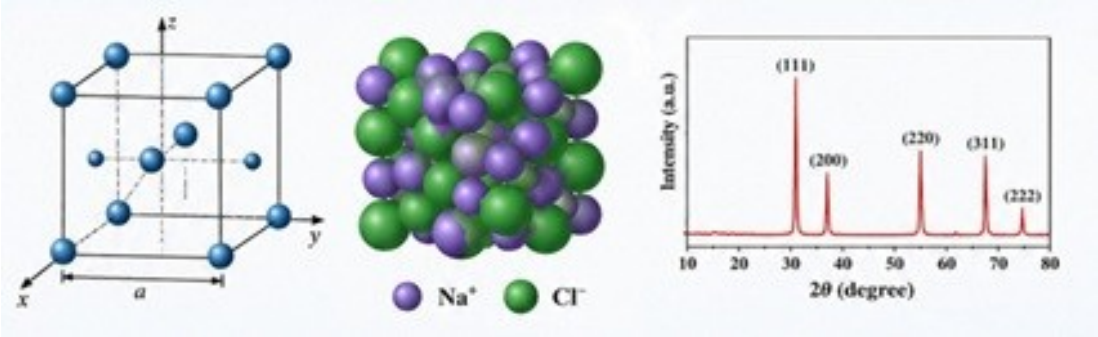
جامعة الشهيد حمه لخضر – الوادي

كلية العلوم الدقيقة

قسم الفيزياء

علم البلورات الفيزيائي

Physical Crystallography (D123)



مطبوعة بيداغوجية

موجهة لطلبة السنة الثانية ليسانس – فيزياء

السداسي الثالث (S3)

وحدة تعليم استكشافية (UED)

إعداد:

د. ريحية غاني أستاذ محاضر –أ–

قسم الفيزياء – كلية العلوم الدقيقة

جامعة الشهيد حمه لخضر – الوادي.

السنة الجامعية: 2025 – 2026

فهرس المحتويات		
	مقدمة	1
الفصل الأول: مدخل إلى علم البلورات		
1-1	تمهيد	2
2-1	حالات المادة وخصائصها	2
3-1	المواد الصلبة	3
1-3-1	المواد الصلبة البلورية	3
2-3-1	المواد الصلبة غير البلورية	3
4-1	التركيب البلوري	4
5-1	تصنيف الشبكات البلورية	6
6-1	الشبكات البلورية المكعبة	7
7-1	المتجهات والمستويات البلورية	9
8-1	المستويات البلورية	13
9-1	معامل التعبئة و الكثافة الحجمية	21
10-1	العدد التناسقي	22
11-1	الشبكة العكسية	23
1-11-1	تعريف الشبكة العكسية	23
2-11-1	متجهات الأساس للشبكة العكسية	24
3-11-1	خصائص الشبكة العكسية	24
4-11-1	العلاقة بين المسافة البينية للمستويات البلورية (d_{hkl}) والشبكة العكسية	25
5-11-1	الشبكة العكسية للشبكات المكعبة	25
الفصل الثاني: تناظر الأشكال المنتهية		
1-2	مقدمة	33
2-2	مفهوم تناظر الأشكال المنتهية	33
3-2	تناظر الأشكال المنتهية و عناصر التناظر	35
1-3-2	مستوى التناظر	35
2-3-2	محور الدوران	36
3-3-3	مركز التناظر	39
4-3-2	الدوران الانقلابي	39
5-2	النقاط المتكافئة	42
الفصل الثالث: شبكات برافي والأنظمة البلورية		
1-3	شبكة برافي	51
2-3	الأنظمة البلورية	52
3-3	خلية فيجنر–سايتز الأولية	55

4-3	أمثلة لبعض التركيبات البلورية	56
5-3	التعبئة المتراصة	60
6-3	الفجوات البينية	63
الفصل الرابع :الطرق التجريبية لانعراج الأشعة السينية		
4-1	انعراج الأشعة السينية	65
4-2	مقدمة	65
3-4	الاستطارة	67
4-4	الانعكاس العشوائي	68
5-4	انعراج الأشعة السينية في البلورات	68
6-4	قانون براج	72
7-4	الطرق التجريبية لانعراج الأشعة السينية	73
1-7-4	طريقة لاوي	73
2-7-4	طريقة البلورة الدوارة	74
3-7-4	طريقة ديباي–شيرر	75
8-4	عامل البنية	82
الفصل الخامس: الروابط الكيميائية في البلورات		
1-5	مدخل إلى الروابط الكيميائية	80
2-5	عموميات حول الروابط الكيميائية	80
3-5	طاقة الترابط بين الذرات	89
4-5	الكهروسلبية	90
5-5	الروابط الكيميائية في البلورات	91
6-5	أنواع الروابط البلورية	92
1-6-5	5.3.1 الرابطة الأيونية	92
2-6-5	الرابطة التساهمية	93
3-6-5	الرابطة المعدنية	98
4-6-5	القوى بين الجزيئية (قوى فان دير فالس)	101
5-6-5	لرابطة الهيدروجينية	102
	المراجع	

فهرس المحتويات

معلومات على المقياس

اسم المقياس : علم البلورات الفيزيائي (Cristallographie Physique)

السداسي : السداسي الثالث (S3)

الميدان : علوم المادة، الشعبة : فيزياء، نوع الوحدة : وحدة تعليم استكشافية (UED)

المعامل : 02، الرصيد : 02

الحجم الساعي الأسبوعي : محاضرة: 1 ساعة و30 دقيقة، أعمال موجهة: 1 ساعة و30 دقيقة

تقديم المقياس

يُعنى مقياس علم البلورات الفيزيائي بدراسة البنية البلورية للمواد الصلبة والعلاقة بين ترتيب الذرات وخواص المادة الفيزيائية والكيميائية. ويتناول المفاهيم الأساسية للشبكات البلورية وخلايا الوحدة وعناصر التناظر وشبكات برافيه، إضافة إلى مبادئ انعراج الأشعة السينية والروابط الكيميائية المسؤولة عن استقرار البنى البلورية.

ويمثل هذا المقياس مدخلاً أساسياً لفهم فيزياء الحالة الصلبة وعلوم المواد، حيث يسمح للطالب بالتعرف على الأسس البنيوية التي تتحكم في خواص المواد المختلفة.

أهداف المقياس : بنهاية دراسة هذا المقياس يكون الطالب قادراً على:

- التمييز بين المواد البلورية والمواد غير البلورية.
- التعرف على مختلف أنواع الشبكات البلورية وخلايا الوحدة.
- استخدام مؤشرات ميلر لتوصيف المستويات والاتجاهات البلورية.
- فهم عناصر التناظر وعمليات التناظر المختلفة في البلورات.
- التعرف على الأنظمة البلورية وشبكات برافيه الأربعة عشر.
- تفسير مبادئ انعراج الأشعة السينية ودورها في تحديد البنية البلورية.
- ربط نوع الروابط الكيميائية بالبنية البلورية واستقرار المادة.

المكتسبات القبلية المطلوبة : ينبغي أن يمتلك الطالب معارف أساسية في:

- الفيزياء العامة، الكيمياء العامة، الهندسة الفراغية والمتجهات، الحساب الرياضي الأساسي.

محتوى المقياس (Course Content)

الفصل الأول: عموميات (General Concepts)

تعريف الحالة البلورية

.الشبكات البلورية: المتجهات والمستويات الشبكية

- الخلايا الممثلة (خلايا الوحدة)، الطراز (الأساس البلوري)،مؤشرات ميلر للمستويات والاتجاهات البلورية.
- الشبكة العكوسة: التعريف والخصائص الأساسية والعلاقة مع الشبكة المباشرة.
- المسافات البينية بين المستويات البلورية.

المحور الثاني: تناظر الأشكال المنتهية

- مفهوم التناظر في البلورات.
- عمليات التناظر الأساسية: الانعكاس، الدوران، الانقلاب المركزي، الانقلاب الدوراني، الانعكاس الدوراني.
- النقاط المتكافئة.

المحور الثالث: تناظر الشبكات وشبكات برافيه

- الأنظمة البلورية،أنماط تمركز الشبكات البلورية، شبكات برافيه الأربعة عشر.
- توافق محاور الدوران مع الشبكات البلورية،العلاقات الهندسية في الشبكات البلورية.

المحور الرابع: الطرق التجريبية للانعراج

- شروط الانعراج البلوري، قانون براج،معادلات فون لاوي، بناء إيوالد.
- طريقة لاوي، طريقة ديباي—شيرر، طريقة البلورة الدوارة، طريقة وايزنبرغ، أجهزة انعراج الأشعة السينية الحديثة.

المحور الخامس: الروابط الكيميائية في البلورات

- مفاهيم عامة حول الروابط الكيميائية، البنى المستقرة والطاقة الداخلية.
- الروابط المختلفة في البلورات:

أ- الروابط القوية (Strong Bonds)

- قوى التجاذب، الرابطة الأيونية، الرابطة التساهمية،الرابطة الفلزية، التآثرات ثنائية القطب.

ب- الروابط الضعيفة (Weak Bonds)

•قوى فان دير فال، روابط انتقال الشحنة، الرابطة الهيدروجينية، قوى التنافر.

طريقة التقييم : امتحان نهائي: 100%

المراجع الأساسية

1. Charles Kittel, Introduction to Solid State Physics.
2. C. Hammond, The Basics of Crystallography and Diffraction.
3. M. A. Wahab, Solid State Physics.
4. B. D. Cullity, Elements of X-Ray Diffraction.
5. C. Giacovazzo, Fundamentals of Crystallography.

مقدمة

يُعد علم البلورات (Crystallography) أحد الفروع الأساسية في فيزياء المادة المكثفة وعلوم المواد، ويهتم بدراسة البنية الذرية للمواد الصلبة والعلاقة بين ترتيب الذرات وخصائص المواد الفيزيائية والكيميائية. وقد بدأ هذا العلم بدراسة الأشكال الهندسية الخارجية للبلورات وتصنيفها، ثم تطور تدريجياً ليصبح علماً دقيقاً يُعنى بفهم البنية الداخلية للمادة على المستوى الذري.

شهد علم البلورات نقلة نوعية بعد اكتشاف ظاهرة انعراج الأشعة السينية سنة 1912، حيث مكّنت هذه التقنية من تحديد المواقع الذرية داخل البلورات بدقة عالية، وأثبتت أن المواد البلورية تتميز بترتيب دوري طويل المدى للذرات أو الأيونات أو الجزيئات. وقد أسهم هذا التطور في فهم العديد من الظواهر الفيزيائية والكيميائية، كما فتح المجال أمام تطوير مواد جديدة ذات خصائص وظيفية متقدمة.

وتتجلى أهمية علم البلورات في تطبيقاته الواسعة في مجالات الفيزياء والكيمياء وعلوم المواد والهندسة المعدنية والبيولوجيا الجزيئية والصيدلة وتقنيات النانو. كما يُعد أساساً لفهم الخواص الميكانيكية والكهربائية والبصرية والحرارية للمواد الصلبة.

يهدف هذا المقرر إلى تقديم المبادئ الأساسية لعلم البلورات الفيزيائي، من خلال دراسة الشبكات البلورية وخلايا الوحدة وعناصر التناظر ومؤشرات ميلر وشبكات برافيه، إضافة إلى التعرف على طرق انعراج الأشعة السينية والروابط الكيميائية المسؤولة عن استقرار البنى البلورية.

هذا العمل هو ثمرة عدة سنوات من تدريس مقياس علم البلورات بقسم الفيزياء، كلية العلوم الدقيقة، بجامعة الشهيد حمه لخضر – الوادي. وقد أعد أساسا لطلبة السنة الثانية ليسانس فيزياء، بهدف تزويدهم بالمفاهيم الأساسية لعلم البلورات الفيزيائي وتطبيقاته المختلفة.

كما يُعد هذا المقياس مدخلا أساسيا لدراسة مقاييس فيزياء الحالة الصلبة السنة الثالثة، حيث يساهم في فهم البنية البلورية للمواد والعلاقة بين تركيبها الذري وخصائصها الفيزيائية.

الفصل الأول:

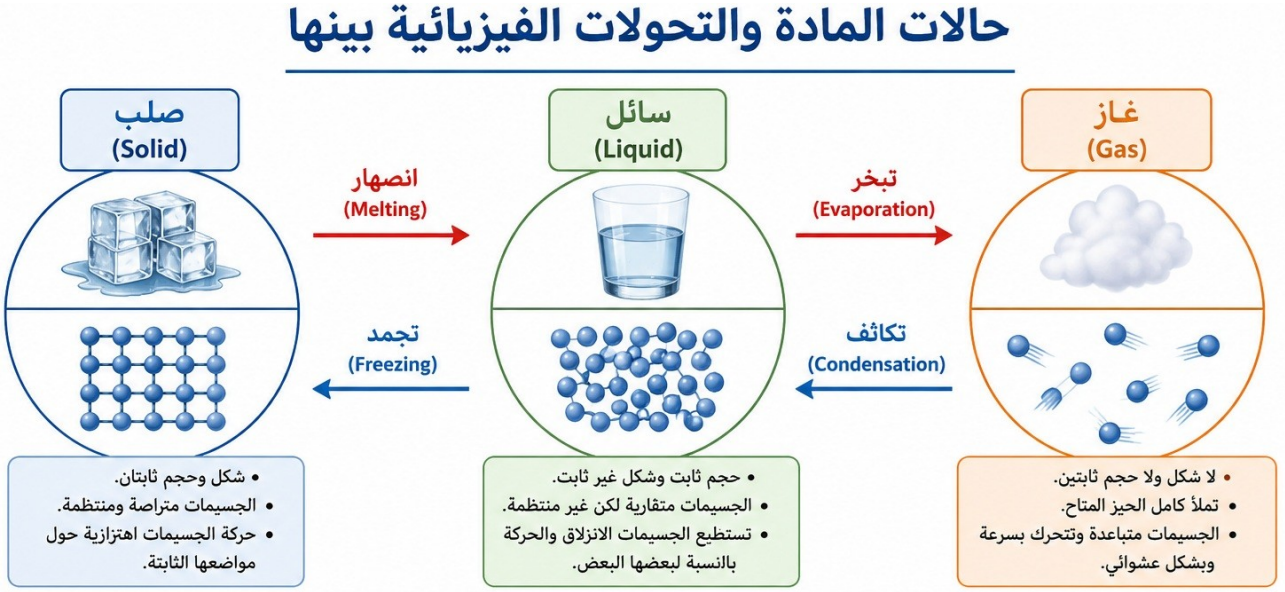
مدخل إلى علم البلورات

1-1 تمهيد:

تتواجد المادة في الطبيعة على ثلاث حالات: الحالة الغازية، الحالة السائلة والحالة الصلبة، وتتكون المادة اما من ذرات أو جزيئات تكون دائمة الحركة. يتم تحديد الشكل الذي تتواجد به المادة في الطبيعة من خلال التفاعلات بين الجسيمات المكونة لها (الذرات أو الجزيئات أو الأيونات)، وكذلك الضغط ودرجة الحرارة.

يمكن تمييز كل حالة من الحالات السابقة عن الأخرى فيزيائيا بالنظر في خاصية السريان أو التدفق، حيث تكون المادة في حالتيها الغازية والسائلة قابلة للانسياب والتشكل بشكل الإناء الذي توضع فيه، بينما تفقد المادة الغازية أو السائلة قدرتها على التدفق عندما تتحول إلى الحالة الصلبة بعد تبريدها، وتتخذ شكلا وحجما ثابتين.

يسمى المرور من الحالة الصلبة إلى الحالة السائلة بالانصهار، ويسمى المرور من الحالة السائلة إلى الحالة الغازية بالتبخر. في المتجه المعاكس، لدينا التميع أو التكثيف الذي يعيد الجسم من الحالة الغازية إلى الحالة السائلة، ثم التصلب الذي يجعله ينتقل إلى الحالة الصلبة (الشكل 1-1).



الشكل (1-1): حالات تواجد المادة في الطبيعة.

2-1 خصائص حالات المادة

تمتاز كل حالة من حالات المادة بخصائص تميزها عن الحالات الأخرى حيث يمكن ان نلخص خصائص كل مادة في الجدول (1-1).

الحالة الصلبة	الحالة السائلة	الحالة الغازية
*تتحرك دقائقها حركة موضعية اهتزازية. * لها شكل ثابت. * لها حجم ثابت. * غير قابلة للانضغاط. * طاقتها الحركية منخفضة	* تتحرك دقائقها حركة انتقالية ودائمة وعشوائية. * تأخذ شكل الوعاء الذي توضع فيه. * لها حجم ثابت. * صعبة الانضغاط. * قابلة للجريان. * طاقتها الحركية عالية	* تتحرك دقائقها حركة انتقالية دائمة، سريعة، عشوائية في كافة المتجهات، في خطوط مستقيمة. * تأخذ شكل الوعاء الذي توضع فيه. * حجمها غير ثابت ويعتمد على حجم الوعاء الذي توضع فيه. * قابلة للانضغاط بسهولة. * تمتاز بخاصية الانتشار. . * طاقتها الحركية عالية جدا

الجدول (1–1): مميزات حالات المادة.

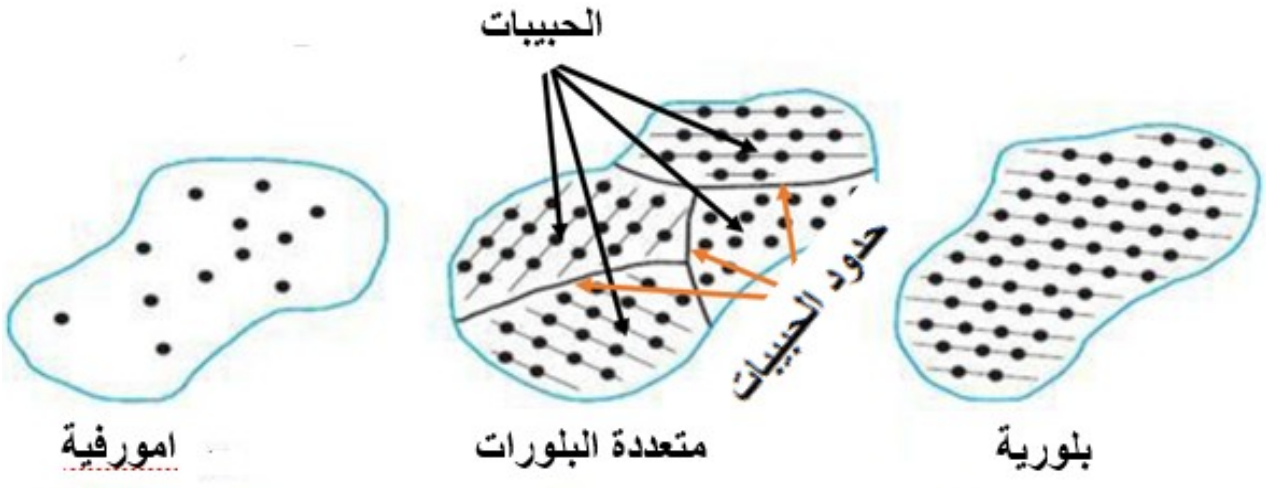
ويمكن تصنيف المواد الصلبة إلى نوعين رئيسيين هما:

1–2 –1 المواد الصلبة البلورية:

فيها ينتظم ترتيب الذرات في الفراغ بحيث تشكل نمطاً هندسياً دورياً، حيث إذا امتدت صفة الدورية أو التكرارية في المادة المتبلورة عندئذ نحصل على بلورة منفردة أو أحادية، أما إذا اضطربت التكرارية عند الحدود الحبيبية فسوف نحصل على مادة متعددة البلورات أي تتكون من مجموعات صغيرة جدا من الحبيبات، أو البلورات الأحادية الصغيرة في اتجاهات مختلفة الشكل (1–2).

1–1–2 المواد الصلبة غير البلورية:

تضم المواد الصلبة التي تتخذ ذراتها أو جزيئاتها توزيعاً عشوائياً، حيثما يتسنى لها عندما تتحول من الحالة المائعة (الغازية أو السائلة) إلى الحالة الصلبة وتوصف هذه المواد الصلبة اللابلورية أيضاً بأنها "لا شكلية" بمعنى أنها لا تتخذ شكلاً مميزاً كما توصف بأنها "زجاجية" نظراً لأنها تتشابه مع الزجاج في عشوائية ترتيب الذرات الشكل (1–2).



الشكل (1–2): ترتيب الذرات في المادة.

هناك مواد لا تنتمي تماماً لأي من النوعين المذكورين، حيث أنها تقع بدرجات متفاوتة بين الحالتين: الكاملة التبلور وغير البلورية، ويمكن وصف الترتيب الجزئي للذرات فيها بتعيين ما يسمى " بدرجة البلورة" ويمتد الترتيب المنتظم في بعض هذه المواد الصلبة الشبه بلورية إلى مسافات قصيرة، فيوصف بأنه ذو مدى قصير مقارنة بالترتيب ذي المدى الطويل في المواد الصلبة كاملة التبلور.

1-3 التركيب البلوري

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

1-3-1 الشبكة البلورية:

هي نوع من التمثيل الرياضي لنمط ترتيب الوحدة البنائية الأساسية للمادة البلورية ويتم هذا التمثيل بعدد لا نهائي من النقاط الهندسية المرتبة ترتيبا شبكيا متوازيا يتميز بالتماثل والتكرار المنتظم في الفراغ.

1-3-2 القاعدة (الأساس):

هي الوحدة البنائية الأساسية لكل نقطة من نقاط الشبكة، وهي عبارة عن ذرة أو جزيئة أو مجاميع من الذرات أو الجزيئات تلتصق مع نقاط الشبكة البلورية وتمثل البناء البلوري الحقيقي.للأساس دورا مهماً في البناء البلوري بحيث يجب أن يكون متماثلا في البنية والمتجه والترتيب.

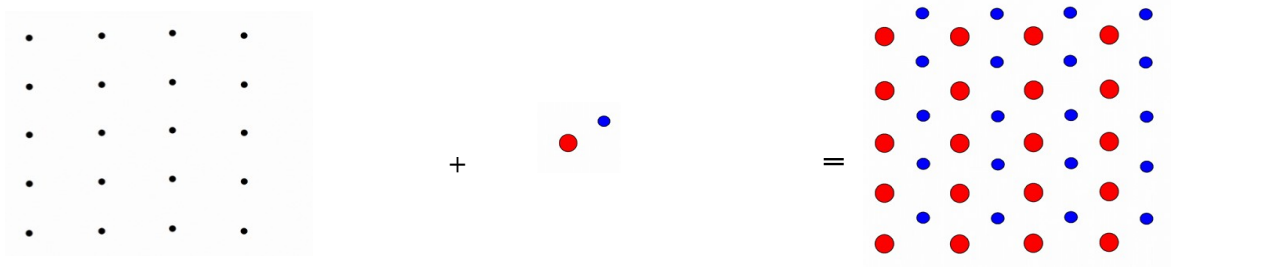
ويمكننا الحصول على التركيب البلوري (الشبكة البلورية) وذلك بوضع نفس الأساس أو القاعدة عند كل نقطة من نقاط الشبكة وبهذا يمكننا كتابة العلاقة بين الشبكة النقطية والأساس والتركيب البلوري على النحو التالي:

$$\text{الشبكة البلورية (التركيب البلوري)} = \text{(قاعدة) أساس} + \text{شبكة نقطية} \qquad (1-1)$$

في أبسط التركيبات البلورية توجد ذرة واحدة لكل نقطة شبكية، كما والحال في بلورات النحاس والذهب والفضة، وقد تكون الوحدة البنائية الأساسية (أو القاعدة) مجموعة من الذرات، ويشترط حينئذ أن تكون الوحدات البنائية متطابقة في تركيبها وترتيبها وتوجيهها، كما يجب أن يكون لها نفس الميل والمتجه.

مثال: عين الشبكة البلورية (التركيب البلوري) للشبكة النقطية الموضحة في الشكل علما أن الأساس (القاعدة) عبارة عن ذرتين مختلفتين.

بتطبيق العلاقة شبكة نقطية + أساس (قاعدة)=الشبكة البلورية (التركيب البلوري) نحصل على التركيب البلوري التالي



.الشكل (1-3): الشبكة البلورية في حالة أساس ذو ذرتين.

تتركب البلورة المثالية من قواعد مرتبة على شبكة بلورية فراغية ثلاثية الأبعاد بحيث يبدو هذا الترتيب عند النظر إليه من نقطة شبكية ذات متجه موضع $\vec{r}$ هو نفسه عند النظر إليه من نقطة أخرى) $\vec{r'}$ وهو ما يسمى بالتناظر الانسحابي طبقا للمعادلة :

$$\vec{r'} = \vec{r} + \vec{R} \qquad (2-1)$$

سمى $\vec{R}$ شعاع الانسحاب (الانتقال) الأساسي وهو يصل بين أي عقدتين (قاعدتين) في الشبكة البلورية ويعرف بالمعادلة التالية:

$$\vec{R} = n_1\vec{a_1} + n_2\vec{a_2} + n_3\vec{a_3} \qquad (3-1)$$

حيث:

$\vec{a_1}$ $\vec{a_2}$،$\vec{a_3}$ أشعة الانسحاب الأولية وهي محددة وثابتة في كل شبكة بلورية

n_1 ، n_2، n_3 أعداد صحيحة.

1-4 خلية الوحدة

هي أصغر شكل هندسي يمكن بتكراره الحصول على البنية البلورية، وهي نوعان : أولية و اصطلاحية (غير الأولية).

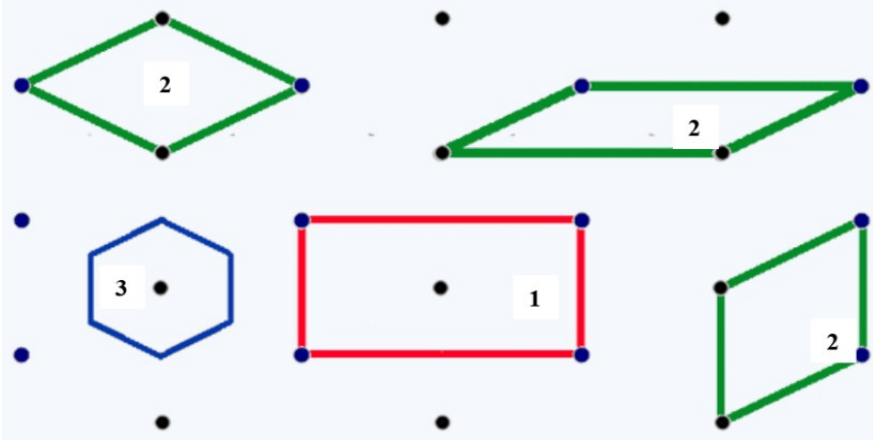
1-4-1خلية الوحدة الأولية تحتوي فقط على عقد في رؤوس الشبكة أي خلية الوحدة تحتوي على ذرة واحدة وتحقق الخصائص التالية

- تحافظ على التناظر الانسحابي ولكن لا تحافظ بالضرورة على التناظر النقطي للشبكة البلورية التي هي جزء منها.
- تنتمي لها عقدة(قاعدة) أو ذرة واحدة فقط.
- تتواجد عقد الشبكة البلورية على رؤوسها فقط.
- لها حجم أصغر من جميع الخلايا الاختيارية الأخرى تحدده أشعة الانسحاب الأولية $\vec{a_1}$، $\vec{a_2}$، $\vec{a_3}$ وهو

$$v_e = \vec{a} * (b \wedge c) \qquad (4-1)$$

1-4-2 خلية الوحدة الاصطلاحية: تحتوي على عدد أكبر من العقد في القمم وفي مركز الشبكة إما في مراكز جميع الوجوه أو في مراكز وجهين متقابلين أي خلية الوحدة تحتوي على أكثر من ذرة واحدة. وتحقق الخصائص التالية:

- تحافظ على التناظر الانسحابي والتناظر النقطي للشبكة البلورية التي هي جزء منها.
- تنتمي لها عقدة واحدة أو أكثر.
- تتواجد عقد الشبكة البلورية على رؤوسها وفي مركزها ومراكز أوجهها ...إلخ
- لها حجم أصغر من جميع الخلايا الاختيارية الأخرى.



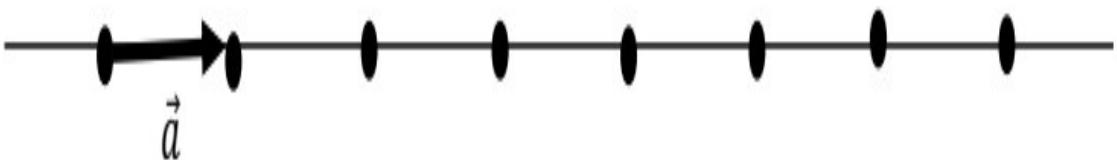
الشكل 1–4: أنواع مختلفة من الشبكات البلورية في شبكة مستوية ذات بعدين.

3–1 خلية اصطلاحية.2– خلية أولية.

1–5 تصنيف الشبكات البلورية

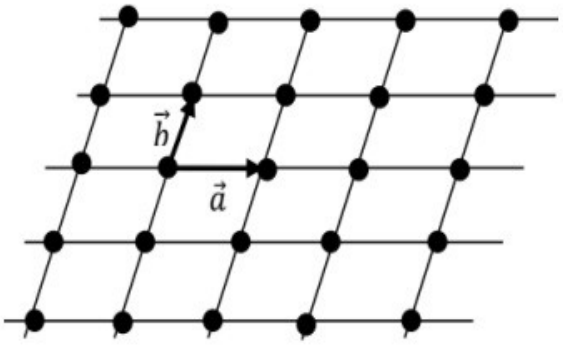
يمكننا تصنيف الشبكات البلورية البرافية على العموم إلى ثلاثة أنواع:

1–5–1 الشبكة أحادية البعد عبارة عن مجموعة من النقاط (العقد) متساوية البعد ومن نفس الطبيعة، وتنتمي إلى خط مستقيم. المجموعة لا نهائية، لذلك هناك عدد لا نهائي من العقد. $|\vec{a}|$ ثابت الشبكة.



الشكل (1–6): شبكة بلورية أحادية البعد.

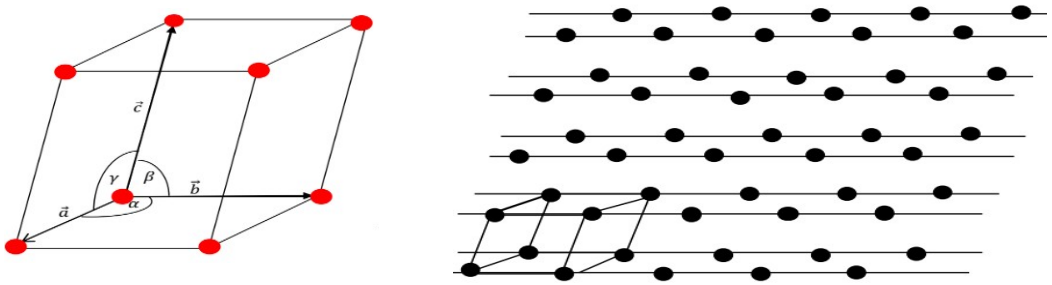
2–5–1 شبكة ثنائية الأبعاد: قاعدة الشبكة ثنائية الأبعاد أو الشبكة الأولية المحددة من خلال اقتران أصغر متجهين $\vec{a}$ و$\vec{b}$ للشبكة، غير معدومين وغير الخطيين. $|\vec{a}|$ و $|\vec{b}|$ هي ثوابت الشبكة.



الشكل (1–7): شبكة بلورية ثنائية البعد.

3–5–1 الشبكة ثلاثية الأبعاد: الخلية الأولية للشبكة عبارة عن متوازي الأضلاع، يتم تعريفه بواسطة ثلاث متجهات للشبكة غير صفرية $\vec{a}$، $\vec{b}$، و $\vec{c}$ المشكلة لثلاثي السطوح المباشر. يتم تحديد الشبكة من خلال ستة معلمات:

الثوابت $\vec{a}$، $\vec{b}$، و $\vec{c}$ و الزوايا بين الثوابت $\alpha(\vec{a},\vec{b}),\beta(\vec{b},\vec{c}),\gamma(\vec{a},\vec{c})$



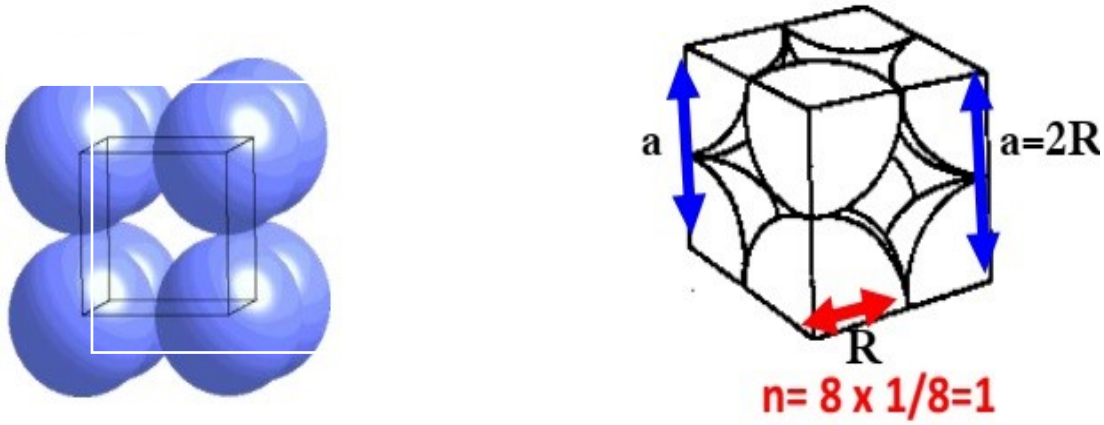
الشكل (1–8): شبكة بلورية ثلاثية البعد.

1–6 الشبكة البلورية المكعبة:

هي شبكة خليتها الأولية عبارة عن مكعب. ويوجد في النظام المكعب ثلاثة أنواع شبكات مختلفة، وهي الشبكة المكعبة البسيطة، والشبكة المكعبة الممركزة الجسم والشبكة المكعبة الممركزة الوجوه.

1–6–1 الشبكة المكعبة البسيطةSC

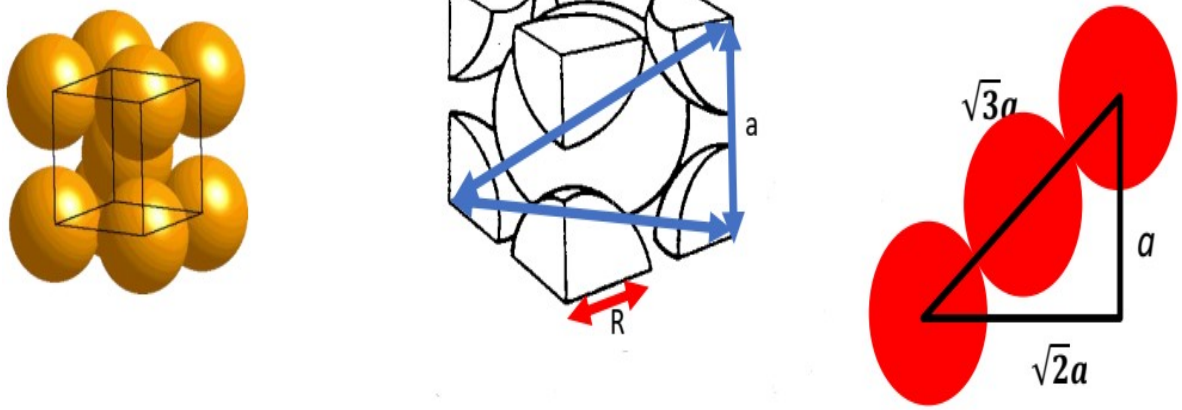
: خليتها الأولية عبارة عن مكعب يحتوي عند كل رأس من رؤوسه الثمانية على عقدة وكل عقدة من هذه العقد تشارك ثمانية خلايا كل خلية يكون نصيبها هو الثمن من هذه العقدة و بهذا يكون العدد د الفعلي للعقد في SC هو1.



الشكل (1–9): الشبكة المكعبة البسيطةSC.

2–6–1 الشبكة المكعبة الممركزة الجسمBCC

: خليتها الأولية عبارة عن مكعب يحتوي بالإضافة إلى ثماني العقد الموجودة في الرؤوس على عقدة كاملة في مركزه و بهذا يكون العدد د الفعلي للعقد في BCC هو2.

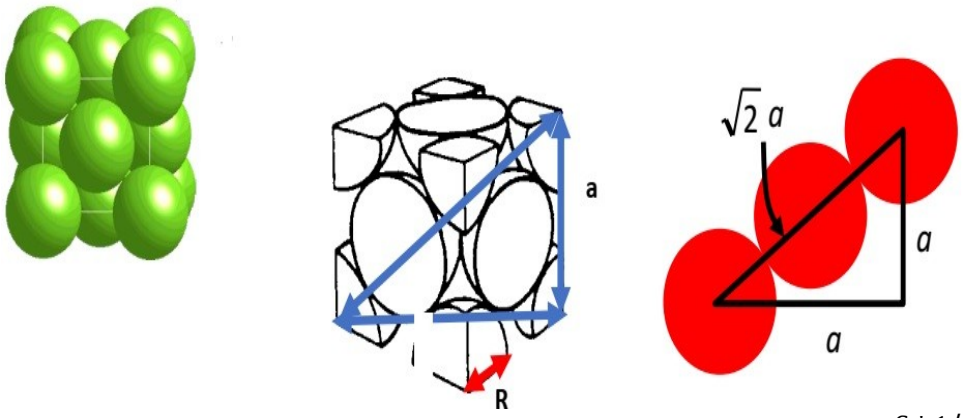


$n = 1 + 8 * 1/8 = 2$

الشكل (1–10): الشبكة المكعبة الممركزة الجسمBCC.

1–6–3 الشبكة المكعبة الممركزة الوجوه FCC

: خليتها الأولية عبارة عن مكعب يحتوي بالإضافة إلى ثماني العقد الموجودة في الرؤوس على عقدة في مركز كل وجه أو سطح من سطوحه الستة بحيث كل عقدة موجودة في مركز كل سطح تشارك خليتين كل خلية يكون نصيبها هو النصف وبهذا يكون العدد الفعلي للعقد في FCC هو 4.



$n = 6 * 1/2 + 8 * 1/8 = 4$

الشكل (1–11): الشبكة المكعبة الممركزة الوجوه FCC.

1–7 المتجهات والمستويات البلورية

إن معظم الخصائص الفيزيائية للمواد الصلبة البلورية تختلف باختلاف المتجهات أو المستويات البلورية وهذا بسبب عدم تجانس خواص بلورات المواد الصلبة في أبعادها الثلاثة وبمعنى أخر أن معظم البلورات هي بلورات متباينة المناحي (Anisotropic) أي أن الخواص الفزيائية المدروسة لهذه المواد لها علاقة بالمتجهات والمستويات وهي تختلف من اتجاه إلى أخر ومن مستوي إلى مستوي أخر ولهذا من أجل دراسة أي خاصية فيزيائية نجد أنفسنا ملزمين إلزاما تاما على تحديد المتجهات أو المستويات البلورية التي تقاس فيها هذه الخاصية ولهذا السبب اهتم علم البلورات بكيفية تحديد المتجهات والمستويات البلورية وقد تم التوصل إلى عدة طرق لوصف وتعين المتجهات والمستويات البلورية، لكن الإشكالية المطروحة هي كيف يمكننا تعين ووصف هذه المستويات والمتجهات ؟.

1-7-1 المتجه البلوري وقرائن فيس:

أ -تعريف

المتجه البلوري هو متجه رياضي يُستخدم في علم البلورات لوصف المواضع النسبية للذرات داخل الشبكة البلورية. وهو باختصار كل خط (اتجاه) يشمل على الأقل عقدتين من عقد الشبكة البلورية. ويمكن التعبير عن موقع أي ذرة في البلورة من خلال العلاقة الخطية بين هذه المتجهات:

$$\vec{r}=u\vec{a}+v\vec{b}+w\vec{c} \qquad (5-1)$$

حيث: u,v,w هي معاملات نسبية تحدد موقع الذرة داخل الخلية الأولية.

يرمز للاتجاه (المتجهات المتوازية) البلوري بالرمز $[uvw]$ حيث wو vو u هي ثوابت تعرف بقرائن أو معاملات فيس.

ب- طريقة تحديد قرائن فيس

لتحديد قرائن فيس نتبع الخطوات التالية:

1- أول خطوة هي اختيار خلية بلورية أساسية (الخلية الأولية) التي تمثل أصغر وحدة متكررة في الشبكة البلورية، و نفرض أن المحاور الكارتيزية تنطبق على أشعة الانتقال الأساسية للخلية الأولية (أحرف الخلية الأولية) بحيث يكون رأس الخلية الأولية هو مبدأ للمحاور.

2- نعين إحداثيات نقطة بداية ونهاية المتجه البلوري حيث نقطة البداية هي $A=(x_A,y_A,z_A)$ ونقطة النهاية هي $B=(x_B,y_B,z_B)$

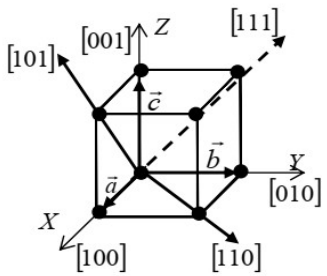
3- نعين إحداثيات المتجه البلوري $\overrightarrow{AB}=(x_B-x_A,y_B-y_A,z_B-z_A)$

4- نضرب القيمx_B-x_A و y_B-y_A و z_B-z_A في أصغر مضاف مشترك لي مقاماتها فنحصل على قيم قرائن فيس المعرفة للاتجاه البلوري على الشكل $[uvw]$، حيث:

$(u=n(x_B-x_A),v=n(y_B-y_A),w=n(z_B-z_A))$و n هو المضاعف المشترك الأصغر.

