

الفصل الخامس: العيوب البلورية

1- المقدمة:

يعتبر التنظيم الدوري للذرات في البناء البلوري من أهم الخصائص البلورية، ولذلك، فإنه عند دراسة التركيب الذري لبلورات المواد فإننا نهتم بمواضع الذرات في البلورة ونتأكد من وجود هذه الذرات في أماكنها الدورية. وبالرغم من أن وجود العيوب البلورية في كثير من المواد الصلبة يؤدي إلى تحسين بعض خصائصها الفيزيائية إلا أنه كثيرا ما راود العلماء حلم الحصول على بلورة تامة لدرجة الكمال المطلق في دوريتها ودقة وانتظام تركيبها وتأتي صعوبة ذلك بسبب الكثير من الصعوبات التي تحدث أثناء التحضير. تؤدي هذه الصعوبات إلى الإخلال في الدورية وعدم تكامل التناسق وإنتاج بلورة تحتوي على عيوب في التركيب. تتعدد أنواع العيوب البلورية طبقا لمنشئها، فمثلا وكما ذكرنا من قبل، يعتبر سطح البلورة نوعا من أنواع التشوه وذلك بسبب تعطل التكرار والدورية عند السطح، حيث ترى الذرات القريبة من السطح بيئة محيطة مختلفة عما تراه الذرات الموجودة في عمق البلورة وبالتالي تسلك سلوكا مختلفا. وكذلك، يسبب الاهتزاز الحراري للذرات، حول مواضع اتزانها عند درجة حرارة أكبر من الصفر المطلق، تشوها للبلورة بدرجة تعتمد على درجة الحرارة. كما يؤدي وجود ذرات غريبة في التركيب البلوري إلى خلق عيوب تسمى بالشوائب. وبالرغم من تقنيات التحضير المتقدمة إلا أنه غالبا ما تحتوي البلورة المحضرة على بعض الذرات الغريبة وحتى عند تحضيرها بواسطة أفضل وسائل النمو البلوري فإنه تبقى بعض الشوائب (بتركيز 10^{12} cm^{-3}) داخل البلورة وتجعل من الصعب تعيين التركيب البلوري الصحيح. وبناء على ما سبق، لا يكون للبلورات الحقيقية تركيب بنائي تام الانتظام وذلك بسبب وجود عيوب تختلف باختلاف أنواع وأبعاد البلورة. تتعدد العيوب البلورية فمنها: العيوب النقطية والعيوب الخطية والعيوب السطحية. العيوب النقطية هي عبارة عن وجود نقص في بعض نقط الشبكة البلورية على شكل فراغات تمثل عدم وجود ذرة أو جزئ أو مجموعة من الذرات في نقطة ما بالشبكة. من المفيد أن وجود العيوب في البلورات يؤدي، في كثير من الأحيان، إلى تحسين الكثير من الخصائص الفيزيائية لبعض المواد حيث يمكن الحصول على سبائك معدنية جديدة تتميز

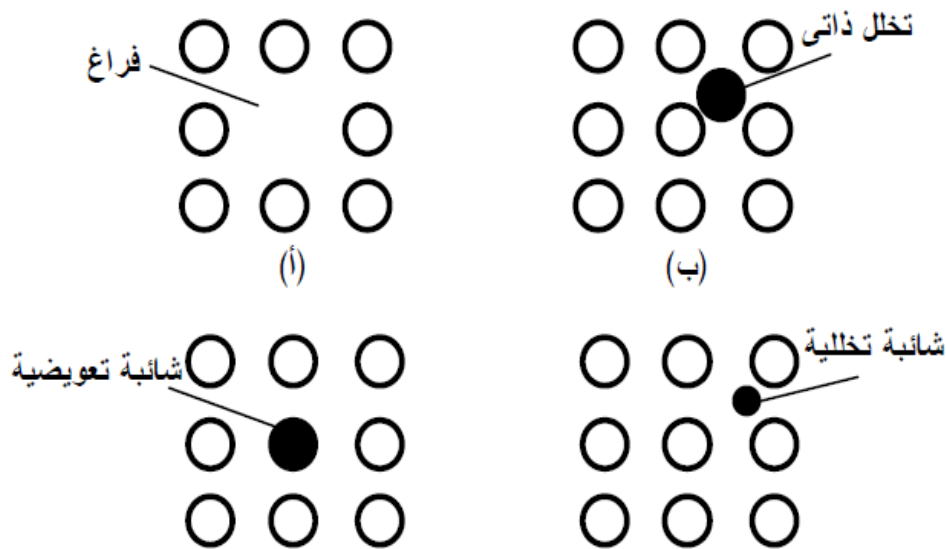
بمقاومة عالية للأحمال المؤثرة. كما تعود خاصية التوصيل الكهربائي في بعض أشباه الموصلات إلى وجود كمية ضئيلة من الذرات الشائبة، وكذلك تسبب هذه العيوب مراكز لونية (color centers) في بعض المواد مما يجعلها مناسبة للعديد من التطبيقات التكنولوجية هذا بالإضافة إلى ارتباط التآلق الضوئي (photo-luminescence) بهذه الشوائب.

تنقسم العيوب البلورية على عدة أقسام: 1- عيوب ساكنة، وهي العيوب الدائمة نتيجة تشوه التركيب البلوري، 2- عيوب مؤقتة يمكن التخلص منها بالمعالجة المناسبة و 3- عيوب الإثارة وتحدث نتيجة وجود مؤثر خارجي مثل المجال الكهربائي، المجال المغناطيسي أو خلافه وتزول هذه العيوب بزوال المؤثر. كما يمكن أيضا تصنيف العيوب البلورية طبقا لنوع التشوه التي تسببه هذه العيوب، على النحو الآتي: 1- عيوب تتسبب في تشويه المنطقة المجاورة لها فقط من الشبكة البلورية تشوهاً موضعياً محدوداً لا يتعدى بضعة خلايا وحدة وتسمى هذه العيوب بالعيوب النقطية (point defects)، 2- عيوب تؤثر في صف بأكمله من صفوف الذرات الشبكة البلورية، وتسمى هذه العيوب بالعيوب الخطية (line defects) أو الانخلاعات (dislocations)، 3- عيوب مستوية وتتشرك فيها ذرات مستوى بلوري كامل. سنتعرض في هذا الباب بالتفصيل لدراسة الأنواع المختلفة من هذه العيوب البلورية وتأثيرها على خصائص البلورة الفيزيائية.

