مركبات مستقلة وهي تشكل مصفوفة متناظرة.

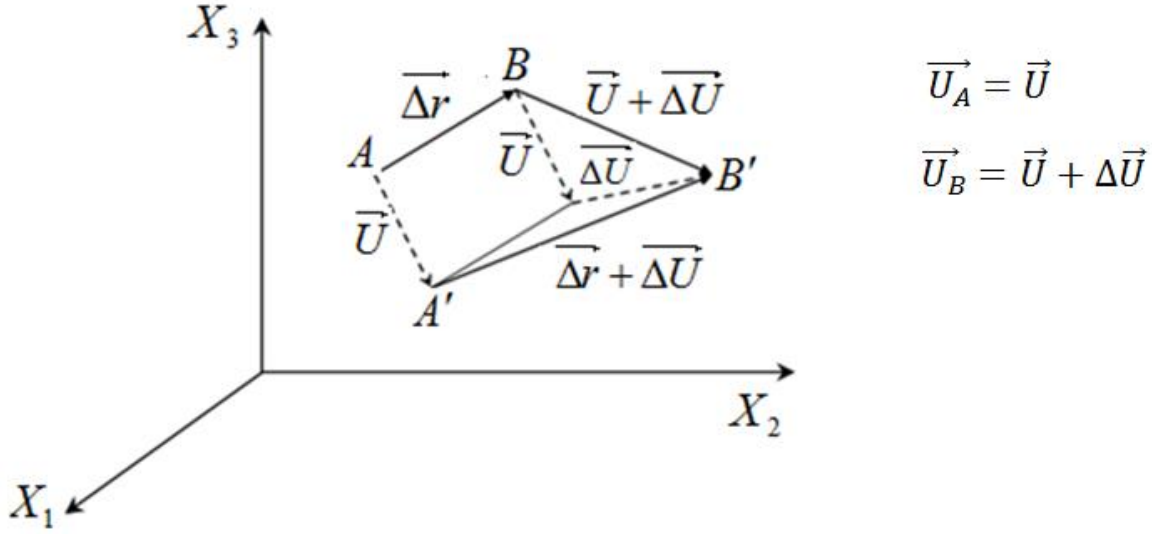
$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix}$$

3 ممتد التشوه

عندما يكون الجسم معرضاً إلى إجهاد صغير فإن تشوه الجسم يكون قليلاً وعكوسياً، أي أنه بإزالة التأثير الخارجي تعود ذرات الجسم إلى وضعها الأصلي قبل التشوه، مثل هذا التشوه يسمى مرناً. ولكنه عندما يكون الإجهاد الخارجي كبيراً فإن التشوه سيكون كبيراً ويتجاوز حدود مرونة الجسم ويكون غير عكسي يسمى بالتشوه اللدائني (بلاستيكي).

نتناول دراسة التشوهات الصغيرة التي تحصل تحت تأثير قوى غير كبيرة.

إنزياح أي نقطة من نقاط الجسم هي دالة للإحداثيات: $\vec{U} = \vec{U}(x_1, x_2, x_3)$ (الشكل 2.4).



الشكل 2.4: إنزياح نقاط الجسم تحت تأثير إجهاد خارجي.

شعاع الانزياح يتناسب خطيا مع إحداثيات تلك النقطة:

$$\begin{cases} U_1 = \varepsilon_{11}X_1 + \varepsilon_{12}X_2 + \varepsilon_{13}X_3 \\ U_2 = \varepsilon_{21}X_1 + \varepsilon_{22}X_2 + \varepsilon_{23}X_3 \\ U_3 = \varepsilon_{31}X_1 + \varepsilon_{32}X_2 + \varepsilon_{33}X_3 \end{cases}$$

من الشكل:

$$\vec{U} = [\varepsilon_{ij}]\vec{r} \quad (2.4)$$

حيث: $[\varepsilon_{ij}]$ ممتد الانزياحات الصغيرة.