عند تعين المتجهات البلورية بواسطة قرائن فيس يجب الأخذ بعين الاعتبار الملاحظات التالية:

- ✓ إذا كان مسقط الشعاع على محور معين سالب يكون معامل فيس المرفق له سالبا (مثلا قرائن فيس للمحور السالب هي $[uvw]=[0\bar{1}0]$).
- ✓ تعين كل المتجهات البلورية المتوازية بنفس قرائن فيس.
- ✓ يرمز لمجموعة أو عائلة المتجهات البلورية المتكافئة في البلورة أي المتجهات التي تنطبق على بعضها بسب تناضر البلورة بالرمز. $\langle uvw\rangle$. يمثل الشكل$(11-1)$ قرائن فيس لبعض المتجهات المهمة في الفئة المكعبة.



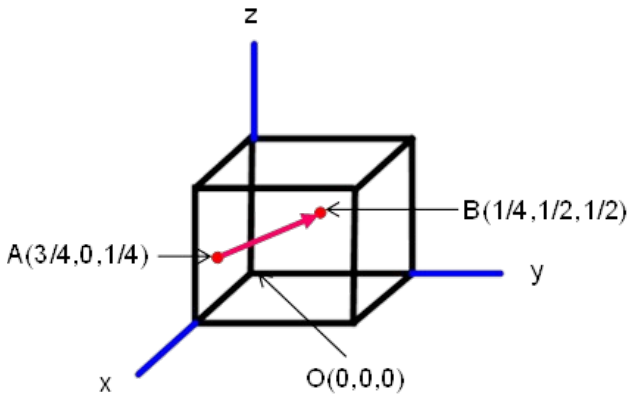
الشكل (1–12): قرائن ميلر لبعض المتجهات المهمة في الفئة المكعبة.

مثال1:

في البلورة المكعبة تضم عائلة المتجهات البلورية $\langle 100\rangle$المتجهات

$\langle 100\rangle=[100],[010],[001],[\bar{1}00],[0\bar{1}0],[00\bar{1}]$.

مثال 2: عين قرائن فيس للاتجاه البلوري المبين في الشكل المقابل.



يمكننا توضيح الخطوات السابقة المتبعة في تحديد المتجهات البلورية (قرائن فيس) من خلال:

- إحداثيات المتجه البلوري المبين في الشكل هي

$$\overrightarrow{AB}=(x_B-x_A,y_B-y_A,z_B-z_A)=\left(\frac{1}{4}-\frac{3}{4}\quad\frac{1}{2}-0\quad\frac{1}{2}-\frac{1}{4}\right)=(-\frac{1}{2}\quad\frac{1}{2}\quad\frac{1}{4})$$

- بضرب إحداثيات الشعاع $\overrightarrow{AB}$ في المضاعف المشترك الأصغر لمقاماتها (المضاعف المشترك الأصغر للأعداد 4و2و2 والذي يساوي 4)
- نحصل على قيم قرائن فيس للاتجاه البلوري على النحو $[uvw]=[\bar{2}21]$.

ج– طريقة رسم قرائن فيس

لرسم المتجه البلوري بشكل صحيح، تحتاج إلى اتباع خطوات تعتمد على تحديد الخلية البلورية (الخلية الأولية) وتحديد اتجاهات وأبعاد المتجهات الثلاثة $\vec{a}$ ، $\vec{b}$، $\vec{c}$ ، هذه المتجهات تمثل الأبعاد والمتجهات الأساسية في البنية البلورية. ومن اجل رسم قرائن فيس عادة نتبع الخطوات التالية:

1– نختار نظام إحداثيات ثلاثي الأبعاد حيث المحور x سيُمثل المتجه $\vec{a}$، والمحور y سيُمثل المتجه $\vec{b}$، والمحور z سيُمثل المتجه $\vec{c}$. نرسم الخلية ونعين عليها نقطة المبدأ والمحاور مع الأخذ بعين الاعتبار أن المتجهات الموجبة للمحاور هي اتجاهات الأسهم.

2– إذا كان المتجه هو $[uvw]$

نبدأ المسار من نقطة المبدأ على محور X مسافة قدرها u من الوحدات الوحدة هي a إذا كانت u موجبة وفي عكس اتجاه محور X إذا كانت u سالبة.

من النقطة الجديدة نبدأ التحرك مسافة v موازياً لمحور Y إذا كانت v موجبة وعكس اتجاه محور Y إذا كانت

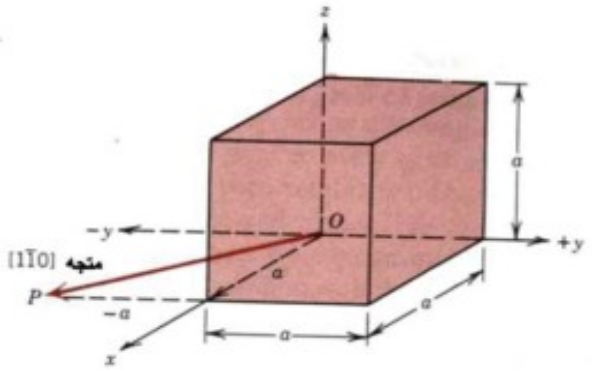
vسالبة.

من أخر نقطة نبدأ التحرك موازياً لمحور Z مسافةwفي اتجاه محور Z إذا كانت w موجبة وفي عكس اتجاه محور Z إذا كانت w سالبة.

3- نصل نقطة المبدأ بآخر نقطة ويكون ذلك هو المتجه $[uvw]$.

قد يكون هذا المتجه خارج الخلية أي في الخلية المجاورة وهو يعطي نفس المعنى لأن الخلايا هنا متماثلة.

مثال



د- طريقة حساب التوزيع الذري

- **الكثافة الذرية للمتجهات**

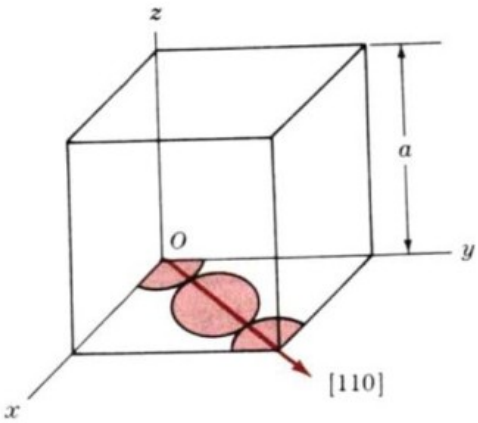
الكثافة الخطية للمتجهات البلورية تشير إلى عدد الذرات أو الأيونات التي تقع على طول متجه معين داخل البلورة. في البلورات، الذرات أو الأيونات تكون مرتبة في نمط دوري منتظم، مما يعني أن هناك اتجاهات معينة في البلورة تحتوي على كثافة مختلفة من الذرات على طولها.

لحساب الكثافة الخطية على طول اتجاه معين في البلورة، يتم النظر إلى عدد الذرات الموجودة على طول هذا المتجه في وحدة المسافة. وهي ببساطة عدد الذرات في وحدة الطول من المتجه، ويمكن تعريفها كالآتي:

$$\text{الكثافة الذرية للمتجه} = \frac{\text{عدد أقطار الذرات التي تتقاطع مع طول مختار من المتجه}}{\text{الطول المختار للمتجه}} \qquad (6-1)$$

مثال:

احسب كثافة المتجه $[110]$ للذهب إذا علمت أن ثابت الشبكة $a=0.408\,nm$.



الطول المختار للمتجه هو وتر الوجه $\sqrt{2}a$.

عدد أقطار الذرات التي تتقاطع مع هذا الطول $2=1/2+1+1/2$

كثافة المتجه $\rho_{[100]}=\frac{2}{\sqrt{2}}a=3.466\,10^5\,\frac{noeud}{cm}$

- **نسبة التعبئة الخطية:**

نسبة التعبئة الخطية للمتجهات البلورية هي نسبة تعبر عن مدى كثافة

تعبئة الذرات أو الأيونات على طول اتجاه معين داخل البلورة. يتم حساب هذه النسبة لمعرفة مدى قرب الذرات من بعضها البعض على طول هذا المتجه.

للحصول على نسبة التعبئة الخطية، يتم اتباع الخطوات التالية:

1. **حساب الطول الإجمالي للاتجاه** في البلورة المعني (أي طول المتجه البلوري على طول المتجه المدروس).
2. **حساب الطول الذي تشغله الذرات** أو الأيونات فعلياً على طول هذا المتجه. يعتمد ذلك على نوع البلورة وترتيب الذرات.
3. **نسبة التعبئة الخطية** تُحسب عن طريق قسمة الطول الفعلي الذي تشغله الذرات على طول المتجه على الطول الإجمالي للاتجاه.

تعرف نسبة الكثافة الخطية بالعلاقة

$$\text{الكثافة الخطية} = 2r * \text{نسبة التعبئة الخطية} = \frac{\text{الطول الذي تشغله الذرات على طول المتجه}}{\text{الطول الإجمالي للاتجاه في وحدة الخلية}} \qquad (7\text{–}1)$$

r: نصف القطر الذري.

مثال:

احسب نسبة الكثافة الخطية للمتجه $[110]$ للذهب إذا علمت أن ثابت الشبكة $a = 0.408\,nm$.

$$P.E.L[100] = \frac{2}{\sqrt{2}} a * 2r$$

من الشكل السابق نجد العلاقة $\sqrt{2}a = 4r$

$$P.E.L[100] = \frac{2}{\sqrt{2}} a * 2r = \frac{2}{\sqrt{2}} a * 2\frac{\sqrt{2}\cdot a}{4} = 1 = 100\,\%$$

1–8 المستوي البلوري:

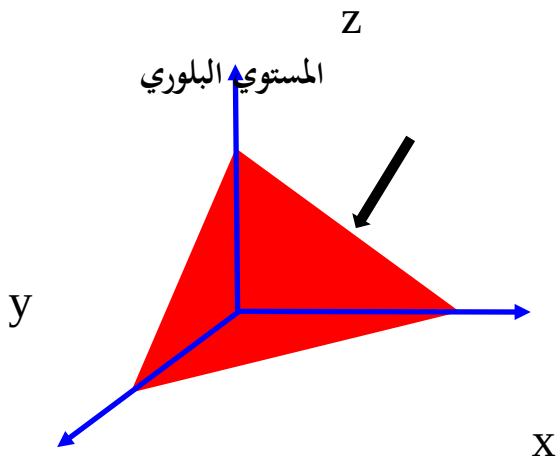
1–8–1 تعريف

المستوى البلوري هو مفهوم في علم البلورات يشير إلى مجموعة من الذرات المرتبة بشكل دوري في البلورة، حيث تكون هذه الذرات مرتبة على سطح مستوي. كل مستوى بلوري يمكن تحديده باستخدام مجموعة من الأعداد الصحيحة المعروفة باسم مؤشرات ميلر .

يعرف المستوي البلوري بأنه المستوي المار بثلاثة عقد على الأقل ليست على استقامة واحدة أو بتقاطع متجهين بلوريين غير متوازيين الشكل (1–13). في علم البلورات تستخدم قرائن **ميلر** لتعريف المستويات في نظام بلوري، وقد ابتكرت من طرف العالم وليام ميلر عام 1839، ويرمز له بالرمز (hkl) ويوصف بالمعادلة الرياضية من الشكل:

$$hx + ky + lz = m \qquad 8\text{–}1$$

حيث l وk وh هي ثوابت تعرف بقرائن أو ثوابت ميلر.



الشكل (1–13): مستو بلوري

- ✓ إذا كان: $m=0$ فإن المستوي (hkl) يمر بالمبدأ.
- ✓ إذا كان: $m=1$ فإن المستوي (hkl) هو أول مستوي لا يمر بالمبدأ.
- ✓ إذا كان: $m=2$ فإن المستوي (hkl) هو ثاني مستوي لا يمر بالمبدأ.

ملاحظة:

يتعلق بالمستوي البلوري عدد لا متناهي من المستويات البلورية الموازية للمستوي البلوري المقصود فإذا طلب منا تحديد المستوي (hkl) يجب علينا تحديد أول مستوي لا يمر بالمبدأ أي $m=1$.

1–8–2 طريقة تحديد قرائن (معاملات) ميلر:

يتم وصف وتحديد المستويات البلورية في الشبكة البلورية بواسطة مجموعة من الأعداد التي وضعها العالم الإنجليزي ميلر والتي تسمى بقرائن ميلر، ويمكن تعريف هذه القرائن على أنها مجموعة مكونة من ثلاثة أرقام (h, k, l) تُستخدم لتحديد اتجاه وسطح المستويات البلورية داخل البلورة. تساعد هذه المؤشرات في وصف الترتيب الهندسي للذرات داخل البنية البلورية، وتُعد أداة أساسية لفهم الخواص البلورية. ولتحديد هذه القرائن نتبع الخطوات التالية:

1) نفرض أن المحاور الكارتيزية تنطبق على أشعة الانتقال الأساسية للخلية الأولية (أحرف الخلية الأولية) بحيث يكون رأس الخلية الأولية هو بمثابة مبدأ للمحاور.

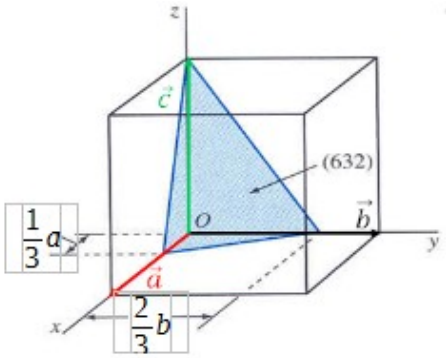
2) نعين إحداثيات نقاط تقاطع المستوي مع المحاور الكارتيزية x,y,z على امتداد أشعة الانتقال الأساسية$\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ على الترتيب بحيث نعبر عن هذه الإحداثيات بواسطة أعداد تكون مضاعفات كسرية لأطوال أشعة الانتقال الأساسية.

3) نكون مجموعة الأعداد الكسرية على النحو التالي $\left(\frac{x}{a} \text{ و } \frac{y}{b} \text{ و } \frac{z}{c}\right)$.

4) نعين مقلوب مجموعة الأعداد الكسرية السابقة فنحصل على المجموعة التالية $\left(\frac{a}{x} \text{ و } \frac{b}{y} \text{ و } \frac{c}{z}\right)$.

5) ثم نقوم بضرب المجموعة الأعداد الكسرية السابقة في أصغر مضعف مشترك للمقام ويكون حينها مجموعة الأرقام المتحصل عليها هي قرائن ميلر التي تكتب على الشكل التالي(hkl). حيث: $\left(h=n\frac{a}{x},k=n\frac{b}{y},l=n\frac{c}{z}\right)$ و n هو المضاعف المشترك الأصغر للمقام.

مثال: عين قرائن ميلر للمستوي البلوري المشار له في الشكل المقابل بالون الأزرق.



من خلال الشكل نلاحظ بأن:

1.المستوي يقطع المحاور الثلاثة في النقاط $(x,y,z)=\left(\frac{1}{3}a,\frac{2}{3}b,c\right)$

2.تكوين مجموعة الأعداد الكسرية التالية $\left(\frac{x}{a},\frac{y}{b},\frac{z}{c}\right)=\left(\frac{1}{3},\frac{2}{3},1\right)$

3.مقلوب هذه المجموعة هو $\left(\frac{a}{x},\frac{b}{y},\frac{c}{z}\right)=\left(\frac{3}{1},\frac{3}{2},1\right)$

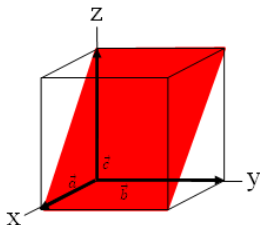
4.ضرب أعداد هذه المجموعة الأخيرة في المضاعف المشترك الأصغر لمقاماتها (المضاعف المشترك الأصغر للأعداد 1و2و1) والذي هو 2.

5.نحصل على معاملات أو قرائن ميلر للمستوي على النحو $(hkl)=(632)$.

عند وصف وتعين المستويات البلورية بواسطة قرائن ميلر يجب الأخذ بعين الاعتبار الملاحظات التالية:

✓ المستوي البلوري الموازي لأي محور أي يقطعه في ∞ يكون معامل ميلر له وفق هذا المحور معدوم.

مثال:



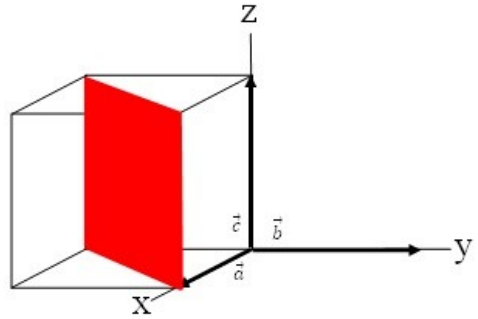
في الشكل المقابل نلاحظ بأن نقاط تقاطع المستوي مع المحاور الثلاثة هي $x=a$ و $y=\infty$ لأن للمستوي ضلع موازي للمحور y و $z=c$

إذا يمكننا تكوين مجموعة الأعداد الكسرية التالية $\left(\frac{x}{a},\frac{y}{b},\frac{z}{c}\right)\left(1,\frac{1}{\infty},1\right)=$

وتكون قرائن ميلر (hkl)لهذا المستوي هي (101)

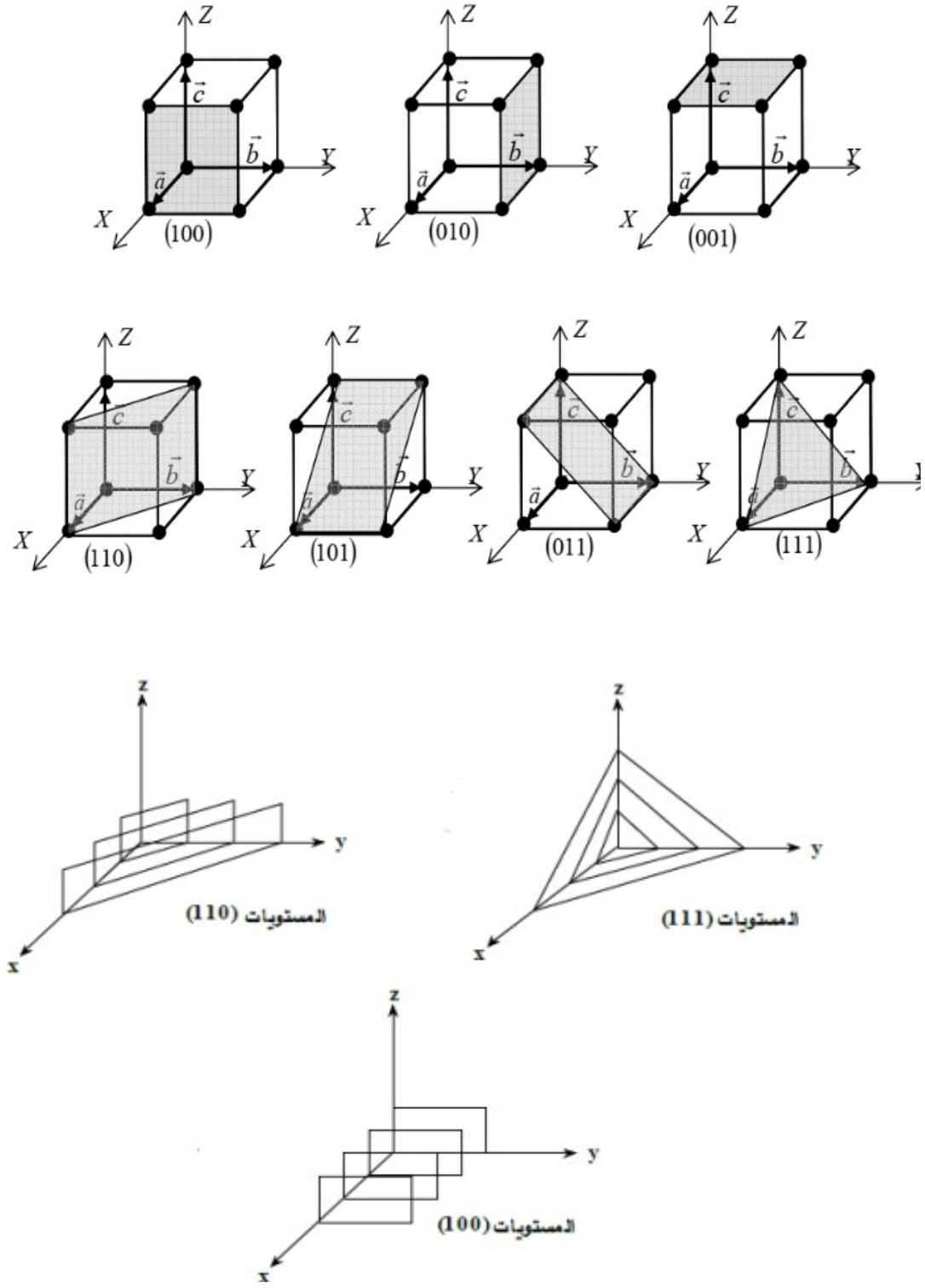
✓ إذا قطع المستوي البلوري محور معين من جهته السالبة من المبدأ فإن قرينة ميلر الموافقة له تكون سالبة ويرمز لها بالرمز $\bar{h}$ أو $\bar{k}$ أو $\bar{l}$.

مثال:



في الشكل المقابل من أجل تحديد نقاط تقاطع المستوي مع المحاور الثلاثة نغير المبدأ كما هو في الشكل وتكون نقاط التقاطع مع المحاور الثلاثة هي $x=a$ و $y=-b$ لأن المستوي يقطع المحور y في الجهة السالبة و $z=\infty$ لأن للمستوي ضلع موازي للمحور z، إذا يمكننا تكوين مجموعة الأعداد الأكسرية التالية $\left(\frac{x}{a},\frac{y}{b},\frac{z}{c}\right)=\left(1,-1,\frac{1}{\infty}\right)$ وتكون قرائن ميلر (hkl)لهذا المستوي هي $(1\bar{1}0)$

- ✓ يوجد عدد لانهائي من المستويات المتوازية وتعين هذه المستويات بنفس قرائن ميلر، فعلى سبيل المثال، المستوي (333) هو نفسه المستوي (111)، والمستوي (220) هو نفسه المستوي (110)، المستوي (400) هو نفسه المستوي (100) الشكل (1-14).



الشكل (1-14): قرائن ميلر لبعض المستويات البلورية.

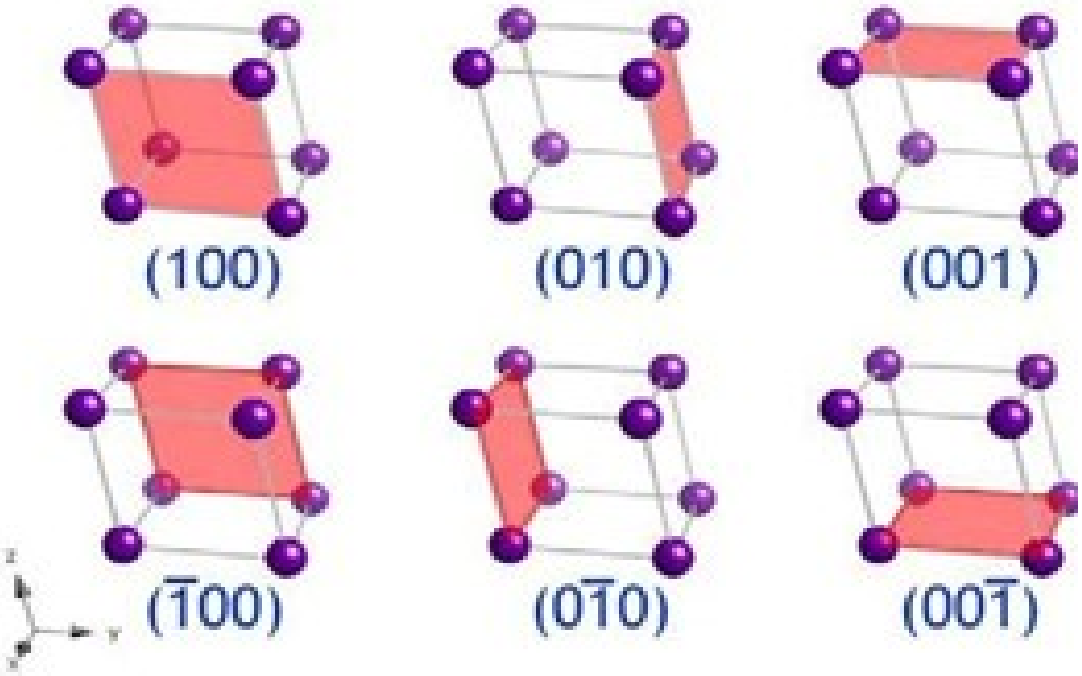
✓ يرمز لمجموعة وعائلة المستويات المتكافئة في البلورة (المستويات التي تشترك في عناصر التناظر) أي المستويات التي تنطبق على بعضها بسب تناضر البلورة بالرمز *hkl*

عائلة المستويات البلورية هي مجموعة من المستويات البلورية التي تمتلك نفس الخصائص التناظرية داخل البلورة. بعبارة أخرى، جميع المستويات التي تنتمي إلى عائلة معينة تكون متماثلة من حيث التوجهات الهندسية لكنها تختلف في أماكن تقاطعها مع المحاور البلورية. هذه العائلات تتحدد باستخدام **مؤشرات ميلر**. على سبيل المثال في البلورة المكعبة:

✓تشير 100 إلى مجموعة من المستويات التي تحتوي على مؤشرات ميلر مثل (100)، (010)، (001) بالإضافة إلى جميع التباديل الممكنة (مثل الاتجاهات السالبة $(00\bar{1})$ $(0\bar{1}0)$ $(\bar{1}00)$.. هذه المستويات جميعها متعامدة على أحد المحاور البلورية وتقطع المحورين الآخرين عند لانهاية.

✓**عائلة** 110: تتضمن المستويات $(1\bar{1}0)$ $(\bar{1}10)$ (011) (101) (110)، وهكذا. هذه المستويات تقطع محورين من المحاور البلورية عند نقاط معينة، ولا تقطع المحور الثالث.

✓**عائلة** 111: تتضمن المستويات $(11\bar{1})$ $(\bar{1}11)$ $(1\bar{1}1)$ (111). هذه المستويات تمثل المستويات القطعية للبلورة التي تقطع جميع المحاور البلورية عند نقاط متساوية.



الشكل (1–15): عائلة المستويات البلورية {001}.

1–8–3 طريقة رسم قرائن (معاملات) ميلر:

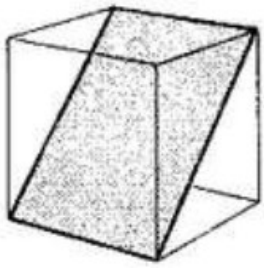
لرسم قرائن (معاملات) ميلر، التي تُستخدم في البلورات لوصف مستويات أو أسطح في البلورة، يمكنك اتباع الخطوات التالية:

1-نحدد قيم المحاور الثلاثة. $(x,y,z)=(a,b,c)$

2-نأخذ مقلوب قيم تلك المحاور.

3-نجد القيم الجديدة ونضعها داخل قوسين صغيرين من دون وضع إشارة الفاصلة بين قيم المعاملات وكالاتي $\left(\frac{x}{a},\frac{y}{b},\frac{z}{c}\right)$ ليمثل المستوي المرسوم.

ملاحظه مهمة: إذا كانت قيمة احدي المحاور سالبة فننقل مركز المكعب إلى اتجاه القيمة السالبة.

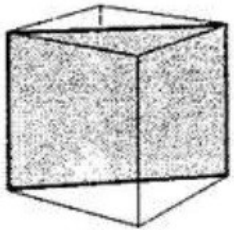


مثال

ارسم المستويات الآتية في بلورة مكعبة الشكل؟

- (101)

1- نحدد قيم المحاور الثلاثة $(1,0,1)$.



2- نأخذ مقلوب قيم تلك المحاور $(1,\infty,1)$.

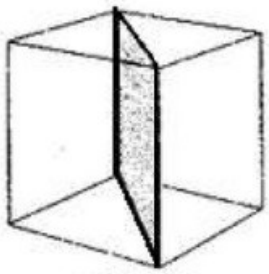
3- نجد القيم الجديدة ونضعها داخل قوسين صغيرين من دون وضع إشارة الفاصلة بين قيم المعاملات وكالاتي $(1,\infty,1)$ ليمثل المستوي المرسوم.

- (110)

1- نحدد قيم المحاور الثلاثة $(1,1,0)$.

2- نأخذ مقلوب قيم تلك المحاور $(\infty,1,1)$.

3- نجد القيم الجديدة ونضعها داخل قوسين صغيرين من دون وضع إشارة الفاصلة بين قيم المعاملات كالاتي$(\infty,1,1)$. ليمثل المستوي المرسوم.



- $(\bar{1}10)$

1- نحدد قيم المحاور الثلاثة $(\bar{1},1,0)$.

2- نأخذ مقلوب قيم تلك المحاور $(\bar{1},1,\infty)$.

3- نجد القيم الجديدة ونضعها داخل قوسين صغيرين من دون وضع إشارة الفاصلة بين قيم المعاملات كالات $(\bar{1},1,\infty)$ ليمثل المستوي المرسوم.

4- فننقل مركز المكعب إلى اتجاه القيمة السالبة على المحور (x).

4-8-1 قرائن ميلر في الشبكة السداسية:

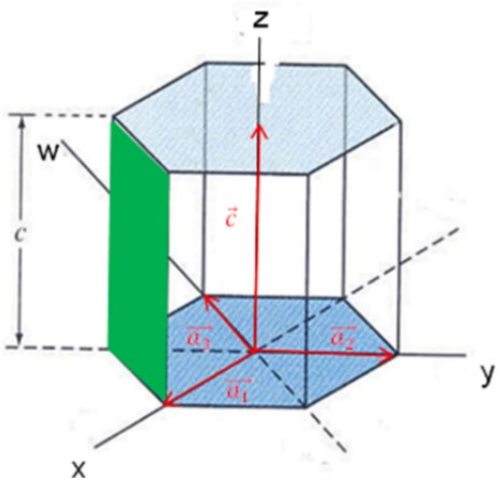
في الشبكة السداسية، تتطلب عملية تحديد المستويات البلورية استخدام ثلاث قرائن بلورية تُعرف باسم h k i بالإضافة إلى l، والتي تصف الاتجاهات في المحاور البلورية. يمكن تلخيص هذه القرائن على النحو التالي:

1. h k و i: هذه القرائن تصف الاتجاهات على المستوي الأفقي (محاور$\vec{a}_3$ ،$\vec{a}_2$ ،$\vec{a}_1$) في الشبكة السداسية. حيث يمكن إثبات أن العلاقة الرابطة بين قرائن ميلر هي $h+k+i=0$، حيث يُستخدم هذه العلاقة للتأكد من الاتساق بين القرائن الثلاثة.

2 1 يصف القرينة العمودية أو المحور $\vec{c}$، الذي يمثل الاتجاه العمودي على المستويات الأفقية في الشبكة السداسية.

و تكتب قرائن ميلر للفصيلة السداسية بمجموعة مكونة من أربعة أرقام $(hkil)$ حيث كل من h,k,i,l تمثل المحاور

x, y, w, z



الشكل (1–16): قرائن ميلر برافي في الشبكة السداسية.

ويمكننا توضيح الخطوات السابقة المتبعة في تحديد قرائن ميرفي الشبكة السداسية من خلال المثال التالي: عين قرائن ميلر للمستوي البلوري المشار له في الشكل المقابل بالون الأخضر.

- من خلال الشكل نلاحظ بأن المستوي يقطع المحاور الأربعة في النقاط $(x, y, w, z)=(a_1, -a_2, \infty, \infty)$.
- تكوين الأعداد الكسرية التالية $=\left(\frac{x}{a_1}, \frac{y}{a_2}, \frac{w}{a_3}, \frac{z}{c}\right)=(1, -1, \infty, \infty)$
- مقلوب هذه المجموعة هو $\left(\frac{a_1}{x}, \frac{a_2}{y}, \frac{a_3}{w}, \frac{c}{z}\right)=(1, -1, 0, 0)$
- ضرب أعداد هذه المجموعة الأخيرة في المضاعف المشترك الأصغر لمقاماتها والذي هو $n=1$ نحصل على معاملات أو قرائن ميلر للمستوي $(hkil)=(1\bar{1}00)$.

1–8–5 طريقة حساب التوزيع الذري

أ- **الكثافة المستوية**

الكثافة المستوية البلورية هي مفهوم في علم البلورات والفيزياء الصلبة، وتستخدم لوصف عدد الذرات أو الأيونات الموجودة في وحدة المساحة على مستوى معين داخل بلورة. يُعد هذا المفهوم مهمًا في فهم خصائص المواد البلورية.

هي أكبر نسبه مساحية يمكن أن تشغلها الذرات الموجودة في مستو ي معين من خلية الوحدة و تعطى بالعلاقة التالية:

$$\text{الكثافة المستوية} = \frac{\text{عدد ذرات الوجه}}{\text{مساحة سطح الوجه}} (\text{ذرة}/cm^2) \qquad (8–1)$$

مثال: في بلورة الرصاص، أحسب الكثافة الذرية للمستويات (110) (111) (100) إذا علمت أن الرصاص يتبلور على شكل مكعب ممركز الأوجه ذو ثابت شبكة $a=4.93\,\text{Å}$.

- **المستوى** (100)

يكون توزيع الذرات كما هو مبين في الشكل () يحتوي هذا المستوى على ذرتين اثنتين $1+1/4*4=2$ وبالتالي تكون الكثافة الذرية لهذا المستوى

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

- **المستوى** (111)

يكون توزيع الذرات كما هو مبين في الشكل (1-17) يحتوي هذا المستوى على ذرتين اثنتين $3x1/6+3*1/2=2$ وبالتالي تكون الكثافة الذرية لهذا المستوى،لكل مثلث ، PRQ ارتفاعه $h=\sqrt{2}\cos 30$ وطول قاعدته يساوي $2a$ وبالتالي تكون مساحته تساوي $\frac{1}{2}\sqrt{2}\,a\,\frac{\sqrt{3}}{2}\cos 30^\circ=\sqrt{2}a\ x\ a$

وبالتالي تكون الكثافة الذرية لهذا المستوى

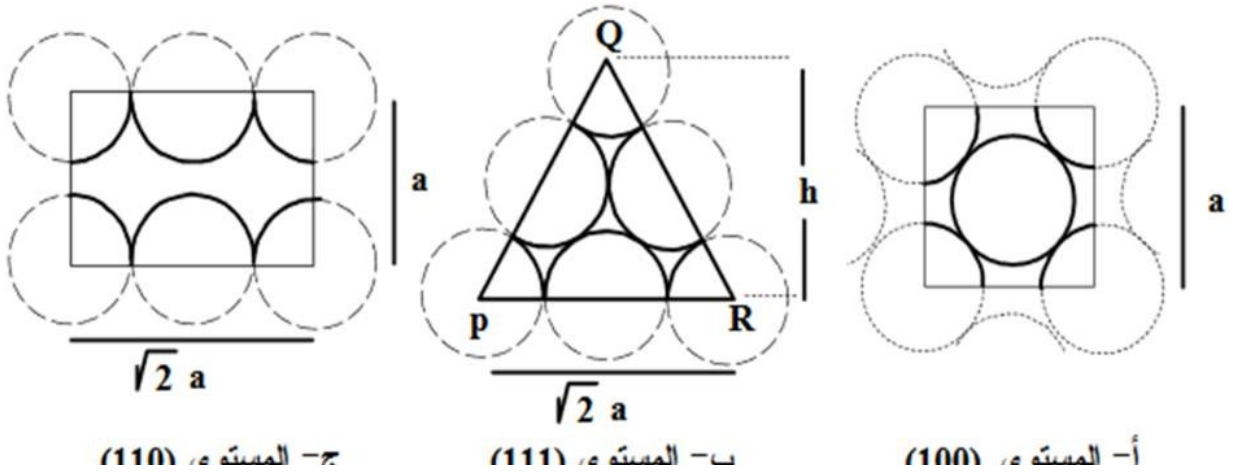
$$\rho_{(}(111))=(4\,atoms)/\ \left[\left(\sqrt{3}\,a\right]\right]^{2}=2/(\sqrt{3}(4.93x10^{(}-7))^{2})=9.5x10^{12}\ atoms/mm^{2}$$

- **المستوى** (110)

يكون توزيع الذرات كما هو مبين في الشكل () يحتوي هذا المستوى على ذرتين اثنتين $4x1/4+2*1/2=2$

وبالتالي تكون الكثافة الذرية لهذا المستوى

$$\rho_{(}(110))=(4\,atoms)/\ \left[\left(\sqrt{2}\,a\right]\right]^{2}=2/(\sqrt{2}(4.93x10^{(}-7))^{2})=5.82x10^{12}\ atoms/mm^{2}$$



الشكل (1-17): توزيع الذرات في المستويات البلورية (100) (111) (110).

1-9 معامل التعبئة (التراص) والكتلة الحجمية

1-9-1 معامل التعبئة

هو مفهوم يستخدم في علم البلورات والهياكل البلورية لوصف النسبة بين حجم الذرات أو الأيونات داخل خلية بلورية وحجم الخلية نفسها. يعبر هذا العامل عن كيفية تنظيم الذرات في البلورة ومدى كفاءة تعبئتها داخل الخلية.

يتم حساب معامل التعبئة البلوري باستخدام الصيغة التالية:

معامل التعبئة =الحجم الإجمالي للخلية البلورية/الحجم الإجمالي للذرات داخل الخلية

$$C=\sum_{i}\frac{n_a^i v_a^i}{V} \qquad (9-1)$$

n_a^i: عدد الذرات من نوع i في خلية الوحدة.

v_a^i: حجم الدرة من نوع i.

V : حجم خلية الوحدة.

2-8-1 خطوات حساب معامل التعبئة:

1. حجم الذرات: حساب حجم الذرات الموجودة في الخلية البلورية. يتم اعتبار كل ذرة على أنها كرة ويحسب حجمها بناءً على نصف قطرها (R). حجم الذرة = $\frac{(4\pi R^3)}{3}$
2. عدد الذرات داخل الخلية: حساب عدد الذرات الفعلي الذي يشغل الخلية البلورية. يعتمد هذا على نوع الشبكة البلورية (مكعب بسيط، مكعب مركز الوجه، إلخ).
3. حجم الخلية البلورية: حساب الحجم الإجمالي للخلية البلورية. يتم حساب حجم الخلية بناءً على طول حافة الخلية (a). حجم الخلية=حجم الخلية$a3$

1-9-2 الكتلة الحجمية

الكتلة الحجمية الذرية هي مفهوم يستخدم للإشارة إلى كثافة المادة على المستوى الذري، ويأخذ في الاعتبار توزيع الذرات داخل المادة وحجم الذرات نفسها. يتم حسابه بطريقة مشابهة للكتلة الحجمية التقليدية، ولكنه يركز على الكتلة والحجم المرتبطين بالذرات الفردية بدلاً من المادة بكاملها، تعرف الكتلة الحجمية بانها النسبة بين كتلة وحجم خلية الوحدة، حيث يمكن كتابة عبارتها انطلاقا من علاقة حساب معامل التراص وذلك بتعويض حجم الذرة v_a^i بكتلتها m_a^i ونحصل عليها بالعلاقة التالية:

$$\rho = \sum_i \frac{n_a^i m_a^i}{V} = \sum_i \frac{n_a^i M_a^i}{N_{av} V} \qquad (10-1)$$

n :عدد ذرات الخلية الاصطلاحية.

M: الكتلة المولية.

Nav: عدد أفوجادرو و يساوي مول/ذرة $6.023\,x\,10^{23}$.

V: حجم الخلية الاصطلاحية.

تعتمد الكتلة الحجمية الذرية بشكل كبير على نوع البنية البلورية للمادة، سواء كانت مكعبة مركزية الوجه (FCC)، مكعبة مركزية الجسم (BCC)، أو سداسية (HCP)، لأن عدد الذرات في وحدة الخلية يختلف لكل نوع من هذه الهياكل.

هذا المفهوم مهم في دراسة خواص المواد الصلبة البلورية، حيث يساهم في فهم توزيع الذرات داخل المادة وتأثيرها على الخصائص الميكانيكية والكهربائية والحرارية للمادة.

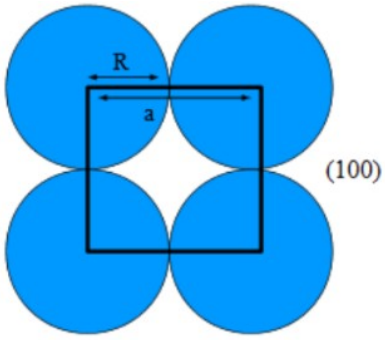
1-9-3 نسبة التعبئة الحجمية

نسبة التعبئة الحجمية هي مقياس لمدى استخدام الحجم في هيكل بلوري معين لاحتواء الذرات، وهي النسبة بين الحجم الفعلي للذرات داخل الخلية الأولية وحجم الخلية الأولية بأكملها. تُعتبر هذه النسبة مؤشرًا على كفاءة ترتيب الذرات في شبكة بلورية معينة، (في ثلاثة أبعاد) فتعطى بالعلاقة التالية

$$\text{نسبة التعبئة الحجمية} = \frac{\text{المشغول الحجم بالذرات في المختارة الخلية} * 100}{\text{الاصطلاحية للخلية الكلي الحجم}} \qquad (11-1)$$

مثال:

أوجد معامل التعبئة لعنصر البولونيوم نسبة التعبئة الحجمية له، علما انه يتبلور في شبكة مكعبة بسيطة،



$a = 335.2\ pm\ et\ MPo = 209\ g/mol$

الشكل (1–18): مستو التراص (100) لعنصر البولونيوم.