2- العيوب النقطية: Point defects

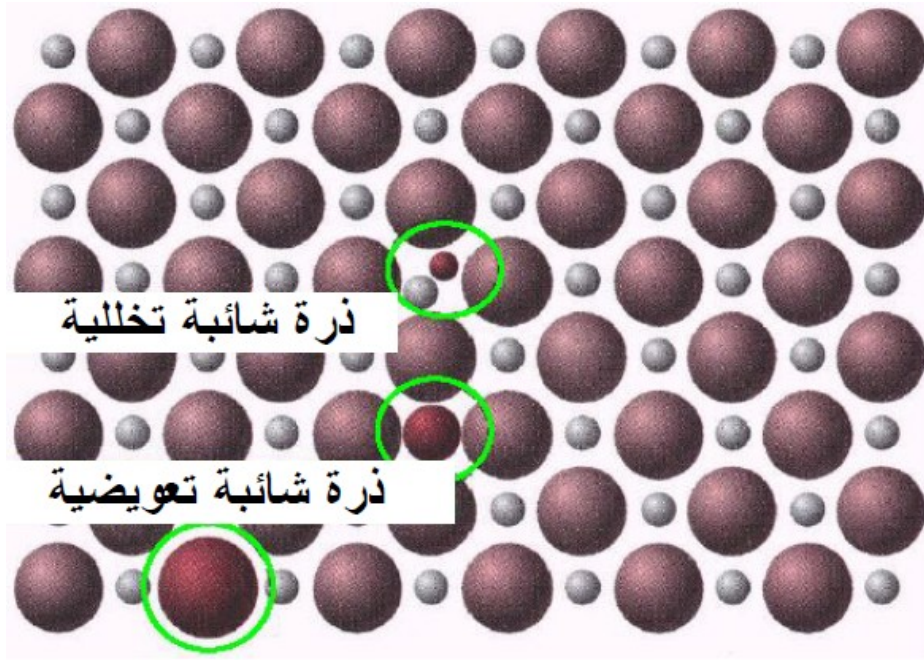
العيوب النقطية هي عيوب موضعية تنشأ من غياب ذرة عن مكانها في الشبكة البلورية أو عن وجود ذرة زائدة في غير مكانها. يوجد نوعان من العيوب النقطية تكون متصلة في المادة، بمعنى أنها تنشأ أثناء نمو البلورة ومن دون أي تدخل خارجي هما الفراغ (vacancy) و الذرة المتخللة (interstitial) كما هو مبين بالشكل (1-5). ينشأ الفراغ عندما تغيب الذرة عن مكانها في الترتيب الدوري للشبكة البلورية، كما هو مبين بالشكل (1-5). يكون النوع الثاني من العيوب النقطية عبارة عن وجود ذرة زائدة متخللة في التركيب البلوري، أي تحتل ذرة ما مكاناً بين الذرات الأصلية، سواء كانت هذه الذرة أصلية (من نفس نوع ذرات البلورة) ويسمى العيب في هذه الحالة

تخلل ذاتي (Self intestinal) كما هو مبين بالشكل (5-1) ب أو كانت ذرة غريبة وتسمى الشائبة . في الحالة الأخيرة، تحتل الذرة الشائبة مكانا بين الذرات الأصلية (بين المستويات البلورية)، ويسمى العيب النقطي في هذه الحالة بالشائبة المتخللة (interstitial impurity)، كما هو الحال مبين بالشكل (5-1) ج. غالبا ما تكون مثل هذه الشوائب عبارة عن ذرات ذات حجم أصغر من الذرات الأم ويمكنها من شغل مكان بين المستويات الذرية للبلورة من دون إخلال ملحوظ في أبعاد البلورة، كما في حالة الهيدروجين في بلورة الكربون . عندما تحتل الذرة الغريبة محل ذرة أصلية في الترتيب البلوري يسمى العيب، في هذه الحالة، بشائبة تعويضية كما هو مبين بالشكل (5-1) د. يحدث هذا النوع من العيوب عندما تكون حجم الذرة الشائبة كبير ويقارب حجم ذرات البلورة الأصلية، كما في حالة ذرة النيكل في بلورة الحديد . في هذه الحالة لا يضطرب الترتيب البلوري ولكن فقط نوع الذرات في الشبكة البلورية يكون مختلف.



الشكل (5-1) أنواع مختلفة من العيوب النقطية في بلورة أساسية.

الشكل (5-2) يلخص ويجمع بين أنواع العيوب الناشئة عن وجود ذرات الشوائب في التركيب البلوري بقصد المقارنة.

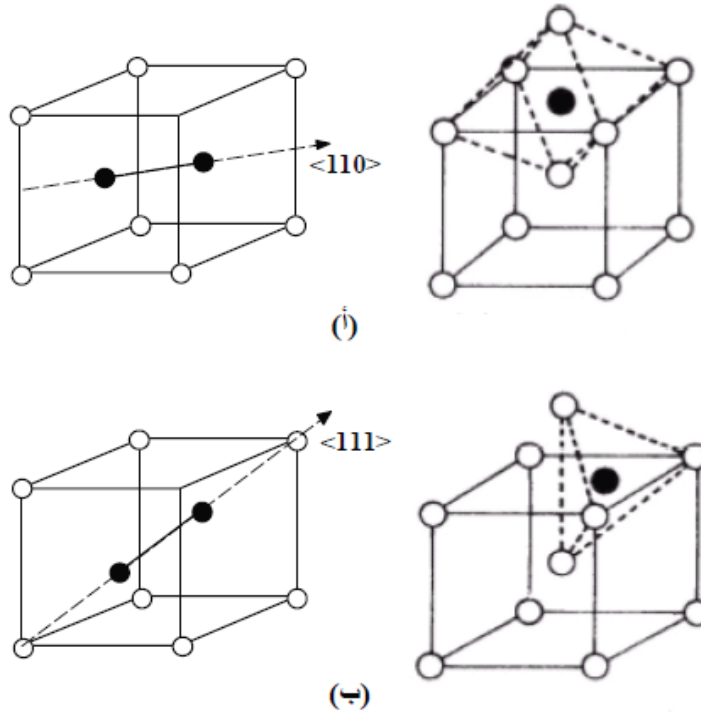


الشكل (2-5) مقارنة العيوب النقطية الناتجة عن الشوائب.