لدينا مركبات شعاع الانزياح: $[U_1(x_1, x_2, x_3), U_2(x_1, x_2, x_3), U_3(x_1, x_2, x_3)]$

ومنه نكتب:

$$\begin{cases} \Delta U_1 = \frac{\partial U_1}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial U_1}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial U_1}{\partial x_3} \Delta x_3 \\ \Delta U_2 = \frac{\partial U_2}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial U_2}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial U_2}{\partial x_3} \Delta x_3 \\ \Delta U_3 = \frac{\partial U_3}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial U_3}{\partial x_2} \Delta x_2 + \frac{\partial U_3}{\partial x_3} \Delta x_3 \end{cases} \quad (3.4)$$

لدينا:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \quad (4.4)$$

ومنه:

$$\begin{cases} \Delta U_1 = \varepsilon_{11}\Delta x_1 + \varepsilon_{12}\Delta x_2 + \varepsilon_{13}\Delta x_3 \\ \Delta U_2 = \varepsilon_{21}\Delta x_1 + \varepsilon_{22}\Delta x_2 + \varepsilon_{23}\Delta x_3 \\ \Delta U_3 = \varepsilon_{31}\Delta x_1 + \varepsilon_{32}\Delta x_2 + \varepsilon_{33}\Delta x_3 \end{cases}$$

من الشكل:

$$\Delta U_i = \sum_{j=1}^3 \varepsilon_{ij}\Delta x_j \quad i = (1,2,3) \quad (5.4)$$

أي عناصر ممتد التشوه تربط مركبات شعاعين: الشعاع $\overline{\Delta U}$ (الإزاحة النسبية لنقاط الجسم) والشعاع $\overline{\Delta r}$ متجه الموضع النسبي قبل التشوه.

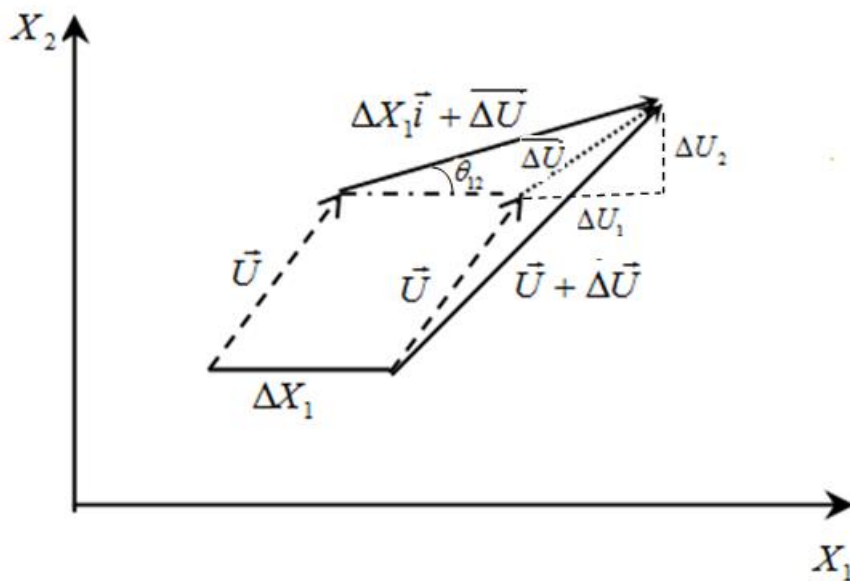
وللتعريف على دلائل عناصر ممتد التشوه نأخذ الحالة المبسطة التالية (الشكل 3.4):

$$\overline{\Delta r} = \Delta x_1 \vec{i}$$

$$\Delta x_2 = \Delta x_3 = 0$$

ومنه:

$$\begin{cases} \Delta U_1 = \varepsilon_{11}\Delta x_1 \\ \Delta U_2 = \varepsilon_{21}\Delta x_1 \\ \Delta U_3 = \varepsilon_{31}\Delta x_1 \end{cases}$$



الشكل 3.4: إنزياح نقاط الجسم تحت تأثير إجهاد خارجي (الحالة الخاصة $\Delta x_2 = \Delta x_3 = 0$).

يمكن أن نكتب:

$$\varepsilon_{11} = \frac{\Delta x_1(1 + \varepsilon_{11}) - \Delta x_1}{\Delta x_1}$$

إن: ε_{11} يصف التمدد النوعي (لوحة الطول) بموازاة المحور OX_1 .