لدينا معامل التعبئة $C = \frac{nv}{V}$

$n = 1$ من اجل شبكة مكعبة بسيطة

$V = a^3$ من اجل شبكة مكعبة و من خلال مستوي التراص (100) نجد العلاقة $a = 2r$

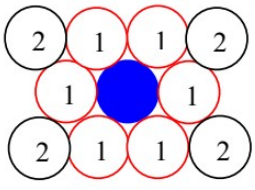
$V = \frac{4}{3}\pi r^3$ باعتبار أن الذرات عبارة عن كرات مصمتة.

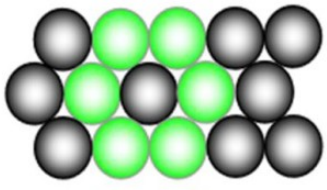
بالتعويض في عبارة معامل التعبئة نجد $C = \frac{nv}{V} = \frac{1\frac{4\pi r^3}{3}}{a^3} = \frac{4\pi r^3}{3x8r^3} = 52\%$

1–10 العدد التناسقي للذرة

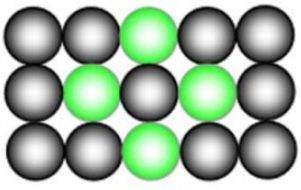
العدد التناسقي للذرة هو عدد الذرات أو الأيونات المجاورة التي ترتبط مباشرة بذرة معينة في تركيب جزيء أو مادة صلبة. يُستخدم هذا المصطلح بشكل رئيسي في الكيمياء وفي فيزياء المواد لوصف كيفية تنسيق الذرات في البلورات أو المركبات الكيميائية.

يمثل عدد التناسق لعقدة فى الشبكة (الذرة) مدى قدرة تراص الذرات في الشبكة البلورية ويعرف بأنه عدد أقرب العقد في الشبيكة بالنسبة لعقدة معينة، أي أنه عدد أقرب العقد المجاورة لتلك العقدة. وحيث أن العقد في الشبيكة البرافية متماثلة من ناحية التوزيع الفضائي مع ما يحيط بكل عقدة من بقية العقد فإن عدد التناسق يكون هو نفسه لكل عقد شبيكة معينة أو يكون خاصية من خصائص تلك الشبيكة. في المكعبى البسيط نجد أن عدد التناسق هو ستة، كما يتبين في الشكل (1–19) كذلك، يكون عدد التناسق في المكعبى المتمركز الجسم هو، 8بينما يكون 12في المكعبى المتمركز الأوجه.





عدد التناسق هو:6

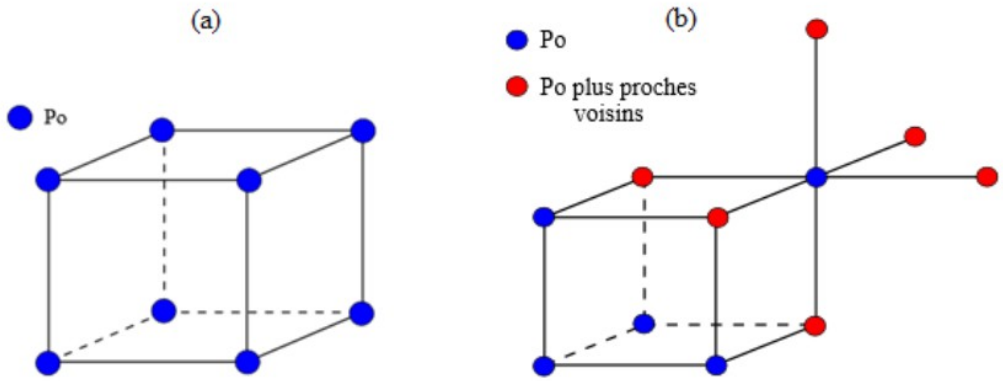


عدد التناسق هو:4

الشكل (1–19): العدد التناسقي لشبكات مستوية رباعية وسداسية

مثال:

أوجد العدد التناسقي لعنصر البولونيوم علما انه يتبلور في النظام المكعبي البسط.



الشكل (1–20): (a) بلورة البولونيوم. (b) تنسيق البولونيوم.

من خلال الشكل (1–20) نلاحظ أن عدد الذرات الأقرب لذرة البولونيوم يساوي 6، وبالتالي العدد التناسقي لعنصر البولونيوم هو 6

نعلم أن المركبات الأيونية تتركب من أيونات مختلفة حيث يرتبط كل كاتيون مع أنيون وهكذا. يتكرر هذا الشكل من الارتباط وتتكون بلورات هذه المواد. لذلك فإن للمركبات الأيونية عددان للتناسق، يكون العدد الأول عدد التناسق للكاتيونات ويكون الثاني عدد التناسق للأنيونات. وبشكل عام، يزداد عدد التناسق في المركبات الأيونية مع زيادة النسبة بين نصف قطر الكاتيون ونصف قطر الأنيون $(\frac{r_{cation}}{r_{anion}})$ بمعنى كم من الأنيونات يمكنك ترتيبها حول الكاتيون. يبين الشكل (1–21) المفهوم السابق وبعض أمثلة التركيب

الشكل (1–21): بعض الأمثلة على العدد التناسقي لبعض المركبات الأيونية.

1–10 الشبكة المعكوسة

1–9–1 مقدمة

تقوم فكرة الشبكة العكسية على تمثيل كل مجموعة من المستويات البلورية المتوازية بمتجه عمودي عليها، بحيث يتناسب طول المتجه عكسيًا مع المسافة بين هذه المستوياتd. يمكن إثبات أن نقاط نهاية هذه المتجهات، التي تمثل جميع المجموعات المحتملة من المستويات البلورية، تشكّل شبكة بلورية أخرى، ولهذا تُعرف هذه النقاط أيضًا بعقد الشبكة العكسية.
يمكننا التمييز بين نوعين من الشبكات المرتبطة ببنية البلورات:

- **الشبكة المباشرة** (Direct Lattice)، والمعروفة أيضًا بشبكة برافي (Bravais Lattice)، والتي تتحدد بناءً على مواقع نقاط الشبكة التي تمثل مواضع الذرات في البلورة.
- **الشبكة العكسية** (Reciprocal Lattice)، وهي شبكة تُبنى من متجهات عكسية تمثل المستويات البلورية، بحيث ترتبط هذه المتجهات عكسيًا بالمسافات البينية للمستويات.

1–9–2 مفهوم الشبكة المعكوسة

الشبكة المعكوسة أو الشبكة المقلوبة (Reciprocal Lattice) هي مفهوم رياضي مهم في علم البلورات وفيزياء الحالة الصلبة، وتستخدم لوصف البلورات بطريقة مختلفة عن الشبكة المباشرة (الشبكة الحقيقية). تساعد الشبكة المعكوسة في تحليل كيفية تفاعل البلورات مع الإشعاعات، مثل انعراج الأشعة السينية والإلكترونات، مما يتيح فهمًا أعمق للبنية الداخلية للمواد الصلبة.

1–9–2 العلاقة بين متجهات الانتقال في الشبكة المباشرة و متجهات الشبكة العكسية

.الشبكة العكسية ذات أهمية بالغة لمعرفة بعض خصائص الأجسام الصلبة و كذا لتسهيل الحسابات و هي تعتمد أساسا على الشبكة المباشرة، فإذا كان أساس الفضاء في الشبكة المباشرة هو أشعة الانسحاب الأساسية:$\vec{c}$ ، $\vec{b}$، $\vec{a}$ فان فضاء الشبكة المعكوسة يحدد بالأشعة: $\vec{c}$، $\vec{b}$ ، $\vec{a}$ حيث: $\vec{a}_i * \vec{a}_j = 2\pi\delta ij$

δij هو رمز كرونيكر $\delta ij = \begin{cases} 1 i = j \\ 0, i \neq j \end{cases}$

من هذا التعريف نلاحظ ان الشعاع$\vec{a}$ يكون متعامدا مع كل من الشعاعين $\vec{c}$ ، $\vec{b}$ ، و كذلك $\vec{b}$ يكون متعامد مع الشعاعين $\vec{c}$ ، $\vec{a}$ ، و الشعاع $\vec{c}$ يكون متعامد مع الشعاعين $\vec{c}$ ، $\vec{b}$. و نحصل على العلاقة بين اشعة الشبكة المعكوسة بدلالة الشبكة المباشرة على الشكل التالي :

$$\vec{a} = 2\pi \frac{\vec{b} \wedge \vec{c}}{V} \qquad (12–1)$$

$$\vec{b} = 2\pi \frac{\vec{c} \wedge \vec{a}}{V} \qquad (13–1)$$

$$\vec{c} = 2\pi \frac{\vec{a} \wedge \vec{b}}{V} \qquad (14–1)$$

حيث $V = \left|(\vec{a} \wedge \vec{b})\right| * \vec{c}$ هو حجم الخلية الأساسية

1–9–3 خصائص الشبكة المعكوسة

- من خلال المعادلات السابقة التي تربط بين اشعة انتقال الشبكة العكسية و الشبكة المباشرة نجد

$$\vec{a}*\vec{b} = \vec{a}*\vec{c} = \vec{b}*\vec{a} = \vec{b}*\vec{c} = \vec{c}*\vec{a} = \vec{c}*\vec{b} \qquad (15–1)$$

$$\vec{a}*\vec{a}=\vec{b}*\vec{b}=\vec{c}*\vec{c}=1 \qquad (16-1)$$

- أن تحديد مواقع نقاط الشبكة المباشرة يكون بواسطة أشعة الانسحاب الأساسية: $\vec{a}$ ، $\vec{b}$، $\vec{c}$ يكتب بواسطة شعاع الانتقال

$$\vec{R}=n_1\vec{a}+n_2\vec{b}+n_3\vec{c} \qquad (17-1)$$

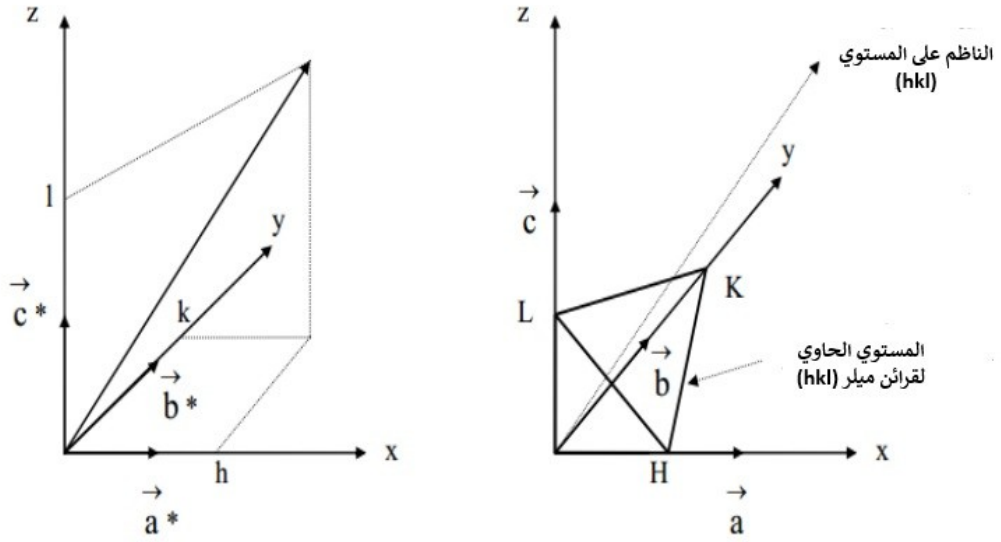
- بنفس الطريقة يمكن معرفة موقع أي نقطة من الشبكة العكسية بمتجه الانتقال للشبكة العكسية $\vec{G}$ بدلالة الأعداد الصحيحة h،k،l لمحاور الشبكة المقلوبة $\vec{a}$ ، $\vec{b}$، $\vec{c}$ و يكتب على الشكل التالي :

$$\vec{G}=h\vec{a}+k\vec{b}+l\vec{c}\cdot \qquad (18-1)$$

- الشبكة المعكوسة هي شبكة برافية، طالما تستنتج الشبكة المعكوسة من شبكة برافي المباشرة.
- متجه الشبكة المقلوبة المحدد بالأرقام الصحيحة h،k،l يكون دائما عموديا على جملة المستويات المتوازية (hkl)
- حجم الخلية الأساسية للشبكة المعكوسة متناسب عكسيا مع حجم الخلية الأولية للشبكة الأساسية

1-9-4 العلاقة بين المستوى (hkl)، المتجه $[hkl]$، والمسافة بين المستويات الشبكية

- لكل عائلة من المستويات الشبكية (hkl) في الشبكة البلورية (الشبكة المباشرة)، توجد صفٌّ في الشبكة المتماثلة



(الشبكة المتبادلة) تكون عمودية على المستوى (hkl)

الشكل (1-21): العلاقة بين المستوى (hkl)، المتجه $[hkl]$، والمسافة بين المستويات الشبكية

وفقًا لتعريف مؤشرات ميلر (Miller indices)، فإن المستوى (hkl) القريب من نقطة المبدا يمر عبر النقاط Lو Kو H الموجودة على المحاور البلورية. يتم تحديد مواقع هذه النقاط على النحو التالي:

1. النقطة H: تقع على المحور x عند مسافة a/h من نقطة الأصل، حيث a هو طول الوحدة على المحور x.
2. النقطة K: تقع على المحور y عند مسافة b/k من نقطة الأصل، حيث b هو طول الوحدة على المحور y.
3. النقطة L: تقع على المحورz عند مسافة c/l من نقطة الأصل، حيث c هو طول الوحدة على المحورz.

من اجل البرهان على أن $\vec{G}$ عمودي على المستوي (hkl) يكفي أن نبرهن أن : $\vec{G}*\overrightarrow{HK}=0$

لدينا

$$\overrightarrow{OH}+\overrightarrow{HK}=\overrightarrow{OK}\Rightarrow\overrightarrow{HK}=\overrightarrow{OK}-\overrightarrow{OH}=\frac{\vec{b}}{k}-\frac{\vec{a}}{h}$$

$$\vec{G}*\overrightarrow{HK}=0\Leftrightarrow\left(h\vec{a}+k\vec{b}+l\vec{c}\right)*\left(\frac{\vec{b}}{k}-\frac{\vec{a}}{h}\right)=0\Leftrightarrow\vec{a}*\vec{a}-\vec{b}*\vec{b}=1-1=0$$

بنفس الطريقة نجد : $\vec{G}*\overrightarrow{KL}=\vec{G}*\overrightarrow{LH}=0$.

* إن قيمة الشعاع $\vec{G}$ تتناسب عكسيا مع اصغر مسافة بين المستويات البلورية المتوازية (hkl) و العمودية عليه d $\vec{G}\alpha\frac{\vec{1}}{d}$. أي أن هذه المسافة تختلف باختلاف المستويات.

لتكن النقطة P مسقط النقطة O على المستوي hkl .المسافة $\left|\vec{G}\right|=d$

نلاحظ أن OP هو مسقط المتجه $\overrightarrow{OH}$ على المتجه $\vec{G}$. و منه نجد :

$$\vec{G}*\overrightarrow{OH}=\vec{G}*\overrightarrow{OP}=\vec{G}*\vec{d}$$

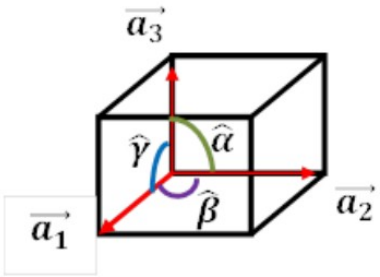
$$\vec{G}*\overrightarrow{OH}=\left(h\vec{a}+k\vec{b}+l\vec{c}\right)*\left(\frac{\vec{a}}{h}\right)=1*2\pi$$

و منه نجد : $\left|\vec{G}\right|=2\frac{\pi}{d}$

4-9-1 الشبكات العكسية للشبكات المكعبة

- **الشبكة العكسية للشبكة المكعبة البسيطة:**

أشعة الانسحاب الأولية للشبكة المكعبة البسيطة المباشرة هي: $\vec{a}=a\vec{i}$ ، $\vec{b}=a\vec{j}$ ، $\vec{c}=a\vec{k}$



تحسب أشعة الانسحاب الأولية لمعكوس الشبكة المكعبة البسيطة كما يلي:

$$\vec{a}=2\pi\frac{\vec{b}\wedge\vec{c}}{V}=2\pi a^2\frac{\vec{j}\wedge\vec{k}}{a^3}=2\frac{\pi}{a}\vec{i}$$

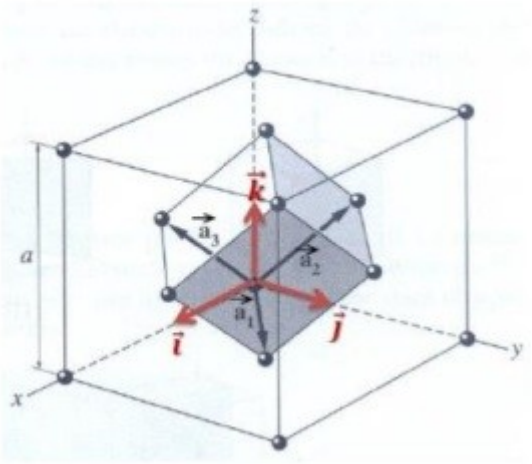
$$\vec{b}=2\pi\frac{\vec{c}\wedge\vec{a}}{V}=2\pi a^2\frac{\vec{k}\wedge\vec{i}}{a^3}=2\frac{\pi}{a}\vec{j}$$

$$\vec{c}=2\pi\frac{\vec{a}\wedge\vec{b}}{V}=2\pi a^2\frac{\vec{i}\wedge\vec{j}}{a^3}=2\frac{\pi}{a}\vec{k}$$

نلاحظ أن هذه الأشعة تماثل من حيث الشكل أشعة الانسحاب الأولية للشبكة المكعبة البسيطة ، و منه فان الشبكة العكسية للشبكة المكعبة ممركزة الجسم هي شبكة مكعبة بسيطة ثابتها $2\frac{\pi}{a}$.

- **الشبكة العكسية للشبكة المكعبة ممركزة الأوجه:**

أشعة الانسحاب الأولية للشبكة المكعبة ممركزة الأوجه المباشرة هي :



$$\vec{a}=\frac{a}{2}(\vec{j}+\vec{k})$$

$$\vec{b}=\frac{a}{2}(\vec{i}+\vec{k})$$

$$\vec{c}=\frac{a}{2}(\vec{i}+\vec{j})$$

تحسب أشعة الانسحاب الأولية لمعكوس الشبكة المكعبة ممركزة الأوجه كما يلي:

$$\vec{a}=2\pi\frac{\vec{b}\wedge\vec{c}}{V}=2\frac{\pi}{a}(-\vec{i}+\vec{j}+\vec{k})$$

$$\vec{b}=2\pi\frac{\vec{c}\wedge\vec{a}}{V}=2\frac{\pi}{a}(+\vec{i}-\vec{j}+\vec{k})$$

$$\vec{c}=2\pi\frac{\vec{a}\wedge\vec{b}}{V}=2\frac{\pi}{a}(+\vec{i}+\vec{j}-\vec{k})$$

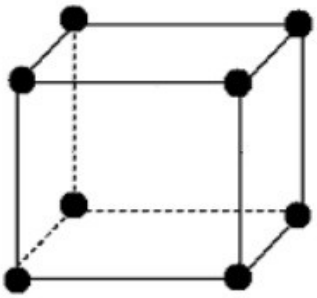
نلاحظ أن هذه الأشعة تماثل من حيث الشكل أشعة الانسحاب الأولية للشبكة المكعبة ممركزة الجسم، و منه فان الشبكة العكسية للشبكة المكعبة ممركزة الجسم هي شبكة مكعبة ممركزة الجسم ثابتها $2\frac{\pi}{a}$.

تمارين اضافية

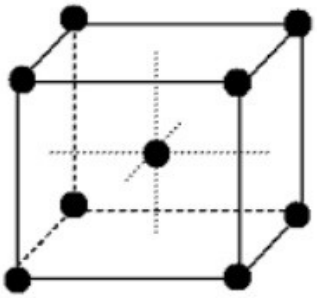
التمرين الأول:

تمثل الأشكال الثلاثة التالية تموضع الذرات في الشبكات البلورية المكعبة.

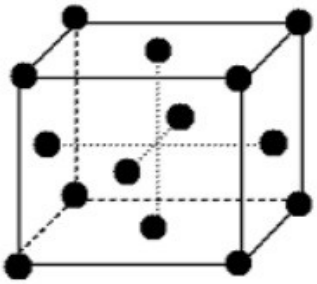
– اعط عدد الذرات الموجودة في الخلية الأولية لكل شكل من الأشكال السابقة.



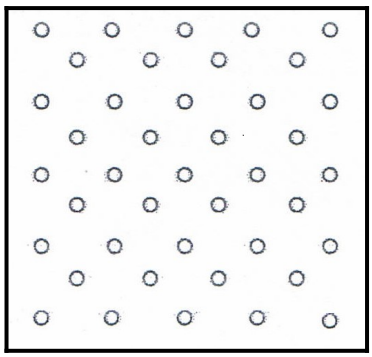
الشكل 1



الشكل 2



الشكل 3



التمرين الثاني

يمثل الشكل 1 شبكة بلورية ثنائية البعد (2D).

مثل على هذه الشبكة خلية أولية وخلية اصطلاحية

التمرين الثالث:

نعتبر شبكة مكعبة.

✓ مثل على هذه الشبكة الاتجاهات البلورية التالية :

أ- [100]،[010]،[001]،[111]،[120]،[201]،[032].

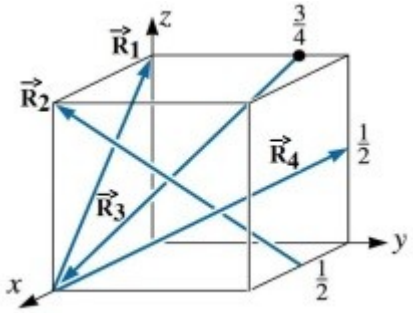
ب- [$\bar{1}$ 0 0]،[0 $\bar{1}$ 0]،[0 0 $\bar{1}$]،[$\bar{1}$ $\bar{1}$ $\bar{1}$]،[$\bar{1}$ $\bar{2}$0]،[$\bar{2}$ 0 $\bar{1}$]،[0$\bar{3}$ $\bar{2}$].

✓ أحسب الزاوية المحصورة بين الاتجاهين

أ- [100]،[010]. [010]،[001]. [100]،[001].

ب- [120]،[201]. [111]، [1 1$\bar{1}$].

3- أوجد إحداثيات الاتجاهات البلورية الممثلة في الشكل أدناه.



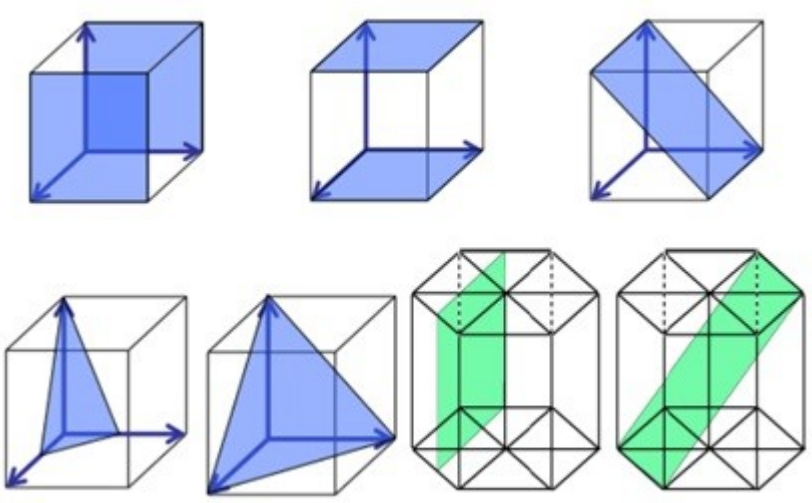
التمرين الرابع:

في بلورة الرصاص، احسب الكثافة الذرية للاتجاهات البلورية التالية [100]، [111]،[110].

إذا علمت أن الرصاص يتبلور على شكل مكعب ممركز الأوجه طول ضلعه a=4,93Å.

التمرين الخامس:

1- عين قرائن ميلر أو ميلر- برافي للمستويات البلورية الممثلة في الشبكات الأتية.



2- عين قرائن ميلر لمستوي بلوري في الحالات التالية:

ا/ المستوي يقطع محاور الشبكة البلورية في النقاط التالية: OA=a ; OB=3/2 a ; OC=1/2 a .

ب/ المستوي يمر بالنقاط (111) B (011) ،A و (121) C.

ج/ المستوي يحتوي على الاتجاهين [032] و [210].

3- أرسم المستويات البلورية التالية (100)، (010)، (001)، (111)، (221)، (120)، (320).

$(\bar{1}\ 0\ 0)$، $(0\ \bar{1}\ 0)$، $(0\ 0\ \bar{1})$، $(\bar{1}\ \bar{1}\ \bar{1})$، $(\bar{2}\ \bar{2}\ \bar{1})$، $(0\ \bar{2}\ \bar{1})$، $(\bar{3}\ \bar{2}\ 0)$.

4- أحسب الزاوية المحصورة بين المستويين البلوريين (100) و (110).

التمرين السادس:

في بلورة الرصاص، احسب الكثافة الذرية للمستويات البلورية التالية (100)، (111)، (110).

إذا علمت أن الرصاص يتبلور على شكل مكعب ممركز الأوجه طول ضلعه a=4,93Å.

التمرين الأول:

يتبلور الكالسيوم Ca في نظام مكعبي ممركز الجسم CC.

1- ارسم الخلية العنصرية لمعدن الكروم؟

2- ما هو العدد التناسقي في هذه البنية؟

3- احسب نسبة التراص لهذه البنية؟

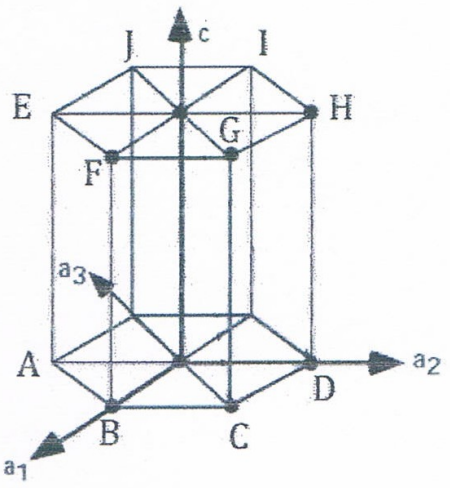
4- احسب نصف قطر ذرة الكالسيوم إذا علمت أن ثابت الشبكة البلورية a_{Cu}=5,58 Å و كتلته المولية هي M_{Cu}=40,08g/mo

5- احسب الكتلة الحجمية للكروم؟

التمرين السابع:

أوجد قرائن ميلر- برافي للمستوبات المبينة على الشبكة السداسية في الشكل ادناه.

1- BCFG
2- CDHG
3- ABFE
4- EFGHIJ



التمرين الثاني:

عند الضغط الجوي، يوجد الحديد في بنيات بلورية مختلفة اعتمادًا على درجة الحرارة. حيث عند درجة حرارة أقل من 910 درجة مئوية، يتبلور في شبكة مكعبة ممركزة الجسم يسمى الحديد α ، و بين 910 درجة مئوية و1394 درجة مئوية.يتبلور في بنيت مكعبة ممركزة الوجوه يُسمى الحديد γ .

1- ارسم شكلا توضيحيا لبنيتي الحديد السابقتين.

2- احسب معامل التراص لكلا البنيتين وقارن بينهما.

3- احسب نصف قطر ذرة الحديد في كل بنية. ماذا تلاحظ؟

تعطى : $a_{Fe\alpha}=0,287nm$, $aFe^{\gamma}=365Pm$

التمرين الثالث:

يتبلور معدن الذهب وفق البنية البلورية المكعبة ممركزة الوجوه، ويبلغ نصف قطر ذرة الذهب($R_{Cu}=144,2PM$)

1- ارسم شكلاً توضيحياً للخلية العنصرية لمعدن الذهب؟

2- احسب بعد الخلية العنصرية لمعدن الذهب؟

3- الذهب الأبيض هو عبارة عن خليطة من النيكل و الذهب يمكن اشتقاقها من بنية الذهب السابقة باستبدال ذرات الذهب الثمانية المتواجدة في رؤوس المكعب بذرات النيكل.

احسب ثابت الشبكة للخلية العنصرية للخليط ذهب - نيكل علما أن نصف قطر ذرة النيكل هو $R=0,124nm$.ثم احسب الكتلة الحجمية للخليط والنسبة الكتلية للفضة فيها؟

تعطى $\rho_{Ni}=8,9$، $M_{Ni}=108g/mol$ ، $M_{Au}=196,97/mol$ ، $\rho_{Au}=19,3g/Cm^3$.

الفصل الثاني
تناظر الأشكال المنتهية

2-1 مقدمة

التناظر هو مفهوم أساسي في الرياضيات والفيزياء والعلوم الطبيعية، ويشير إلى خاصية يمكن من خلالها تكرار أو تطبيق عمليات معينة على جسم أو شكل بحيث يبدو الشكل أو الجسم متطابقًا بعد العملية. تناظر الأشكال المنتهية يعني دراسة التناظر في الأشكال التي لها حدود محددة أو عدد منتهٍ من العناصر.

في تناظر الأشكال المنتهية، نبحث في مجموعة من العمليات الهندسية التي يمكن تطبيقها على الشكل بحيث يعود الشكل إلى حالته الأصلية. هذه العمليات تشمل الدوران، الانعكاس، الانسحاب، وتُسمى بشكل عام عمليات التناظر.

بما أن متعدد السطوح الذي يشكل البلورة المثالية هو شكل محدود (وهو نفس الشيء بالنسبة للشبكة البلورية،) فإن عدد عناصر التناظر في هذا الشكل هو بالتالي عدد محدود على عكس عناصر التناظر التي تصف البنية المجهرية الدورية اللانهائية، والتي هي لا نهائية في عدد.

نقول عن البلورة إنها متناظرة إذا كانت خصائصها البنيوية لا تتغير عند إجراء عملية انسحاب أو دوران. ينطبق هذا أيضًا على الشبكات البلورية، حيث تبقى الشبكة دون تغيير عند تطبيق الانسحاب T أو عند تنفيذ عمليات الدوران المختلفة.

من الظواهر الملحوظة على كثير من البلورات ظاهرة التوزيع المنظم والمرتب للأوجه البلورية. فإننا نجد أن جميع الأوجه البلورية وكذلك الهذرات والأيونات المكونة للمادة مرتبة حسب نظام خاص وتنسيق معين يخضع لقواعد معينة معروفة باسم عناصر التماثل. وجوهر التماثل هو التكرار. فنلاحظ أن وجه البلورة مثلا أو أحد أحرفها يتكرر عدة مرات أي يوجد في أماكن متماثلة عددا من المرات طبقا لقانون ثابت. ويعتبر التماثل أساسا في دارسة البلورات

2-2 مفهوم تناظر الأشكال المنتهية:

2-2-1 الشكل المنتهي هو شكل له عدد محدود من الحدود أو العناصر، مثل المضلع، المكعب، أو أي شكل هندسي محدد.

2-2-2 التماثل: تكرار أو تطابق أجزاء معينة لشكل ما عند إجراء مجموعة من العمليات، ويعتبر التماثل أهم الخصائص الهندسية التي تميز خلايا الوحدة للجسم الصلب المتبلور، حيث تتميز كل خلية بنوع واحد أو أكثر من أنواع التماثل الهندسي .

مثال: تناظر المثلث المتساوي الأضلاع:

المثلث المتساوي الأضلاع له ثلاث زوايا متساوية وثلاثة أضلاع متساوية. هذا يعني أن له مجموعة من عمليات التناظر التي تجعله يبدو كما هو بعد العملية., عمليات التناظر لهذا المثلث تشمل الدوران بزاوية120° و240°، بالإضافة إلى الانعكاس عبر الخطوط التي تمر بكل رأس وتقسم المثلث إلى نصفين متطابقين.

من اهم عناصر التماثل الموجودة في الشكل المحدود والتي سنتطرق إليها في هذا الفصل هي:

- ✓ ▪ مستوى التماثل (أو المرآة)

- ✓ ▪ محاور الدوران ذات الترتيب n وتسمى أي أيضا المحاور المباشرة أو المحاور الصحيحة.
- ✓ ▪ مركز التماثل (أو الانقلاب).
- ✓ ▪ محاور الدوران الانقلابي من الرتبة $\bar{n}$ وتسمى أيضا المحاور غير المباشرة.
- ✓ ▪ محاور الدوران والانعكاس من الرتبة n'

2-3 تناظر الأشكال المنتهية و عمليات التناظر

2-3-1 مستوى التناظر:

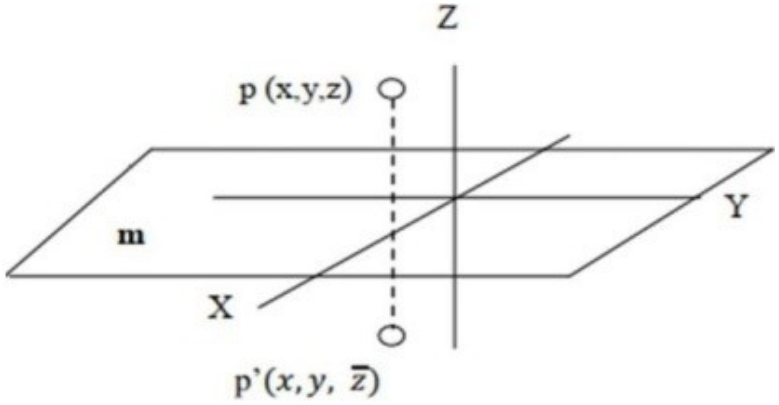
أ مفهوم مستوي التناظر

مستوى التناظر أو مستوى الانعكاس هو مستوى داخل شكل أو جسم يقسمه إلى نصفين متطابقين، حيث يكون كل جزء انعكاسًا للآخر. إذا كان بإمكانك عكس الجسم أو الشكل حول هذا المستوى وتظل جميع النقاط في مواقعها المتماثلة، فإن هذا المستوى يُسمى مستوى تماثل. أي هو المستوى الذي يقسم شكلا ما إلى نصفين متماثلين بشرط أن يكون أحد النصفيين صورة مرآة للنصف الأخر، ويرمز لمستوى التناظر بالرمز m، والتمثيل البياني له يعطى بالشكل : على سبيل المثال، إذا كان مستوى التناظر هو المستوى (xoy) لمعلم الإحداثيات المتعامد (oxyz) ، فإن

: المستوى m عمودي على مستوى الرسم.

: المستوي m في مستوى الرسم.

أي نقطة لها الإحداثيات $P(x,y,z)$ سيكون لها كصورة النقطة ذات الإحداثيات $P'(x,y,\bar{z})$.



الشكل2-1: عملية التماثل بواسطة مستوي تحول النقطة $P(x,y,z)$ إلى النقطة $P'(x,y,\bar{z})$.

2-3-2 أمثلة على الأشكال التي تمتلك مستويات تناظر:

الدائرة: الدائرة تمتلك عددًا لا نهائيًا من مستويات التناظر لأنها يمكن أن تنقسم إلى نصفين متطابقين عبر أي خط يمر بمركزها.

المربع: المربع يحتوي على أربعة مستويات تماثل:

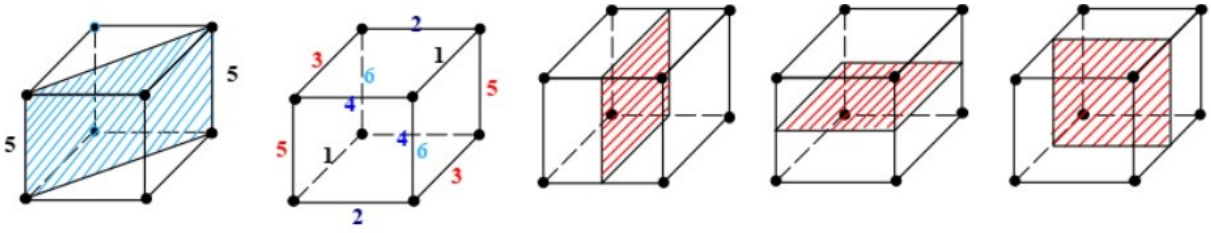
- مستويين يمران عبر المركز ويتوازيان مع الأضلاع (أفقي وعمودي).
- مستويين يمران عبر المركز ويقطعان الزوايا (القطرين).

المثلث المتساوي الأضلاع: يحتوي المثلث المتساوي الأضلاع على ثلاثة مستويات تناظر، وكل منها يمر برأس من رؤوس المثلث ويتقاطع مع منتصف الضلع المقابل.

الشبكة المكعبة :يكون للشبكة المكعبة تسعة مستويات تماثل، كما هو مبين بالشكل، 2-2 وبيناتها كالاتي:

-عدد ثلاث مستويات تمر بمركز البلورة وتوازى أوجه المكعب، كما في الشكل (-2-2ا.)

-عدد ستة مستويات تمر بمركز البلورة وكل مستوى منها يصل بين حرفين متقابلين، كما بالشكل (-2-2ب.



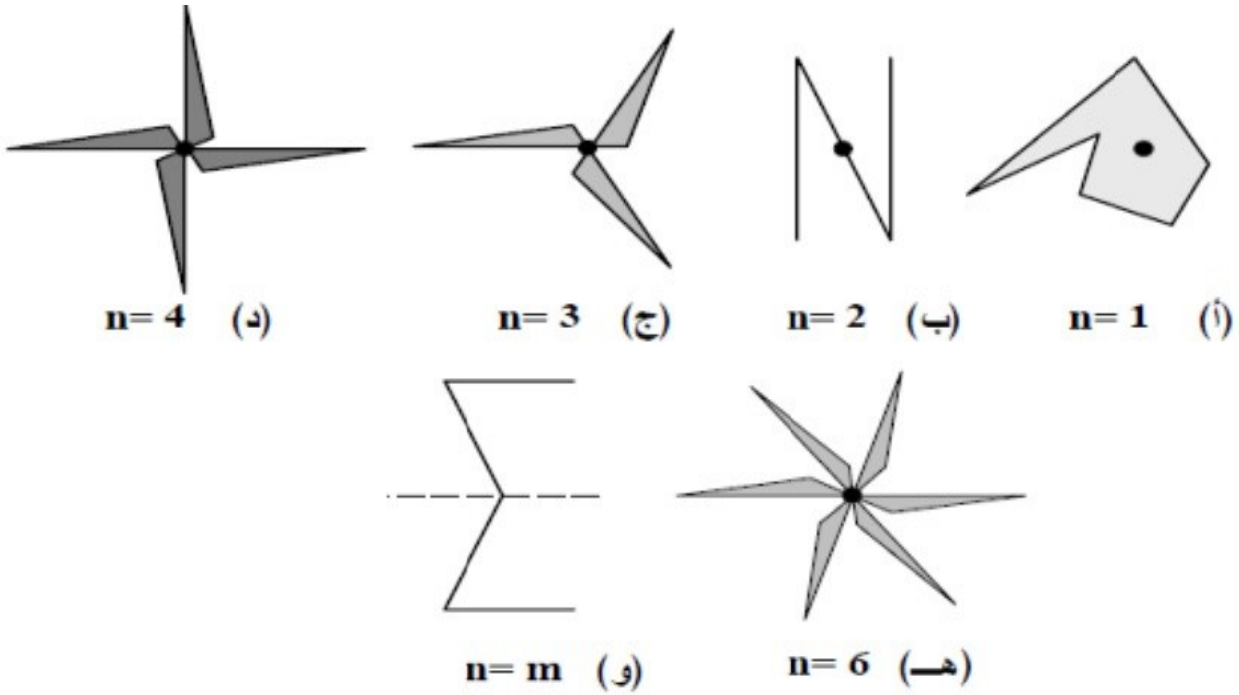
أ- ثلاث مستويات تماثل ب- ستة مستويات تماثل

الشكل 2-2 :مستويات التماثل في الشبكة المكعبة.

2-3-3 محور الدوران

أ- مفهوم محور الدوران

محور الدوران هو خط تخيلي يمكن تدوير الشكل حوله بزاوية معينة بحيث يعود الشكل إلى مظهره الأصلي بعد الدوران. .تتحدد رتبة التماثل للمحور بعدد المرات (n) التي تتكرر فيها البلورة وضعها خلال دورة كاملة .فعلى سبيل المثال، إذا أدرنا أي جسم غير متماثل حول أي محور فإن الجسم سوف يعود إلى وضعه الأصلي (وضع مماثل) بعد 360° أي بعد دورة واحدة ويسمى محور التماثل، في هذه الحالة، محور تماثل من الرتبة الأولى n=1، ويقال أن محور التماثل من الرتبة الثانية إذا تكرر وضع الجسم أو البلورة مرتين عند الدوران حوله دورة كاملة وهكذا، كما هو مبين بالشكل.



الشكل (2–3) :تماثل الجسم حول محور.