بالإضافة إلى تطابقها مع الذرات المضيفة (الأم) فإن الشوائب التخللية والذرات التخللية الذاتية تختلف في الطريقة التي تكمن بها في الشبكة. يبين الشكل (3-5) بلورة متمركزة الجسم، على سبيل المثال، تحتوي على ذرة متخللة لكي تحتل الذرة المتخللة ذاتيا هذا المكان فإنها تزيح الذرة المضيفة عن مكانها الطبيعي في البلورة مكونة معها ما يسمى بزواج من الذرات على شكل الدمبل (dumbbell-shaped pair) (الدمبل حديديتان بينهما قضيب معدني)، كما هو مبين في يسار الشكل (3-5) يتعين كل من اتجاه الدمبل المتكون والمسافة بين الذرتين بواسطة الحالة التي معها تكون طاقة وضع الشبكة نهاية صغرى.

على الجانب الآخر، تحتل ذرات الشوائب المتخللة، أحيانا، مواضع محددة دون إحداث تشوه في البلورة المضيفة. يمكن تسمية هذه المواضع طبقا للشكل المتعدد الأسطح المتكون من التوصيل بين الذرات المضيفة التي تحيط بالذرة المتخللة. يبين الشكل كيف أن الذرات المتخللة، في البلورة المتمركزة الجسم، تحتل مركز شكل سداسي الأسطح (كما في الجزء (أ)) أو تحتل مركز شكل رباعي الأسطح (كما في الجزء (ب)). هذين الشكلين (سداسي الأسطح أو رباعي الأسطح) معظم

الفراغ لكي تكمن فيه الذرة الشائبة يعتمد نوع متعدد الأسطح المتكون على طاقة التفاعل بين الذرة الشائبة والذرات المضيفة اعتمادا أساسيا وبشكل حساس.



الشكل (3-5) الشوائب المتخللة في بلورة متمركزة الجسم.

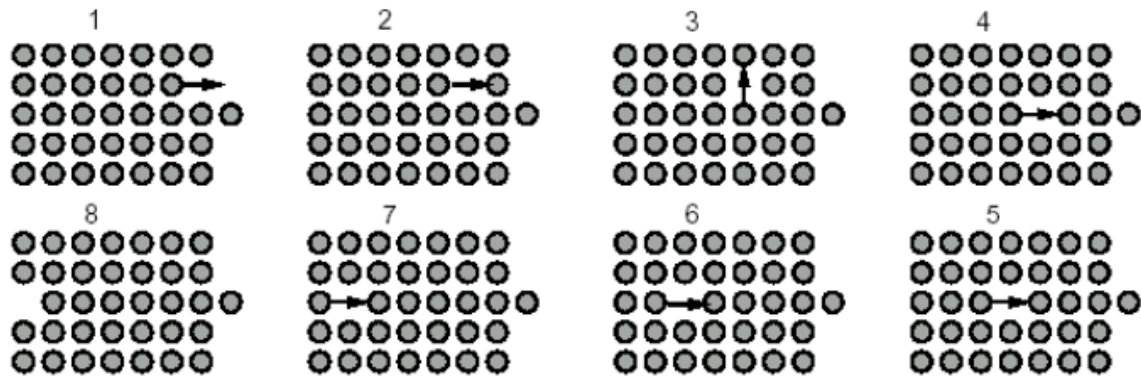
2-1- العيوب النقطية في البلورات الأيونية:

تتكون الشوائب المتخللة والفراغات بشكل طبيعي في البلورات الأيونية كما تحدث في بلورات العناصر الصلبة. ومن ناحية أخرى، بسبب أن الكاتيونات والأنيونات في البلورات الأيونية تحمل شحنات كهربية، فإن عمليات تكون الفراغات أو التخللات هي عمليات غير مستقلة، نظرا لأن القوى الكولومية (Columbic forces) بين الأيونات في هذه البلورات تكون كبيرة جدا. لذلك، لكي يتكون فراغ أنيون، عن طريق تحريكه إلى السطح، مثلا، فإن السطح سوف تظهر عليه شحنة سالبة، بينما تظهر شحنة موجبة حول الفراغ المتكون داخل البلورة، وذلك للمحافظة على التعادل الكهربائي للبلورة. يمكن تطبيق نفس المفهوم على فراغات كاتيونات في البلورة المتخللة ذاتيا.

يكون تركيز الفراغات في المواد النقية صغيرا جدا (حوالي فراغ إلى كل 10^8 ذرة) ويزداد هذا التركيز بارتفاع درجة الحرارة (حوالي فراغ إلى كل 10^8 ذرة قرب درجة الانصهار). تعتبر

الفراغات مهمة لأنها تحكم معدل الانتشار (او الاحتلال) الذري في الهيكل البنائي للمادة، بمعنى أن مقدرة الذرات على الحركة في الجسم الصلب يرجع، في المقام الأول، إلى وجود الفراغات. تكون حركة الفراغ داخل المادة عن طريق الإزاحة والإحلال محل الذرات المجاورة. يبين الشكل (5-5) ديناميكية حركة الفراغ داخل بلورة جسم صلب ذو عبوة متراسة (لتبسيط المفهوم، يمكن تشبيهه بحركة الفراغ بحركة فراغ في كراج سيارات مزدحم).

يوجد نوعان من العيوب الفراغية في البلورات الأيونية هما عيوب شوتكي (Schottky defects) وعيوب فرانكل (Frenkel defects). فيما يلي سندرس بشئ من التفصيل كل نوع من هذه العيوب وذلك بقصد ترسيخ المفهوم وتسهيل المقارنة بينهما.