تعميم: ε_{ij} ($i = 1, 2, 3$) هي معاملات تصف التمدد النوعي بموازاة OX_1, OX_2, OX_3 على الترتيب.

من الشكل السابق:

$$tg\theta_{21} \cong \theta_{21} = \frac{\Delta U_2}{\Delta x_1 + \varepsilon_{11}\Delta x_1} \sim \varepsilon_{21}$$

لأن: $\varepsilon_{11} \ll 1$.

ε_{21} : دوران حول OX_3 نحو جهة OX_2 لمستقيم يوازي OX_1 .

تعميم: ε_{ij} هو زاوية الدوران حول المحور OX_k ($i \neq j \neq k$) نحو جهة OX_i لمستقيم يوازي OX_j .

ويكون مثلاً: $\varepsilon_{21} \neq \varepsilon_{12}$ أي الممتد $[\varepsilon_{ij}]$ يكون عموماً غير متناظر.

وبالإمكان أن نكتب:

$$[\varepsilon_{ij}] = [e_{ij}] + [w_{ij}] \quad (6.4)$$

الممتد $[e_{ij}]$ ممتد متناظر

الممتد $[w_{ij}]$ ممتد ضد متناظر

حيث:

$$\begin{cases} e_{ii} = \varepsilon_{ii} \\ e_{ij} = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ij} + \varepsilon_{ji}) = e_{ji} \\ w_{ii} = 0 \\ w_{ij} = \frac{1}{2}(\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ji}) = -w_{ji} \end{cases} \quad (7.4)$$

الممتد $[w_{ij}]$ يصف عملية دوران محظ لنقاط الجسم حول محور يمر بالنقطة "O" (ليس هناك مساهمة في التشوه).

الممتد $[e_{ij}]$ يصف التشوه حيث المركبات القطرية e_{ii} تحمل نفس معنى المركبات القطرية ϵ_{ij} وتصف التمدد أو الكبس الطولي أما المركبات اللاقطرية e_{ij} ($i \neq j$) فتصف الانزياح الزاوي.

مثال تطبيقي:

إيجاد التغير النسبي بالحجم تحت تأثير الكبس الهيدروستاتيكي الموصوف بالممتد:

$$[\sigma_{ij}] = \begin{bmatrix} -\Delta P & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta P & 0 \\ 0 & 0 & -\Delta P \end{bmatrix}$$

لدينا:

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{\dot{V} - V}{V}$$

حيث: V الحجم قبل التشوه، \dot{V} الحجم بعد التشوه

$$V = \Delta x_1 \cdot \Delta x_2 \cdot \Delta x_3$$

$$\dot{V} = \Delta \dot{x}_1 \cdot \Delta \dot{x}_2 \cdot \Delta \dot{x}_3$$

$$e_{ii} = \frac{\Delta \dot{x}_i - \Delta x_i}{\Delta x_i} \quad (i = 1, 2, 3)$$

في حالة الكبس يكون: $e_{ii} < 0$

$\Delta \dot{x}_i$ الطول الجديد لـ Δx_i بسبب التشوه.

$$\Delta \dot{x}_i = \Delta x_i (1 + e_{ii})$$

$$\dot{V} = \Delta \dot{x}_1 \cdot \Delta \dot{x}_2 \cdot \Delta \dot{x}_3 = V(1 + e_{11})(1 + e_{22})(1 + e_{33})$$

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{\dot{V} - V}{V} = \frac{V}{V} [(1 + e_{11})(1 + e_{22})(1 + e_{33}) - 1]$$

$$= 1 + e_{11} + e_{22} + e_{33} - 1 = e_{11} + e_{22} + e_{33}$$

$$= \sum_{i=1}^3 e_{ii}$$

نهمل الحدود المتكونة عن حاصل ضرب معاملات التشوه الصغيرة.

4 قانون هوك

تشوه الجسم يكون عكوسيا إذا لم يبلغ الإجهاد المسلط حدا معيناً يسمى حد المرونة وهذا الحد يعتمد على نوع المادة ويقاس تجريبياً.