تعرف رتبة التماثل بأنها عدد المرات التي يكرر الجسم أو البلورة نفسها عند دورانها حول المحور دور ة كاملة أي أن $n=\frac{2\pi}{\theta}$ ، حيث θ تمثل الزاوية التي يكرر الجسم نفسه عندها، حيث قد يتكرر الوجه كما ذكرنا مرتين، أو ثلاث أو أربع أو ست اعتمادا على زاوية الدوران لمحور معين وهذه الزاوية اصغر زاوية يدورها الشكل حول محور التناظر ليحل الشكل محل نفسه وتسمى زاوية الدوران الأولية لذلك المحور، ويرمز لمحور التناظر بالرمز A الجدول (2–1).

اسم المحور	$n=\frac{2\pi}{\theta}$	رمز المحور	الرمز الهندسي
محاور تناظر أحادية أي يتكرر الوجه مرة واحدة	360°/1 = 360°	A_1	
محاور تناظر ثنائية أي يتكرر الوجه مرتين	360°/2 = 180°	A_2	⬬
محاور تناظر ثلاثية أي يتكرر الوجه ثلاث مرات	360°/3 = 120°	A_3	▲
محاور تناظر رباعية أي يتكرر الوجه أربع مرات	360°/4 = 900°	A_4	■
محاور تناظر سداسية أي يتكرر الوجه ست مرات	360°/6 = 60°	A_6	⬢

ملاحظة:المحور من الرتبة **2n** هو في نفس الوقت محور من الرتبة **n** ومحور من الرتبة 6 هو في نفس الوقت محور من الرتبة 2.

ب- أمثلة على محاور الدوران في الأشكال الهندسية:

أ. المربع:

يحتوي المربع على محور دوران من الدرجة الرابعة، حيث يمكن تدويره بزاوية 90° ويعود إلى مظهره الأصلي بعد أربع دورات.

يمتلك أيضًا محورين دورانين من الدرجة الثانية عند تدويره بزاوية 180°

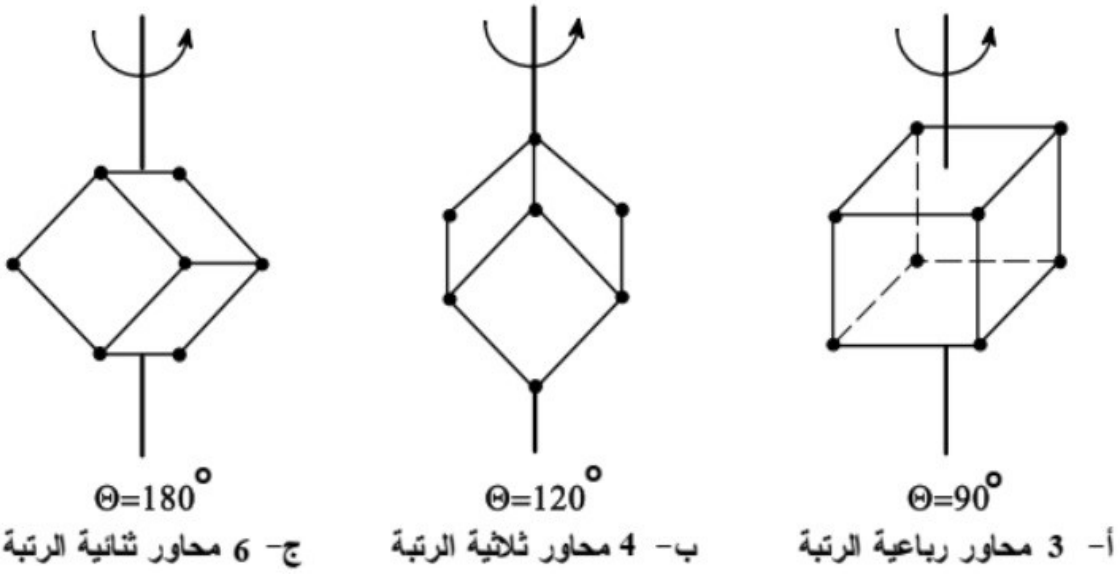
ب. المثلث المتساوي الأضلاع: يمتلك المثلث المتساوي الأضلاع محور دوران من الدرجة الثالثة. يمكن تدويره بزاوية 120° ويعود إلى شكله الأصلي بعد ثلاث دورات.

ج. النجمة السداسية: النجمة السداسية تمتلك محور دوران من الدرجة السادسة، حيث يمكن تدويرها بزاوية 60° لتعود إلى مظهرها الأصلي بعد ست دورات.

د الشبكة المكعبة

يكون للشبكة المكعبة ثلاثة عشر محور تماثل، كما هو مبين الشكل (،)5-2 وبياناتها كالاتي:

- 3محاور من الرتبة الرابعة يصل كل منها بين مراكز الأوجه المتقابلة الشكل (-5-2ا.)
- 4محاور من الرتبة الثالثة يصل كل منها بين زاويتين مجسمتين متقابلتين الشكل(-5-2ب).
- 6محاور من الرتبة الثانية يصل كل منها بين النقطتين المنصفتين لحرفين متقابلين الشكل(-5-2ج.



ج- 6 محاور ثنائية الرتبة ب- 4 محاور ثلاثية الرتبة أ- 3 محاور رباعية الرتبة

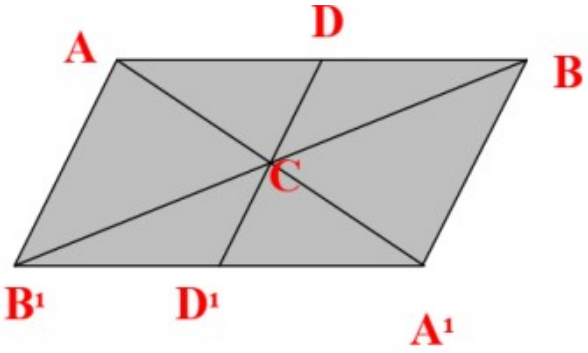
الشكل (2 -4) : محاور التماثل في الشبكة المكعبة.

2-3-4 مركز التناظر

أ- مفهوم مركز التناظر

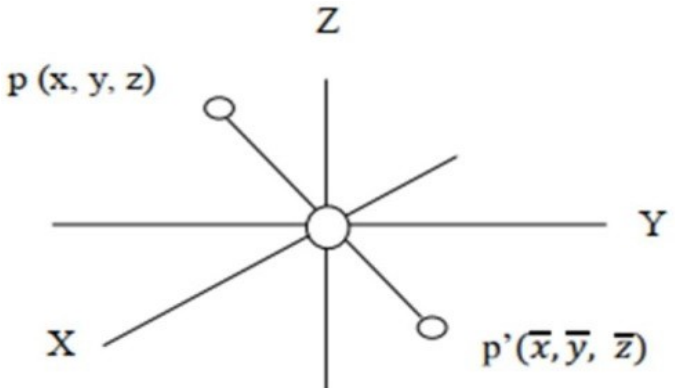
مركز التناظر (أو مركز التماثل) هو نقطة داخل الشكل أو الجسم، إذا مررنا بخط مستقيم من أي نقطة على سطح الشكل أو الجسم عبر هذا المركز، نجد نقطة أخرى على الخط نفسه، على مسافة متساوية ولكن في الاتجاه المعاكس، بحيث تكون النقطة الأصلية والنقطة الجديدة متطابقتين. بمعنى آخر، الشكل الذي يحتوي على مركز تناظر هو شكل يتطابق مع نفسه بعد انعكاسه حول هذا المركز.مركز التناظر يشير إلى أن كل جزء من الشكل أو الجسم يُقابله جزء آخر متماثل تمامًا ولكن في الجهة المعاكسة بالنسبة للمركز.

يمثل الشكل (6-2) متوازي الأضلاع ABA'B'، النقطة (C) الناتجة عن تقاطع أقطار متوازي الأضلاع. القطعة المستقيمة طولها تساوي (AC) فأن نهايتها ستنطبق على A^1، والعكس صحيح أي اذا ما انعكست النقطةA^1 من النقطة C لانطبقت على النقطة A . و بانعكاس النقطتينB و D على النقطة C يتم انطباقها في النقطتين D^1 , B^1والعكس بالعكس وهكذا بالنسبة لكل نقاط الشكل.



الشكل (2-5):مركز التماثل لمتوازي المستطيلات.

التمثيل الرياضي:



الشكل2-6 :عملية الانقلاب تحول النقطة (z، y، x) p الى النقطة ($\bar{x}$، $\bar{y}$ ،$\bar{z}$) p.

ب- أمثلة على الأشكال التي تحتوي على مركز تناظر:

- ✓ **الدائرة:** الدائرة تمتلك مركز تناظر في نقطة الوسط. يمكن رسم أي خط مستقيم يمر عبر مركز الدائرة، وكل نقطة على هذا الخط تقابل نقطة أخرى على الجهة المقابلة تمامًا وعلى نفس المسافة من المركز.
- ✓ **المربع:** يمتلك المربع مركز تناظر في نقطة تقاطع قطريه. كل نقطة على المربع تقابلها نقطة أخرى على الجهة المقابلة إذا رسمنا خطًا مستقيمًا عبر هذا المركز.
- ✓ **المكعب:** المكعب يحتوي على مركز تناظر في منتصفه. أي نقطة على سطح المكعب تقابل نقطة متماثلة في الجهة المعاكسة بالنسبة لمركز المكعب.

البلورات: بعض البلورات، مثل البلورات المكعبة، تمتلك مركز تناظر، حيث تكون كل ذرة أو مجموعة ذرية في البلورة متطابقة مع نظيرتها في الجهة المقابلة بالنسبة لمركز البلورة.

ج- أمثلة على الأشكال التي لا تحتوي على مركز تناظر:

- ✓ **المثلث المتساوي الأضلاع:** المثلث المتساوي الأضلاع لا يحتوي على مركز تناظر، لأنه لا يمكن رسم خط يمر عبر نقطة وسطى في المثلث بحيث تقابل النقاط على أحد الجوانب نظيرتها على الجانب الآخر.
- ✓ **الأشكال غير المتناظرة:** الأشكال التي تحتوي على عدم انتظام أو عدم تناسق في الأبعاد، مثل الأشكال غير المتناظرة، لا تحتوي على مركز تناظر.

2-3-5 الدوران الانقلابي

الدوران الانقلابي، محور الدوران الانقلابي، هو عملية تناظر تجمع بين دوران الجسم حول محور معين بزاوية $2\pi/n$ يليه تناظر (أو انقلاب) بالنسبة إلى نقطة ما تقع على هذا المحور. هذه العملية تتكون من خطوتين:

6) **الدوران** حول محور بزاوية معينة.

7) **الانقلاب** بالنسبة لمركز تناظر.

ويرمز له$\bar{n}$ ؛ وتعتمد درجة الدوران ثم الانقلاب على درجة التناظر أيضا. فلو احتوت البلورة على محور تناظر دوراني انقلابي رباعي)$\bar{4}$ فلكي تعيد البلورة نفسها (أو أي جهة أو أي ضلع أو زاوية) في الفراغ فان هذا يستوجب دوران البلورة بزاوية قدرها 90^o ثم الانقلاب عبر المركز وتعاد هذه العملية اربع مرات خلال دورة كاملة360^o ، أو بتعبير أخر محور التناظر الدوراني الانقلابي عبارة عن محور أو مستقيم إذا ما دارت البلورة حوله بزاوية معينة ثم انعكست كل نقاطه في النقطة المركزية (مركز التناظر) للشكل لحل الشكل محل نفسه.

كما أشرنا سابقا بالنسبة للمحاور المباشرة، فإن محاور الدوران الانعكاسي$\bar{n}$ الممكنة تكون من الرتبة 1 و 2 و 3 و4 و 6 فقط وهي التي تتوافق مع دورية الشبكة البلورية.

اسم المحور	رمز المحور	الرمز الهندسي
محور دوران من الدرجة الأولى (360°/1 = 360°) ثم انقلاب بالنسبة للمركز	$\overline{1}$	
محور دوران من الدرجة الأولى (360°/2 = 180°) ثم انقلاب بالنسبة للمركز	$\overline{2}$	
محور دوران من الدرجة الأولى (360°/3 = 120°) ثم انقلاب بالنسبة للمركز	$\overline{3}$	
محور دوران من الدرجة الأولى (360°/4 = 90°) ثم انقلاب بالنسبة للمركز	$\overline{4}$	
محور دوران من الدرجة الأولى (360°/6 = 60°) ثم انقلاب بالنسبة للمركز	$\overline{6}$	

أ – الانعكاس الدوراني هو عملية هندسية مركبة تشمل دورانًا حول محور معين بزاوية $2\pi/n$ يتبعه انعكاس حول مستوى(مرآة) عمودي على هذا المحور. يعتبر الانعكاس الدوراني نوعًا من أنواع التناظر الهندسي الذي يجمع بين عمليتي الدوران والانعكاس معًا في خطوة واحدة.يرمز للانعكاس الدوراني بالرمز $\grave{n}$

ب– آلية الانعكاس الدوراني:

ب- **الدوران:** في البداية، يتم تدوير الجسم أو الشكل بزاوية محددة حول محور. قد تكون الزاوية على سبيل المثال 60° ،90°، 120° وهكذا.

4. **الانعكاس:** بعد الدوران، يتم انعكاس الشكل عبر مستوى عمودي على المحور الذي تم الدوران حوله. يعكس هذا المستوى كل نقطة على الجسم لتكون في الجهة المقابلة بالنسبة للمستوى.

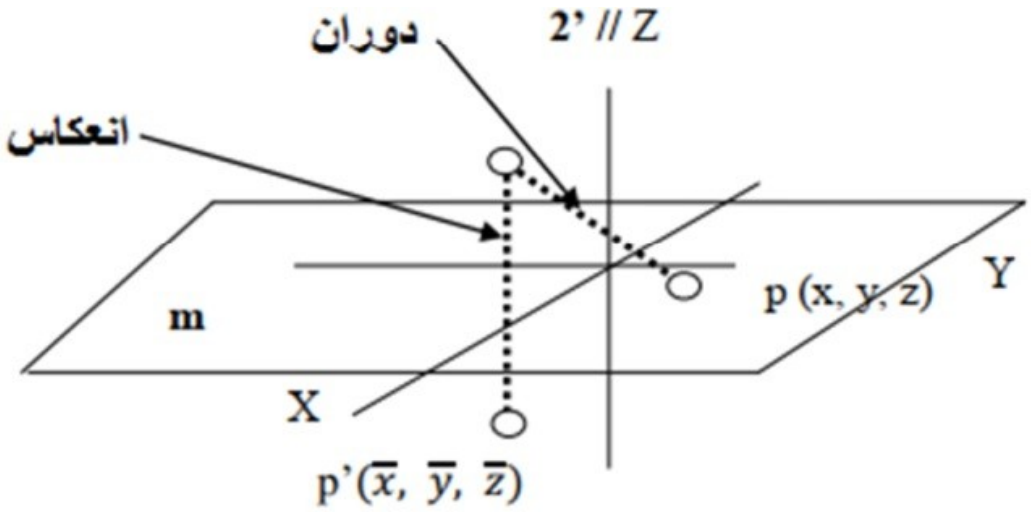
$\grave{1}$: يعبر عن دوران بزاوية 360° ثم انعكاس.

$\grave{2}$ يعبر عن دوران بزاوية 180° ثم انعكاس.

$\grave{3}$ يعبر عن دوران بزاوية 120° ثم انعكاس.

$\grave{4}$ يعبر عن دوران بزاوية 90° ثم انعكاس.

$\grave{6}$ يعبر عن دوران بزاوية 60° ثم انعكاس.



الشكل(2–7) :انعكاس دوراني من الدرجة الثانية[9] .

2–4 النقاط المتكافئة (الإسقاط الستيريوغرافي)

من المفيد أحيانًا تمثيل عملية التناظر بمجموعة النقاط المتكافئة التي نحصل عليها من خلال تكرار العملية عدة مرات حسب الضرورة، بدءًا من النقطة الأولى. ثم نعرض نقاط المجموعة إما عن :

2–4–1 طريق إعطاء قائمة إحداثيات النقاط المكافئة.

لإعطاء قائمة بإحداثيات النقاط المكافئة الناتجة عن تطبيق عمليات التماثل، يجب أولاً معرفة:

4- **نوع عنصر التماثل** المستخدم (مثل محور دوران، مستوى انعكاس، أو مركز تناظر).

5- **الإحداثيات الأولية للنقطة** التي تبدأ منها العمليات التماثلية.

مثال:

نفترض نقطة ابتدائية بإحداثيات (x,y,z) (x, y, z) (x,y,z) في فضاء ثلاثي الأبعاد. وفيما يلي كيفية إيجاد إحداثيات النقاط المكافئة بناءً على بعض عناصر التماثل الشائعة:

1- . **محور دوران من الدرجة n**

مثال: النقاط المتكافئة من التماثل والتي يتم إنشاؤها بواسطة محور الدوران المباشر من الدرجة 4 (Z //4) يتم تمثيله بواسطة:

a. النقطة الأصلية: (x,y,z)

b. الدوران بزاوية 90° ($\bar{x}$, y,z)

c. الدوران بزاوية 180° ($\bar{x}$, $\bar{y}$,z)

d. الدوران بزاوية 270° (x, $\bar{y}$,z)

5- 2. مستوى انعكاس عمودي على محور (ox)

- النقطة الأصلية: (x,y,z)
- الانعكاس بالنسبة للمستوى (oyz) : $(-x,y,z)(-x, y, z)(-x,y,z)$:yyy-zzz

- 3. مركز تماثل (نقطة الأصل)

- النقطة الأصلية: $(x,y,z)(x,\ y,\ z)(x,y,z)$
- النقطة المكافئة: $(x,-y,-z-)(x,\ -y,\ -z-)(x,-y,-z-)$

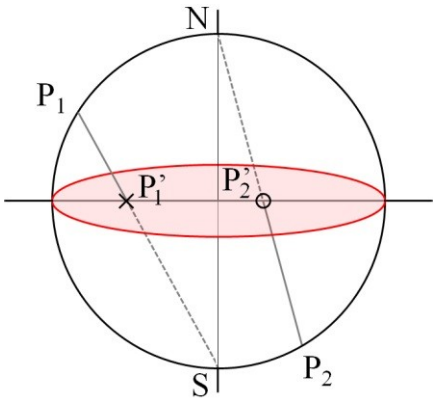
2-4-2 تمثيل النقاط المتكافئة، والموجودة على سطح الكرة في أي عملية تناظر، ويسمى هذا التمثيل بالإسقاط الستيريوغرافي

الإسقاط الستيريوغرافي هو إسقاط الكرة على المستوى. في الرياضيات، يمكن إجراء الإسقاط الستيريوغرافي على أي مستوى. أما في علم البلورات، الإسقاط الستيريوغرافي في علم البلورات هو تقنية تستخدم لتمثيل الأوجه البلورية والتركيبات البلورية المعقدة على سطح مستوٍ. يعتمد هذا النوع من الإسقاط على تحويل الأوجه البلورية من شكل ثلاثي الأبعاد إلى شكل ثنائي الأبعاد، مما يسهل تحليل وتفسير الأبعاد والزوايا والعلاقات بين الأوجه البلورية في بلورة معينة.

أ- مبدا الإسقاط الستيريوغرافي

ترتبط الأقطاب الكروية (مع الإحداثيات φ ،θ) بخطوط مستقيمة إلى القطبين الجنوبي أو الشمالي اعتمادًا على ما إذا كانت في نصف الكرة الشمالي أو الجنوبي، على التوالي. تقاطعات خطوط الاتصال مع مستوى خط الاستواء هي القطبين المجسمين (الشكل 7).

في مستوى الإسقاط، داخل دائرة خط الاستواء، يشير الرمز (X) إلى القطب المجسم لنقطة تقع في نصف الكرة الشمالي، والدائرة (O) القطب المجسم لنقطة تقع في نصف الكرة الجنوبي. في الشكل 6 ،نختار النقطة S من الكرة لتكون مركز الإسقاط. تسمى النقطة " S القطب الجنوبي" للكرة، والنقطة N التي تقع في مقابلها تمامًا "القطب الشمالي". يتم إسقاط النقطة P1 للكرة باتجاه صورتها P1' على المستوى، والتي يتم تعريفها على أنها نقطة تقاطع الخط SP1مع المستوى. بنفس الطريقة، يتم إسقاط النقطة P2 للكرة باتجاه صورتها P2' على المستوى، والتي تُعرف بأنها نقطة تقاطع الخط NP2 مع المستوى.

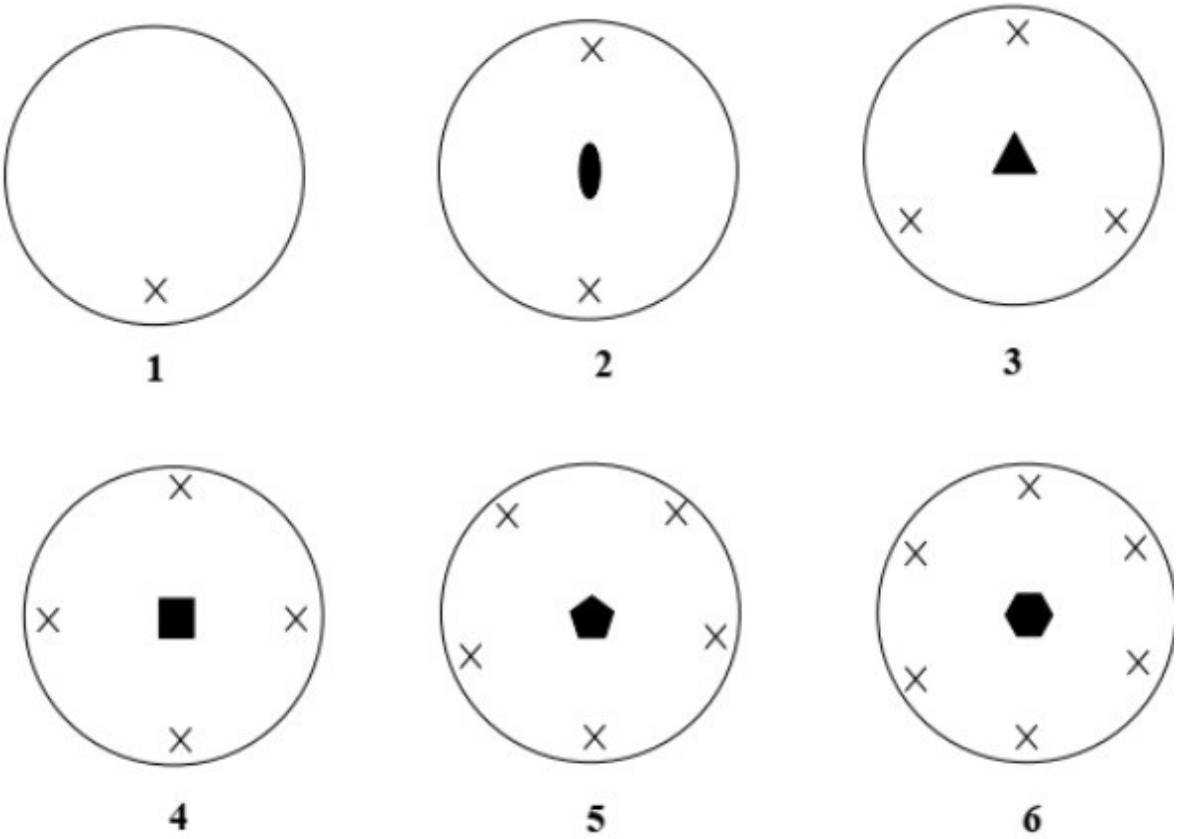


الشكل (2-8):مبدأ الإسقاط الستيريوغرافي في علم البلورات.

ب- أمثلة:

في الأمثلة التالية، تعتبر نقطة البداية لعملية التناظر دائما في نصف الكرة الشمالي

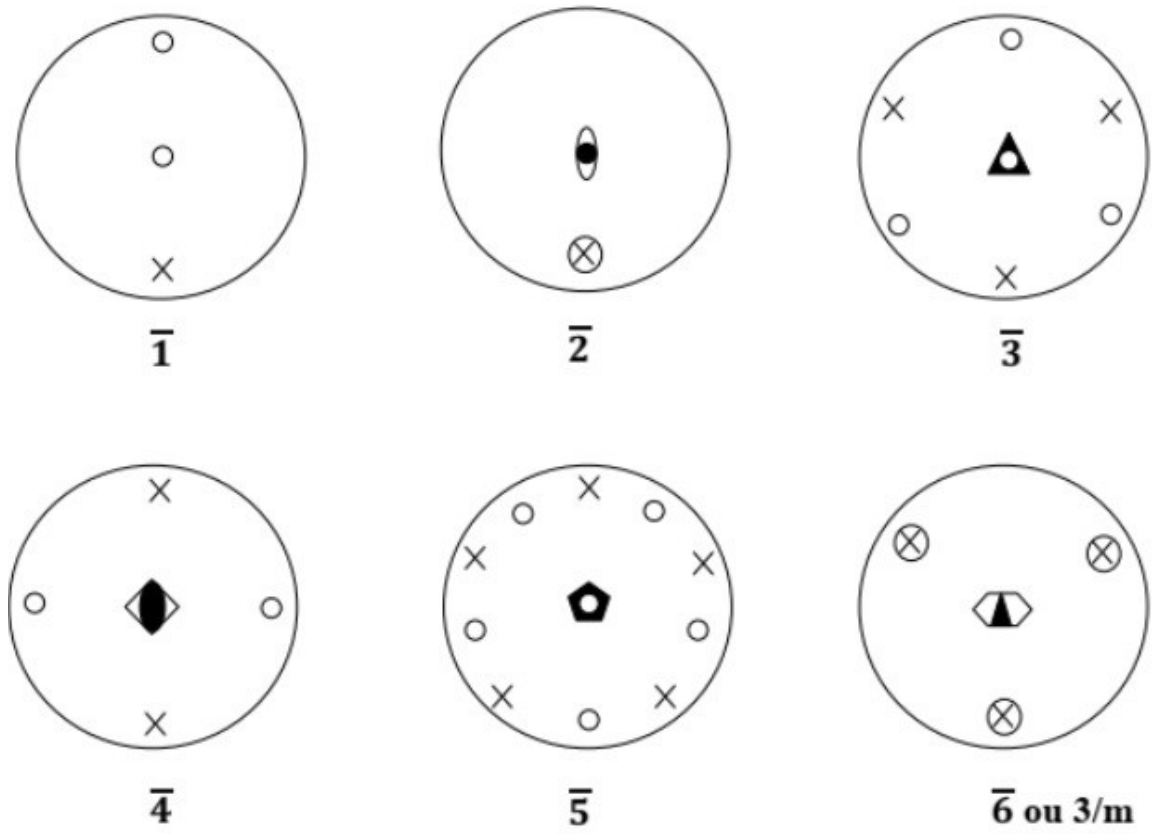
- **محاور الدوران المباشر**



الشكل (2-10) : تمثيل ستيريوغرافي لفئات التناظر البلوري لمحاور الدوران المباشر

ملاحظات نلاحظ في حالة محاور الدوران المباشر أن النقاط المكافئة بالتناظر تقع دائما في نصف الكرة الشمالي (توجد إشارة x فقط.

- **محاور الدوران الانقلابي**



الشكل (11–2) : تمثيل ستيريوغرافي لفئات التناظر البلوري لمحاور الدوران الانقلابي

ملاحظات نلاحظ في حالة محاور الانقلاب (الدوران + الانقلاب) أن النقاط متكافئة بواسطة التناظر يتم تقاسمها بين نصف الكرة الشمالي (إشارة x)ونصف الكرة الجنوبي (0).

2–4–3 مجموعات التماثل

عندما تمتلك صورة أو شكل معين عنصرًا أو أكثر من عناصر التماثل، فإن العمليات المتعلقة بالتماثل تشكل مجموعة وفقًا للمعنى الرياضي لهذا المصطلح.

1- المجموعة **n** n= 1, 2, 3, 4, 6

2- **المجموعة** $\bar{n}$ حيث $\bar{n}=\bar{1},\bar{2},\bar{3},\bar{4},\bar{6}$

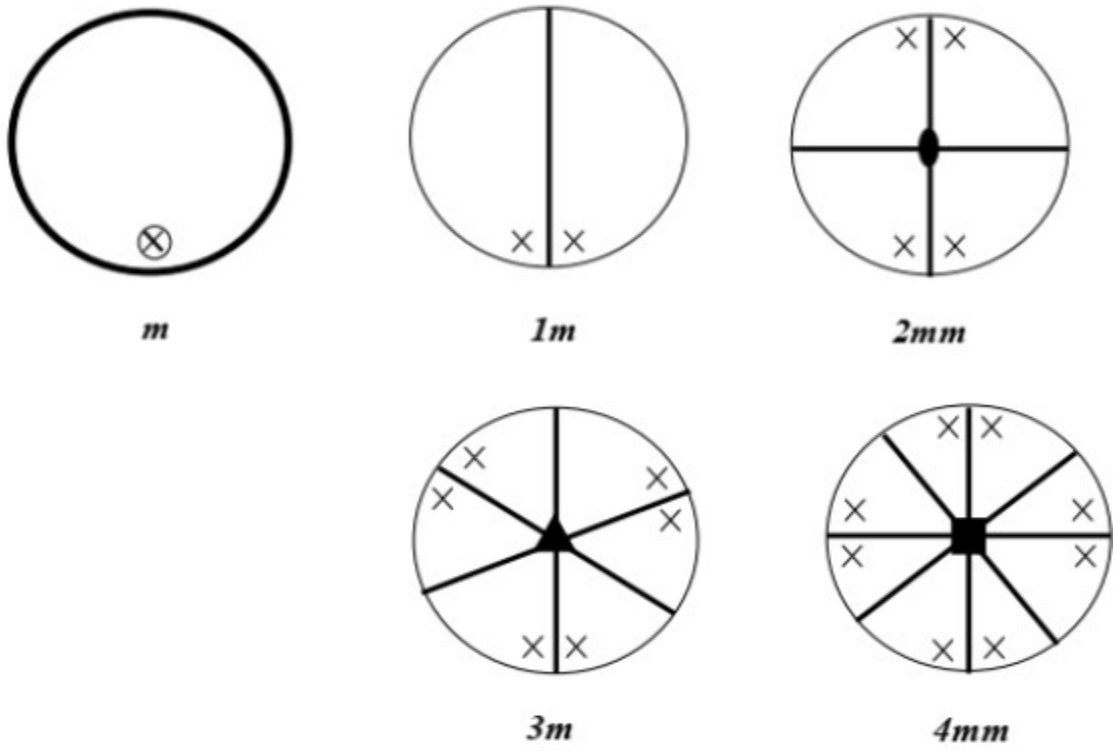
3– المجموعة n/m : مرآة عمودية على المحور المباشر **n**. نحصل على ثلاث مجموعات جديدة: $2/m,4/m,6/m$ حيث $1/m=m,3/m=\bar{6}$

4– المجموعة nm : مرآة تمر (//) عبر المحور المباشر n. نجد المجموعات التالية: 2mm، 3m، 4mm، 6mm

.

ملاحظات :

- عندما يكون عدد المرايا زوجي، نضاعف m في رمز الفئة البلورية على النحو التالي: 2mm, 4mm 6mm.
- عندما يكون عدد المرايا فردياً، لا نضاعف m في رمز الفئة البلورية على النحو التالي: 1m, 3m



الشكل (12-2): تمثيل ستيريوغرافي لفئات التناظر البلوري 4

5- المجموعة $\bar{n}m$ مرآة تمر بالمحور الانقلابي$\bar{n}$، نتحصل على $\bar{6}m$ $\bar{4}m$ $\bar{3}m$.

حيث $\bar{1}/m=2/m, \bar{2}/m=mm2$

6- المجموعة n2 : محور دوران من الدرجة الثانية عمودي على محور من الدرجة **n**, نجد 222, 32, 422, 622,

2 : محور دوران مباشر من الدرجة الثانية عمودي على مستوي الرسم.

222: محورين مباشرين للدوران من الرتبة 2 في المستوى (أحدهما يتبع المحور **ox** والآخر يتبع المحور **oy**) وتقاطعهما هو محور من الرتبة 2 عمودي على مستوى الرسم وموجه على طول المحور oz.

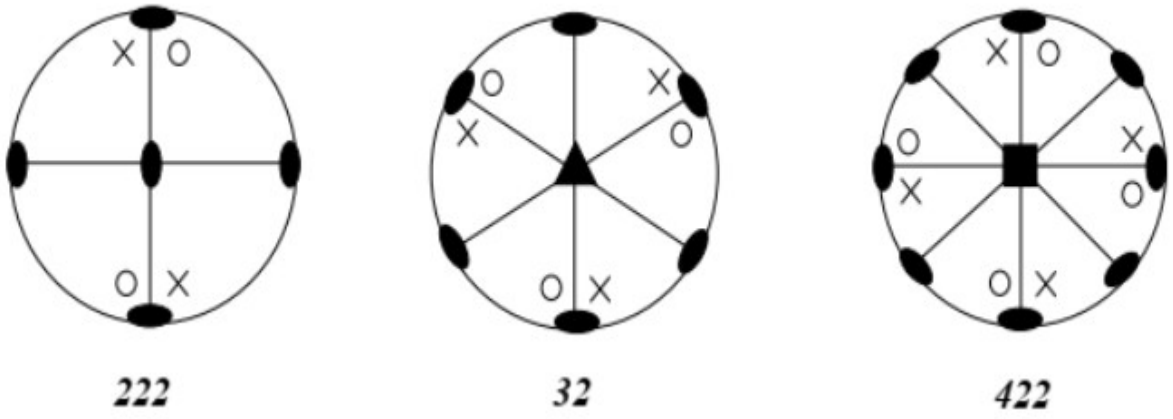
32: ثلاث محاور دوران مباشرة من الرتبة 2 في المستوى و محور دوران مباشر الرتبة 3 عمودي على مستوى الرسم وموجه على طول المحور **oz**.

422: اربع محاور دوران مباشرة من الرتبة 2 في المستوى و محور من الرتبة 4 عمودي على مستوى الرسم وموجه على طول المحور oz.

622: ستة محاور دوران مباشرة من الرتبة 2 في المستوى و محور من الرتبة 4 عمودي على مستوى الرسم وموجه على طول المحور oz.

ملاحظات :

- عندما يكون عدد محاور الرتبة 2 في المستوى زوجي، نضاعف الـ 2 في المستوى رمز الطبقة البلورية مثل: 222، 422، 622.
- عندما يكون عدد محاور الرتبة 2 في المستوى فردياً، فإننا لا نضاعف الـ 2 في رمز الطبقة البلورية على النحو التالي: 32 و52



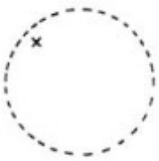
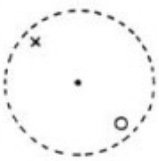
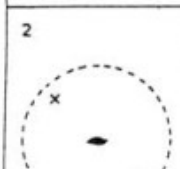
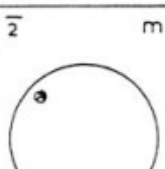
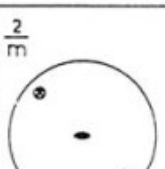
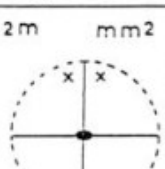
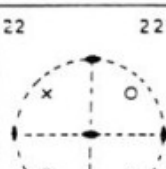
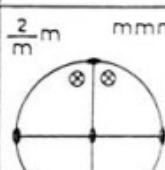
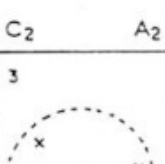
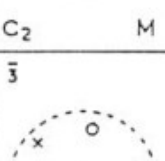
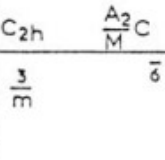
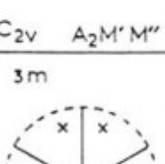
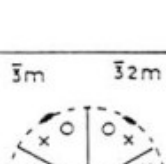
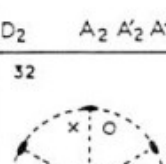
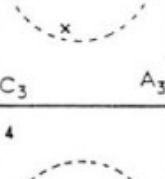
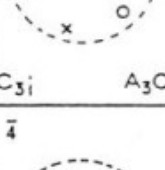
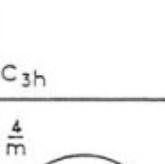
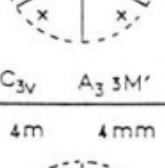
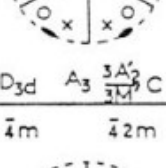
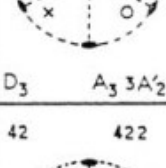
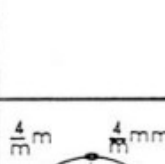
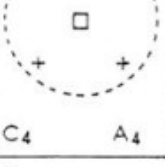
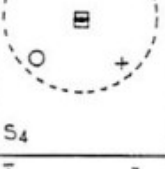
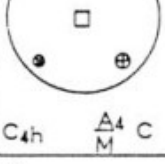
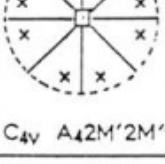
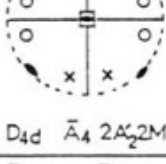
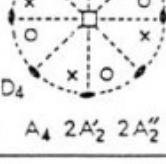
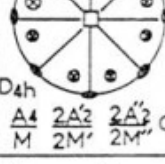
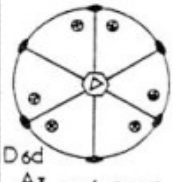
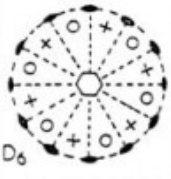
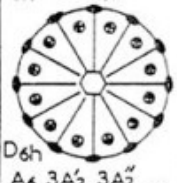
الشكل (13–2): تمثيل ستيريوغرافي لفئات التناظر البلوري .

7– المجموعة n/mm : محور دوران مباشر n ومرآة تمر عبر هذا المحور، ومرآة عمودية على المحور الرئيسي ، نجد .mmm, 4/mm , 6/mm

2–4–4 تمثيل وتوزيع الفئات البلورية الـ 32

أدى تعداد مجموعات النقاط البلورية ثلاثية الأبعاد إلى 32 مجموعة نقطية (32 فئة بلورية).

الإسقاطات الستيروغرافية لفئات التناظر البلوري، وعددها 32،مبينة في الشكل II.1. وتسمى أيضا فئات التماثل مجموعات النقاط البلورية.

Cn		Cnh	Cnv	Dnd	Dn	Dnh
1  C_1	$\bar{1}$  C_i C	$\frac{1}{m}$ m M	1m m C_{1v} M	$\bar{1}$m $\frac{2}{m}$ D_{1d} $\frac{A2}{M}$C	12 2 D_1 A_2	$\frac{1}{m}$m mm2 D_{1h} $A_2M'M''$
2  C_2 A_2	$\bar{2}$ m  C_2 M	$\frac{2}{m}$  C_{2h} $\frac{A_2}{M}$C	2m mm2  C_{2v} $A_2M'M''$	$\bar{2}$m mm2	22 222  D_2 A_2 A'_2 A''_2	$\frac{2}{m}$m mmm  D_{2h} $\frac{A_2}{M}\frac{A'_2}{M}\frac{A''_2}{M''}$C
3  C_3 A_3	$\bar{3}$  C_{3i} A_3C	$\frac{3}{m}$ $\bar{6}$  C_{3h}	3m  C_{3v} A_3 $3M'$	$\bar{3}$m $\bar{3}$2m  D_{3d} A_3 $\frac{3A'_2}{3M}$C	32  D_3 A_3 $3A'_2$	$\frac{3}{m}$m $\bar{6}$2m
4  C_4 A_4	$\bar{4}$  S_4	$\frac{4}{m}$  C_{4h} $\frac{A_4}{M}$C	4m 4mm  C_{4v} $A_4$2M'2M''	$\bar{4}$m $\bar{4}$2m  D_{4d} $\bar{A}_4$ $2A'_2$2M''	42 422  D_4 A_4 $2A'_2$ $2A''_2$	$\frac{4}{m}$m $\frac{4}{m}$mm  D_{4h} $\frac{A_4}{M}\frac{2A'_2}{2M'}\frac{2A''_2}{2M''}$C
6  C_6 A_6	$\bar{6}$ $\frac{3}{m}$  C_{3h} $\frac{A_3}{M}$	$\frac{6}{m}$  C_{6h} $\frac{A_6}{M}$C	6m 6mm  C_{6v} $A_6$3M' 3M''	$\bar{6}$m $\bar{6}$2m  D_{6d} $\frac{A_3}{M}$ $3A'_2$ 3M''	62 622  D_6 A_6 $3A'_2$ $3A''_2$	$\frac{6}{m}$m $\frac{6}{m}$mm  D_{6h} $\frac{A_6}{M}\frac{3A'_2}{3M'}\frac{3A''_2}{3M''}$C
23 T $3A_2$ $4A_3$		m3 $\frac{2}{m}3$ Th $\frac{3A_2}{3M}$ $4A_3$ C		$\bar{4}$ 3m  Td $3\bar{A}_4$ $4A_3$ 6M'	432  O $3A_4$ $4A_3$ $6A'_2$	$\frac{4}{m}3\frac{2}{m}$ m3m  Oh $\frac{3A_4}{3M}$ $4A_3$ $\frac{6A'_2}{6M'}$C

2-4-4 درجة تناظر لمجموعة البلورية

لتحديد درجة التماثل لمجموعة بلورية نستخدم الإسقاط الستيريوغرافي. يتم حساب درجة درجة التماثل لمجموعة بلورية باستخدام العلاقة التالية:

$$s=1+\ n2+2\ \ n3+3\ \ n4+5\ \ n6 \qquad (1-2)$$

حيث n2، n3، n4، n6 تمثل عدد المحاور الثنائية والثلاثية والرباعية والسداسية على التوالي.