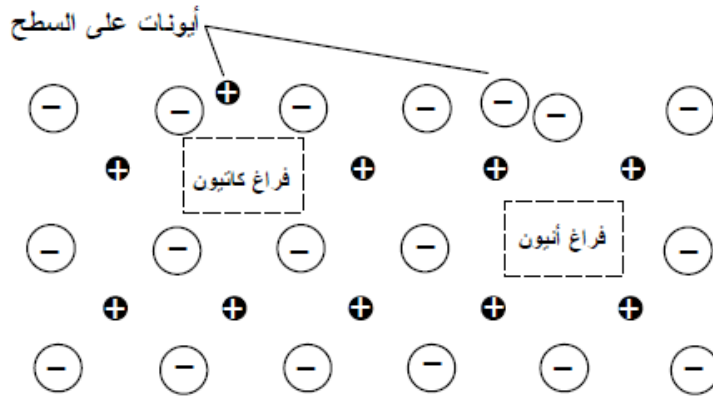


الشكل (5-5) ديناميكية حركة الفراغ داخل بلورة جسم صلب ذو عبوة متراسة.

2-2- فراغات شوتكي: Shocttcy vacances

يتكون فراغ شوتكي في المركبات الكيميائية ذات النظام البلوري الأيوني والذي يتطلب فيه اتزان الشحنة بين الأيونات المتجاورة. ينشأ فراغ شوتكي عندما تترك الذرة مكانها وتنتقل بخطوات متتابعة حتى تستقر في النهاية على سطح البلورة تاركة خلفها مكان شاغرا، كما هو موضح في الشكل (5-6)، وكنتيجة لذلك يتكون زوج من فراغات أيونات إحداهما سالب الشحنة والآخر موجب الشحنة للحفاظ على هذا الاتزان الكهربائي. ونظرا لمخالفة شحنة الفراغ المتكون لشحنة الايون الذي ترك مكانه وتحركه إلى السطح فإن ذلك يكافئ زوج من الايونات المختلفة الشحنة ولذلك يسمى عيب شوتكي، أحيانا، بعيب الزوج الأيوني. يلعب هذا النوع من العيوب دورا كبيرا

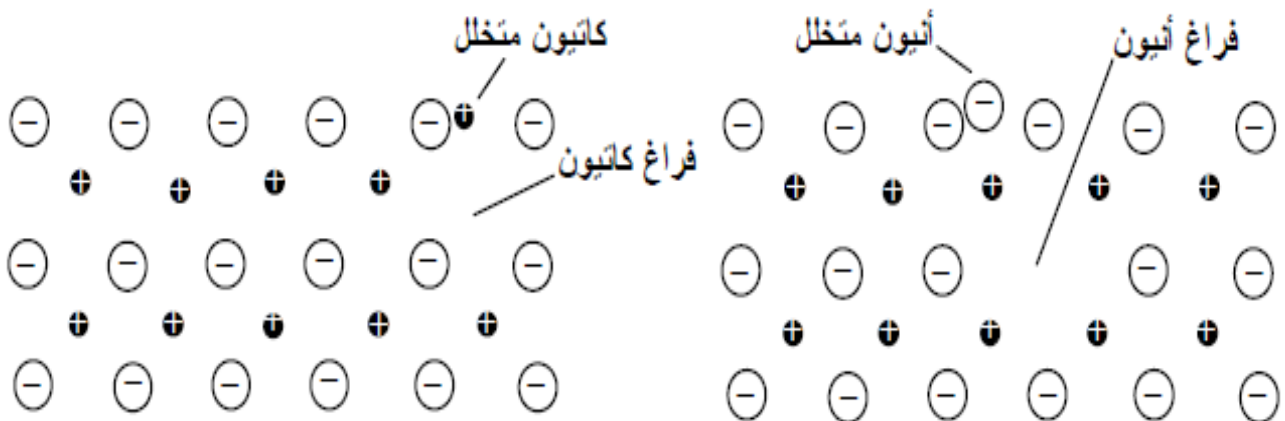
في تغير بعض الخصائص الفيزيائية للمادة وخاصة سرعة انتشار (diffusion) الذرات داخل البلورة.



الشكل (5-6) أنواع فراغات شوتكي.

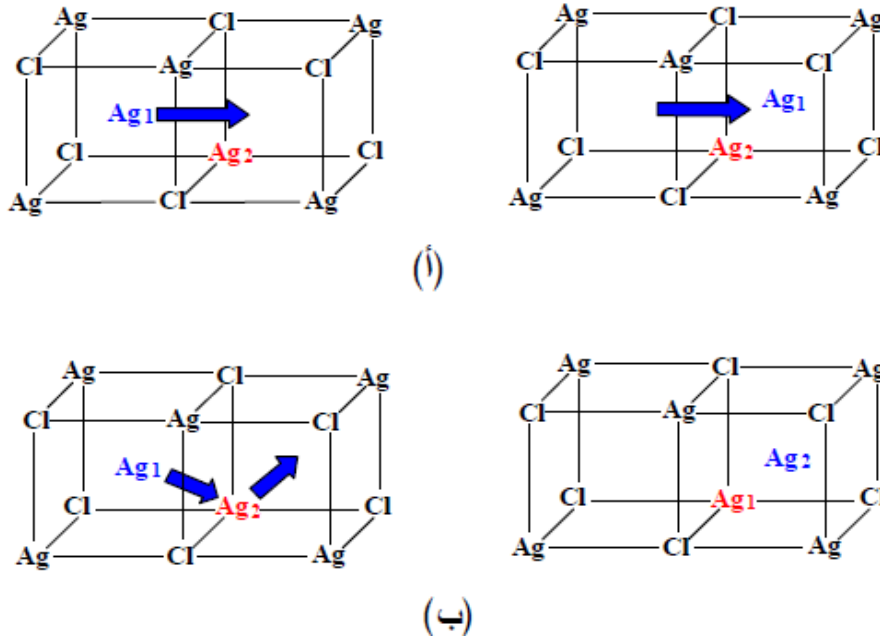
3-2- فراغات فرنكل: Frenkel vacancies

تنشأ عيوب فرنكل في المركبات الكيميائية ذات الرابطة الأيونية ويوجد نوعان من هذه العيوب تحدث في نفس الوقت: النوع الأول هو أن تترك الذرة مكانها الطبيعي في الترتيب الدوري وتتحشر بين الذرات الأخرى، أي تستقر بين المستويات الذرية مكونة ذرة تخللية بينما يكون النوع الثاني عبارة عن الفراغ الناتج عن ترك الذرة لمكانها في الترتيب. يحمل الفراغ المتكون دائماً شحنة مشابهة للشحنات المحيطة به، كما هو مبين في الشكل (5-7). يسمى عيب فرنكل، أحياناً، بعيب الأيون المزاح.