يخضع التشوه العكوسي (ضمن حدود المرونة) إلى قانون هوك المعمم:

$$\sigma_{ij} = \sum_{l,m=1}^3 C_{ijlm} e_{lm} \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (8.4)$$

$$e_{ij} = \sum_{l,m=1}^3 S_{ijlm} \sigma_{lm} \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (9.4)$$

C_{ijlm} : معاملات مرونة الصلابة وحدتها $[\frac{N}{m^2}]$.

S_{ijlm} : معاملات المرونة المطاوعة وحدتها $[\frac{m^2}{N}]$.

عدد معاملات المرونة C أو S يساوي: $81 (9 \times 9)$ وتشكل مصفوفة. تناظر ممتد التشوه والإجهاد يجعل مصفوفتا معاملات المرونة C أو S متناظرتان أيضاً:

$$S_{ijlm} = S_{imlj} \quad (j \leftrightarrow m) \quad (10.4)$$

$$S_{ijlm} = S_{ljim} \quad (i \leftrightarrow l) \quad (11.4)$$

وبذلك يصبح عدد معاملات المرونة المستقلة $36 (6 \times 6)$ ، وباستخدام أفكار طاقة المرنة وقوانين الديناميكا الحرارية يمكن تبيان أن:

$$S_{ijlm} = S_{lmij} \quad (ij \leftrightarrow lm) \quad (12.4)$$

وبذلك ينقص عدد معاملات المرونة المستقلة إلى 21. وهذا العدد ينقص كثيراً اعتماداً على تناظر البلورة. كما أن الاستبدال $(i \leftrightarrow j)$ و $(l \leftrightarrow m)$ لا يؤثر كذلك على قيم معاملات المرونة. لهذا كله يتم التعامل بالصيغة الثنائية لمعاملات المرونة: S_{pg} أو C_{pg} بدلا من الصيغة الرباعية S_{ijlm} أو C_{ijlm} طبقاً للتبديل التالي:

$$11 \rightarrow 1, \quad 22 \rightarrow 2, \quad 33 \rightarrow 3, \quad 23 \rightarrow 4, \quad 31 \rightarrow 5, \quad 12 \rightarrow 6$$

وبالتالي يأخذ قانون هوك المعمم الصيغة التالية:

$$\sigma_p = \sum_{g=1}^6 C_{pg} e_g \quad (p = 1, \dots, 6) \quad (13.4)$$

$$e_p = \sum_{g=1}^6 S_{pg} \sigma_g \quad (p = 1, \dots, 6) \quad (14.4)$$

معاملات المرونة S و C مرتبطة مع بعضهما بالعلاقات التالية:

$$S_{pg} = \frac{(-1)^{P+g} \Delta_{Pg}^C}{\Delta^C} \quad (15.4)$$

Δ^C : محدد متكون من معاملات المرونة $[C_{pg}]$.

Δ_{Pg}^C : المحدد الأصغر يتحصل عليه بإلغاء السطر الأفقي P والعمودي g للمحدد Δ^C

ويكون:

$$C_{pg} = \frac{(-1)^{P+g} \Delta_{Pg}^S}{\Delta^S} \quad (16.4)$$

5 طاقة المرونة

العمل المنجز على تشوه وحدة حجم البلورة يعطي بالعلاقة:

$$d\omega = \sum_{p=1}^6 \sigma_p de_p = \sum_{p,g=1}^6 C_{pg} e_g de_p \quad (17.4)$$

باستخدام علاقة طاقة المرونة وقوانين الديناميكا الحرارية يمكن تبين أن: $C_{pg} = C_{gp}$ أيضا يكون:
 $S_{pg} = S_{gp}$ أي أن مصفوفتا معاملات المرونة متناظرة وبالتالي سينقص عدد معاملات المرونة المستقلة من 36 إلى 21.

يُجرى التكامل على المعادلة (17.4) نجد كثافة طاقة التشوه:

$$\omega = \frac{1}{2} \sum_{p,g=1}^6 C_{pg} e_g e_p \quad (18.4)$$

6 معاملات مرونة البلورات المكعبة

إن عدد معاملات المرونة المستقلة يمكن أن يكون أقل من 21 اعتمادا على تناظر البلورة. فالبلورات ذات الفئة المكعبة توصف بـ 3 معاملات مستقلة فقط.