- إذا كان للمجموعة النقطية أيضًا مركز تناظر. درجة التماثل في هذه الفئة تعطى:

$$S=2s \qquad (2-2)$$

مثال:

1- المجموعة النقطية 32: حسب الإسقاط الستيريوغرافي للمجموعة 32 نجد:

$$s=1+3+2.1+3.0+5.0=6$$

2- المجموعة النقطية$2/mm$: حسب الإسقاط الستيريوغرافي للمجموعة $2/mm$ نجد:

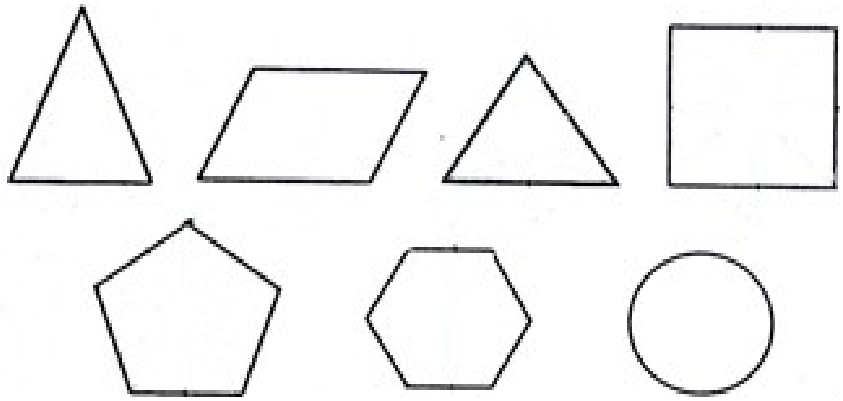
$$s=1+3+2.0+3.0+5.0=4$$

هذه الفئة البلورية لها مركز تناظر، لذا $S=2s=8$

تمارين اضافية

التمرين الأول:

مثل عناصر التناظر و المجموعات المرتبطة بالتناظر للأشكال الهندسية المنتهية التالية:



التمرين الثاني

- بين أن محور الدوران من الدرجة 2 يكافئ مستوي انعكاس.

2 - بين أن المحور 6 يكافئ المحور 3 عموديا على مرآة.

التمرين الثالث:

1- باستخدام الإسقاط الستيريوغرافي، قم بعرض عناصر التماثل والنقاط الموجودة على التماثل للأشكال المنتهية للمجموعات النقطية التالية :

3, 4, $\bar{3}$, $\bar{4}$, 422, 222 , 32 , $\bar{4}m$, 6/m, 4mm .

2- احسب درجة التناظر البلوري للمجموعة النقطية التالية :$\frac{4}{m}$

الفصل الثالث

الأنظمة البلورية وشبكات برافي

3-1 شبكات برافي (Bravais Lattices)

3-1-1 تعريف شبكة برافي

شبكة برافي هي التوزيع المنتظم والدوري للنقاط في الفضاء، والذي يمكن الحصول عليه بإجراء انسحاب متوازي لخلية الوحدة في الاتجاهات المختلفة. وتمثل هذه الشبكة الإطار الهندسي الذي يصف البنية البلورية للمادة.

ولا تمثل شبكة برافي دائماً جميع الجسيمات المكونة للبلورة، إذ قد تحتوي البلورات المعقدة على أكثر من نوع من الذرات أو الجزيئات المرتبة بصفة دورية. وفي هذه الحالة يمكن وصف البنية البلورية على أنها شبكة برافي ترتبط بكل نقطة من

نقاطها مجموعة من الذرات أو الجزيئات تسمى الأساس (Basis).

أثبت العالم الفرنسي أوغست برافي (Auguste Bravais) سنة 1848 أن جميع الشبكات البلورية الممكنة يمكن تصنيفها إلى أربع عشرة شبكة مستقلة تعرف باسم شبكات برافي الأربعة عشر (Fourteen Bravais Lattices).وتتوزع هذه الشبكات على سبعة أنظمة بلورية (Crystal Systems)، وذلك تبعاً للعلاقات الهندسية بين أطوال أضلاع خلية الوحدة والزوايا التي تشكلها.

وتنتج شبكات برافي المختلفة من الطرق الممكنة لترتيب النقاط الشبكية داخل خلية الوحدة مع المحافظة على شرط التناظر الدوري، بحيث تكون البيئة البلورية المحيطة بكل نقطة شبكية متماثلة تماماً.

تصنف شبكات برافي وفق موضع النقاط الشبكية داخل خلية الوحدة إلى الأنواع التالية:

- **الشبكة البسيطة (Primitive Lattice)** ويرمز لها بالحرف **P**، حيث توجد النقاط الشبكية عند أركان خلية الوحدة فقط.
- **الشبكة متمركزة الجسم (Body-Centered Lattice)** ويرمز لها بالحرف **I**، حيث توجد نقطة شبكية إضافية في مركز الخلية.
- **الشبكة متمركزة الوجوه (Face-Centered Lattice)** ويرمز لها بالحرف **F**، حيث توجد نقطة شبكية في مركز كل وجه من أوجه الخلية.
- **الشبكة متمركزة القاعدة (Base-Centered Lattice)** ويرمز لها بالحرف **C** (أو A وB حسب مستوى التمركز)، حيث توجد نقطتان شبكيتان إضافيتان في وجهين متقابلين من خلية الوحدة.

وتؤدي هذه الأنماط المختلفة من التمركز، عند دمجها مع الأنظمة البلورية السبعة، إلى الحصول على شبكات برافي الأربعة عشر التي تمثل جميع الشبكات البلورية الممكنة في الطبيعة.

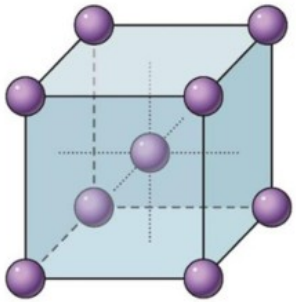
3-1-1 وحدة الخلية (Unit Cell)

في علم البلورات، تعرف وحدة الخلية بأنها أصغر جزء من الشبكة البلورية يمكن، بتكراره دورياً بواسطة عمليات

انسحاب (Translation) على امتداد المحاور الثلاثة للفضاء، إعادة بناء البلورة كاملة. ويتم هذا الانتقال دون أي دوران أو تغيير في اتجاه وحدة الخلية. تُوصف وحدة الخلية بستة معاملات شبكية (Lattice Parameters)، هي:

أطوال الأضلاع: $a;b;c$ وتسمى ثوابت الشبكة البلورية. و الزوايا بين الأضلاع: $\alpha;\beta;\gamma$ حيث: (α) هي الزاوية بين المحورين (b) و(c)، (β) هي الزاوية بين المحورين (a) و(c)، (γ) هي الزاوية بين المحورين (a) و(b).

وتحتوي وحدة الخلية على جميع عناصر التناظر التي تميز البنية البلورية، لذلك فإن معرفة شكلها وأبعادها يسمح بتحديد خصائص الشبكة البلورية بأكملها. ولا يشترط أن توجد ذرة عند كل زاوية من زوايا الخلية، إذ يعتمد عدد الذرات ومواقعها على نوع البنية البلورية المدروسة. فعلى سبيل المثال، يتبلور الحديد النقي **الشكل3-1** عند درجة الحرارة العادية وفق البنية المكعبة متمركزة الجسم (BCC)، حيث توجد ذرات الحديد عند زوايا المكعب الثمانية إضافة إلى ذرة واحدة في مركز الخلية. وبما أن كل ذرة موجودة عند أحد الأركان تشترك فيها ثماني خلايا متجاورة، فإن مساهمة ذرات الأركان تساوي: $8\times\frac{1}{8}=1$ ومع إضافة الذرة الموجودة في مركز الخلية نحصل على:$1+1=2$ ومن ثم تحتوي خلية الحديد من نوع BCC على ذرتين فعليتين داخل وحدة الخلية.



الشكل3-1 :خلية وحدة الحديد

3-2 الأنظمة البلورية (Crystal Systems)

توجد المواد الصلبة البلورية في أشكال هندسية متعددة تعرف بالأنظمة البلورية. والبلورة هي جسم صلب متجانس كيميائياً، تتموضع فيه الذرات أو الأيونات أو الجزيئات وفق ترتيب دوري ومنتظم في الفضاء ثلاثي الأبعاد. ويتميز هذا الترتيب بإمكانية تقسيمه إلى وحدات متكررة ومتماثلة تسمى خلايا الوحدة (Unit Cells)، حيث تمثل أصغر خلية يمكن بتكرارها دورياً في جميع الاتجاهات إعادة بناء البلورة كاملة.كما يظهر التركيب البلوري على المستوى العياني في شكل أوجه ومستويات بلورية طبيعية تعكس عناصر التناظر والبنية الهندسية الداخلية للبلورة.يعتمد تصنيف البلورات إلى أنظمة بلورية مختلفة على العلاقات الهندسية بين أطوال أضلاع خلية الوحدة: $a;b;c$ والزوايا المحصورة بينها: $\alpha;\beta;\gamma$ وبناءً على هذه العلاقات تقسم البلورات إلى سبعة أنظمة بلورية أساسية ، وهي:

1.النظام المكعبي (Cubic System).

2.النظام الرباعي (Tetragonal System).

3.النظام السداسي (Hexagonal System).

4.النظام الثلاثي أو الرومبوهدري (Trigonal / Rhombohedral System).

5.النظام المعيني القائم (Orthorhombic System).

6.النظام أحادي الميل (Monoclinic System).

7.النظام ثلاثي الميل (Triclinic System).

وتشكل هذه الأنظمة السبعة الأساس الهندسي الذي تشتق منه شبكات برافي الأربعة عشر، والتي تمثل جميع الشبكات البلورية الممكنة في الطبيعة.

يتبع كل معدن أو مركب بلوري أحد الأنظمة البلورية السبعة، حيث تتكرر خلايا الوحدة دورياً في الاتجاهات الثلاثة للفضاء دون وجود فراغات بينها، مكونةً بذلك البنية البلورية الكاملة للمادة. وتكون الصورة العيانية للبلورة انعكاساً للبنية الهندسية الداخلية لخلايا الوحدة وترتيبها المنتظم.ويمكن توضيح ذلك بسهولة في حالة النظام المكعبي، حيث تتكرر خلية الوحدة المكعبة في جميع الاتجاهات؛ فتجاورها خلايا مماثلة من اليمين واليسار، ومن الأعلى والأسفل، ومن الأمام والخلف، مما يؤدي إلى ملء الفضاء بصورة منتظمة ومتواصلة. ومع استمرار هذا التكرار تنمو البلورة تدريجياً لتشكل جسماً بلورياً كبيراً.

وتصنف جميع المعادن والأملاح المعروفة ضمن أحد الأنظمة البلورية السبعة، والتي تختلف فيما بينها في أبعاد خلية الوحدة والزوايا بين محاورها البلورية.ولا يقتصر الاختلاف بين البلورات على شكل خلية الوحدة فقط، بل يشمل أيضاً مواضع النقاط الشبكية داخل الخلية، وهو ما يعرف بأنماط تمركز الشبكة . وتوجد أربعة أنماط أساسية للتمركز:

أ- الشبكة البدائية (Primitive Centering) – الرمز P : توجد النقاط الشبكية عند أركان خلية الوحدة فقط.

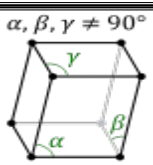
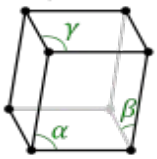
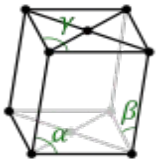
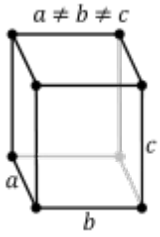
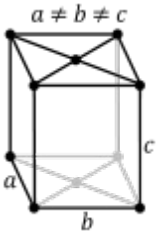
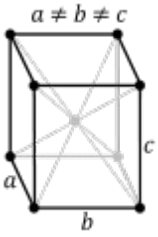
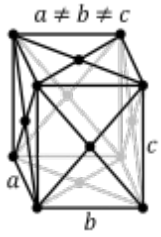
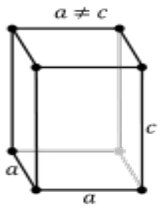
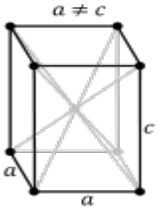
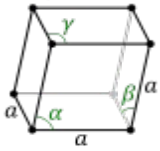
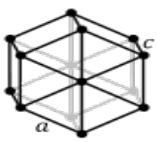
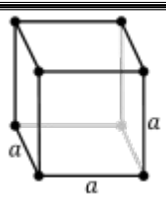
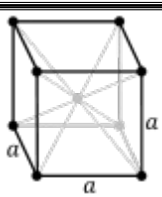
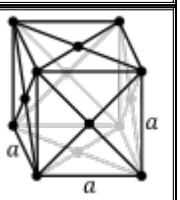
ب- الشبكة متمركزة الجسم (Body-Centered) – الرمز I : توجد نقطة شبكية إضافية في مركز خلية الوحدة بالإضافة إلى النقاط الموجودة عند الأركان.

ج- الشبكة متمركزة الوجوه (Face-Centered) – الرمز F :توجد نقطة شبكية إضافية في مركز كل وجه من أوجه خلية الوحدة الستة، بالإضافة إلى النقاط الموجودة عند الأركان.

د- الشبكة متمركزة القاعدة (Base-Centered) – الرمز C : توجد نقطتان شبكيتان إضافيتان في مركزي وجهين متقابلين من أوجه خلية الوحدة، بالإضافة إلى النقاط الموجودة عند الأركان.ويؤدي دمج هذه الأنماط المختلفة من التمركز مع الأنظمة البلورية السبعة إلى الحصول على شبكات برافي الأربعة عشر، التي تمثل جميع الشبكات

البلورية الممكنة في الطبيعة الجدول (3-1).

الجدول (3-1) : شبكات برافي الأربعة عشر

الأنظمة البلورية السبعة	شبكات برافي الأربعة عشر			
triclinic (ثلاثي الميل)	P			
	$\alpha, \beta, \gamma \neq 90°$ 			
monoclinic (احادي الميل	P	C		
	$\beta \neq 90°$ $\alpha, \gamma = 90°$ 	$\beta \neq 90°$ $\alpha, \gamma = 90°$ 		
orthorhombic (معيني قائم)	P	C	I	F
	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 
tetragonal (رباعي قائم)	P	I		
	$a \neq c$ 	$a \neq c$ 		
Trigonal (ثلاثي الميل)	P			
	$\alpha=\beta=\gamma \neq 90°$ 			
hexagonal (السداسي)	P			
				
cubic (المكعب)	P (pcc)	I (bcc)	F (fcc)	
				

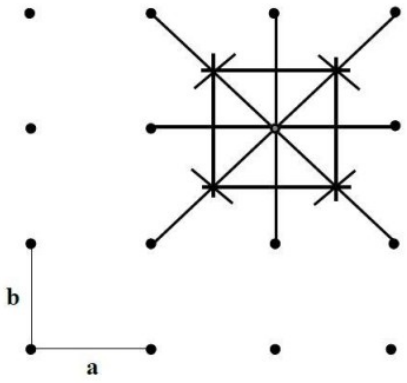
3-3 خلية فيغنر–سايتز الأولية (Wigner–Seitz Cell)

إن استعمال الخلايا غير الأولية في وصف بعض الشبكات البلورية يعود أساساً إلى سهولة تمثيل عناصر التناظر الخاصة بها. فعلى سبيل المثال، في الشبكة المكعبة متمركزة الوجوه (FCC)، يُفضَّل غالباً استعمال خلية غير أولية ذات شكل مكعبي لأنها تُظهر تناظر الشبكة بصورة واضحة، رغم أنها لا تمثل أصغر خلية ممكنة.

ومن هنا يطرح السؤال التالي: هل يمكن اختيار خلية أولية تمتلك نفس خصائص التناظر الموجودة في الشبكة البلورية؟ والجواب نعم، إذ توجد طريقة هندسية تسمح ببناء خلية أولية تحقق هذا الشرط، وتعرف باسم خلية فيغنر–سايتز.

اقترح كل من فيغنر وسايتز طريقة بسيطة لتحديد هذه الخلية، وتتم وفق الخطوات الآتية:

1. رسم الشبكة النقطية التي تمثل شبكة برافي.
2. اختيار نقطة شبكية مرجعية، ثم وصلها بجميع النقاط الشبكية المجاورة لها.
3. رسم المستويات العمودية المنصفة للقطع المستقيمة الواصلة بين النقطة المرجعية والنقاط المجاورة.
4. يشكل الحيز المغلق الناتج عن تقاطع هذه المستويات خلية فيغنر–سايتز.

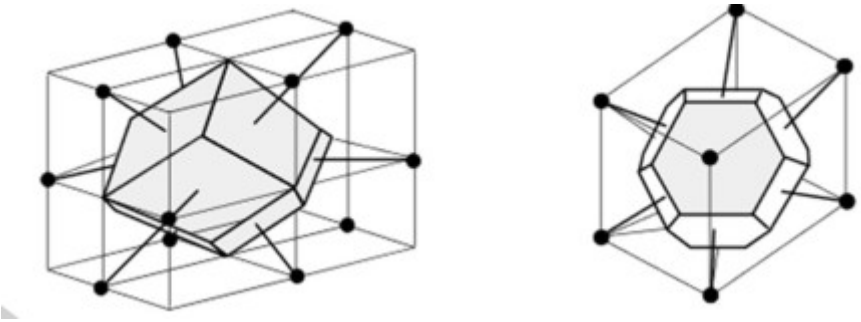


الشكل (3–2): خلية فيجنر–زايتس Wigner–Seitz للشبكات المستوية.

وتتميز خلية فيغنر–سايتز بأنها خلية أولية تحتوي على نقطة شبكية واحدة مكافئة، وتمثل أصغر حجم في الفضاء يمكن بتكراره إعادة بناء الشبكة البلورية كاملة.ويختلف شكل خلية فيغنر–سايتز باختلاف نوع الشبكة البلورية. ففي الشبكات ثنائية الأبعاد قد تكون مربعة أو مستطيلة أو سداسية، بينما تكون في الأبعاد الثلاثية على شكل متعدد أوجه يعكس تناظر الشبكة المدروسة.

ففي حالة الشبكة المكعبة متمركزة الجسم (BCC)، تأخذ خلية فيغنر–سايتز شكل مجسم متعدد الأوجه يعرف بالمجسم الاثنا عشري المقطوع (Truncated Octahedron)، ويتكون من أربعة عشر وجهاً: ستة أوجه مربعة وثمانية أوجه سداسية منتظمة كما هو مبين بالشكل (3–3–ا)، كما يتميز بدرجة عالية من التناظر تتوافق مع تناظر الشبكة المكعبة متمركزة الجسم.

أما خلية فيجنر–سايتز للبلورة الممركزة الأوجه ، FCCفتكون على هيئة معيني اثني عشري، أي له اثني عشر سطحا على شكل معين، كما هو موضح بالشكل(3–3 –ب). في هذا الشكل لم تظهر الخلية الأولية للشبكة، فالمكعب المرسوم المحيط بخلية فيجنر– سايتز ليس خلية أولية .تكون كل الأوجه الاثني عشر متطابقة ويكون كل وجه عموديا على المستقيم الواصل بين الذرة الموجودة وسط خلية فيجنر– سايتز والذرات الاثنى عشر الموجودة وسط أضلاع المكعب المرسوم



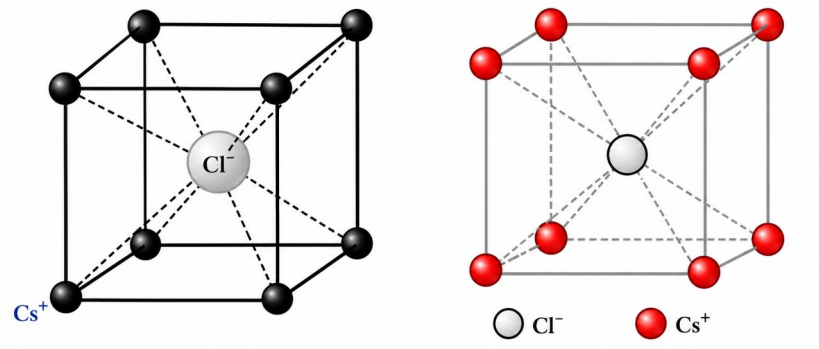
أ– خلية فيغنر–سايتز للشبكة المكعبة ممركزة الجسم ، ب– خلية فيغنر–سايتز للشبكة المكعبة متمركزة الوجوه.

الشكل (3–3): يوضح خلية فيغنر–سايتز

3–4 أمثلة لبعض التركيبات البلورية المكعبة

3–4 –1 تركيب بلورة كلوريد السيزيوم (CsCl)

يتبلور كلوريد السيزيوم في بنية مكعبة، حيث تتبادل أيونات السيزيوم (Cs^+) وأيونات الكلور (Cl^-) مواقعها على امتداد أقطار المكعب الفراغية، كما هو موضح في الشكل (3–4– أ).وتكون خلية الوحدة على هيئة مكعب متمركز الجسم، كما يبين الشكل (3–4– ب).



ب- خلية الوحدة (مكعب متمركز الجسم) أ- بلورة كلوريد السيزيوم (CsCl)

الشكل(3–4): تركيب بلورة كلوريد السيزيوم.

توجد في كل خلية وحدة أيونات السيزيوم عند أركان المكعب، أي عند الإحداثي: (0,0,0) بينما يشغل أيون الكلور مركز الخلية عند الإحداثيات: $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$ وبذلك يمكن اعتبار بلورة كلوريد السيزيوم بلورة غير برافي مكونة من شبكتين مكعبيتين بسيطتين متداخلتين، إحداهما مكونة من أيونات السيزيوم والأخرى من أيونات الكلور، وتكون

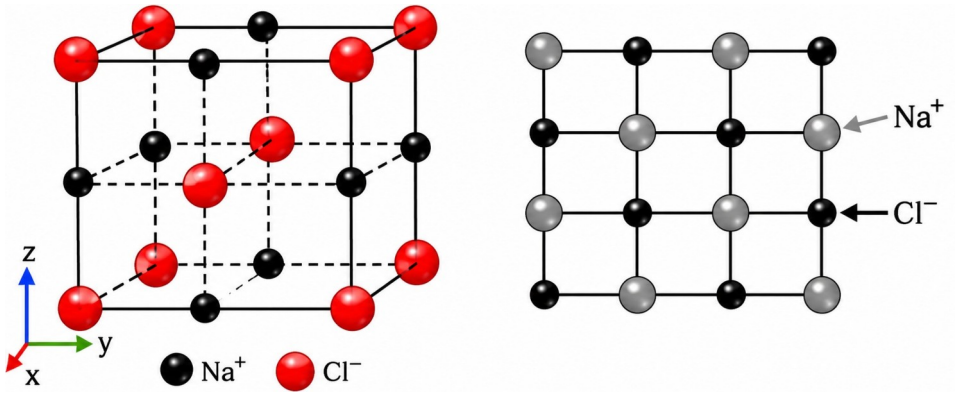
إحدى الشبكتين مزاحة بالنسبة إلى الأخرى بمقدار يساوي نصف قطر المكعب على امتداد القطر الفراغي. يبين الجدول 3-5 أبعاد بلورة بعض المركبات التي تتبلور على صورة كلوريد السيزيوم.

.الجدول(3-2): أبعاد بلورة بعض المركبات التي تتبلور على صورة كلوريد السيزيوم (بالأنجستروم)

a (Å)	المركب	a (Å)	المركب
4.12	CsCl	3.83	TlCl
4.29	CsBr	3.97	TlBr
4.57	CsI	4.20	TlI

3-4 -2- تركيب بلورة كلوريد الصوديوم (NaCl)

يتبلور كلوريد الصوديوم (ملح الطعام) وفق بنية مكعبة متمركزة الوجوه (FCC)، حيث تتناوب أيونات الصوديوم (Na^+) وأيونات الكلور (Cl^-) في شغل المواقع الشبكية على امتداد الاتجاهات الأساسية، كما هو مبين بالشكل (3-5-أ). يبين الشكل (3-5-ب) خلية الوحدة في الأبعاد الثلاثة. نلاحظ أن الخلية تكون من النوع المتمركز الأوجه وتكون مواضع أيونات الصوديوم الأربعة هي: $(0,0,0)$, $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$, $\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right)$, $\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$ بينما تتواجد أيونات الكلور الأربعة في المواضع: $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$، $\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right)$، $\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$ و $(0,0,0)$ مع الأخذ في الاعتبار أن هذه الإحداثيات تعطى بدلالة طول ضلع المكعب.



أ- بلورة صوديوم في بعدين **ب- بلورة متمركزة الأوجه في ثلاثة أبعاد**

الشكل(3-5) : تركيب بلورة كلوريد الصوديوم

ويمكن وصف البنية البلورية لكلوريد الصوديوم على أنها ناتجة عن تداخل شبكتين مكعبيتين متمركزتي الوجوه من النوع (FCC)، إحداهما مكونة من أيونات الصوديوم (Na^+) والأخرى من أيونات الكلور (Cl^-)، بحيث تكون إحدى الشبكتين مزاحة بالنسبة للأخرى بمقدار: $\left(\frac{1}{2},0,0\right)$ أو أي إزاحة مكافئة لها بلورياً.

وتحتوي خلية الوحدة على أربع وحدات صيغة من المركب (NaCl)، ولذلك فإن عدد أيونات الصوديوم يساوي

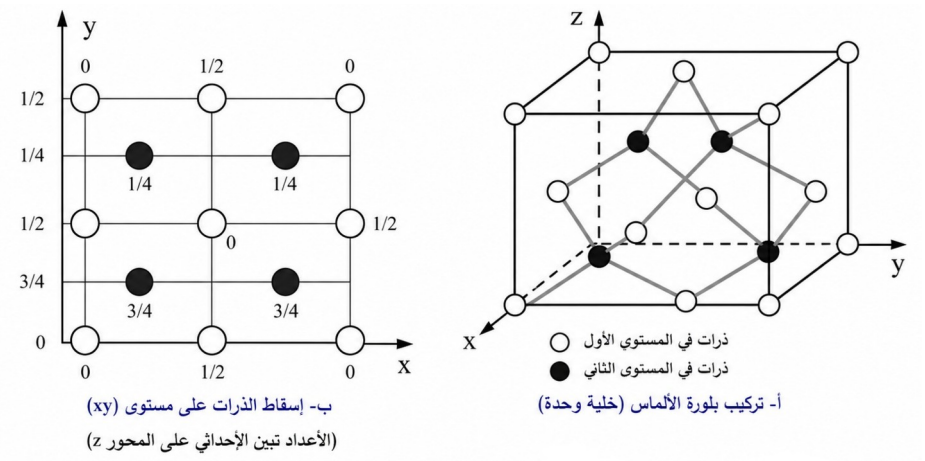
عدد أيونات الكلور داخل الخلية، مما يحقق شرط التعادل الكهربائي للبلورة. ويعد تركيب كلوريد الصوديوم من أكثر التراكيب البلورية الأيونية انتشاراً، ويُعرف باسم بنية الملح الصخري (Rock Salt Structure)، ينطبق نفس التركيب السابق على العديد من البلورات الأيونية، يبين الجدول(3-3) أبعاد بلورات بعض المركبات التي تتبلور على صورة كلوريد الصوديوم.

لجدول(3-3) : أبعاد بلورات بعض المركبات التي تتبلور على صورة كلوريد الصوديوم.

المركب	a (Å)	المركب	a (Å)
LiF	4.02	AgCl	5.55
NaCl	5.64	MgS	5.20
KF	6.35	CaSe	5.91
RbF	5.64	BaS	6.39
NaF	4.62	MgO	4.21

3-4 -1 تركيب بلورة الألماس

الألماس هو كربون متبلور بسبب الضغط ودرجة الحرارة المرتفعين لفترات زمنية كبيرة. تكون شبكة الألماس على هيئة مكعب، وهي شبكة ليست برافي، كما يبين الشكل (3-6-ا). تحتوي الخلية الأولية على 8 ذرات، كما هو مبين في الشكل (3-6-ب)، وفيها يتكون الألماس من ذرتين من الكربون متماثلتين لكل عقدة (نقطة) عند الإحداثيات: (0,0,0) و $\left(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4}\right)$ ويمكن تصور شبكة الألماس المكعبة على أنها تتكون من شبكتين (FCC) متماثلتين ومتداخلتين. تتكون الشبكة الأولى من الذرات المظللة في الشكل (ب)، وتكون الشبكة الثانية من الذرات غير المظللة. تكون هاتان الشبكتان مزاحتين عن بعضهما باتجاه ربع القطر الجسمي للشبكة المكعبة بمقدار ربع قطر المكعب. تكون كل ذرة محاطة بأربع ذرات من الجوار على مسافات متساوية واقعة على رؤوس شكل رباعي السطوح منتظم، كما يبين الشكل (3-6-ج)، حيث إن التوزيع الفضائي للذرات التي تحيط بذرة معينة يختلف من ذرة إلى أخرى، لذلك تعد الشبكة ليست برافي.



الشكل (3–6) تركيب بلورة الماس

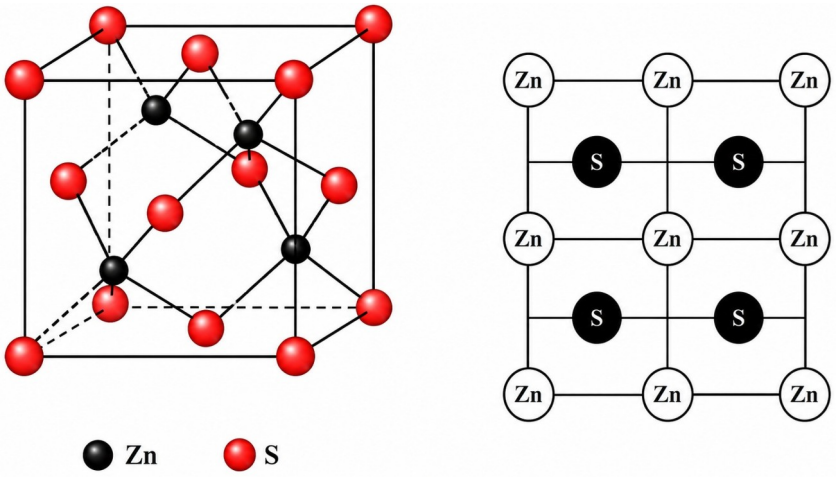
3–4 –4 تركيب بلورة كبريتيد الزنك ZnS

يشبه تركيب بلورة كبريتيد الزنك تركيب بلورة الألماس، التي سبق شرحها،والاختلاف الوحيد هو أن الأساس في حالة (ZnS) مكون من ذرتين هما (Zn) و (S) بدلاً من ذرتي الكربون المتشابهتين في الألماس، وترتب ذرات (Zn) و (S) تحتل المواقع الذرية الآتية:

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

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

تحتوي كل خلية وحدة على أربعة جزيئات من كبريتيد الزنك (ZnS)، ولا توجد ذرة الزنك أو الكبريت في مركز شكل رباعي مكون من ذرات النوع المخالف، كما هو مبين بالشكل(3–7). تتبلور كثيراً من المواد شبه الموصلة على صورة بلورة كبريتيد الزنك.



أ– التركيب البلوري في بعدين.ب– التركيب في الأبعاد الثلاثة.

الشكل(3–7): تركيب بلورة كبريتيد الزنك

يبين الجدول(3-4) أبعاد بلورات بعض المركبات التي تتبلور على صورة ZnS.

الجدول(3-4): أبعاد بلورات بعض المركبات التي تتبلور على صورة ZnS .

المركب	a (Å)	المركب	a (Å)
CuCl	5.41	CdS	5.82
AgI	6.47	HgSe	6.08
BeSe	5.07	AlSb	5.62
ZnS	5.41	GaAs	5.65
ZnTe	6.09	SiC	4.35

3-5- التعبئة المتراصة (Close Packing)

تعد التعبئة المتراصة من المفاهيم الأساسية في علم البلورات وفيزياء الحالة الصلبة، وتهدف إلى دراسة الطريقة التي تنتظم بها الذرات أو الأيونات أو الكرات المتساوية الحجم في الفضاء بحيث تشغل أكبر حجم ممكن وتترك أقل فراغات ممكنة.

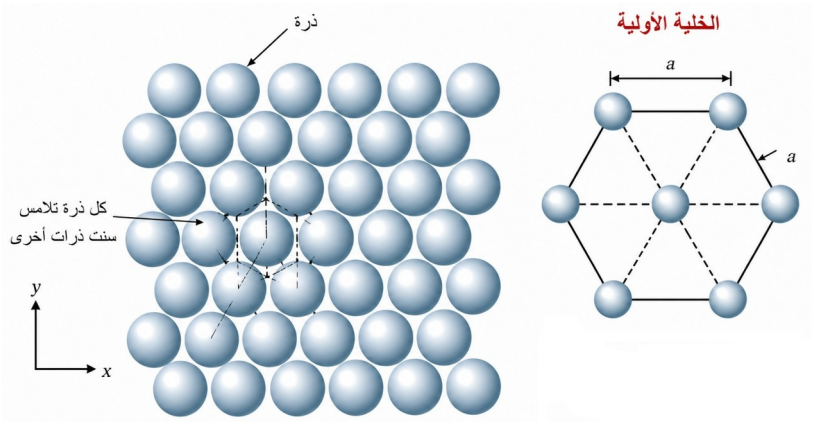
عند ترتيب الذرات على شكل كرات صلبة متلامسة، نجد أن أكثر الترتيبات كفاءة هي الترتيبات المتراصة، والتي تؤدي إلى الحصول على أعلى عامل تعبئة ذري (Atomic Packing Factor).

لفهم البنية البلورية للمواد الصلبة، يمكن تمثيل الذرات أو الأيونات على أنها كرات صلبة متساوية الحجم. وعند ترتيب هذه الكرات في الفضاء، فإنها تسعى إلى اتخاذ وضعية تحقق أكبر درجة من التقارب وأقل حجم ممكن من الفراغات البينية. ويعرف هذا النوع من الترتيب باسم **التعبئة المتراصة** (Close Packing).

تعد دراسة التعبئة المتراصة من المواضيع الأساسية في علم البلورات، لأنها تسمح بفهم البنى البلورية للعديد من المعادن والعناصر الصلبة، كما تساعد على تفسير بعض الخواص الفيزيائية مثل الكثافة والاستقرار الميكانيكي.

3-5-1 التعبئة المتراصة في المستوى

لنفترض وجود مجموعة من الكرات المتساوية موضوعة على سطح مستوي. لتحقيق أكبر درجة من التراص، ترتب الكرات بحيث تلامس كل كرة ست كرات مجاورة لها.ينتج عن هذا الترتيب شبكة سداسية ثنائية الأبعاد كما هو موضح في الشكل (3-8).



الشكل(3–8): التعبئة المتراصة في المستوى

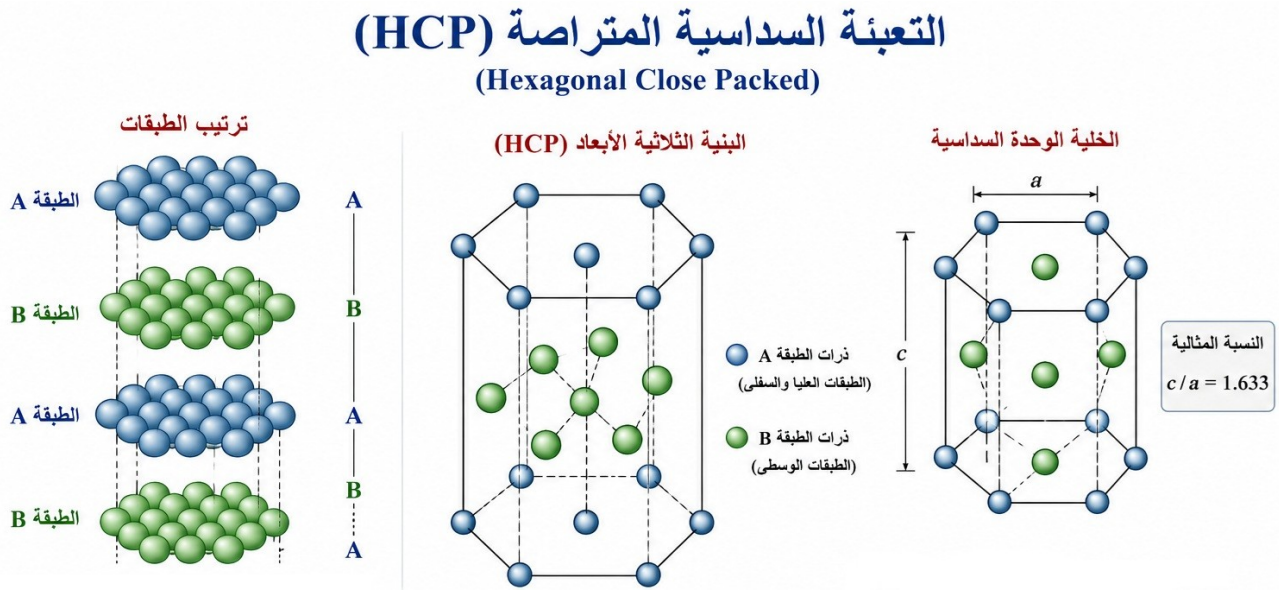
في هذه الحالة:عدد أقرب الجيران لكل ذرة:$Z=6$ حيث يسمى (Z) عدد التناسق .

3–5–2 التعبئة المتراصة في الفضاء

للحصول على بنية ثلاثية الأبعاد، نضيف طبقات جديدة فوق الطبقة الأولى. نرمز للطبقة الأولى بالحرف: A وتوضع كرات الطبقة الثانية داخل الفجوات الموجودة بين كرات الطبقة الأولى، وتسمى هذه الطبقة: B بعد ذلك توجد طريقتان مختلفتان لوضع الطبقة الثالثة، وينتج عنهما نوعان من التعبئة المتراصة.

ا– التعبئة السداسية المتراصة (HCP)

في هذه الحالة توضع الطبقة الثالثة مباشرة فوق مواقع الطبقة الأولى.فيكون ترتيب الطبقات: *ABABABAB* وبالتالي نحصل على البنية السداسية المتراصة الشكل (3–9).



الشكل(3–9): التعبئة السداسية المتراصة (HCP)

خصائص البنية HCP

- النظام البلوري: سداسي.
- عدد التناسق: $Z=12$ أي أن كل ذرة محاطة باثنتي عشرة ذرة مجاورة.
- عامل التعبئة الذرية: $APF=0.74$ أي أن الذرات تشغل 74% من الحجم الكلي للبلورة.
- نسبة الفراغات: 26%

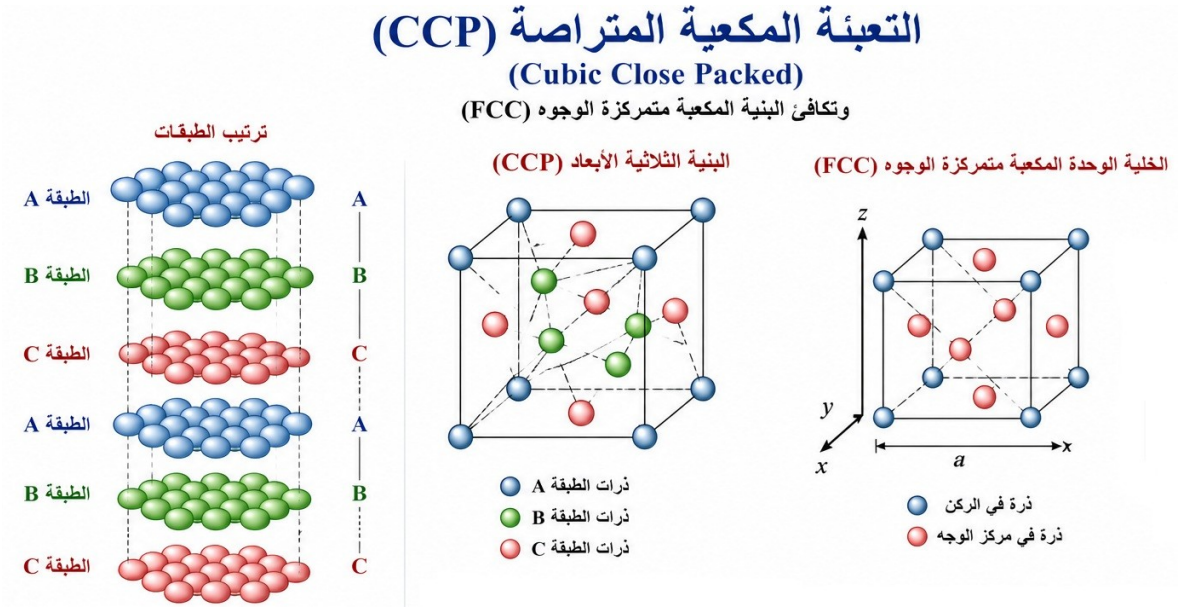
أمثلة : من المواد التي تتبلور وفق هذا التركيب:البيريليوم (Be)، المغنيسيوم (Mg)، الزنك (Zn)، الكادميوم (Cd)،التيتانيوم (Ti)

ب التعبئة المكعبة المتراصة Cubic Close Packed (CCP)

في هذه الحالة لا توضع الطبقة الثالثة فوق الطبقة الأولى، بل فوق فجوات جديدة تختلف عن فجوات الطبقتين A و B.

فتكون الطبقات مرتبة كما يلي *ABCABCABC* وينتج عن هذا الترتيب البنية المكعبة المتراصة الشكل (3-10).