الشكل (5-7) أنواع فراغات فرنكل.

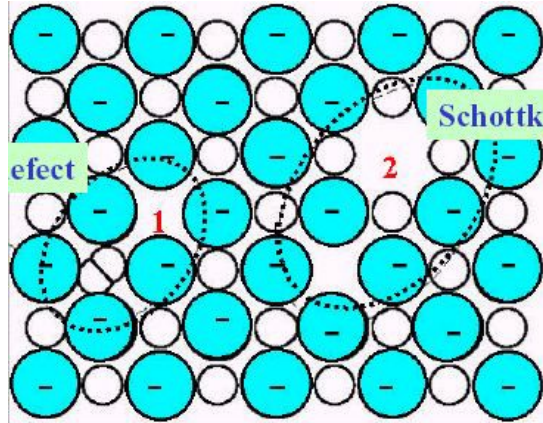
من الممكن أن يتحد الفراغ مع الذرة المتخللة ويختفي العيبان معاً، كما إنه من الممكن أن يتحد فراغين لتكوين فراغ ثنائي (divacancy) وتكون حركته أسهل من الفراغ المفرد، كما يمكن أن يتجمع عدد كبير من الفراغات معاً وينشأ عن ذلك فجوة. تتحرك عيوب فرنكل في البلورة الأيونية بأحد طريقتين: بالقفز المباشر للذرة المتخللة، كما هو مبين بالشكل (5-8)أ، أو بميكانيكية التخلل، كما هو مبين في الشكل (5-8)ب.



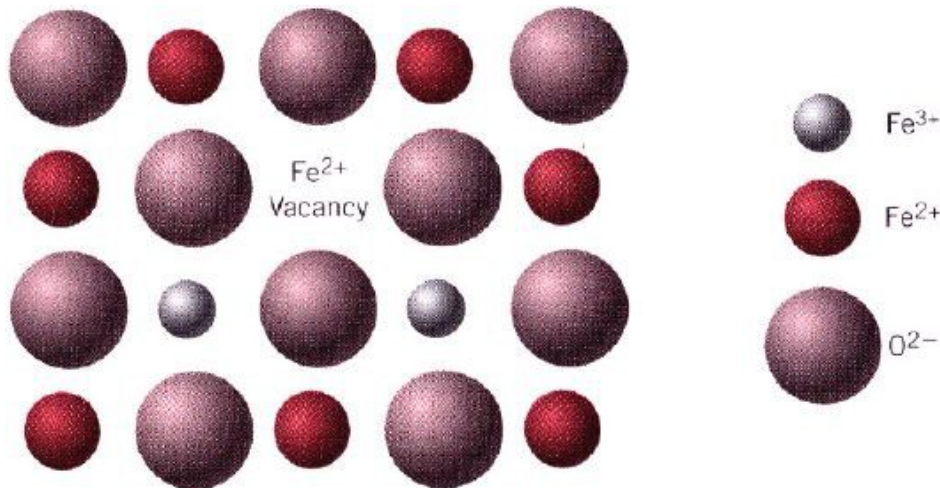
الشكل (5-8) حركة عيوب فرنكل في بلورة كلوريد الفضة.

عادة تتكون الفراغات بالقرب من الأسطح الحرة (free surfaces) وبالقرب من حدود الحبيبات (grain boundaries) وأيضا بالقرب من الإنخلاعات. يمكن المقارنة بين عيوب شوتكى وعيوب فرنكل بالرجوع إلى الشكل (5-9). لا تغير عيوب شوتكى وفرنكل النسبة بين الأنيونات والكاتيونات في المواد الأيونية معروفة الصيغة الكيميائية (stoichiometric compounds)، بينما من الممكن أن تؤدي إلى تغيير التركيب الكيميائي في المواد غير المعروفة الصيغة الكيميائية (non-stoichiometric compounds). تحتوى المواد غير المعروفة الصيغة الكيميائية على عناصر انتقالية، مثل الحديد والذي يمكن أن يوجد على إحدى الحالتين: Fe^{2+} أو Fe^{3+} ولذلك فهي غير

معروفة الصيغة الكيميائية .على سبيل المثال، في بلورة أكسيد الحديد، FeO، يكون تكافؤ الحديد +2. فإذا تحول زوج من ايونات الحديد ذو تكافؤ +2 الى حديد ذو تكافؤ +3، فإن ذلك يتطلب وجود فراغ للمحافظة على تعادل الشحنة، وبذلك يتغير التركيب الكيميائي، كما يتضح في الشكل (5-10).



الشكل (5-9) مقارنة بين عيوب شوتكي وفرنكل.



الشكل (5-10) تكون الفراغ في بلورة أكسيد الحديدوز.

2-4- أنواع أخرى من العيوب النقطية:

بالإضافة إلى الأنواع السابقة توجد أنواع أخرى من العيوب النقطية، حيث تترك ذرة أصلية مكانها في الترتيب المنتظم وتنحشر بين الذرات الأصلية الأخرى وتسمى في هذه الحالة ذرة تخلليه ذاتية . يحدث هذا النوع من العيوب في المواد البلورية التي لها كثافة تعبئة ذرية منخفضة .تحتاج هذه

العملية إلى طاقة كبيرة لكي تحدث ولذلك فهي تتم فقط عند درجات الحرارة العالية أو عند التأثير على المادة الصلبة بشعاع من الطاقة مثل شعاع النيوترونات.

3- العيوب الخطية: Line defects

يعتبر الإنخلاع أكثر العيوب الخطية شيوعاً. والإنخلاع هو عبارة عن خط منتظم من الذرات التي غابت عن مكانها (misplaced atoms) في الشبكة البلورية. غالباً، يمتد هذا الخط مسافة كبيرة نسبياً داخل الشبكة. يمكن تقسيم الإنخلاعات إلى إنخلاع الحافة و الإنخلاع اللولبي. سنشرح هذه الأنواع بشئ من التفصيل في الفصل التالي. يوجد العديد من الشواهد العملية على وجود العيوب الخطية في المواد البلورية منها: 1- اختلاف الخصائص الميكانيكية للمواد الصلبة عما هو متوقع، حيث وجد أن قيم العديد من الخصائص الميكانيكية للمواد الصلبة أقل بآلاف المرات من القيم المتوقعة بالنسبة للبلورات المثالية.