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix}$$

ويكون نفس الشكل بالنسبة للمصفوفة $[S_{pg}]$.

حساب المعاملات S_{pg} بدلالة C_{pg} :

$$\begin{aligned} e_p &= \sum_{g=1}^6 S_{pg} \sigma_g \\ &= \sum_{g=1}^6 \sum_{r=1}^6 S_{pg} C_{gr} e_r \\ \Rightarrow \sum_{g=1}^6 S_{pg} C_{gr} &= \delta_{pr} \end{aligned} \quad (19.4)$$

δ_{pr} : رمز كرونكر

نأخذ الحالات التالية:

$$P = 1, r = 1 \Rightarrow S_{11}C_{11} + S_{12}C_{21} + S_{13}C_{31} + S_{14}C_{41} + S_{15}C_{51} + S_{16}C_{61} = 1$$

$$P = 1, r = 2 \Rightarrow S_{11}C_{12} + S_{12}C_{22} + S_{13}C_{32} + S_{14}C_{42} + S_{15}C_{52} + S_{16}C_{62} = 0$$

$$P = 1, r = 4 \Rightarrow S_{41}C_{14} + S_{42}C_{24} + S_{43}C_{34} + S_{44}C_{44} + S_{45}C_{54} + S_{46}C_{64} = 1$$

باستعمال قيم المصفوفتين $[S_{pg}]$ أو $[C_{pg}]$ يكون:

$$S_{11}C_{11} + S_{12}C_{12} + S_{12}C_{12} = 1 \quad (20.4)$$

$$S_{11}C_{12} + S_{12}C_{11} + S_{12}C_{12} = 0 \quad (21.4)$$

$$\begin{aligned} S_{44}C_{44} &= 1 \\ \Rightarrow S_{44} &= \frac{1}{C_{44}} \end{aligned} \quad (22.4)$$

بضرب المعادلة (20.4) في C_{12} نجد:

$$C_{12}S_{11}C_{11} + 2S_{12}C_{12}^2 = C_{12} \quad (23.4)$$

بضرب المعادلة (21.4) في C_{11} نجد:

$$S_{11}C_{12}C_{11} + S_{12}(C_{11}^2 + C_{11}C_{12}) = 0 \quad (24.4)$$

$$(23.4) - (24.4) \Rightarrow S_{12} = \frac{-C_{12}}{(C_{11}-C_{12})(C_{11}+2C_{12})} \quad (25.4)$$

نعوض S_{12} في العلاقة (20.4) نجد:

$$S_{11} = \frac{C_{11}+C_{12}}{(C_{11}-C_{12})(C_{11}+2C_{12})} \quad (26.4)$$

ومن العلاقة (18.4) نجد كثافة طاقة المرونة للبلورة المكعبة:

$$\omega = \frac{1}{2}C_{11}(e_1^2 + e_2^2 + e_3^2) + \frac{1}{2}C_{44}(e_4^2 + e_5^2 + e_6^2) + C_{12}(e_1e_2 + e_1e_3 + e_2e_3) \quad (27.4)$$

7 معاملات تجريبية لمرونة الأجسام

1.7 معامل يونغ

يصف خواص مرونة الوسط في إتجاه معين، وهو يحدد بنسبة الإجهاد المطبق في ذلك الاتجاه على قيمة التشوه في نفس ذلك الاتجاه.