وتكافئ هذه البنية الشبكة المكعبة متمركزة الوجوه *FCC*



الشكل(3-10): التعبئة المكعبة المتراصة (CCP)

خصائص البنية FCC

- النظام البلوري: مكعبي.
- عدد التناسق: $z=12$

عامل التعبئة: $APF=0.74$،نسبة الفراغات: 26%

أمثلة : النحاس (Cu)،الألمنيوم (Al)، الفضة (Ag)، الذهب (Au)،النيكل (Ni)، الرصاص (Pb)

3-6 الفجوات البينية

رغم أن التعبئة المتراصة تحقق أكبر درجة من التراص، إلا أنها تحتوي على فراغات بينية تستغلها أحياناً الذرات الصغيرة أو الأيونات. تنقسم هذه الفجوات إلى نوعين:

3-6-1 الفجوات رباعية السطوح (Tetrahedral Voids)

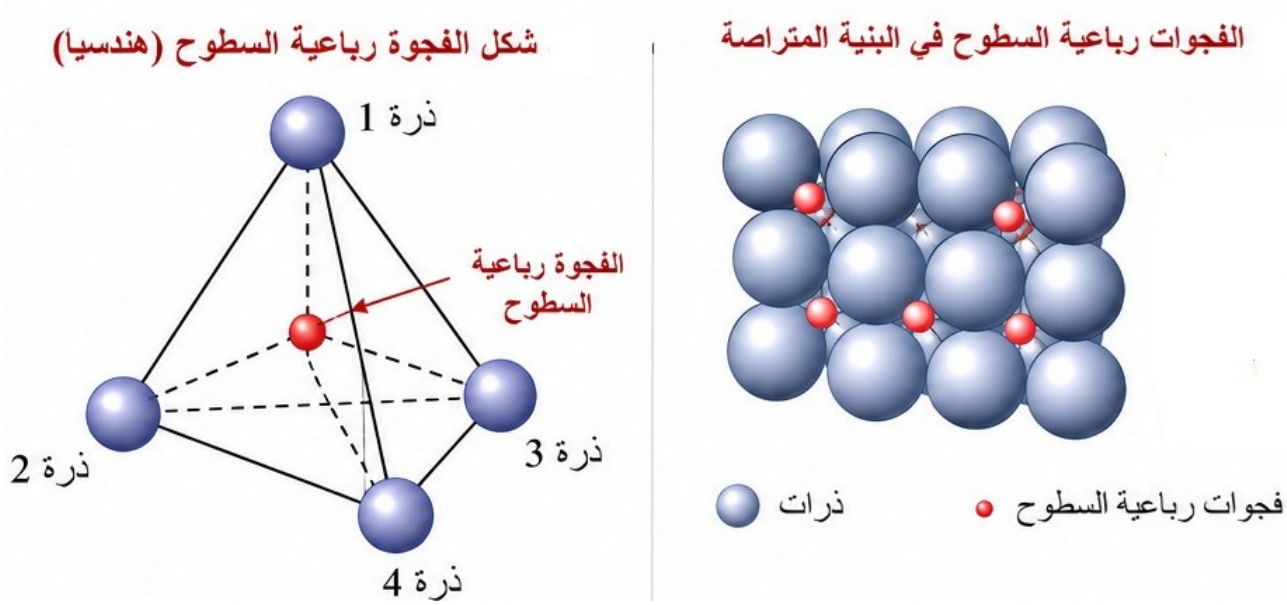
تعرف الفجوات رباعية السطوح بأنها الفراغات البينية الصغيرة المتشكلة داخل البنى المتراصة للذرات، والتي تنشأ نتيجة ترتيب أربع ذرات متلامسة تقع عند رؤوس رباعي سطوح منتظم (Regular Tetrahedron).

عند النظر إلى أربع ذرات متجاورة في البنية البلورية، نجد أنها لا تملأ الحيز بالكامل، بل تترك فراغا صغيرا في مركز الشكل الرباعي السطوح، يسمى الفجوة رباعية السطوح الشكل (3-11).

تتكون الفجوة عندما:

- تشكل ثلاث ذرات متلامسة مثلثاً متساوي الأضلاع في طبقة معينة.
- تستقر ذرة رابعة فوق هذا المثلث في الطبقة المجاورة.
- ينتج عن هذا الترتيب فراغ داخلي محاط بأربع ذرات.

يمكن تمثيل ذلك بالشكل الهندسي التالي:



الشكل(3-11): الفجوات رباعية السطوح

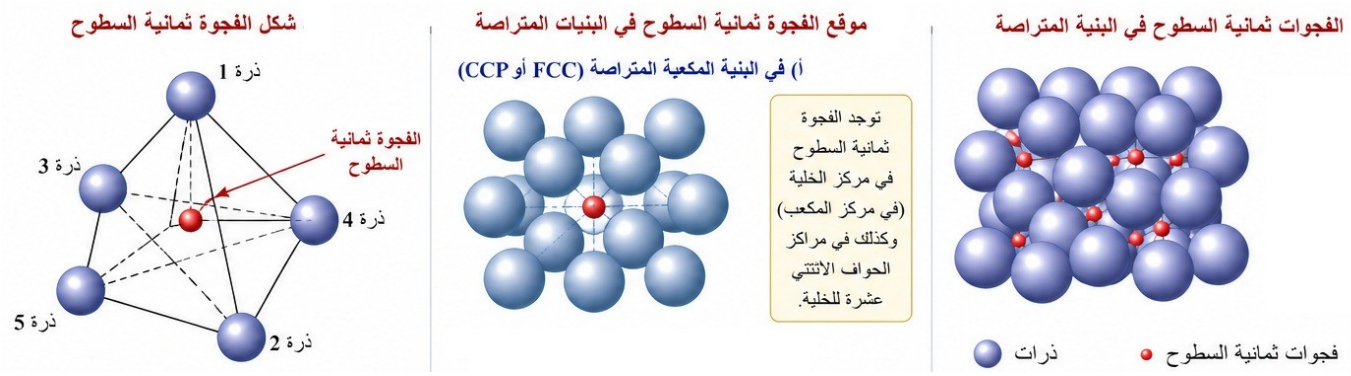
3-6-2- الفجوات ثمانية السطوح (Octahedral Voids)

الفجوات ثمانية السطوح هي فراغات بينية تتشكل داخل البنى البلورية المتراصة نتيجة ترتيب ست ذرات متلامسة تحيط بفراغ مركزي. تقع هذه الذرات عند رؤوس ثماني سطوح منتظم (Regular Octahedron)، ولذلك

سميت بالفجوات ثمانية السطوح الشكل(3-12)، تتكون الفجوة ثمانية السطوح عندما تحيط ست ذرات متساوية الحجم بفراغ مركزي

- أربع ذرات تقع في مستوى واحد.
- ذرة واحدة فوق هذا المستوى.
- ذرة واحدة أسفله.

وبذلك تصبح الذرات الست عند رؤوس شكل ثماني السطوح منتظم، بينما تقع الفجوة في مركزه.



الشكل(3-12): الفجوة ثمانية السطوح

الفصل الرابع

الطرق التجريبية لانعراج الأشعة السينية

4 انعراج الأشعة السينية

4-1 مقدمة

يمكن الحصول على معلومات أولية مفيدة حول تركيب المواد الصلبة المتبلورة من خلال ملاحظات العين المجردة للمظهر الخارجي للبلورة أو باستخدام المجهر الضوئي. حيث تُظهر البلورة بعض الخصائص الشكلية مثل الأوجه البلورية، التشقق ، والأبعاد الخارجية. ومع ذلك، فإن هذه المعلومات لا تكفي لدراسة التركيب الداخلي الدقيق للبلورة على المستوى الذري.

إن استخدام المجهر لدراسة البلورات يواجه قيودًا أساسية، ليس بسبب قدرة التكبير فحسب، بل بسبب طبيعة الشعاع المستخدم. الضوء المرئي المستخدم في المجاهر يمتلك طولًا موجيًا يتراوح بين 4000–7000 Å ، أي أن أكبر وحدة طول يمكن رؤيتها باستخدام الضوء المرئي لا تتجاوز 2000 Å . في المقابل، فإن المسافات البينية بين الذرات في البلورة تكون في حدود بضعة أنغستروم 1–5Å .لذلك، يصبح من المستحيل باستخدام الضوء المرئي أو أي إشعاع ذي طول موجي أكبر من بضعة أنغستروم أن نحصل على معلومات دقيقة حول التركيب البلوري مثل:حجم أصغر خلية بلورية (خلية وحدة)، مواقع الذرات داخل الخلية البلورية،التوزيع الإلكتروني في البلورة،أنماط الاهتزازات الذرية داخل البلورة.

بناءً على ذلك، فإن دراسة التركيب البلوري للمواد تتطلب استخدام إشعاع ذي طول موجي يعادل أو يقل عن المسافات البينية بين الذرات في البلورة. هذا الشرط يتيح للأشعة التفاعل مع الترتيب الذري داخل المادة بدقة، مما يمكننا من الكشف عن التفاصيل البنيوية الدقيقة. يتم تحقيق ذلك باستخدام تقنيات تعتمد على ظاهرة الانعطاف أو الانعراج، وفي بعض الأحيان يُشار إلى هذه العملية بـ التشتت أو الاستطارة.

4-2 الاستطارة

الاستطارة هي انحراف أي شعاع عن مساره الأصلي نتيجة تفاعله مع المادة. يحدث هذا الانحراف عندما يتفاعل الجسيم (مثل الإلكترون أو النواة) أو الفوتون مع جسيم آخر، سواء كان نواة الذرة أو إلكترونا. تعتمد خصائص الاستطارة على طبيعة التفاعل ويمكن تصنيفها إلى نوعين رئيسيين

4-2-1. الاستطارة غير المرنة(التشتت غير المرن)

تحدث عندما يفقد الجسيم أو الفوتون جزءا من طاقته أثناء التفاعل. يؤدي هذا التفاعل إلى تغير في طاقة الشعاع المتشتت، مما يعني أن الطاقة النهائية تختلف عن الطاقة الأصلية. تُستخدم هذه الظاهرة لدراسة التغيرات في المادة، مثل أنماط الاهتزاز أو التحولات الإلكترونية.

4-2-1 الاستطارة مرنه(التشتت المرن)

تحدث عندما لا يتغير مقدار طاقة الجسيم أو الفوتون بعد التفاعل. في هذه الحالة، يبقى الطول الموجي للشعاع المتشتت ثابتًا، ويحدث فقط تغيير في اتجاهه.

عندما يمر شعاع ضوئي عبر وسط مادي، تحدث عملية **استطارة** للشعاع نتيجة لتفاعل الضوء مع الجسيمات الموجودة في الوسط. هذه الاستطارة يمكن أن تتم بطريقتين منفصلتين ومختلفتين من حيث المبدأ وآلية الحدوث، وهما:

4-3 الانعكاس العشوائي

يحدث الانعكاس العشوائي عندما تمر الأشعة الضوئية عبر وسط مادي يحتوي على جسيمات صغيرة تعمل هذه الجسيمات كأنها **مرايا صغيرة** تعكس الضوء الساقط عليها.تكون الجسيمات موزعة بشكل عشوائي، مما يجعل الضوء المنعكس ينتشر في اتجاهات مختلفة بسبب توجيهها العشوائي بالنسبة لاتجاه الشعاع الساقط عليها ، تحدث هذه الظاهرة إذا كانت أبعاد الجسيمات أكبر من الطول الموجي للضوء الساقط.

4-4 الانعراج

يحدث الانعراج عندما تمر الأشعة الضوئية عبر وسط مادي يحتوي على جسيمات صغيرة الحجم مقارنة بالطول الموجي للضوء الساقط.تعمل الجسيمات الصغيرة ک مراكز إشعاع، حيث يُعاد توزيع الضوء في جميع الاتجاهات نتيجة للانعراج.تكون أبعاد الجسيمات أصغر من الطول الموجي للضوء.

ظاهرة الانعراج تمثل حالة خاصة من التداخل تنشأ نتيجة الطبيعة الموجية للضوء والجسيمات الأخرى التي ترتبط بحركتها موجات، مثل الإلكترونات والنيوترونات. بناءً على ذلك، يمكن استخدام الأشعة السينية، الإلكترونات، والنيوترونات لدراسة التركيب البلوري للمواد.

4-4-1 فوتونات الأشعة السينية:

حسب علاقة انشتاين $E=h\sigma=\frac{hc}{(\lambda)m}$ حيث $c=3\times10^{8}$ J.s , $h=6.626\times10^{-34}$ m/s ثابت بلانك.

بالتعويض في العلاقة السابقة نجد:

$$E=\frac{12398}{(\lambda)\mathring{A}} \qquad 1-4$$

هذا يعني أن فوتونًا بطول موجي يبلغ 1Å يمتلك طاقة تبلغ حوالي 12400 إلكترون فولت .

فوتونات الأشعة السينية هي إشعاعات كهرومغناطيسية ذات أطوال موجية قصيرة جدًا، تتراوح عادة بين 0.1 و10 أنغستروم. تتميز بطولها الموجي القريب من المسافات البينية بين المستويات الذرية في البلورات، مما يجعلها أداة مثالية

لدراسة الترتيب الذري داخل المادة

➢ إنتاج الأشعة السينية

تم اكتشاف الأشعة السينية في صيف عام 1895 على يد العالم الألماني رونتجن (Roentgen). كان رونتجن مهتمًا بدراسة أشعة المهبط الناتجة عن التفريغ الكهربائي داخل أنابيب مفرغة من الهواء. خلال تجاربه، لاحظ عن طريق الصدفة انبعاث وميض على شاشة فلوريسنتية موضوعة على مسافة بعيدة عن الأنبوب. أثار هذا التوهج الفضول العلمي لرونتجن، فكرس كل جهوده لدراسة هذه الأشعة الجديدة، والتي أطلق عليها اسم الأشعة السينية (X-rays) لأنها كانت مجهولة الطبيعة آنذاك.

حظي اكتشاف رونتجن باهتمام كبير من قبل المجتمع العلمي، وسرعان ما تم استغلاله في التطبيقات الطبية، حيث أُجريت أولى التجارب لتصوير الهياكل العظمية باستخدام الأشعة السينية. شكّل هذا الاكتشاف ثورة في التشخيص الطبي، مما فتح آفاقًا جديدة في العلوم والصحة

في السنوات الخمس عشرة التي تلت اكتشاف رونتجن، بقيت طبيعة الأشعة السينية غير واضحة، إلى أن تمكن العالم ماكس فون لاوي (Max Von Laue) عام 1912 من إثبات أن الأشعة السينية هي نوع من الموجات الكهرومغناطيسية. بعدها تمكن كل من كنيبنج (Knipping) وفريدريك (Friedrich) بعد عدة محاولات من إجراء تجربة تاريخية لتوضيح تفاعل الأشعة السينية مع المواد البلورية: استخدموا بلورة كبريتات النحاس كهدف لتسليط الأشعة السينية حيث لاحظوا ظهور بقع منتشرة حول النقطة المركزية على اللوح الحساس الذي سقطت عليه الأشعة نتيجة تشتت الإشعاع بواسطة المستويات الذرية للبلورة، وقد توصلوا بشكل قاطع إلى استنتاج أن الإشعاع يتكون من موجات وأن البلورة تتركب من ذرات مرتبة في شبيكة فضائية.

➢ **توليد الأشعة السينية** يتم باستخدام جهاز يتكون من أنبوبة مفرغة من الهواء تحتوي على مهبط ومصعد (الهدف) الشكل 4-1 وفق المراحل التالية.

✔ **تسخين المهبط (Cathode):**

يسخن المهبط باستخدام فتيلة كهربائية، مما يؤدي إلى انبعاث الإلكترونات منه بفعل ظاهرة الانبعاث الحراري الإلكتروني . ثم تسرع هذه الإلكترونات بواسطة فرق جهد عالٍ مطبق بين المهبط والمصعد، ويتراوح هذا الجهد عادة بين $1kV$ و $50kV$ مما يكسب الإلكترونات سرعات وطاقة حركية مرتفعة.

✔ **اصطدام الإلكترونات بالمصعد :**

عندما تصطدم الإلكترونات المسرعة بالمصعد، يصنع المصعد عادة من التنغستن (W) بسبب ارتفاع عدده الذري

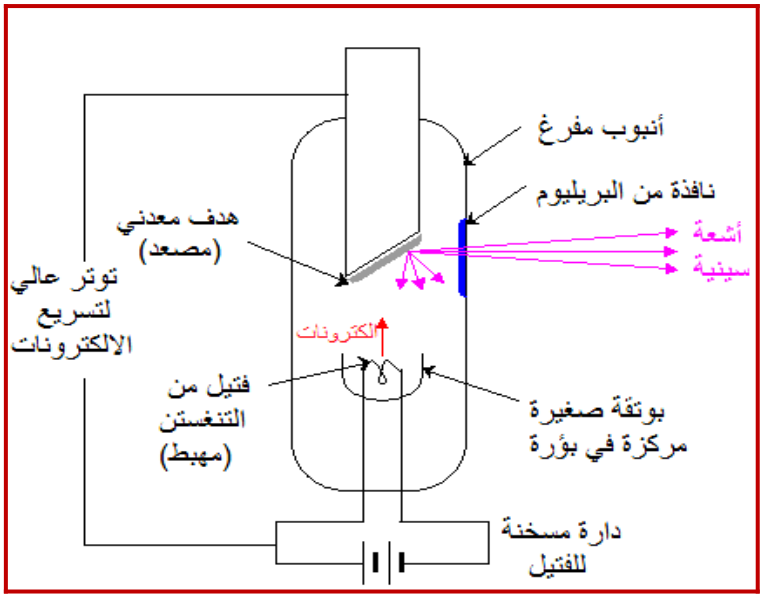
($Z=74$) ودرجة انصهاره المرتفعة ($3422^{\circ}C$)، مما يزيد من مردود إنتاج الأشعة السينية وقدرته على تحمل درجات الحرارة العالية. ، تفقد جزءاً كبيراً من طاقتها الحركية. وتتحول معظم هذه الطاقة (حوالي 99%) إلى حرارة نتيجة التصادمات المتعددة داخل المادة الهدف، بينما يتحول جزء صغير منها (حوالي 1%) إلى أشعة سينية (X-rays). وتنشأ هذه الأشعة نتيجة تباطؤ الإلكترونات السريع داخل المجال الكهربائي لأنوية ذرات الهدف (إشعاع الفرملة) أو نتيجة انتقالات إلكترونية بين المستويات الذرية (الأشعة السينية المميزة).

✔ **خروج الأشعة السينية:**

تخرج الأشعة السينية المتولدة عبر نافذة خاصة في أنبوب الأشعة السينية، تكون عادةً مغطاة بمادة ذات امتصاص منخفض للأشعة السينية مثل **البيريليوم (Be)**، للسماح بمرور أكبر قدر ممكن من الإشعاع المتولد.

✔ **تبريد المصعد:**

بسبب الكمية الكبيرة من الحرارة المتولدة أثناء اصطدام الإلكترونات بالمصعد، يجب أن يصنع المصعد من مادة ذات درجة انصهار مرتفعة ومقاومة حرارية عالية. كما يزود غالبا بنظام تبريد مناسب، وقد يصمم بكتلة كبيرة أو بشكل دوار في الأجهزة الحديثة للمساعدة على تبديد الحرارة بفعالية، مما يطيل عمر الأنبوب ويحافظ على كفاءته التشغيلية.



الشكل 4-1 صورة ومخطط توضيحي لأنبوبة توليد الأشعة السينية

تتولد الأشعة السينية نتيجة اصطدام حزمة من الإلكترونات المسرعة بمصعد معدني (الهدف). وعند حدوث هذا الاصطدام تتحول الطاقة الحركية للإلكترونات إلى حرارة وإشعاع كهرومغناطيسي، وينتج نوعان رئيسيان من الأشعة السينية:

1- طيف الفرملة (Bremsstrahlung) أو الطيف المستمر

ينشأ هذا الطيف نتيجة تباطؤ الإلكترونات السريعة وانحرافها عند مرورها بالقرب من أنوية ذرات المادة المكوِّنة للمصعد. وعندما تفقد هذه الإلكترونات جزءاً من طاقتها الحركية، تنبعث فوتونات أشعة سينية ذات طاقات وأطوال موجية مختلفة، مما يؤدي إلى ظهور **طيف مستمر** يعرف بطيف الفرملة.

ويتميز هذا الطيف بوجود حد أدنى لطول الموجة λ_{min}، يقابل الحالة التي تفقد فيها الإلكترونات كامل طاقتها الحركية في تصادم واحد.

2- الأشعة السينية المميزة (Characteristic X-rays)

تنتج الأشعة السينية المميزة عندما تمتلك الإلكترونات الساقطة طاقة كافية لاقتلاع إلكترون من أحد الأغلفة الداخلية للذرة (مثل الغلاف K أو L) في المادة الهدف. ويؤدي ذلك إلى حدوث فجوة إلكترونية في هذا الغلاف، فتنتقل إلكترونات من مستويات طاقة أعلى لملء هذه الفجوة.

وخلال هذا الانتقال ينبعث فوتون أشعة سينية طاقته تساوي الفرق بين مستويي الطاقة: $E=E_i-E_f$ ، وتتميز هذه الأشعة بأطوال موجية محددة وثابتة تعتمد على نوع العنصر المكوّن للمصعد، لذلك تسمى الأشعة السينية المميزة.

ومن أشهر المواد المستخدمة كأهداف في أنابيب الأشعة السينية: النحاس (Cu) ، الموليبدينوم (Mo) ، الكوبالت (Co)، الحديد (Fe)، الكروم (Cr) .وتختلف خطوط الأشعة المميزة الناتجة من عنصر إلى آخر تبعاً لتركيبه الإلكتروني وعدده الذري.

3- الطول الموجي للأشعة السينية المميزة

تمثل الأشعة السينية المميزة طيفاً خطياً يتكون من مجموعة من الخطوط المنفصلة، حيث يقابل كل خط انتقال إلكترون من مستوى طاقة أعلى إلى مستوى طاقة أدنى داخل الذرة. وتنتج هذه الخطوط عندما تُنتزع إلكترونات من الأغلفة الداخلية للذرة بفعل قذفها بإلكترونات عالية الطاقة، ثم تنتقل إلكترونات من الأغلفة الخارجية لملء الفجوات المتكونة. فعندما تنتقل الإلكترونات إلى الطبقة K (المستوى $n=1$) تتشكل سلسلة K من الأشعة السينية المميزة. ويعتمد اسم الخط على الطبقة الذي انتقل منه الإلكترون:

- الانتقال من الطبقة L إلى K يعطي الخط: K_α
- الانتقال من الطبقة M إلى K يعطي الخط: K_β

ونظراً لوجود مستويات فرعية دقيقة داخل الطبقات الإلكترونية، فإن الخط K_α ينقسم غالباً إلى خطين متقاربين هما: $K_{\alpha1}$ و $K_{\alpha2}$ ويمتلك كل منهما طولاً موجياً مختلفاً قليلاً نتيجة الانقسام الدقيق لمستويات الطاقة.

مثال: النحاس (Cu)

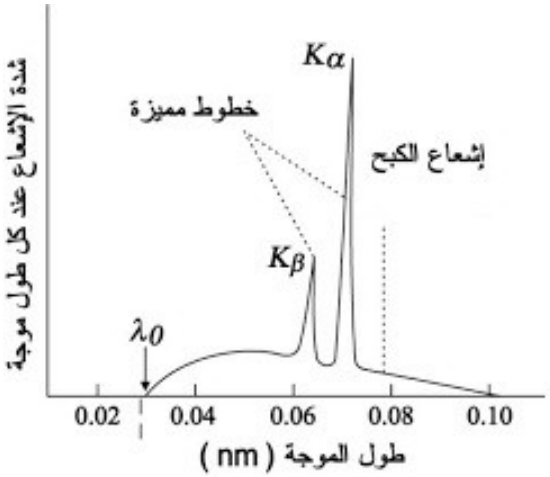
تستعمل أشعة النحاس على نطاق واسع في انعراج الأشعة السينية (XRD)، وتبلغ أطوالها الموجية:

$$K_{\alpha 1}=1.54056\,\text{Å} \quad K_{\alpha 2}=1.54439\,\text{Å} \quad K_{\beta}=1.39222\,\text{Å}$$

مثال: الموليبدينوم (Mo)

$$K_{\alpha 1}=0.70930\,\text{Å} \quad K_{\alpha 2}=0.71359\,\text{Å} \quad K_{\beta}=0.63229\,\text{Å}$$

ويظهر الطيف الناتج عادةً على شكل طيف مستمر (طيف الفرملة الشكل4-2) تتراكب عليه قمم حادة تمثل الخطوط المميزة K_{α} و K_{β}. وتتميز هذه الخطوط بشدات وأطوال موجية ثابتة تعتمد فقط على نوع العنصر المستخدم كمادة هدف في أنبوب الأشعة السينية.



الشكل4-2 : طيف الأشعة السينية الناتج عن أنبوب الأشعة السينية، ويظهر الطيف المستمر (إشعاع الفرملة) متراكباً مع الخطوط المميزة K_{α} و K_{β}.

يمكن حساب أقصر طول موجي للأشعة السينية المستمرة باستعمال علاقة أينشتاين–بلانك. فعندما تصطدم الإلكترونات المسرعة بالهدف المعدني داخل أنبوب الأشعة السينية، تتحول طاقتها الحركية إلى إشعاع كهرومغناطيسي.في الحالة القصوى، إذا تحولت الطاقة الحركية للإلكترون بالكامل إلى فوتون واحد، فإن طاقة هذا الفوتون تكون مساوية للطاقة الكهربائية المكتسبة من فرق الجهد المطبق بين المهبط (Cathode) والمصعد (Anode)، أي:

$$E_{max}=eV_{max}=h\upsilon_{swl}=\frac{hc}{\lambda_{swl}} \qquad \textbf{2-4}$$

ومنها نحصل على:

$$\lambda_{swl}=\frac{hc}{eV_{max}}=\frac{12400}{V_{max}(Volt)} \qquad 3-4$$

حيث:

(e) : شحنة الإلكترون، (V_{max}) : فرق الجهد المطبق على الأنبوب،(h) : ثابت بلانك،(υ_{swl}) : تردد الإشعاع الحدي، (c) : سرعة الضوء،(λ_{swl}) : أقصر طول موجي للأشعة السينية.

وتعرف هذه العلاقة بقانون دوين–هانت (Duane–Hunt Law)، الذي يربط بين الجهد المطبق على أنبوب الأشعة السينية والطول الموجي الحدي للطيف المستمر.

عندما يتعرض بلور لأشعة سينية أحادية اللون، أي ذات طول موجي واحد أو ضمن مجال ضيق جداً من الأطوال الموجية، فإن الذرات الموجودة داخل البلورة تعمل كمراكز لتبعثر هذه الأشعة.

ونتيجة لذلك تنبعث موجات ثانوية في جميع الاتجاهات. وفي بعض الاتجاهات تتراكب هذه الموجات تراكباً بنائياً، فتزداد شدتها بشكل كبير، بينما يحدث في اتجاهات أخرى تراكب هدمي يؤدي إلى ضعف الشدة أو انعدامها. وتعرف هذه الظاهرة بظاهرة انعراج الأشعة السينية (X-ray Diffraction)، وهي الأساس في دراسة البنية البلورية للمواد.

4-4-2 الإلكترونات

يتصرف الإلكترون بوصفه جسيما له كتلة ترافقه موجة طولها λ ، في هذه الحالة، الطول الموجي المنبعث من إلكترون ذي كمية حركة $\vec{P}$ وطاقة E يُعطى بواسطة: $\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{\sqrt{2m_eE_e}}$ ومنه نجد

$$\lambda=\frac{12,3}{\sqrt{E_e}(eV)}\text{A} \qquad 4-4$$

إن ظاهرة الانعراج الإلكتروني هي في الأساس إثبات لوجود موجات ترافق الإلكترونات بموجب نظرية ديبرولي و لكن ما يميز الإلكترون عن الفوتون أو النيوترون أنها مشحونة، فإنها تتفاعل مع المادة وتخترق بشكل محدود داخل البلورة. لذلك، تُستخدم بشكل رئيسي لدراسة الأسطح والطبقات الرقيقة للمواد الصلبة. بعبارة أخرى، نظرًا لأن حزم الإلكترونات تتداخل بشكل كبير مع المادة، فإنه من المستحيل تحليل البلورة بعمق باستخدام هذه التقنية، و ينحصر استخدامها في دراسة سطوح البلورات و دراسة الأغشية الرقيقة.

4-4-3 النترونات

يُعد انعراج النيوترونات البطيئة أيضًا طريقة مثيرة جدًا للاهتمام من هذا المنظور، لكنه يتطلب تجهيزات تجريبية أكثر تعقيدًا وثقلاً. انطلاقًا من علاقة لويس دي بروي $\lambda=\frac{h}{p}$، حيث λ هو الطول الموجي المنبعث من جسيم ذي كمية

حركة P، ومع العلم أن طاقة النيوترون ذي الكتلة M_n هي: $E=\frac{P^2}{2M_n}$ و منه نكتب طول الموجة λ المرافقة للنترون بالعلاقة :

$$\lambda=\frac{0,28}{\sqrt{E\,eV}} \qquad 5-4$$

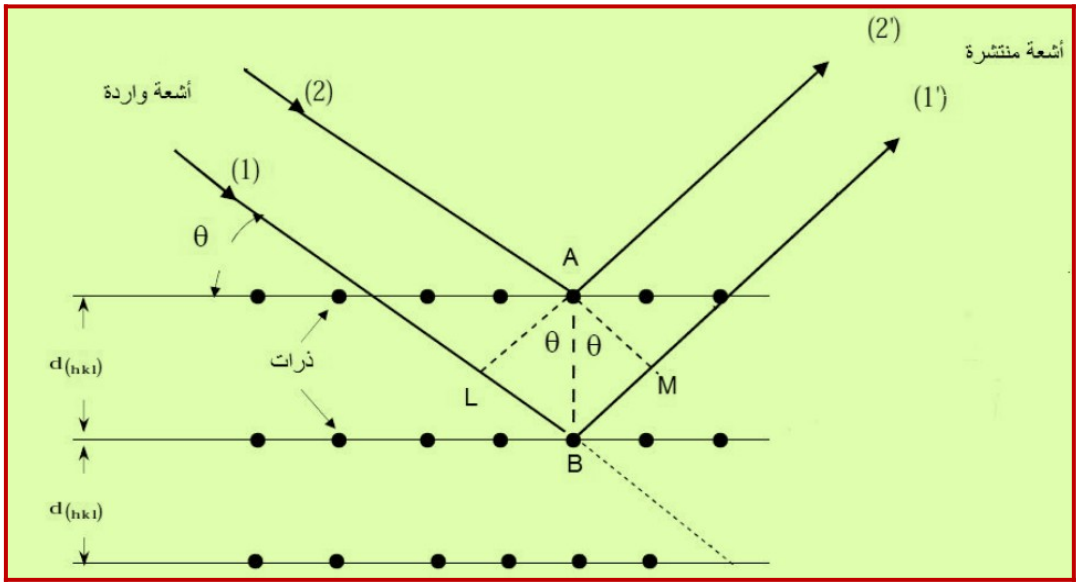
نُشير أيضًا إلى أن النيوترونات متعادلة كهربائيا، و لكنها تكتسب عزما مغناطيسيا، تتفاعل مع العزوم المغناطيسية لذرات المادة الصلبة، ولهذا السبب تستخدم لدراسة المواد المغناطيسية. أما في حالة المواد البارامغناطيسية، فإن النيوترون يتفاعل مع أنوية ذرات المادة الصلبة.

5-4 قانون براغ

تمكن الفيزيائيان ويليام هنري براج (William H. Bragg) وابنه ويليام لورنس براج (William L. Bragg) سنة 1913 من وضع الشروط اللازمة لحدوث انعراج الأشعة السينية بواسطة البلورات، كما اشتقا علاقة رياضية تسمح بتحديد المسافات البينية بين المستويات البلورية.

تعتمد فكرة قانون براج على اعتبار البلورة مجموعة من المستويات الذرية المتوازية (hkl)، تفصل بينها مسافة بينية مقدارها d_{hkl}. وعندما تسقط حزمة من الأشعة السينية أحادية الطول الموجي على هذه المستويات بزاوية معينة، فإن جزءاً من الإشعاع ينعكس من كل مستوى ذري. ويحدث تداخل بناء بين الأشعة المنعكسة فقط عندما يكون فرق المسير بينها مساويا لعدد صحيح من الأطوال الموجية. و نكتب شرط التداخل البناء هو $\delta=n\lambda$ حيث:

- δ : فرق المسير بين الشعاعين المنعكسين (1) و (2).
- n : رتبة الانعراج$(n=1,2,3,\ldots)$.
- λ : الطول الموجي للأشعة السينية.



الشكل(4–3): الشكل الهندسي لقانون براج الذي .

الفرق في المسير بين الشعاعين (1) و (2) هو: $\delta = LB + BM$

بما أن الدرات داخل البلورة تصطف في مجاميع متميزة من المستويات المتوازية (hkl) و التي تبعد عن بعضها بمسافة d_{hkl} $d_{hkl} = AB$

من المثلث ALB لدينا ، $LB = d_{hkl} \sin\theta$

من المثلث AMB لدينا ، $BM = d_{hkl} \sin\theta$

بالتعويض نجد (قانون براغ):

$$\delta = LB + BM = 2 d_{hkl} \sin\theta = n\lambda \qquad 6\text{–}4$$

تعرف العلاقة السابقة بقانون براغ وتصف الوضع الزاوي للشعاع بدلالة λ و d_{hkl}.

النتيجة المهمة المباشرة لمعادلة براغ هي أن تكون المتباينة $\lambda \leq 2d$ شرطا أساسيا لحدوث انعكاسات براغ وهذا ما يفسر عدم ملائمة الضوء العادي لدراسة التركيب البلوري.

6–4 الطرق التجريبية لانحراف الأشعة السينية

من المعروف أن هناك عدة طرق تجريبية لدراسة وتسجيل أنماط انعراج الأشعة السينية، ويعتمد اختيار الطريقة المناسبة على طبيعة العينة المدروسة، سواء كانت بلورة أحادية أو مسحوق بلوري، كما يعتمد على نوع الأشعة السينية المستخدمة (أحادية الطول الموجي أو متعددة الأطوال الموجية) وعلى نوع المعلومات المراد الحصول عليها من التجربة.

4-6-1 انعراج الأشعة السينية بواسطة البلورات الأحادية

يقصد بالبلورة الأحادية تلك البلورة التي تمتد فيها الشبكة البلورية بانتظام في جميع الاتجاهات، بحيث تشكل الذرات أو الأيونات ترتيباً دورياً مستمراً داخل كامل البلورة دون وجود حدود حبيبية داخلية.

وتعد دراسة البلورات الأحادية من أهم الوسائل المستخدمة لتحديد البنية البلورية للمواد بدقة عالية، حيث تسمح بتعيين أبعاد خلية الوحدة، وتحديد مواقع الذرات داخلها، واستخراج عناصر التناظر البلوري المختلفة.

ويتم تسجيل أنماط الانعراج باستخدام كواشف مناسبة مثل الأفلام الفوتوغرافية أو الكواشف الإلكترونية الحديثة، ثم تُحلل البيانات الناتجة للحصول على المعلومات البلورية المطلوبة.

ا- طريقة لاوي (Laue Method)

تعد طريقة **لاوي** (**Laue**) أولى الطرق المستخدمة في دراسة انعراج الأشعة السينية بواسطة البلورات الأحادية، وقد استُخدمت لإثبات الطبيعة الموجية للأشعة السينية وكذلك لإظهار الترتيب الدوري للذرات داخل البلورات.وتستعمل هذه الطريقة عادة مع البلورات الأحادية المعروفة التركيب والتي تكون أبعادها صغيرة نسبياً (أقل من حوالي 1 mm).

تعتمد طريقة لاوي على تسليط حزمة من الأشعة السينية متعددة الأطوال الموجية (الطيف المستمر) على بلورة أحادية ثابتة الاتجاه. وبما أن البلورة تحتوي على عدد كبير من المستويات البلورية ذات المسافات البينية المختلفة، فإن بعض الأطوال الموجية الموجودة ضمن الحزمة الساقطة تحقق شرط براج: $n\lambda = 2d_{hkl}\sin\theta$ فتحدث عملية الانعراج في اتجاهات مختلفة، وينتج عن ذلك نمط مميز من البقع الانعراجية على اللوح أو الكاشف الموضوع خلف البلورة أو أمامها الشكل(4-4).

خطوات التجربة

1. تثبت البلورة الأحادية في وضع ثابت.
2. تسلط عليها حزمة من الأشعة السينية متعددة الأطوال الموجية.
3. توضع صفيحة فوتوغرافية أو كاشف إلكتروني لتسجيل الأشعة المحيدة.
4. تظهر بقع انعراج مرتبة تعكس تناظر البلورة واتجاهاتها البلورية.

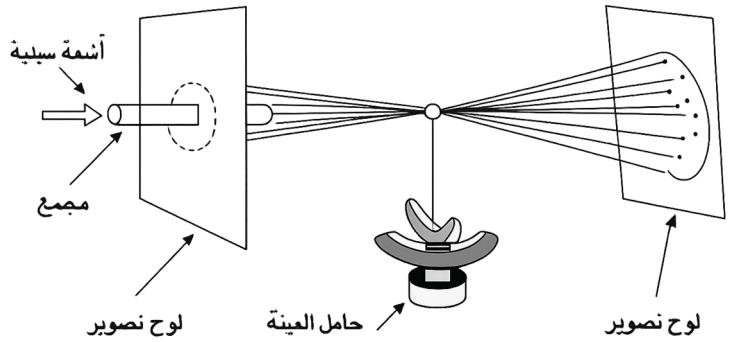
مميزات طريقة لاوي

- تحديد اتجاه البلورات الأحادية.

- دراسة عناصر التناظر البلوري.
- الكشف عن العيوب البلورية والتشوهات.
- فحص جودة البلورات قبل إجراء الدراسات البنيوية الدقيقة.

عيوب الطريقة

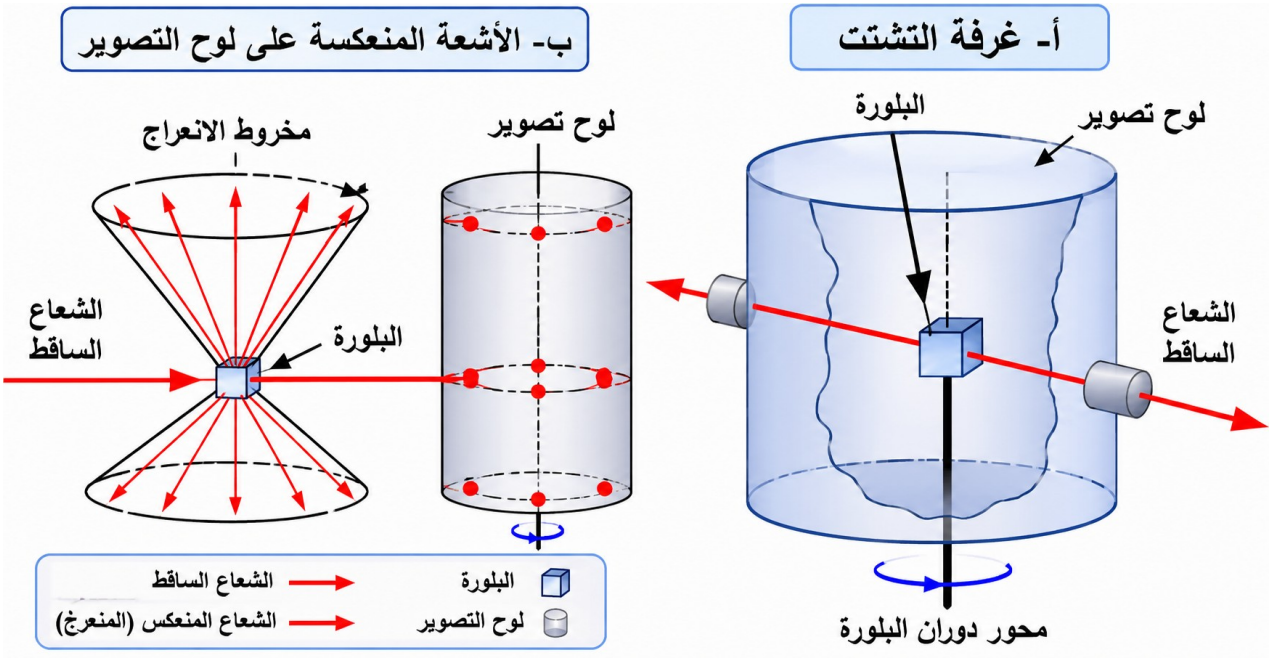
- لا تسمح بتحديد البنية البلورية بدقة كبيرة مقارنة بالطرق الحديثة.
- يتطلب تحليل الأنماط الانعراجية خبرة جيدة.
- تكون أقل ملاءمة لتحديد مواقع الذرات بدقة مقارنة بطريقة البلورة الدوارة أو مطيافية البلورات الحديثة.



الشكل(4-4): المبدأ التجريبي لطريقة لاوي

ب- طريقة البلورة الدوارة (Rotating Crystal Method)

في طريقة البلورة الدوارة تعرَّض البلورة الأحادية لحزمة من الأشعة السينية أحادية الطول الموجي، بينما تُدار البلورة حول محور ثابت عمودي على اتجاه الحزمة الساقطة. وتكون البلورة عادةً على شكل أسطوانة رفيعة تُثبت بحيث يتطابق محور دورانها مع المحور البلوري المراد دراسته، كما هو موضح في الشكل (4-5).