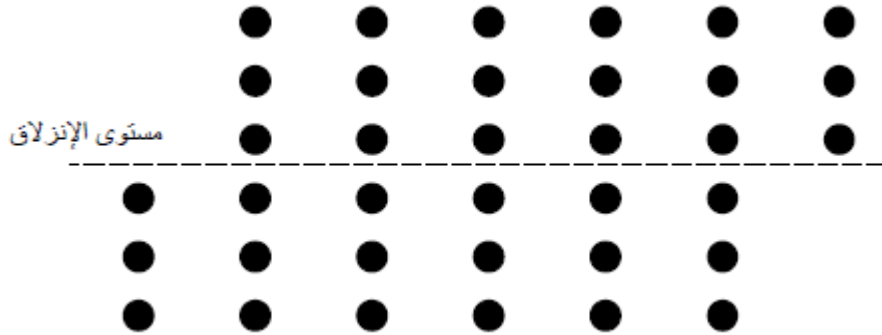
2- في تجارب تشتت الأشعة السينية وجد أن شدة الحيود في البلورات الحقيقية يختلف كثيراً عن شدة الحيود المحسوبة على أساس افتراض أن التركيب البلوري مثالي أي لا يتضمن عيوب خطية. 3- وجد أن بعض المحاليل الكيميائية تؤثر على مناطق معينة من سطح البلورة (على صورة تآكل) أكثر من تأثيرها على المناطق الأخرى، حيث وجد أن المناطق التي تتأثر أكثر هي تلك التي تتجمع عندها العيوب الخطية.

4- وجد اختلافاً كبيراً بين معدل نمو البلورة المقاس ومعدل النمو المحسوب على أساس افتراض وجود بلورة مثالية.

5- يمكن باستخدام الميكروسكوب الإلكتروني رؤية العيوب الموجودة في العينة مباشرة حيث تظهر الإنخلاعات كخطوط معتمة على شاشة فلورسينية.

الإنخلاع، كما ذكرنا من قبل، هو عيب خطي يوجد في البلورة ويتضمن عدد كبير من الذرات مرتبة حول خط. عند التأثير بقوة خارجية على بلورة فإنها تتعرض لإجهاد يحدث تشوهاً من الممكن أن يكون هذا التشوه مرناً أو غير مرناً. في حالة التشوه المرن تعود البلورة إلى شكلها

الأصلي بعد إزالة القوة المؤثرة. ولكن عند تعريض البلورة لإجهاد أكبر فإنه يحدث للبلورة تشوها غير مرن) دائم (عن طريق الانزلاق. يؤدي الإجهاد إلى حدوث انفعال في الشبكة البلورية ينتج عنه إزاحة للذرات عن مواضع اتزانها الأصلية وعندما يكون الإجهاد كبيرا فإن الانفعال يكون على صورة زحفا ملموسا لعدد كبير من الذرات مكونا تشوها غير مرن يسمى بالإنخلاع. يبين الشكل (5-11) عملية انزلاق للمستويات البلورية بمقدار خطوة مقدارها ذرة واحدة.



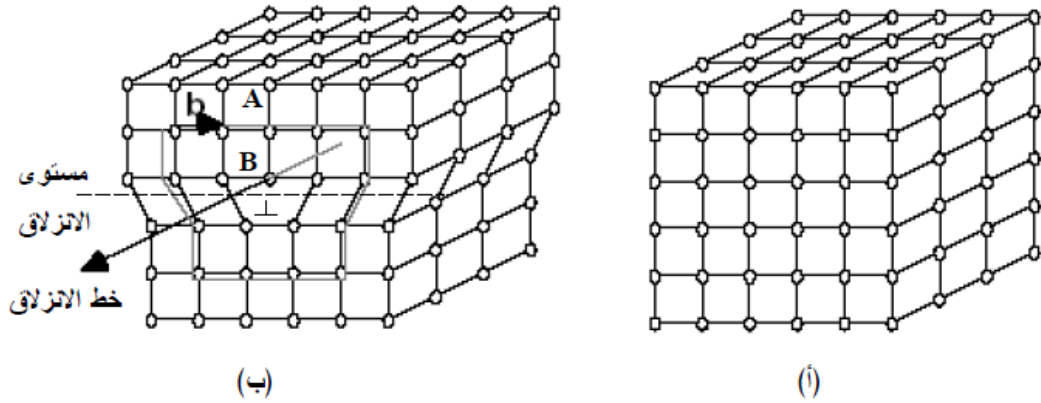
الشكل (5-11) عملية انزلاق للمستويات البلورية بمقدار ذرة واحدة.

عادة تتكون الفراغات الناتجة عن الإنخلاع بالقرب من الأسطح الحرة وبالقرب من حدود الحبيبات وأيضا بالقرب من الإنخلاعات. فيما يلي سناقش النوعين الأساسيين من الإنخلاعات وهما: إنخلاع الحافة أو النهاية والإنخلاع اللولبي أو البرمي (Screw dislocation)

3-1- إنخلاع الحافة: Edge dislocation

الشكل (5-12) يجمع رسم تخطيطي لبلورة غير مشوهه بمعنى لا تحتوى على عيوب (الجزء أ)) وبلورة مشوهة يوجد بداخلها إنخلاع حافة (الجزء ب) من الشكل) بقصد توضيح المفهوم وتسهيل المقارنة. يمكن تفسير إنخلاع الحافة على أساس أن هناك جزء من مستوى زائد محشور داخل البلورة (الجزء AB من الشكل (5-12) ب)). ينتج عن هذا الجزء تولد إجهاد ضغط على بعض مناطق الجوار وإجهاد شد على المناطق الأخرى وهذا يؤدي إلى زيادة طاقة الوضع على امتداد خط الإنخلاع. يلاحظ أن جزء البلورة الذي يوجد فيه جزء المستوى الزائد يحدث له ضغط، أي تكون