معامل يونغ باتجاه المحور X :

$$E = \frac{\sigma_{xx}}{e_{xx}} \quad (28.4)$$

مثال: عند تعرض جسم متجانس ومتماثل المناحي إلى سحب طولي باتجاه OX_3 فإن:

$$E = \frac{\sigma_{33}}{e_{33}}$$

لدينا الإجهاد المطبق هو عبارة عن سحب في الاتجاه OX_3 فإن ممتد الإجهاد يكون:

$$[\sigma_{ij}] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{bmatrix}$$

باستعمال قانون هوك العلاقة (13.4) من أجل $p = 3$ فإن:

$$e_3 = \sum_{g=1}^6 S_{3g}\sigma_g$$

نجد:

$$e_3 = S_{31}\sigma_1 + S_{32}\sigma_2 + S_{33}\sigma_3 + S_{34}\sigma_4 + S_{35}\sigma_5 + S_{36}\sigma_6 \\ \Rightarrow e_3 = S_{33}\sigma_3 = S_{11}\sigma_3$$

ومنه:

$$E = \frac{\sigma_3}{e_3} = \frac{1}{S_{11}}$$

2.7 معامل بواسن

يحدد نسبة التشوه الانكماشى العرضي على التشوه السحبي الطولي الناتجان عن إجهاد خارجي.

$$\nu = \frac{-\Delta a/a}{\Delta l/l} \quad (29.4)$$

مثال: عند تعرض جسم متجانس ومتماثل المناحي إلى سحب طولي باتجاه OX_3 فإنه سيعاني تشوه

$e_{33} = \frac{\Delta c}{c}$ ويصاحب الزيادة في الطول إلى إنكماش عرضي باتجاه OX_1 و OX_2 مقداره: $e_{11} = \frac{-\Delta a}{a}$ ،

$e_{22} = \frac{-\Delta b}{b}$ على الترتيب وحيث: $e_{11} = e_{22}$.

$$\nu = \frac{-e_{11}}{e_{33}} = \frac{-e_{22}}{e_{33}}$$

من قانون هوك: $e_p = \sum_{g=1}^6 S_{pg} \sigma_g$ نجد:

$$\left\{ \begin{array}{l} e_1 = S_{12} \sigma_3 \\ e_2 = S_{12} \sigma_3 \Rightarrow e_1 = e_2 \\ e_3 = S_{11} \sigma_3 \end{array} \right.$$

لأنه لدينا سحب طولي $\sigma = \sigma_3$ وباقي عناصر المصفوفة معدومة.

$$\nu = \frac{-e_2}{e_3} = \frac{-e_1}{e_3} = -\frac{S_{12}}{S_{11}}$$

3.7 معامل الانضغاط الحجمي

هو النقصان النسبي لحجم البلورة تحت تأثير ممتد إجهاد الكبس الهيدروستاتيكي:

$$[\sigma_{ij}] = \begin{bmatrix} -\Delta P & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta P & 0 \\ 0 & 0 & -\Delta P \end{bmatrix}$$

أي:

$$\sigma_{ij} = -\Delta P \delta_{ij} \quad (i, j = 1, 2, 3)$$

رمز كرونكر δ_{ij} :

لدينا:

$$B = \frac{-\Delta P}{\frac{\Delta V}{V}} \quad (30.4)$$

$$e_{ij} = \sum_{l,m=1}^3 S_{ijlm} \sigma_{lm} = \sum_{l,m=1}^3 S_{ijlm} (-\Delta P) \delta_{lm}$$

ومنه:

$$e_{ij} = \sum_{l,l=1}^3 S_{ijll} (-\Delta P)$$

$$e_{ii} = \sum_{l,l=1}^3 S_{iill} (-\Delta P)$$

$$\frac{\Delta V}{V} = \sum_{i=1}^3 e_{ii} = -\Delta P \sum_{i,l=1}^3 S_{iill}$$

ومنه يكون:

$$B = \frac{-\Delta P}{\frac{\Delta V}{V}} = \frac{1}{\sum_{i,l=1}^3 S_{iill}}$$

تمارين الفصل الرابع

التمرين الأول

تعاني عينة بهيئة مكعب طول ضلعه 1 cm من تشوه مرن بحيث أزيحت نقاطها بالمقادير:

$$U_1 = (4x_1 + 3x_2 - 5x_3)10^{-4} \text{ cm}, U_2 = (7x_1 - 13x_2 + 4x_3)10^{-4} \text{ cm},$$

$$U_3 = (9x_1 - 2x_2 + 4x_3)10^{-4} \text{ cm}$$

حيث: (x_1, x_2, x_3) إحداثيات نقطة من نقاط العينة قبل التشوه.