الشكل(4–5): آلة تصوير بطريقة البلورة الدوارة .

يوضح الشكل (4–5) مخطط مبسط لتجربة البلورة الدوارة، حيث يُستخدم فيلم فوتوغرافي أسطواني الشكل يحيط بالبلورة لتسجيل البقع الانعراجية الناتجة. وتُثبت البلورة على محور دوران خاص، وتكون أبعاد البلورات المستخدمة عادة أقل من مليمتر واحد.

عند سقوط حزمة من الأشعة السينية أحادية الطول الموجي على البلورة أثناء دورانها حول محور ثابت، تتحقق شروط قانون براج تباعاً لمجموعات مختلفة من المستويات البلورية. ونتيجة لذلك تنعكس الأشعة في اتجاهات متعددة، فتُسجل على الفيلم الفوتوغرافي على هيئة بقع أو خطوط انعراجية مميزة.

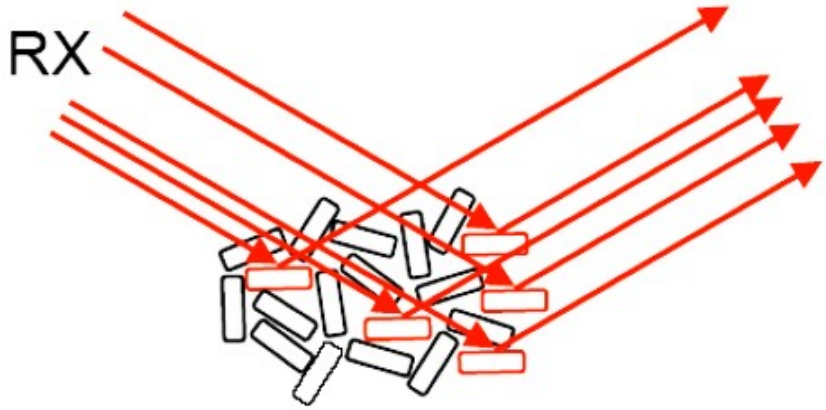
وتسمح هذه الطريقة بتحديد ثوابت الشبكة البلورية وأبعاد خلية الوحدة، كما تُستخدم في دراسة التناظر البلوري وتعيين اتجاهات المستويات البلورية المختلفة. وقد لعبت دوراً مهماً في تطوير علم البلورات قبل ظهور تقنيات انعراج الأشعة السينية الحديثة المعتمدة على الكواشف الإلكترونية والحواسيب.

ومن أهم مزايا طريقة البلورة الدوارة أنها تتيح الحصول على عدد كبير من الانعكاسات الانعراجية باستخدام طول موجي واحد، مما يسهل تحليل البنية البلورية للمواد أحادية البلورة بدقة جيدة. أما من عيوبها فتطلبها بلورات أحادية ذات جودة عالية، إضافة إلى أن تحليل النتائج يكون أكثر تعقيداً مقارنة ببعض التقنيات الحديثة.

ح- انعراج الأشعة السينية على المساحيق (Powder Diffraction)

يعرف المسحوق في علم البلورات بأنه مادة تتكون من عدد كبير من البلورات الدقيقة جداً (متعددة البلورات)، تكون حبيباتها موزعة باتجاهات عشوائية مختلفة. ونتيجة لهذا التوزيع العشوائي، توجد دائماً مجموعة من البلورات التي تحقق

شرط براج بالنسبة لكل مجموعة من المستويات البلورية (*hkl*)، كما هو موضح في الشكل (4-6).



الشكل (4-6): التوجه العشوائي لحبيبات المسحوق.

وعندما تسقط حزمة من الأشعة السينية أحادية الطول الموجي على عينة مسحوقية، فإن البلورات التي تكون مستوياتها البلورية في الوضعية المناسبة تحقق شرط براج، فتقوم بانعراج الأشعة السينية في اتجاهات محددة. ونظراً للتوزيع العشوائي لاتجاهات الحبيبات، تتشكل مخاريط انعراج حول اتجاه الشعاع الساقط، ويُستفاد من هذه الظاهرة في دراسة البنية البلورية للمواد.

وفي كثير من الحالات لا تتوافر بلورات أحادية مناسبة للتحليل البلوري، بينما يكون الحصول على مسحوق بلوري أمرا أكثر سهولة. ولهذا تطحن المادة حتى تصبح حبيباتها صغيرة جدا وذات اتجاهات عشوائية، مما يجعل تقنية انعراج المساحيق من أكثر تقنيات انعراج الأشعة السينية استعمالا في التعرف على الأطوار البلورية وتحديد ثوابت الشبكة البلورية.وتوجد عدة أجهزة لتسجيل أنماط انعراج المساحيق، من أشهرها:

- كاميرا ديباي–شيرر (Debye–Scherrer Camera).
- مقياس الانعراج بالأشعة السينية (Diffractometer).

وقد كانت كاميرا ديباي–شيرر من أوائل الأجهزة المستخدمة لدراسة انعراج المساحيق، في حين أصبحت أجهزة الانعراج الحديثة المعتمدة على الكواشف الإلكترونية والحاسوب هي الأكثر انتشارا في الوقت الحاضر بسبب دقتها العالية وسهولة معالجة البيانات الناتجة عنها.

طريقة ديباي–شيرر (Debye–Scherrer Method)

اكتشف ديباي وشيرر (Debye–Scherrer) عام 1916 طريقة تحليل المواد البلورية الموجودة على شكل مسحوق باستعمال الأشعة السينية أحادية الطول الموجي. وقد أصبحت هذه الطريقة من أهم الطرق المستخدمة في دراسة البنية البلورية للمواد متعددة البلورات، وتعرف أيضاً باسم طريقة انعراج المساحيق.

تعتمد الطريقة على تركيب تجريبي بسيط، حيث توضع العينة المسحوقة في مركز كاميرا أسطوانية تعرف باسم كاميرا ديباي–شيرر، ثم تُسلط عليها حزمة ضيقة من الأشعة السينية أحادية الطول الموجي. ونظراً للتوزيع العشوائي لحبيبات المسحوق، فإن عدداً كبيراً من المستويات البلورية (hkl) يحقق شرط براغ، فتتشكل مخاريط انعراج حول اتجاه الشعاع الساقط.

وتتقاطع هذه المخاريط مع الفيلم الفوتوغرافي الأسطواني المحيط بالعينة على هيئة خطوط أو حلقات انعراجية مميزة، كما هو موضح في الشكل (4–7). وتمثل كل حلقة انعكاسا ناتجا عن مجموعة معينة من المستويات البلورية.

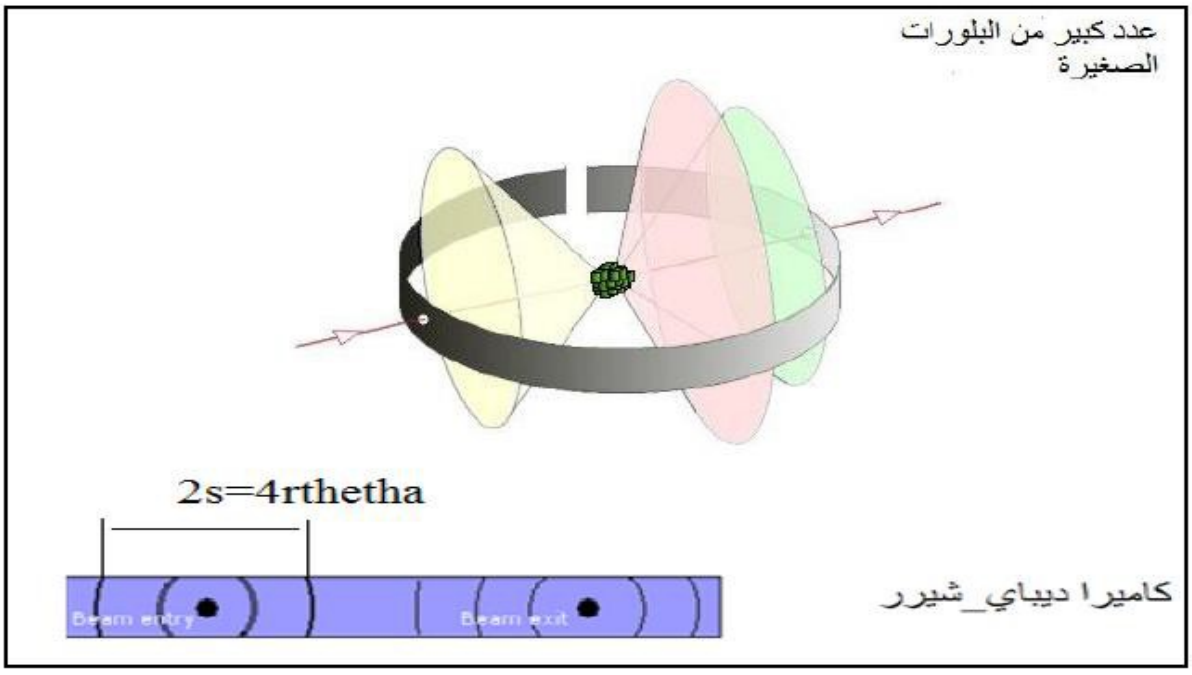
إذا كان نصف قطر الفيلم الأسطواني هو R، وكانت المسافة بين خطي انعراج متناظرين على الفيلم هي S، فإن زاوية الانعراج تحسب من العلاقة:

$$2\theta=\frac{S}{R} \qquad \textbf{7–4}$$

حيث:

- 2θ : زاوية الانعراج.
- S : المسافة المقاسة بين خطي الانعراج على الفيلم.
- R : نصف قطر كاميرا ديباي–شيرر.

وبمعرفة الطول الموجي للأشعة السينية λ، يمكن تطبيق قانون براغ لحساب المسافات البينية d بين المستويات البلورية، ومن ثم تحديد البنية البلورية وثوابت الشبكة للمادة المدروسة.



الشكل (4-7): مخطط توضيحي لكاميرا ديباي–شيرر . .

✔ **جهاز انعراج المساحيق الآلي (X-ray Diffractometer)**

تعد طريقة انعراج الأشعة السينية الآلي (XRD) من أكثر تقنيات الانعراج تطورا واستعمالا في الوقت الحاضر، حيث يتم تسجيل نمط الانعراج بواسطة كواشف إلكترونية وأنظمة حاسوبية متطورة بدلا من استعمال الأفلام الفوتوغرافية التقليدية.

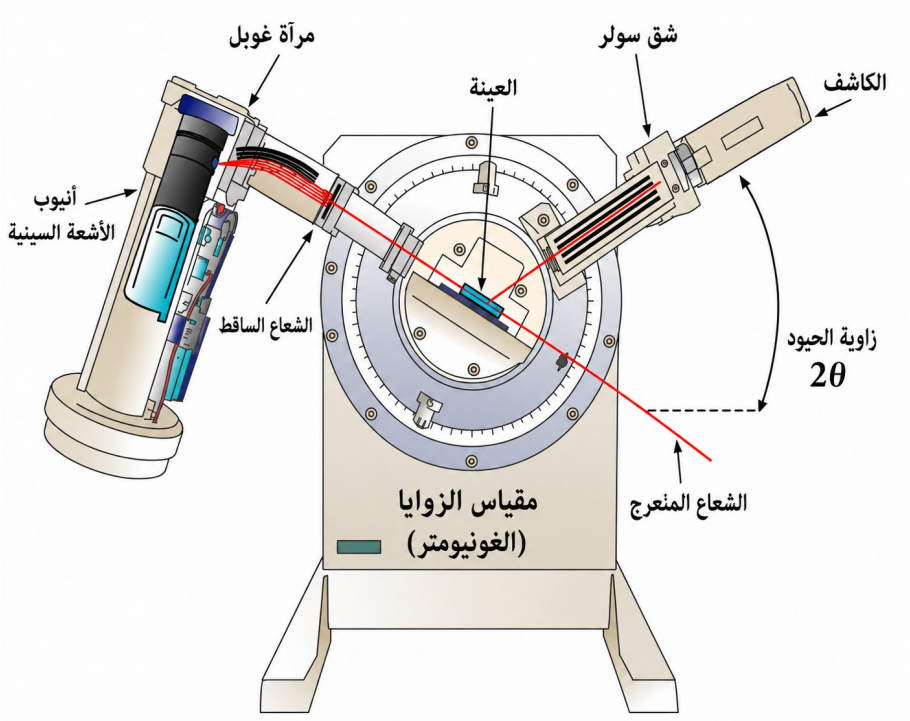
تعتمد هذه الطريقة على استخدام أشعة سينية أحادية الطول الموجي λ، مع تغيير زاوية السقوط θ بصورة منتظمة أثناء عملية القياس. لذلك فإن الشرط الأساسي لتطبيق هذه التقنية هو توفر مصدر لأشعة سينية أحادية اللون.

وللحصول على إشعاع أحادي الطول الموجي، تستخدم مرشحات أو بلورات أحادية تعمل كمحللات طيفية، حيث ستغل ظاهرة الانعراج وفق قانون براج لعزل أحد الخطوط المميزة للأشعة السينية، وغالا خط K_α الأكثر شدة بين الخطوط المنبعثة من المادة الهدف في أنبوب الأشعة السينية.

توضع البلورة أو المرشح في مسار الحزمة السينية متعددة الأطوال الموجية الصادرة من أنبوب الأشعة السينية، فتحذف الأطوال الموجية غير المرغوبة، مما يسمح بالحصول على حزمة شبه أحادية اللون مناسبة لقياسات الانعراج الدقيقة.

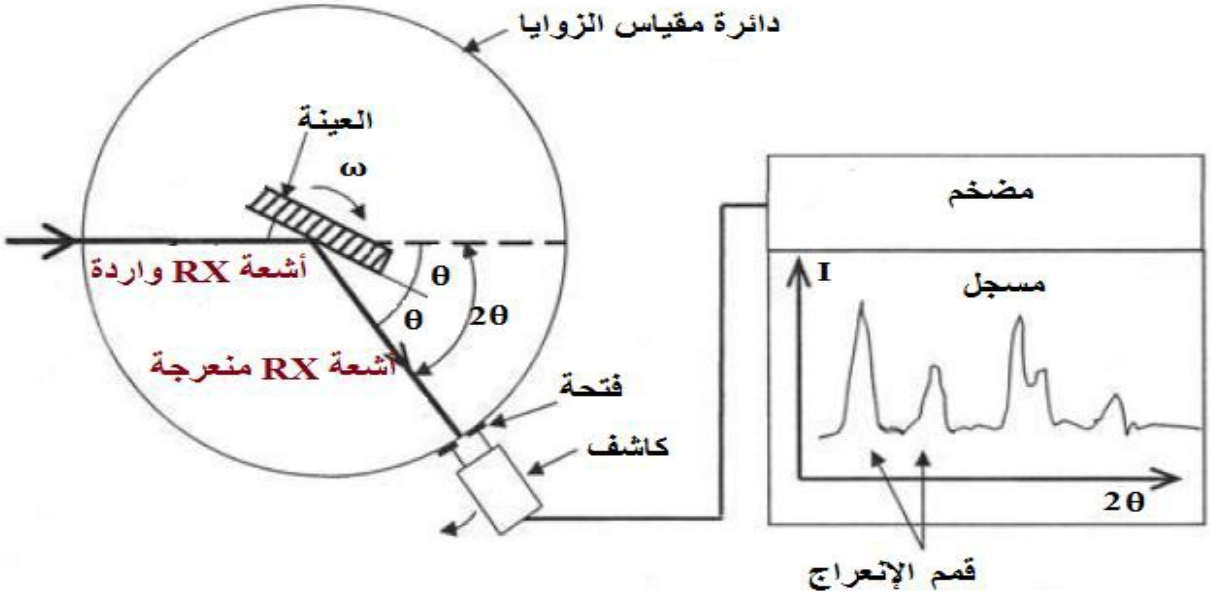
يعمل جهاز انعراج الأشعة السينية الآلي (Diffractometer) وفق المبدأ نفسه الذي تقوم عليه طريقة ديباي–شيرر، إلا أنه يعتمد على كاشف إلكتروني لقياس شدة الأشعة السينية المنعرجة بدقة عالية، بدلاً من استخدام الفيلم الفوتوغرافي.يتكون الجهاز أساسا من (الشكل 4-8):

- أنبوب لإنتاج الأشعة السينية أحادية الطول الموجي.
- حامل للعينة.
- مقياس زوايا (Goniometer).
- كاشف للإشعاع السيني.
- وحدة إلكترونية لتسجيل ومعالجة البيانات.



الشكل4-8 : مخطط توضيحي لجهاز الانعراج الآلي للأشعة السينية

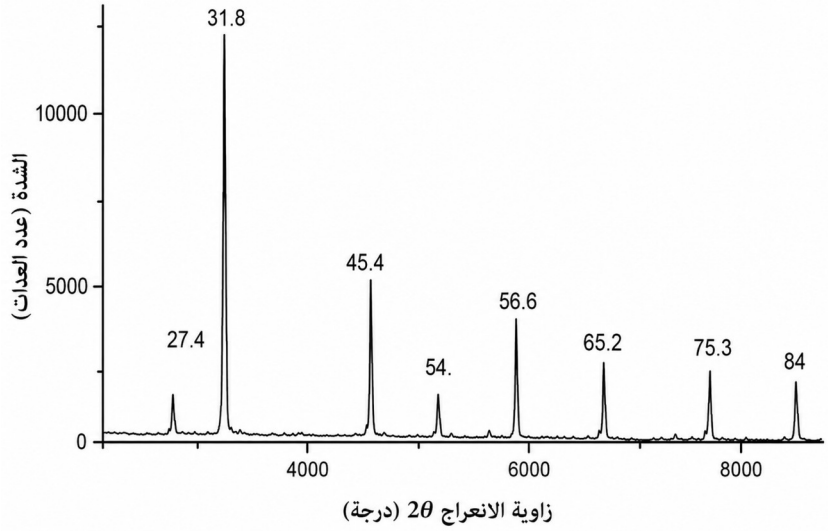
أثناء القياس تثبت العينة في مركز الجهاز وتُعرض لحزمة من الأشعة السينية. ويدار الكاشف حول العينة لقياس شدة الأشعة المنعرجة عند زوايا مختلفة. وفي أغلب أجهزة الانعراج الحديثة تدور العينة بزاوية θ، بينما يدور الكاشف بزاوية 2θ، بحيث يتحقق شرط براج بصورة مستمرة أثناء عملية المسح (الشكل 4-9).



الشكل (4–9): مخطط مبسط لجهاز انعراج الأشعة السينية الآلي يوضح دوران العينة بزاوية θ ودوران الكاشف بزاوية 2θ أثناء تسجيل نمط الانعراج.

وعندما تحقق مجموعة من المستويات البلورية (hkl) شرط براج، يحدث انعراج للأشعة السينية وتُسجل شدة الإشعاع المنعرج بواسطة الكاشف عند الزاوية المناسبة. وتُكرر العملية على مجال واسع من الزوايا للحصول على مخطط الانعراج الكامل.

ويمثل الناتج النهائي منحنى يعرف باسم: مخطط الانعراج وهو عبارة عن تمثيل بياني لشدة الأشعة السينية المنعرجة I بدلالة زاوية الانعراج 2θ: $I=f(2\theta)$ (الشكل 4–10) ، حيث تمثل قمم الانعراج الظاهرة في المخطط انعكاسات المستويات البلورية المختلفة داخل المادة.



(الشكل 4–10):مخطط الانعراج لبلورة ملح الطعام NaCl

ويستخدم هذا المخطط في:

- التعرف على الأطوار البلورية (Phase Identification).
- حساب ثوابت الشبكة البلورية.
- تحديد البنية البلورية.
- تقدير حجم البلورات الدقيقة والإجهادات المجهرية.
- دراسة نسبة التبلور والاتجاهات المفضلة للحبيبات.

4-7- عامل البنية (Structure Factor)

يعد عامل البنية (Structure Factor) من المفاهيم الأساسية في علم البلورات، ويستخدم لوصف كيفية تفاعل الأشعة السينية أو النيوترونات أو الإلكترونات مع المادة البلورية. ويمثل عامل البنية $F(hkl)$ مقدارا مركبا يحدد شدة الأشعة المنعرجة الناتجة عن مجموعة المستويات البلورية ذات مؤشرات ميلر (hkl).وdعطى عامل البنية بالعلاقة:

$$F(hkl)=\sum f_j e^{2\pi i(hxj+kyj+lzj)} \qquad 8-4$$

حيث:

- $F(hkl)$: عامل البنية.
- f_j : عامل التشتت الذري للذرة j، والذي يعتمد على التوزيع الإلكتروني حول الذرة.
- (x_j, y_j, z_j) : الإحداثيات النسبية للذرة j داخل الخلية البلورية.
- h,k,l : مؤشرات ميلر للمستوى البلوري.
- $e^{2\pi i(hx_j+ky_j+lz_j)}$: عامل الطور المرتبط بموقع الذرة داخل الخلية.

وترتبط شدة الانعراج I_{hkl} بعامل البنية بالعلاقة:

$$I_{diff} \propto \left|F_{hkl}^2\right| \qquad 9-4$$

أي أن شدة القمة المنعرجة تتناسب طردياً مع مربع القيمة المطلقة لعامل البنية.

وتستخدم هذه العلاقة لتحديد الانعكاسات المسموح بها والمنعدمة ، كما تعد أساسا في تفسير أنماط انعراج الأشعة السينية وتحديد البنية البلورية للمواد.

ملاحظات

$$e^{i\theta}=\cos(\theta)+i\sin(\theta)\text{-}1$$

$$e^{-2i\pi}=e^{2i\pi}=\cos(2\pi)\pm i\sin(2\pi)=1+0=e^{-i\pi(\text{زوجي عدد})}=e^{i\pi(\text{زوجي عدد})}\text{ -2}$$

$$e^{-i\pi}=e^{i\pi}=\cos(\pi)\pm i\sin(\pi)=1+0=e^{-i\pi(\text{فردي عدد})}=e^{i\pi(\text{فردي عدد})}\text{ 3}$$

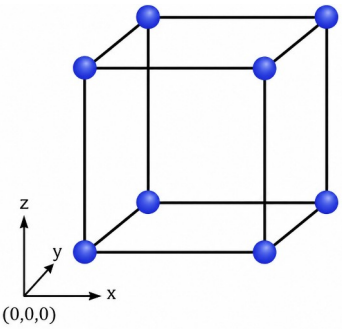
حساب عامل البنية في بعض الحالات الخاصة

أ- الشبكة المكعبة البسيطة (Simple Cubic, SC)

في الشبكة المكعبة البسيطة تكون جميع الذرات متموضعة عند رؤوس المكعب فقط، وتحتوي الخلية الأولية على ذرة واحدة مكافئة. لذلك فإن القاعدة البلورية تتكون من ذرة واحدة تقع عند مبدا الإحداثيات.

1- عدد ذرات القاعدة: $N=1$

2- إحداثيات الذرة: $(0,0,0)$



الشكل (4-11): الخلية الأولية للشبكة المكعبة البسيطة المستعملة في حساب عامل البنية.

3- التعويض في عبارة عامل البنية:

نعلم أن: $F(hkl)=\sum f_j e^{2\pi i(hx_j+ky_j+lz_j)}$

وبما أن: $N=1$ و وإحداثيات الذرة الوحيدة هي: $x=y=z=0$

فإن: $F(hkl)=\sum f_j e^{2\pi i(h0+k0+l0)}=e^0=1$

نحصل على: $F(hkl)=f$ ومن ثم: $|F(hkl)|^2=f^2\neq 0$

بما أن عامل البنية لا يساوي الصفر لأي قيم لمؤشرات ميلر (hkl)، فإن جميع الانعكاسات البلورية تكون مسموحة:

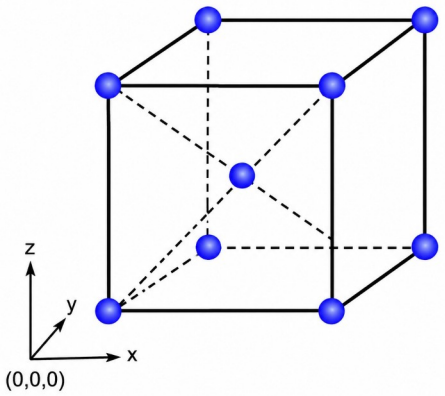
لكل: (hkl) $F(hkl)\neq 0$

ب- الشبكة المكعبة متمركزة الجسم (Body-Centered Cubic, BCC)

في هذه البنية توجد ذرتان متماثلتان داخل الخلية البلورية:

1- عدد ذرات القاعدة $N=2$

2- إحداثيات الذرات $(0,0,0)$ $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$



الشكل (4-12): الخلية الأولية للشبكة المكعبة ممركزة الجسم المستعملة في حساب عامل البنية.

3- التعويض في عبارة عامل البنية

بما أن الذرتين من نفس النوع فإن: $f_1=f_2=f$ *وعليه:*

$$F(hkl)=f\,e^{2\pi i(h0+k0+l0)}+f\,e^{2\pi i(h\frac{1}{2}+k\frac{1}{2}+l\frac{1}{2})}$$

أي: $$F(hkl)=f\left(1+e^{\pi i(h+k+l)}\right)=f\left(1+(-1)^{h+k+l}\right)$$

نميز حالتين:

- *إذا كان* $h+k+l=2n$ *عدد* h *زوجي:* $(-1)^{h+k+l}=1$ *ومن ثم:* $Fhkl=2f$
- *إذا كان* $h+k+l=2n+1$ *عددا فرديا:* $(-1)^{h+k+l}=-1$ *ومن ثم:* $Fhkl=0$

إذن: $\begin{cases} h+k+l=2n & 2f \\ h+k+l=2n+1 & 0 \end{cases}$ ،حيث n عدد صحيح.

شرط ظهور الانعكاسات : تظهر الانعكاسات فقط عندما يكون: $h+k+l=2n$ أي عندما يكون مجموع مؤشرات ميلر زوجيا.

أمثلة على الانعكاسات المسموح بها $(110),(200),(211),(220),(310)$

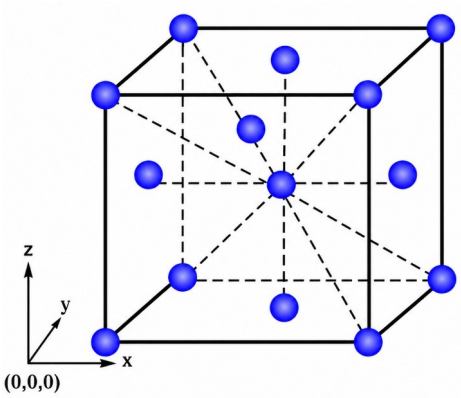
أمثلة على الانعكاسات الممنوعة $(100),(111),(210),(321)$

د- الشبكة المكعبة متمركزة الوجوه (Face-Centered Cubic, FCC)

تحتوي الشبكة المكعبة متمركزة الوجوه على أربع ذرات متماثلة داخل الخلية الأولية.

1- عدد ذرات القاعدة $N=4$

2- إحداثيات الذرات $(0,0,0)$ $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$ $(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})$ $(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})$



الشكل (4-13): الخلية الأولية للشبكة المكعبة ممركزة الوجوه المستعملة في حساب عامل البنية.

3- التعويض في عبارة عامل البنية

بما أن الذرات الأربع من نفس النوع: $f1=f2=f3=f4=f$

فإن: $F(hkl)=f(1+e^{\pi i(k+l)}+e^{\pi i(h+l)}+e^{\pi i(h+k)})=f(1+(-1)^{k+l}+(-1)^{h+l}+(-1)^{h+k})$

شروط ظهور الانعكاسات

بعد دراسة مختلف الحالات نجد أن: $\begin{cases} 4f & hkl \text{ نفس النوع} \\ 0 & hkl \text{ مختلفين} \end{cases}$

أي أن الانعكاسات تظهر فقط عندما تكون مؤشرات ميلر: إذا كانت h,k,l جميعها زوجية أو جميعها فردية

أما إذا كانت بعض المؤشرات زوجية وبعضها فردية فإن الانعكاس ينعدم بسبب التداخل الهدام.

انعكاسات مسموحة ,(111)(400),(331),(222),(311),(220),(200),(111) لأن مؤشرات ميلر في كل حالة إما كلها فردية أو كلها زوجية.

انعكاسات ممنوعة (310),(221),(211),(210),(110),(100) لأن المؤشرات مختلطة (زوجية وفردية).

ملخص شروط الانعكاس للشبكات المكعبة

نوع الشبكة	شرط ظهور الانعكاس
SC	جميع الانعكاسات مسموحة
BCC	h+k+l=2n
FCC	h,k,l كلها زوجية أو كلها فردية

ملاحظة: يعد هذا الجدول أساسياً في تحليل أنماط انعراج الأشعة السينية (XRD)، إذ يسمح بالتعرف مباشرة على نوع الشبكة البلورية من القمم الظاهرة والمختفية في مخطط الانعراج.

تمارين اضافية

التمرين الأول :

الفوتون لديه طاقة $E_{ph} = 50\ KeV$.

أ/ حدد الطول الموجي لهذا الفوتون؟

ب/ تذكر حدود الأشعة السينية واستنتج هل هذا الفوتون هو فوتون أشعة سينية أم لا؟

التمرين الثاني:

اثبت علاقة براغ $2d\sin(\theta)=n\lambda$؟

التمرين الثالث:

احسب ثابت الشبكة لبلورة مكعبة سقطت عليها أشعة سينية ذات طول موجي $\lambda=1,54\,\mathring{A}$ بزاوية $11.1°$ فحققت انعكاسات براغ ذات الرتبة الأولى من المستويات (110)؟

التمرين الرابع :

في تجربة ديباى شرر إذا كان الطول الموجي للأشعة المستخدمة هو $\lambda=1,54\,\mathring{A}$ والمسحوق البلوري المستخدم ذو بنية مكعبة ممركز الجسم وله ثابت شبكة يساوى $a = 3.5\ \mathring{A}$، فعين قرائن ميلر للانعكاس(hkl) الموافق لأكبر زاوية براغ θ_{max}.؟

التمرين الخامس :

1- احسب معامل البنية لشبكة ممركزة الوجوه؟

2- استنتج شرط الانعراج على معاملات ميلر (hkl) لهذه الشبكة؟

الفصل الخامس

عموميات حول الروابط الكيميائية

5-1 عموميات حول الروابط الكيميائية

من وجهة النظر البنيوية، يمكن تصنيف البلورات إلى نوعين رئيسيين: البلورات الجزيئية والبلورات غير الجزيئية. ففي البلورات الجزيئية تكون الوحدات البنائية عبارة عن جزيئات منفردة أو جزيئات كبيرة (جزيئات عملاقة)، تنتظم داخل البلورة وفق ترتيب دوري ثلاثي الأبعاد.أما في البلورات غير الجزيئية، فإن الذرات أو الأيونات لا تشكل جزيئات مستقلة، بل ترتبط فيما بينها بروابط تمتد عبر كامل البنية البلورية. وتختلف طبيعة هذه الروابط باختلاف نوع البلورة وتركيبها الكيميائي.في البلورات الجزيئية البسيطة تكون قوى الترابط بين الجزيئات ضعيفة نسبياً، وغالبا ما تتمثل في قوى فاندير فالس أو الروابط الهيدروجينية. أما في البلورات العملاقة، فيمكن التمييز بين شبكات أحادية البعد أو ثنائية البعد أو ثلاثية الأبعاد، حيث تؤمن الروابط الكيميائية تماسك البنية البلورية بكاملها.

وتكون الروابط المسيطرة في هذه البلورات إما:

- روابط تساهمية (Covalent Bonds).
- روابط أيونية (Ionic Bonds).
- روابط معدنية (Metallic Bonds).

وتتميز هذه الروابط بقوتها الكبيرة مقارنة بالقوى بين الجزيئية، مما يمنح البلورات الناتجة عنها ثباتاً واستقراراً مرتفعين ودرجات انصهار عالية.وبوجه عام، فإن معرفة طبيعة الروابط الكيميائية داخل المادة ضروري لفهم بنيتها البلورية وتفسير خواصها الفيزيائية والكيميائية، وهو ما سيتم تناوله بالتفصيل في الفقرات اللاحقة.

5-2 قوى الربط بين الذرات

عند دراسة قوى الترابط بين الذرات، يمكن اعتبار الذرة مكونة من: نواة موجبة الشحنة تضم البروتونات والنيوترونات، وتتركز فيها معظم كتلة الذرة. إلكترونات سالبة الشحنة تدور حول النواة ضمن مستويات طاقة مختلفة.

وبما أن الشحنات المتشابهة تتنافر والشحنات المختلفة تتجاذب، فإن القوى المتبادلة بين الذرات تنشأ أساسا من التوازن بين قوى التجاذب وقوى التنافر الناتجة عن التفاعل بين النوى والإلكترونات.

فعندما تكون الذرات متباعدة جداً تكون القوى المتبادلة بينها ضعيفة أو مهملة تقريباً. ولكن عند اقترابها من بعضها البعض تظهر قوى جديدة تختلف عن تلك الموجودة في الذرة المنفردة. فعلى سبيل المثال، تبدأ مدارات التكافؤ للذرات المتجاورة بالتداخل تدريجياً، ويزداد هذا التداخل كلما صغرت المسافة الفاصلة بينها.ويؤدي هذا التداخل إلى ظهور

نوعين من القوى:

- **قوى التجاذب** الناتجة عن التفاعل بين النواة الموجبة لإحدى الذرات والإلكترونات السالبة للذرات المجاورة.
- **قوى التنافر** الناتجة عن التفاعل بين النوى الموجبة أو بين السحب الإلكترونية المتقاربة.

وعند مسافات كبيرة نسبياً تسود قوى التجاذب، مما يؤدي إلى اقتراب الذرات من بعضها البعض. أما إذا أصبحت المسافة صغيرة جداً فإن قوى التنافر تزداد بسرعة كبيرة وتصبح هي المسيطرة.

لذلك توجد مسافة معينة بين الذرات تتوازن عندها قوى التجاذب وقوى التنافر، وتسمى مسافة التوازن (Equilibrium Distance). وعند هذه المسافة تكون طاقة النظام في أدنى قيمة ممكنة، فتستقر الذرات في وضع ثابت مكونةً الروابط الكيميائية والبنى البلورية المختلفة.

وتعد دراسة هذا التوازن بين قوى التجاذب والتنافر أساساً لفهم طبيعة الروابط الكيميائية وخواص المواد الصلبة البلورية.

5-3 طاقة الوضع بين ذرتين متجاورتين

تتغير طاقة الوضع $\Phi(r)$ بين ذرتين متجاورتين بدلالة المسافة r الفاصلة بينهما وفق العلاقة العامة:

$$\Phi(r)=-\frac{a}{r^m}+\frac{b}{r^c} \qquad 5-1$$

حيث:

- r : المسافة بين الذرتين.
- a و b : ثوابت تعتمد على طبيعة الذرات والرابطة الكيميائية.
- الحد الأول $(-\frac{a}{r^m})$ يمثل طاقة التجاذب.
- الحد الثاني $(\frac{b}{r^c})$يمثل طاقة التنافر.

يبين الشكل (5-1) اعتماد طاقة الوضع على المسافة بين الذرات. فعندما تكون الذرتان متباعدتين تكون قوى التفاعل بينهما ضعيفة، وتقترب طاقة الوضع من الصفر. ومع اقتراب الذرتين من بعضهما تبدأ قوى التجاذب بالسيطرة، فتتناقص طاقة الوضع تدريجياً حتى تصل إلى قيمة صغرى عند مسافة معينة تسمى: r_0 وتعرف هذه المسافة باسم مسافة التوازن، عند هذه النقطة:

- تكون محصلة القوى المؤثرة معدومة.

- تتحقق حالة الاستقرار للذرتين.
- تتكون الرابطة الكيميائية.

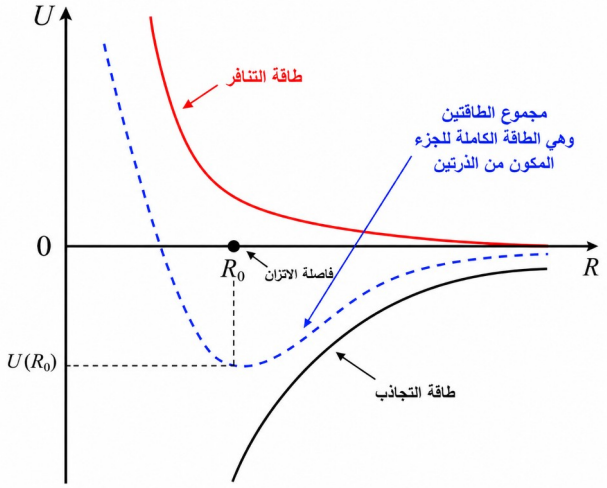
إذا أصبحت المسافة بين الذرتين أكبر من r_0، فإن قوى التجاذب هي المسيطرة وتحاول إعادة الذرتين إلى وضع التوازن.

أما إذا أصبحت المسافة أصغر من r_0، فإن السحب الإلكترونية والنوى تبدأ بالتداخل بشكل كبير، فتظهر قوى تنافر قوية جداً تؤدي إلى إبعاد الذرتين عن بعضهما. وبذلك فإن الموضع المستقر للرابطة يتحقق عند المسافة التي تكون عندها طاقة الوضع أصغر ما يمكن.

تعتمد قيمتا m و c على نوع الرابطة المدروسة، فعلى سبيل المثال:

في البلورات الأيونية غالباً: $m=1$ ، في البلورات الجزيئية تكون قيمة: $c\approx 6$

بينما يختلف الحد التنافري باختلاف النموذج المستعمل لوصف تداخل السحب الإلكترونية.



الشكل 5-1: تغير طاقة الوضع $U(R)$ بين ذرتين متجاورتين بدلالة المسافة البينية R.

5-4 الكهروسلبية

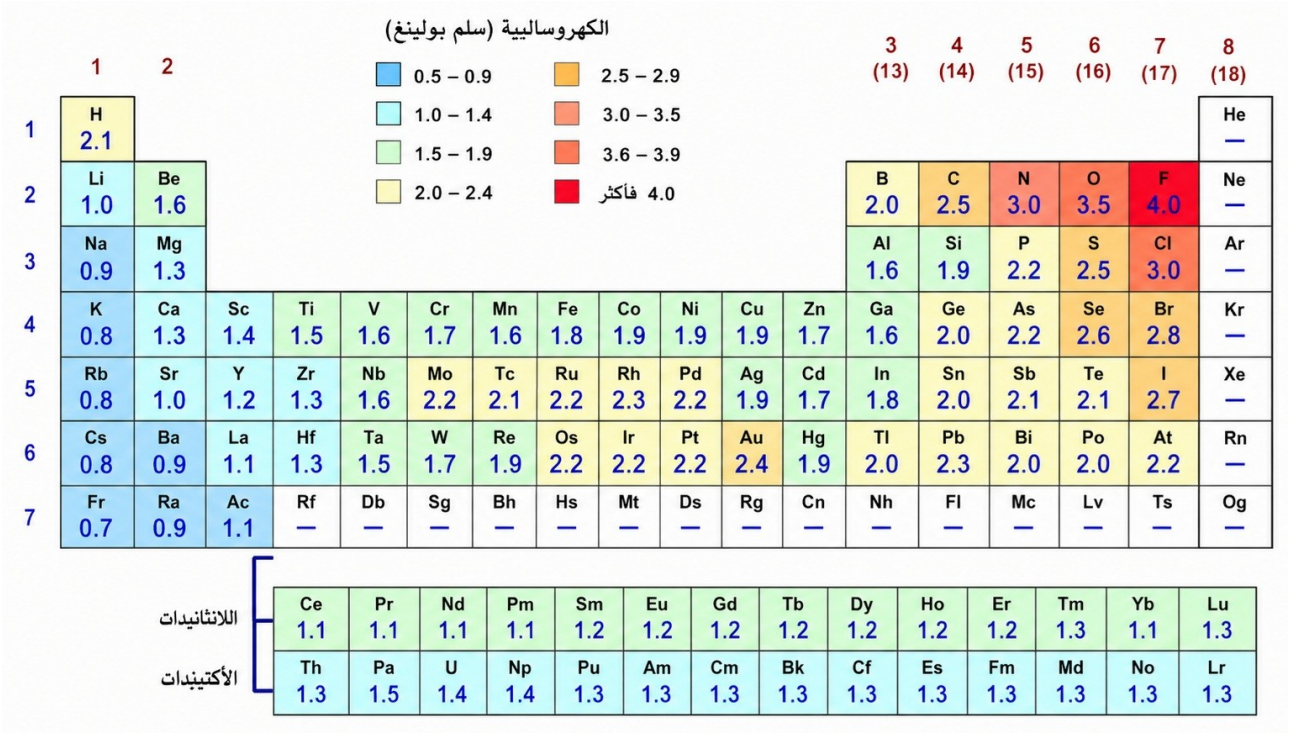
يكثر استعمال مصطلح الكهروسلبية في دراسة الروابط الكيميائية والبنية البلورية، لذلك من الضروري توضيحه بصورة مبسطة ودقيقة.تعد الكهروسلبية من أهم الخصائص الكيميائية للعناصر، إذ تعبر عن قدرة الذرة على جذب إلكترونات الرابطة الكيميائية نحوها عند ارتباطها بذرات أخرى. ولهذا فإنها تلعب دوراً أساسياً في تحديد طبيعة الروابط المتشكلة بين الذرات والخواص الناتجة عنها. وتعرف الكهروسلبية بأنها مقياس لميل الذرة إلى جذب إلكترونات التكافؤ المشتركة في الرابطة الكيميائية. وقد اقترح العالم الأمريكي لينوس بولينغ (Linus Pauling)

أول سلم كمي للكهروسالبية، والذي لا يزال الأكثر استخداماً في الكيمياء الحديثة.