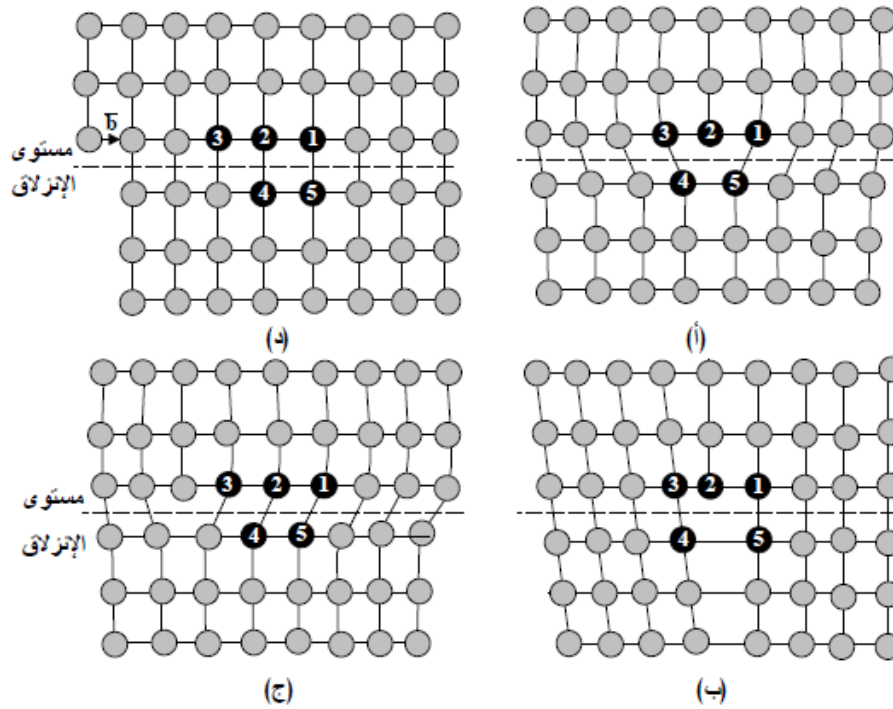
ذراته مضغوطة بعضها مع بعض ، بينما يحدث للجزء السفلى تمدد بسبب غياب جزء من المستوى يرمز لإنخلاع الحافة بالرمز \perp .



الشكل (5-12) إنخلاع الحافة داخل الشبكة البلورية.

ينزلق الإنخلاع على المستويات الواقعة عليها خط الإنخلاع أثناء عملية تشكيل المواد البلورية عند التأثير عليها بإجهادات قص، وبذلك يمكن تخفيض سمك أو أقطار المواد المعدنية عند تشكيلها . يوصف الإنخلاع بمقدار الانزلاق الحادث وذلك بواسطة متجه يعرف بمتجه بيركر (Burger vector) أو متجه الانزلاق (slip vector) و يعرف هذا المتجه بأنه الخطوة التي يخطوها الإنخلاع عند الانزلاق. يرمز لمتجه الانزلاق بالرمز \vec{b} ويكون مقداره هو المسافة التي ينزاحها الإنخلاع ، في الخطوة الواحدة وتتحدد بدلالة البعد الذري، فعلى سبيل المثال في البلورة المكعبة من الممكن أن تكون الإزاحة عبارة عن مضاعفات صحيحة لمتجهات انتقال الشبكة، أي خطوة واحدة (a) او خطوتين (2a) او ثلاث خطوات (3a) وهكذا، حيث a هي المسافة البينية للذرات (طول ضلع المكعب). يكون اتجاه حركة الإنخلاع أو متجه الانزلاق عموديا على خط الإنخلاع.

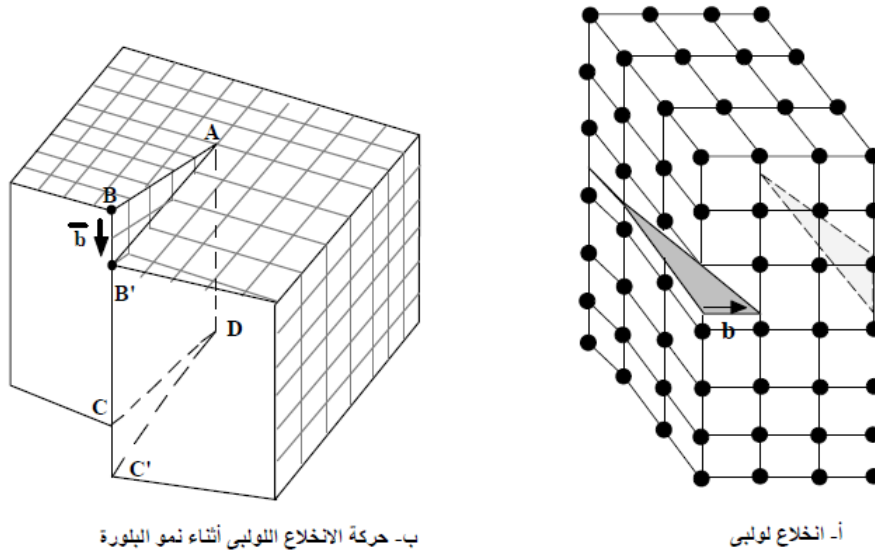
يبين الشكل (5-13) حركة إنخلاع حافة بمقدار خطوة واحدة وذلك عند التأثير علي الإنخلاع بإجهاد قص .تم تمييز 5 ذرات بلون أسود وذلك لسهولة تتبع حركة الإنخلاع من خلال سياق الأشكال من (أ) الى (د). يسمى إنخلاع الحافة أحيانا بالإنخلاع الطرفي.



الشكل (5-13) سياق حركة إنخلاع حافة عند التأثير عليه بإجهاد قص بمقدار خطوة واحدة \vec{b} .