أحسب تغير الزوايا بين أحرف المكعب وتغير حجمه عند التشوه.

التمرين الثاني

يعطى ممتد الإجهاد بالنسبة لمعلم $(OXYZ)$ بالصورة التالية: $[\sigma_{ij}]$ $\sigma_1, \sigma_3 > 0$

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & -\sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{bmatrix}$$

1. مثل تأثير الإجهاد $[\sigma_{ij}]$ على مكعب أحرفه هي المحاور OX, OY, OZ .
2. كيف يتغير الإجهاد $[\sigma_{ij}]$ عند تدوير المحاور OX, OY, OZ حول OZ بزاوية $\frac{\pi}{4}$.
3. مثل تأثير الإجهاد المحصل عليه على مكعب أحرفه المحاور الجديدة.

التمرين الثالث

تعاني بلورة مكعبة من إجهاد كبسي σ في الإتجاه $[100]$.

1. أكتب ممتد الإجهاد وممتد التشوه.
2. ماهي معاملات المرونة التي يمكن تعيينها من نتائج قياسات قيم التشوه الطولي والإنضغاط الحجمي لهذه البلورة.

التمرين الرابع

قضيب من خليط من الألمنيوم قطره $d = 10\text{mm}$ وطوله 300mm خاضع لقوة شد تساوي 5000N ، حيث أن معامل يونغ $E = 70\text{GPa}$ ، $1\text{GPa} = 10^9 \frac{\text{N}}{\text{m}^2}$ ، ومعامل بواسن $\nu = 0.33$.
أحسب التشوه الطولي، الزيادة في الطول، النقصان في القطر والتغير في الحجم.

التمرين الخامس

سلك طوله l ومقطعه $(S = ab)$ مصنوع من مادة صلبة تعتبر متماثلة المناحي. تأثر هذا السلك وعلى

إمتداد طوله بقوة \vec{F} فازداد طوله بالمقدار Δl ونقصت أبعاده العرضية بحيث تتحقق النسبة: $\frac{\Delta a}{\Delta b}$.

1. أعط صيغة تربط معامل يونغ E ومعامل بواسن ν بمعاملات المرونة S_{ij} و C_{ij} .

2. باستعمال العبارة: $\frac{F}{S} = \mu \frac{\Delta V}{V} + 2\mu \frac{\Delta V}{V}$ إستخرج العلاقات الرابطة لمعاملات لامبي (μ و λ) مع

معاملات المرونة S_{ij} و C_{ij} .

3. إذا تعرض السلك أعلاه لكبس هيدروستاتيكي ΔP فاحسب الإنضغاطية K بدلالة معاملات المرونة

S_{ij} و C_{ij} وبدلالة (E و ν) وكذلك وبدلالة (μ و λ).

4. تطبيق عددي:

خذ الألمنيوم: $C_{11} = 1.07 \times 10^{11} \frac{\text{N}}{\text{m}^2}$ ، $C_{12} = 0.61 \times 10^{11} \frac{\text{N}}{\text{m}^2}$

أحسب (E و ν) ، (μ و λ) و K .

المراجع

Callister, W.D (2003) Science et génie des matériaux : 5^{ème} édition. Paris, Dunod, collection Sciences Sup.

Cazaux, J. (1996) Initiation à la physique du solide : exercices commentés avec rappels de cours : 3^{ème} édition. Paris, Masson.

Eberhart, J.P. (1976) Méthodes physiques d'étude des minéraux et des matériaux solides. Paris, Doin.

Kittel, C. (2007) Introduction à la physique du solide : 8^{ème} édition. Paris, Dunod.

Mooser, E. (1993) Introduction à la physique du solide. Lausanne, Presses polytechniques et universitaires romandes.

Ouahes, R. (1984) Eléments de radiocristallographie. Alger, Office des publications universitaires.

عبد الفتاح أحمد الشاذلي (2003) فيزياء الجوامد (الجزء الأول). القاهرة، الدار العربية للنشر والتوزيع.

عقيل عزيز داخل (1987) مقدمة في فيزياء الجسم الصلب (الجزء الأول). الجزائر، ديوان المطبوعات الجامعية.