تتغير الكهروسلبية وفقاً لموقع العنصر في الجدول الدوري، حيث:

- تزداد عبر الدورة الواحدة من اليسار إلى اليمين نتيجة ازدياد الشحنة النووية الفعالة.
- تتناقص نزولاً في المجموعة الواحدة بسبب ازدياد نصف القطر الذري وابتعاد إلكترونات التكافؤ عن النواة.

ومن ثم فإن العناصر الواقعة في أعلى يمين الجدول الدوري تمتلك قيما مرتفعة للكهروسالبية، في حين تكون قيم الكهروسلبية منخفضة لدى العناصر الموجودة في أسفل يسار الجدول الدوري الشكل 5-2.



الشكل 5-2: قيم الكهروسلبية لعناصر الجدول الدوري وفق سلم بولينغ.

ويؤدي اختلاف الكهروسلبية بين الذرات إلى ظهور أنواع مختلفة من الروابط الكيميائية، إذ يعد فرق الكهروسلبية عاملاً أساسياً في تحديد طبيعة الرابطة:

- إذا كان فرق الكهروسلبية صغيراً تتشكل رابطة تساهمية غير قطبية.
- إذا كان الفرق متوسطاً تتشكل رابطة تساهمية قطبية.
- إذا كان الفرق كبيراً تتشكل رابطة أيونية ذات طابع كهروستاتيكي واضح.

وبوجه عام، كلما ازداد فرق الكهروسلبية بين الذرتين ازدادت قطبية الرابطة وازداد انتقال الشحنة بينهما، مما يعزز الطابع الأيوني للرابطة الكيميائية.

5-5 الرابطة الكيميائية في البلورات

بالنسبة للذرات التي يتم تتميز كهروسلبيتها بشكل جيد، يمكن التنبؤ مسبقا بالطبيعة المحتملة للروابط التي ستنشأ بينها اعتماداً على قيم الكهروسلبية الخاصة بها.

(أ) إذا ارتبط عنصران يختلفان كثيراً في الكهروسلبية، فإن الذرة الأكثر كهروسالبية تجذب إلكترونات التكافؤ بقوة أكبر. فعلى سبيل المثال، تكون كهروسالبية الصوديوم (Na) منخفضة، بينما تكون كهروسالبية الكلور (Cl) مرتفعة نسبياً. ونتيجة لذلك تنتقل إلكترونات التكافؤ من الصوديوم إلى الكلور، مما يؤدي إلى تكوّن الأيونات Na^+, Cl^- فتنشأ رابطة أيونية نتيجة التجاذب الكهروستاتيكي بين الأيونات المختلفة الشحنة.

(ب) عندما تكون الكهروسلبية مرتفعة لكلا الذرتين، فإنهما تميلان إلى مشاركة إلكترونات التكافؤ بدلا من انتقالها من ذرة إلى أخرى، مما يؤدي إلى تشكل رابطة تساهمية. وقد تكون هذه الرابطة غير قطبية إذا كانت الذرتان متماثلتين، أو قطبية إذا وجد فرق في الكهروسلبية بينهما.

(ج) إذا كانت الذرتان ضعيفتي الكهروسلبية، كما هو الحال في المعادن، فإن إلكترونات التكافؤ لا ترتبط بذرات محددة، بل تصبح إلكترونات حرة الحركة داخل البلورة مكوّنة ما يعرف بـ بحر الإلكترونات. وينتج عن ذلك الرابطة المعدنية التي تميز معظم الفلزات.

(د) تمثل الحالات السابقة نماذج مبسطة للروابط الكيميائية، إلا أن الروابط الحقيقية تكون غالباً أكثر تعقيداً. فقد تمتلك الرابطة الواحدة صفات أيونية وتساهمية في الوقت نفسه بدرجات متفاوتة، كما أن ظواهر الاستقطاب والتشوه الإلكتروني قد تؤثر في طبيعة الترابط بين الذرات.

(هـ) تؤثر طبيعة الروابط الكيميائية وموقع الإلكترونات وقوة التآثر بين الذرات تأثيراً مباشراً في الخصائص الفيزيائية للمادة الصلبة، ومن أهمها: الصلادة. درجة الانصهار. الكثافة. المرونة واللدونة. التوصيلية الكهربائية. التوصيلية الحرارية. الخواص البصرية. لذلك فإن دراسة الروابط الكيميائية تعد أساساً لفهم البنية البلورية وتفسير سلوك المواد الصلبة وخصائصها المختلفة.

6-5 أنواع الروابط

تتحدد أنواع الروابط الكيميائية المتشكلة بين الذرات تبعا لطبيعة العناصر المكونة للمادة، وقيم الكهروسالبية، والتركيب الإلكتروني للذرات، إضافة إلى ظروف التبلور والترابط. وتؤدي هذه الروابط دورا أساسيا في تحديد البنية البلورية والخواص الفيزيائية والكيميائية للمواد الصلبة.

وتوجد عدة أنواع من الروابط في المواد الصلبة، أهمها: الرابطة الأيونية (Ionic Bond). الرابطة التساهمية (Covalent Bond). الرابطة المعدنية (Metallic Bond). الرابطة الجزيئية (Molecular Bond). الرابطة الهيدروجينية (Hydrogen Bond).

وتتميز كل رابطة بخصائص محددة تؤثر في درجة التماسك والبنية البلورية والخواص الميكانيكية والكهربائية للمادة.

وفي الواقع العملي، نادراً ما تكون الروابط الكيميائية نقية تماماً، إذ تمتلك معظم المواد روابط ذات طبيعة مختلطة تجمع بين أكثر من نوع واحد من الترابط، مما يؤدي إلى ظهور طيف واسع من الخصائص الفيزيائية المختلفة.

5-6-1 الرابطة الأيونية (Ionic Bond)

تعد الرابطة الأيونية من أكثر الروابط شيوع في المركبات غير العضوية، ومن أشهر أمثلتها كلوريد الصوديوم (NaCl) وكلوريد السيزيوم (CsCl).تنشأ هذه الرابطة عندما تنتقل إلكترونات التكافؤ من ذرة إلى أخرى نتيجة وجود فرق كبير في الكهروسالبية بين العنصرين. ونتيجة لذلك:تفقد إحدى الذرات إلكتروناً أو أكثر فتصبح أيوناً موجباً (كاتيوناً). تكتسب الذرة الأخرى هذه الإلكترونات فتصبح أيون سالب (أنيون).

فعلى سبيل المثال: $Cl+e^{-}\rightarrow Cl^{-}\ Na\rightarrow Na^{+}+e^{-}$

وبعد تكون الأيونات تنشأ بينها قوى تجاذب كهروستاتيكية قوية تؤدي إلى تكوين الرابطة الأيونية **الشكل 5-3**.

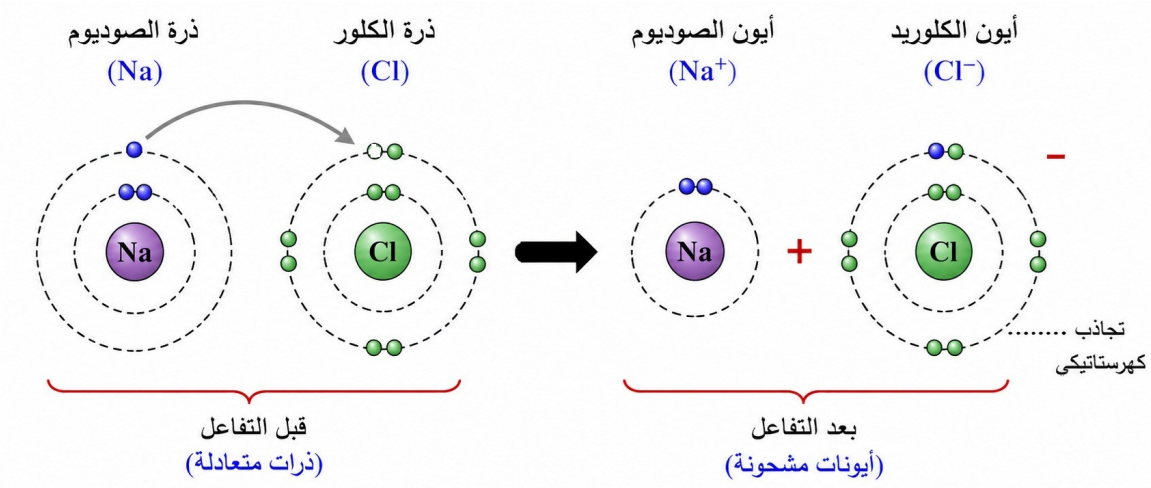
وتخضع هذه القوى إلى قانون كولوم، حيث تتناسب قوة التجاذب طردياً مع مقدار الشحنات وعكسياً مع مربع المسافة الفاصلة بين الأيونات:

$$F=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q_1q_2}{r^2} \qquad \textbf{5-2}$$

حيث:q_1 و q_2 شحنتا الأيونين.

- r المسافة بينهما.
- ε_0 سماحية الفراغ.

وفي الوقت نفسه تظهر قوى تنافر عند تقارب الأيونات كثيراً نتيجة تداخل السحب الإلكترونية، ويتحقق التوازن عند مسافة معينة تصبح عندها طاقة النظام أصغر ما يمكن، فتستقر البنية البلورية.



الشكل 5-3: مخطط توضيحي لآلية تشكل الرابطة الأيونية بين ذرتي الصوديوم والكلور.

خصائص الرابطة الأيونية

- قوية نسبياً.
- غير اتجاهية.
- تمتلك درجات انصهار مرتفعة.
- هشة ميكانيكياً.
- تعزل الكهرباء في الحالة الصلبة.
- تصبح موصلة للكهرباء عند الانصهار أو الإذابة.

أمثلة على البلورات الأيونية

كلوريد الصوديوم (NaCl) ، كلوريد السيزيوم (CsCl) ، أكسيد المغنيسيوم (MgO) ، فلوريد الكالسيوم (CaF_2)

هناك العديد من العوامل التي تؤثر في طبيعة الروابط داخل المواد الصلبة، مثل التآثيرات إلكترون–إلكترون، والخواص التساهمية الجزئية لبعض الروابط، وتأثير البنية الإلكترونية للذرات. غير أنه، ولغرض التبسيط، يمكن اعتبار المواد الصلبة الأيونية مكوّنة من شبكة منتظمة من الأيونات الموجبة (الكاتيونات) والأيونات السالبة (الأنيونات).

وفي هذه الحالة تكون القوى السائدة داخل البلورة ناتجة أساساً عن التجاذب الكهروستاتيكي بين الأيونات مختلفة الشحنة، إضافة إلى قوى التنافر التي تظهر عند تقارب الأيونات بصورة كبيرة. ويؤدي التوازن بين هذين النوعين من

القوى إلى استقرار البنية البلورية.

ويعد ثابت مادلونغ (Madelung Constant) من أهم الكميات التي تميز البلورات الأيونية، إذ يعبر عن التأثير الكلي للتآثرات الكهروستاتيكية داخل الشبكة البلورية. وتعتمد قيمته على نوع البنية البلورية وترتيب الأيونات فيها، كما تتأثر الطاقة الكهروستاتيكية للبلورة بثوابت الشبكة والمسافات البينية بين الكاتيونات والأنيونات وأحجامها الأيونية. وبالتالي فإن استقرار البلورة الأيونية وخواصها الفيزيائية يرتبطان ارتباطاً وثيقاً بالتوازن بين قوى التجاذب والتنافر وبالهندسة البلورية للشبكة الأيونية.

ثابت مادلونغ (Madelung Constant)

يُستخدم ثابت مادلونغ في حساب الجهد والطاقة الكهروستاتيكية للأيونات داخل البلورات الأيونية، حيث يعبر عن التأثير الجماعي لجميع الأيونات المحيطة بأيون مرجعي داخل الشبكة البلورية. وقد سمي هذا الثابت نسبة إلى الفيزيائي الألماني إروين مادلونغ (Erwin Madelung) الذي أدخله في دراسة البلورات الأيونية، ويعد ثابت مادلونغ عاملاً هندسيا لا بعديا يعتمد فقط على نوع البنية البلورية وترتيب الأيونات داخل الشبكة، ولا يعتمد على طبيعة الأيونات نفسها.

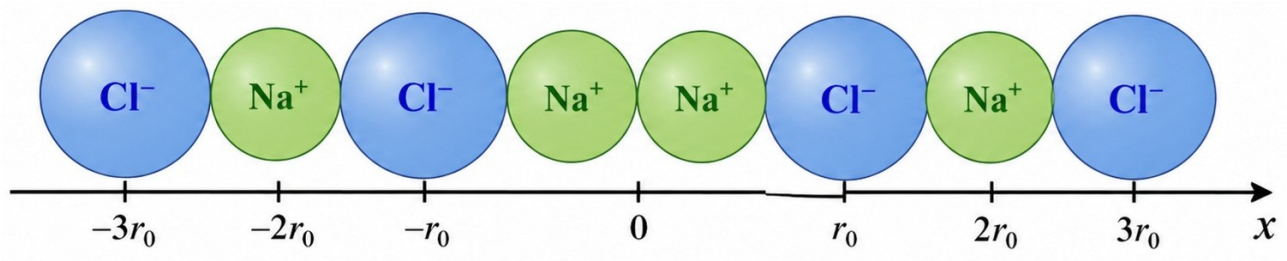
ونظرا لوجود أعداد كبيرة من الأيونات الموجبة والسالبة داخل البلورة، فإن كل أيون يتأثر بقوى تجاذب مع الأيونات المخالفة له في الشحنة وقوى تنافر مع الأيونات المماثلة له في الشحنة. ويؤخذ مجموع هذه التأثيرات الكهروستاتيكية في الاعتبار من خلال ثابت مادلونغ.

ولفصل الأيونات المترابطة داخل البلورة إلى مسافات لا نهائية يلزم تزويد النظام بطاقة معينة تعرف بطاقة الترابط أو **طاقة الشبكة البلورية (Lattice Energy)**. وتمثل هذه الطاقة مقدار الطاقة اللازمة لتفكيك مول واحد من البلورة الأيونية إلى أيوناتها الغازية المنفصلة تحت الشروط القياسية.

ويُستخدم ثابت مادلونغ في حساب طاقة الشبكة والجهد الكهروستاتيكي للبلورات الأيونية، ولذلك يعد من أهم الثوابت المستخدمة في دراسة استقرار البنى البلورية وخواصها الفيزيائية.

ثابت مادلونغ وطاقة التفاعل في بلورة أحادية البعد

قبل دراسة البلورات الأيونية ثلاثية الأبعاد، من المفيد البدء بنموذج مبسط يتمثل في سلسلة خطية أحادية البعد من الأيونات الموجبة والسالبة المتعاقبة، كما هو موضح في الشكل (5-4). ويساعد هذا النموذج على فهم مفهوم ثابت مادلونغ وطاقة التفاعل الكهروستاتيكية داخل البلورات الأيونية.



الشكل 5–4: شبكة خطية افتراضية أحادية البعد لبلورة كلوريد الصوديوم (NaCl).

نفترض وجود أيون صوديوم موجب Na^+ عند الموضع المركزي $(x=0)$، ولتكن r_0 أقصر مسافة فاصلة بين أيونين متجاورين، أي المسافة بين أقرب كاتيون وأنيون في السلسلة.، أي أنها تساوي مجموع نصفي القطر الأيوني للكاتيون والأنيون.وبما أن جميع الأيونات الموجودة في الشبكة تؤثر على الأيون المرجعي بقوى كولومية، فإن الطاقة الكهروستاتيكية الكلية تحسب بجمع مساهمات جميع الجيران تبعاً لبعدهم عن الأيون المرجعي.

الجوار الأقرب الأول (الطبقة الأولى)

يوجد على جانبي أيون الصوديوم المرجعي أيونا كلوريد Cl^- عند المسافتين: $+r_0$ و $-r_0$ ، ولأن الشحنتين متعاكستان، فإن التآثر يكون تجاذبياً، وبالتالي تكون الطاقة الكولومية:

$$-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}+-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}=-\frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0} \qquad \textbf{3–5}$$

الجوار الأقرب الثاني (الطبقة الثانية)

يوجد أيونا صوديوم موجبان عند المسافتين: $+2r_0$ و $-2r_0$ ، وبما أن الشحنات متماثلة، فإن التأثر يكون تنافرياً، ومن ثم تكون الطاقة:

$$+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 2r_0}++\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 2r_0}=+\frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0(2r_0)} \qquad \textbf{4–5}$$

الجوار الأقرب الثالث (الطبقة الثالثة)

في هذه الحالة ينتج تأثير التجاذب الكولومي عن أيوني الكلوريد Cl^- الواقعين على جانبي الأيون المرجعي عند المسافتين:: $+3r_0$ و $-3r_0$ ومن ثم تكون طاقة التفاعل الكولومية:

$$-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 3r_0}+-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 3r_0}=-\frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0(3r_0)} \qquad \textbf{5–5}$$

وبالاستمرار بالطريقة نفسها بالنسبة لجميع الأيونات الموجودة في السلسلة الخطية، نحصل على الطاقة الكهروستاتيكية الكلية للأيون المرجعي:

$$E=-\frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}+\frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0(2r_0)}-\frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0(3r_0)} \qquad \textbf{6–5}$$

وباستخراج العامل المشترك:

$$E=-\frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}(1-\frac{1}{2}+\frac{1}{3}+,,,,,,,,,,) \qquad \textbf{7–5}$$

ويمثل المتسلسل الموجود بين القوسين متسلسلة متناوبة تتقارب إلى:$\ln 2$ ومن ثم تصبح الطاقة:

$$E=-\frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}2\,lin\,2 \qquad \textbf{8–5}$$

وبذلك يكون ثابت مادلونغ للشبكة الخطية أحادية البعد:$A=2\ln 2\,A\approx 1.386\,A$، وتمثل هذه النتيجة أبسط تطبيق لمفهوم ثابت مادلونغ قبل الانتقال إلى البلورات الأيونية الحقيقية ثلاثية الأبعاد.

ثابت مادلونغ وطاقة التفاعل في البلورات ثلاثية الأبعاد

في البلورات ثلاثية الأبعاد تصبح دراسة التآثرات الكهروستاتيكية أكثر تعقيداً مقارنةً بالشبكة الخطية أحادية البعد، إذ لا يمكن تمثيل البلورة بسلسلة واحدة من الأيونات، بل يجب أخذ جميع الأيونات المحيطة بالأيون المرجعي في مختلف الاتجاهات بعين الاعتبار.

ولحساب طاقة التفاعل في بلورة أيونية ثلاثية الأبعاد، نختار أيوناً مرجعياً (مثل أيون الصوديوم Na^+) ونحسب مساهمة جميع الأيونات المجاورة له. ففي بنية كلوريد الصوديوم (NaCl) مثلاً:

- يوجد 6 أيونات كلوريد Cl^- عند المسافة r.
- يوجد 12 أيون صوديوم Na^+ عند المسافة $2r$.
- يوجد 8 أيونات كلوريد Cl^- عند المسافة $3r$.
- يوجد 6 أيونات صوديوم Na^+ عند المسافة $4r$.
- يوجد 24 أيون كلوريد Cl^- عند المسافة $5r$.

وهكذا تستمر المساهمات تبعاً لترتيب الأيونات في الشبكة البلورية، لذلك تُعطى الطاقة الكهروستاتيكية لأيون واحد داخل البلورة بالعلاقة:

$$E_{ion-lattice}=-\frac{Z^2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}M\,9 \qquad \textbf{9–5}$$

حيث:

- M : ثابت مادلونغ.
- Z : تكافؤ الأيون (في NaCl يكون $Z=1$).

- e : شحنة الإلكترون $e=1.6\times10^{-19}$
- r_0 : أقصر مسافة بين الأيونات المتجاورة.

وبالنسبة لبنية كلوريد الصوديوم، فإن ثابت مادلونغ يكتب على شكل المتسلسلة:

$$M=\frac{6}{1}-\frac{12}{2}+\frac{8}{3}-\frac{6}{4}+\frac{24}{5}-,, \qquad \textbf{10-5}$$

وتعكس معاملات البسط أعداد الأيونات الموجودة في كل طبقة من طبقات الجوار حول الأيون المرجعي، بينما تمثل المقامات المسافات النسبية لهذه الطبقات.

الجدول 5-1 قيم ثابت مادلونغ لبعض البلورات الأيونية

المركب	البنية البلورية	ثابت مادلونغ M	نسبة التناسق A:C
NaCl	ملح الصخور (Rock Salt)	1.7476	6 : 6
CsCl	كلوريد السيزيوم	1.7627	8 : 8
CaF_2	الفلوريت	2.5194	4 : 8

يتضح أن قيمة ثابت مادلونغ تعتمد فقط على نوع البنية البلورية وترتيب الأيونات داخل الشبكة، ولذلك تختلف من مركب إلى آخر تبعاً للهندسة البلورية وعدد الأيونات المحيطة بالأيون المرجعي.

5-6-2 الرابطة التساهمية

تتكون الرابطة التساهمية عندما تتشارك ذرتان أو أكثر في زوج واحد أو أكثر من إلكترونات التكافؤ، مما يؤدي إلى استقرار أغلفتها الإلكترونية الخارجية وتحقيق تركيب إلكتروني منخفض الطاقة. ويحدث هذا النوع من الروابط غالبا بين العناصر اللامعدنية ذات قيم الكهرسلبية المتقاربة.

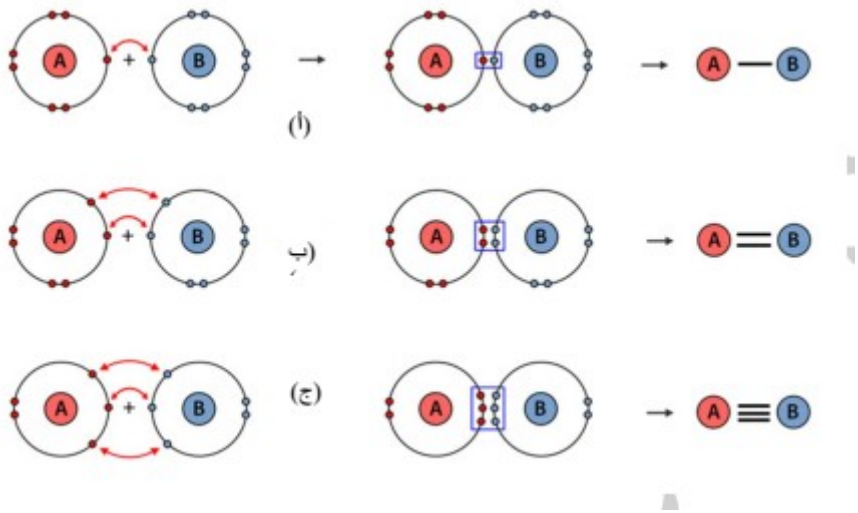
يعد الماس من أشهر الأمثلة على المواد ذات الروابط التساهمية. ففي بلورة الماس تكون ذرة الكربون ذات التوزيع الإلكتروني: $1s^2,2s^2,2p^2$ مرتبطة بأربع ذرات كربون مجاورة بواسطة أربع روابط تساهمية متكافئة ناتجة عن تهجين المدارات من النوع Sp^3. وتتجه هذه الروابط نحو رؤوس رباعي السطوح (Tetrahedron) بزاوية مقدارها: $109°.5'$ (بدقة $109°28'$).

وبذلك تحيط بكل ذرة كربون أربع ذرات مجاورة، فتكتمل إلكترونات التكافؤ لديها وفق قاعدة الثمانية، مما يمنح بلورة الماس صلابة عالية ودرجة انصهار مرتفعة نتيجة قوة الروابط التساهمية الممتدة في جميع الاتجاهات داخل البلورة. وعلى الرغم من أن بنية الماس ليست بنية متراصة، فإنها تتميز باستقرار كبير بسبب الطبيعة الاتجاهية للرابطة التساهمية،

والتي تفرض أن يكون لكل ذرة كربون أربعة أقرب جيران فقط، بخلاف البنى المتراصة التي قد يصل فيها عدد أقرب الجيران إلى اثني عشر. وتصنف الروابط التساهمية حسب عدد أزواج الإلكترونات المشتركة بين الذرتين كما يأتي:

- **الرابطة التساهمية الأحادية:** تنتج عن مشاركة زوج واحد من الإلكترونات، وتتكون من رابطة واحدة من النوع σ، ومن أمثلتها جزيء الكلور: Cl_2
- **الرابطة التساهمية الثنائية:** تنتج عن مشاركة زوجين من الإلكترونات، وتتكون من رابطة σ ورابطة π، ومن أمثلتها جزيء الأكسجين: O_2
- **الرابطة التساهمية الثلاثية:** تنتج عن مشاركة ثلاثة أزواج من الإلكترونات، وتتكون من رابطة σ ورابطتي π ، ومن أمثلتها جزيء النيتروجين: N_2

أما **الرابطة التساهمية الرباعية** فهي حالة نادرة جدا، ولا توجد في المركبات التساهمية الاعتيادية مثل الكربون أو السيليكون. وإنما لوحظت في بعض معقدات العناصر الانتقالية، مثل مركبات الكروم والموليبدينوم والرينيوم، حيث ينشأ الترابط الرباعي نتيجة التداخل بين المدارات الذرية d، ويتكون من رابطة σ ورابطتين π ورابطة δ.



الشكل (5-5): تمثيل تخطيطي لتكوّن الروابط التساهمية

(أ) الرابطة التساهمية الأحادية ، (ب) الرابطة التساهمية الثنائية ، (ج) الرابطة التساهمية الثلاثية

يمكن تلخيص أهم خصائص الرابطة التساهمية فيما يأتي:

- لا تتكون الرابطة التساهمية بانتقال الإلكترونات من ذرة إلى أخرى كما في الرابطة الأيونية، وإنما تنشأ نتيجة

مشاركة ذرتين في زوج واحد أو أكثر من إلكترونات التكافؤ، وذلك من خلال تداخل المدارات الذرية الخارجية للذرتين.

- يعتمد عدد الروابط التساهمية التي تستطيع الذرة تكوينها على عدد إلكترونات التكافؤ غير المزدوجة وعلى التوزيع الإلكتروني لها، بحيث تسعى الذرات إلى الوصول إلى حالة أكثر استقرارا وفق قاعدة الثمانية (Octet Rule)، مع وجود استثناءات لبعض العناصر مثل الهيدروجين والبورون والعناصر ذات الأغلفة الموسعة.
- تكون الرابطة التساهمية غير قطبية عندما تكون الذرتان متماثلتين أو متقاربتين جدا في الكهرسلبية، كما في الجزيئات H_2، Cl_2، وN_2. أما إذا اختلفت كهرسلبية الذرتين فإن الرابطة تصبح قطبية، كما في جزيء كلوريد الهيدروجين HCl.
- تعتمد قوة الرابطة التساهمية على عدة عوامل، أهمها مقدار تداخل المدارات الذرية، وطول الرابطة، وزاوية الرابطة، وطبيعة المدارات المشاركة في الترابط، ولا تعتمد على المسافة بين الذرتين فقط.
- تصنف الروابط التساهمية إلى أحادية وثنائية وثلاثية تبعًا لعدد أزواج الإلكترونات المشتركة، كما توجد الرابطة التناسقية (الإحداثية) التي ينشأ فيها الزوج الإلكتروني المشترك من ذرة واحدة.
- تتميز معظم المركبات التساهمية بضعف التوصيل الكهربائي في الحالة الصلبة، وذلك لعدم وجود أيونات أو إلكترونات حرة الحركة. ومع ذلك، توجد استثناءات مهمة، مثل الجرافيت الذي يتمتع بموصلية كهربائية جيدة بسبب وجود إلكترونات π غير المتمركزة بين طبقاته.
- تختلف الخواص الفيزيائية للمركبات التساهمية باختلاف نوع بنيتها؛ فقد تكون جزيئية أو شبكية. وتؤثر طبيعة الروابط وقوى التجاذب بين الجزيئات في خواصها مثل الصلادة، ودرجة الانصهار، والتوصيل الحراري والكهربائي.
- تتميز الشبكات التساهمية العملاقة مثل الماس والسيليكون وكربيد السيليكون SiC بوجود روابط تساهمية قوية ممتدة في جميع الاتجاهات داخل البلورة، ولذلك تمتلك صلادة عالية ودرجات انصهار مرتفعة واستقرارًا كيميائيًا جيدًا.
- قد يوجد العنصر الكيميائي نفسه في أكثر من صورة بلورية (التآصل Allotropy)، تختلف فيها طريقة ترتيب الذرات، مما يؤدي إلى اختلاف واضح في الخواص الفيزيائية. ويعد الكربون المثال الأشهر؛ إذ يوجد في

صورة الماس ذي البنية التساهمية ثلاثية الأبعاد، وفي صورة الجرافيت الذي يتكون من طبقات سداسية ترتبط داخليًا بروابط تساهمية قوية، بينما ترتبط الطبقات ببعضها بقوى فان دير فالس الضعيفة، ولذلك يكون الجرافيت لين وسهل الانقسام بين طبقاته.

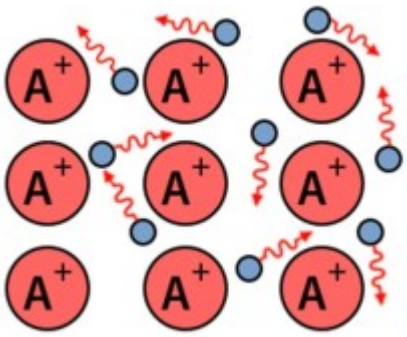
5-6-3 الرابطة المعدنية

تتميز المعادن بقدرتها العالية على توصيل الكهرباء والحرارة، ويرجع ذلك إلى وجود عدد من إلكترونات التكافؤ ضعيفة الارتباط بالنواة، والتي تصبح حرة الحركة داخل البلورة المعدنية. وتتحرك هذه الإلكترونات بحرية بين الأيونات الموجبة، مكوِّنة ما يُعرف بـ بحر الإلكترونات (Electron Sea).

ويمكن تفسير الرابطة المعدنية وفق نموذج بحر الإلكترونات، حيث تفقد ذرات الفلز جزءًا من إلكترونات تكافؤها، فتتحول إلى أيونات موجبة (كاتيونات) مرتبة بانتظام في مواقع الشبكة البلورية، بينما تنتشر إلكترونات التكافؤ الحرة بين هذه الأيونات. ويؤدي التجاذب الكهروستاتيكي بين الكاتيونات الموجبة وبحر الإلكترونات السالبة إلى نشوء الرابطة المعدنية، التي تحافظ على تماسك البلورة.

وتتميز الرابطة المعدنية بأنها رابطة غير اتجاهية (Non-directional Bond)، أي إن قوة الترابط لا تقتصر على اتجاه معين، بخلاف الرابطة التساهمية التي تتميز بطبيعتها الاتجاهية. ولذلك تمتلك المعادن قابلية كبيرة للسحب والطرق والتشكيل دون أن تنكسر الروابط المعدنية، إذ تستطيع طبقات الذرات الانزلاق بعضها فوق بعض مع بقاء بحر الإلكترونات محافظا على ترابط البلورة.

كما تفسر الرابطة المعدنية العديد من الخواص المميزة للفلزات، مثل ارتفاع التوصيل الكهربائي والحراري، والبريق المعدني، والقابلية للطرق والسحب، وارتفاع درجات الانصهار في كثير من المعادن.



الشكل5-6 التجاذب الكهروستاتيكي بين الالكترونات وأيونات المعدن

5-6-4 القوى بين الجزيئية (قوى فان دير فالس)

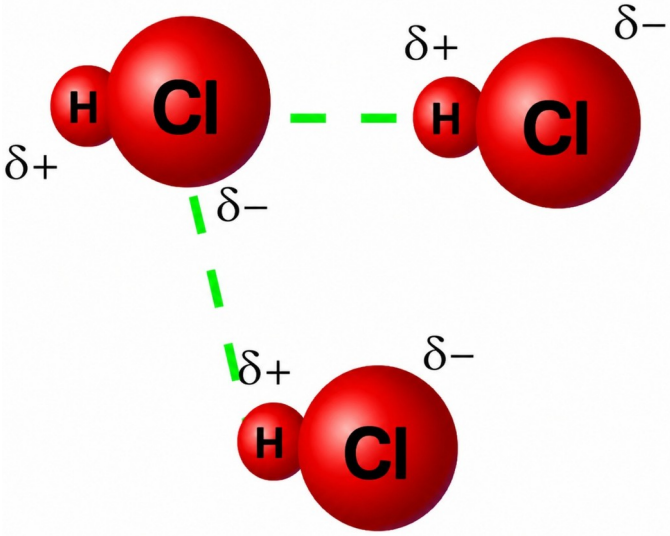
تعد قوى فان دير فالس (Van der Waals Forces) من أضعف قوى التجاذب بين الذرات أو الجزيئات، وهي ليست روابط كيميائية أولية كالرابطة الأيونية أو التساهمية أو الفلزية، وإنما تمثل قوى بين جزيئية تنشأ نتيجة التفاعل الكهروستاتيكي بين الشحنات الجزئية أو الثنائية القطبية الدائمة أو المؤقتة.

وتظهر هذه القوى في المواد الجزيئية مثل الشمع، والبارافين، والغازات النبيلة عند تكاثفها، والعديد من المركبات العضوية، كما توجد بين طبقات الجرافيت. ونظرًا لضعفها مقارنة بالروابط الكيميائية الأولية، فإن المواد التي تعتمد عليها تمتاز عادةً بانخفاض درجات الانصهار والغليان، وضعف التوصيل الكهربائي والحراري.

وتنشأ قوى فان دير فالس نتيجة أحد الأنواع الآتية:

- قوى ثنائي القطب–ثنائي القطب (Dipole–Dipole): تنشأ بين الجزيئات القطبية ذات العزم القطبي الدائم، مثل جزيئات كلوريد الهيدروجين (HCl).
- قوى ثنائي القطب–ثنائي القطب المستحث (Dipole–Induced Dipole): تنشأ عندما يستقطب جزيء قطبي جزيئًا غير قطبي مجاورا.
- قوى التشتت (London Dispersion Forces): تنتج عن ثنائيات قطب لحظية ومستحثة، وتوجد بين جميع الذرات والجزيئات، وتعد القوة الوحيدة الموجودة بين الغازات النبيلة والجزيئات غير القطبية.

وتزداد شدة قوى فان دير فالس كلما زادت قابلية استقطاب السحابة الإلكترونية، وازداد الحجم أو الكتلة الجزيئية، وصغرت المسافة بين الجزيئات، إلا أنها تبقى أضعف بكثير من الروابط الأيونية أو التساهمية أو الفلزية. ويبين الشكل (5-7) مثالًا على قوى التجاذب من نوع ثنائي القطب–ثنائي القطب بين جزيئات كلوريد الهيدروجين، حيث ينجذب الطرف ذو الشحنة الجزئية الموجبة ¿ في أحد الجزيئات إلى الطرف ذي الشحنة الجزئية السالبة($-\delta$) في الجزيء المجاور.



الشكل:5-7 رابطة فان دار فالس بين جزيئات حمض الهيدروكلوريك

5-6-5 الرابطة الهيدروجينية

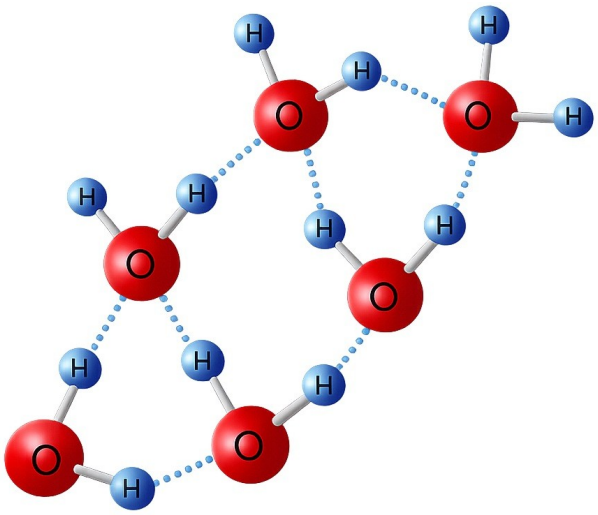
تعد الرابطة الهيدروجينية (Hydrogen Bond) نوعًا خاصًا من قوى التجاذب بين الجزيئات، وتتميز بأنها أقوى من قوى فان دير فالس، لكنها أضعف من الروابط التساهمية والأيونية والفلزية.

وتنشأ الرابطة الهيدروجينية عندما تكون ذرة الهيدروجين مرتبطة تساهميًا بذرة ذات كهرسلبية عالية، مثل الأكسجين (O) أو النيتروجين (N) أو الفلور (F)، مما يؤدي إلى استقطاب الرابطة التساهمية وظهور شحنة جزئية موجبة $(\delta+)$ على ذرة الهيدروجين، وشحنة جزئية سالبة $(\delta-)$ على الذرة الأكثر كهرسلبية.

وتنجذب ذرة الهيدروجين ذات الشحنة الجزئية الموجبة في أحد الجزيئات إلى زوج إلكتروني حر موجود على ذرة الأكسجين أو النيتروجين أو الفلور في جزيء مجاور، فتتكون الرابطة الهيدروجينية.

ويُعد الماء من أشهر الأمثلة على هذا النوع من الروابط، إذ ترتبط جزيئات الماء فيما بينها بروابط هيدروجينية ناتجة عن التجاذب بين ذرة الهيدروجين في أحد الجزيئات وذرة الأكسجين في جزيء مجاور. وعند انخفاض درجة الحرارة تنتظم هذه الروابط في شبكة ثلاثية الأبعاد منتظمة، فتتكون بلورات الجليد ذات البنية السداسية، وهي المسؤولة عن كثير من الخصائص الفيزيائية للماء، مثل ارتفاع درجة غليانه مقارنة بالمركبات المشابهة، وتمدده عند التجمد، وانخفاض كثافة الجليد مقارنة بالماء السائل.

ويبين الشكل (8) شبكة الروابط الهيدروجينية بين جزيئات الماء، حيث تمثل الخطوط المتقطعة الروابط الهيدروجينية، بينما تمثل الخطوط المستمرة الروابط التساهمية داخل جزيء الماء.



الشكل5–8:الرابطة الهيدروجينية في جزيئات الماء

المراجع

1- اللحياني، س. ب. ح. (د.ت.). *فيزياء الجوامد*. كلية العلوم التطبيقية، جامعة أم القرى.

2- أحمد، ن. ع. ا. (2005). *علم البلورات والأشعة السينية*. دار الفكر العربي.

3- مصطفى، ي.، والغامدي، أ. (2015). *فيزياء الجوامد وتطبيقاتها: المرجع الشامل*. مركز النشر العلمي، جامعة الملك عبد العزيز.

4- مصطفى، يسري. (2015). **حيود الأشعة السينية في البلورات**. في *فيزياء الحالة الصلبة* (الباب الخامس).

5- رسن، رضا حزام. (2023). *فيزياء الحالة الصلبة*. جامعة بغداد، الهيئة القطاعية للعلوم التربوية، قسم الفيزياء، المرحلة الرابعة. مذكرة جامعية

6- زروال، صورية. (2021). *محاضرات في علم البلورات الفيزيائي* (موجهة لطلبة السنة الثانية والثالثة ليسانس فيزياء). كلية العلوم الدقيقة، قسم الفيزياء، جامعة الشهيد حمة لخضر – الوادي.

7- بن عمارة، وردة. (2018). *مطبوعة دروس وتمارين في فيزياء الجسم الصلب*. المدرسة العليا للأساتذة للتعليم التكنولوجي – سكيكدة، قسم الفيزياء والكيمياء.

8- مريوش، تغريد مسلم. (2019–2020). *فيزياء الحالة الصلبة (Solid State Physics): المرحلة الرابعة*. كلية التربية للعلوم الصرفة – جامعة ابن الهيثم.

9- داخل، عقيل عزيز . (1987). *مقدمة في فيزياء الجسم الصلب: الجزء الأول، القسم الأول*. الجزائر: ديوان المطبوعات الجامعية.

1- Rousseau, J.-J., & Gibaud, A. (n.d.). *Cristallographie géométrique et radiocristallographie* (3e éd.). Dunod

2- Belfar, A. (2015). *Cours et exercices de cristallographie*. Département de Physique Énergétique, Faculté de Physique, Université des Sciences et de la Technologie d'Oran – Mohamed Boudiaf (USTO-MB).

3- MIHÁLY, László, et MARTIN, Michael C. *Solid State Physics: Problems and Solutions*. New York : John Wiley & Sons, Inc., 1996. ISBN 0-471-15287-0.

4- Yahi, H. (2017). *Polycopié de cours : Cristallographie*. Département des Sciences de la Matière, Faculté des Mathématiques, de l'Informatique et des Sciences de la Matière, Université 8 Mai 1945 Guelma.

5- Talbi, K. (2019). *Cours de cristallographie*. Département de Physique, Institut des Sciences

Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie, Centre Universitaire Ahmed Zabana, Relizane. Polycopié de cours destiné aux étudiants de deuxième année LMD-SM.
6- Cullity, B. D., & Stock, S. R. (2014). *Elements of X-Ray Diffraction* (3rd ed.). Pearson.
7- Massa, W. (2010). *Crystal Structure Determination* (2nd ed.). Springer.
8- Hammond, C. (2015). *The Basics of Crystallography and Diffraction* (4th ed.). Oxford University Press.
9- Giacovazzo, C. (2011). *Fundamentals of Crystallography* (3rd ed.). Oxford University Press.