3-2- الإنخلاع البرمي : Screw dislocation

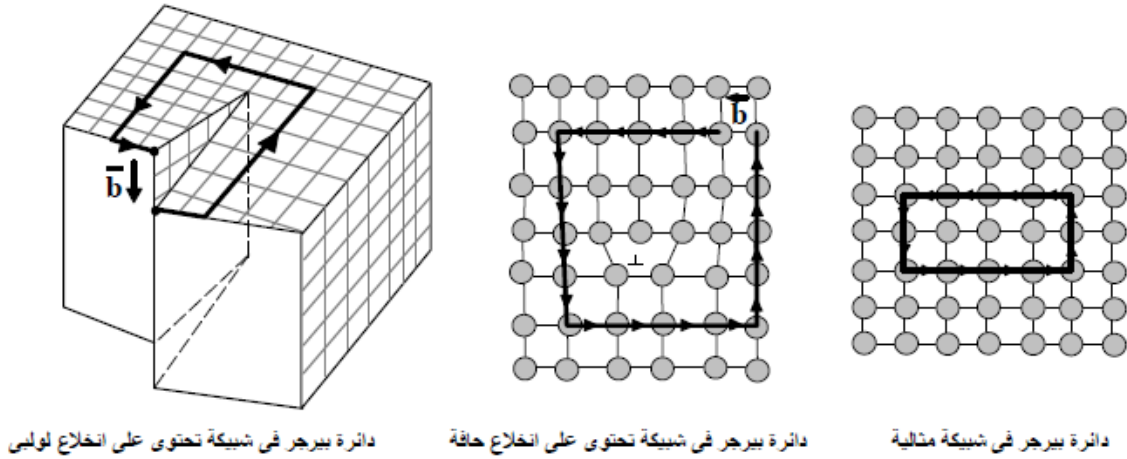
في الإنخلاع اللولبي تكون فيه إزاحة الذرات أثناء حركتها على امتداد خط الإنخلاع ويكون متجه الانزلاق موازيا لخط الإنخلاع على عكس ما هو الحال عليه في إنخلاع الحافة، كما يبين الشكل (5-14) أ. بالإضافة إلى ما سبق، تكون الطاقة الناتجة من هذا الإنخلاع أكبر منها في حالة الإنخلاع الطرفي. بالرجوع إلى الشكل (5-14) ب، وحتى يمكن تخيل الإنخلاع اللولبي، نعتبر أنه حدث قطع في البلورة في المستوى ABCD، كما هو موضح، وأن الجانب الأيسر من البلورة انزلق أعلى الجانب الأيمن. يكون الخط AD هو الإنخلاع الذي تنتهي عنده الخطوة BAB' والتي تكونت من الانزلاق. وجاءت تسمية هذا الإنخلاع باللولبي من أنه إذا تحركنا من المستوى الذري حول الإنخلاع فإننا نجد أن المستوى يكون حلزوني. ينشأ الإنخلاع اللولبي نتيجة تطبيق إجهاد قصي جزئي ويكون خط الإنخلاع موازيا لمتجه الخطوة. تتكون الإنخلاعات، بشكل عام، في الشبيكة البلورية أثناء تجمد مصهور المادة وتكون النظام البلوري. فعندما يحدث اختلال بسيط في اتجاه نمو صفوف الذرات المجاورة نجد أن جزء زائد من الصفوف أو جزء ناقص يفرض نفسه داخل البلورة ويكافئون إنخلاعاتاً.



الشكل (5-14) الانخلاع البرمي.

3-3- متجه ودائرة بيرجر : Burgers vector and circuit

يمكن وصف الإنخلاع سواء كان إنخلاع حافة أو إنخلاع لولبي بواسطة متجه إزاحة يسمى متجه بيرجر وهذا المتجه يغلق المسار الذي يحيط بخط الإنخلاع والذي يسمى دائرة بيرجر (Burger circuit). وتتكون دائرة بيرجر عن طريق الانتقال خلال المنطقة ذات الترتيب المنتظم حول الإنخلاع بخطوات عبارة عن مضاعفات صحيحة لمتجهات انتقال الشبكة في الاتجاهات الأربعة. كما هو موضح في الشكل (5-15) في البلورة المثالية فإن دائرة بيرجر تغلق نفسها ولا يتواجد متجه بيرجر. أما في حالة البلورة غير المثالية والتي يوجد بها عيوب فإن دائرة بيرجر تكون مفتوحة ويكون متجه بيرجر هو المتجه الذي يغلق الدائرة. يكون متجه بيرجر عموديا على خط إنخلاع الحافة ويقع في مستوى الانزلاق وتكون قيمته محددة وتتوقف على طبيعة دورية الشبكة البلورية وتعتمد أيضا على ميكانيكية الانزلاق. تكون قيمة متجه بيرجر لوحدة الإنخلاع مساوية لثابت الخلية. يلخص الشكل (5-15) خصائص دائرة ومتجه بيرجر في شبكات بلورية مثالية (تامة) وأخرى تحتوى على إنخالات.



الشكل (5-15) خصائص دائرة ومتجه بيرجر في شبكة بلورية.

4- العيوب المستوية: Planer defects

العيوب المستوية هي العيوب الواقعة بين سطحين (Interfacial). ويمكن تصنيف العديد من أنواع

الأسطح في المواد الصلبة إلى الفئات الآتية:

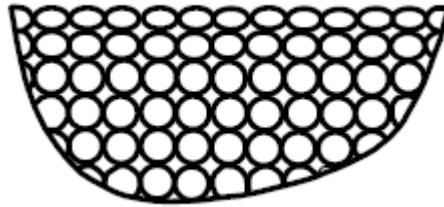
- 1- الأسطح بين المواد الصلبة والغازات وتسمى أسطح حرة.
 - 2- الأسطح بين المناطق التي يوجد فيها تغير في التركيب الذري مع الحفاظ على دورية ترتيب الذرات وتعرف هذه الأسطح بحدود المناطق (domain boundaries).
 - 3- الأسطح بين بلورتين أو حبيبتين لهما نفس الطور حيث يوجد فرق في اتجاه ترتيب الذرات عبر هذا السطح، وتسمى هذه الأسطح حدود الحبيبية (grain boundaries).
 - 4- الأسطح بين الأطوار المختلفة للمادة وتسمى حدود الطور (phase boundaries).
- حيث يوجد، بشكل عام، تغير في التركيب الكيميائي والترتيب الذري عبر السطح بين الأطوار.

5- العيوب الناتجة عن أخطاء التعبئة (الرص):

تتكون حدود الحبيبات على وجه الخصوص في المواد الصلبة المتبلورة، بينما تتواجد كل من الأسطح الحرة و حدود المناطق و حدود الطور في كل من المواد الصلبة المتبلورة وغير المتبلورة.

1-5- الأسطح الحرة: Free surfaces

تملك جميع المواد الصلبة أسطح حرة بسبب حجمها وشكلها المحدد. يختلف ترتيب الذرات على السطح الحر عن الذرات الموجودة في عمق البناء وذلك لاختلاف البيئة المحيطة بذرات السطح لعدم وجود ذرات مجاورة في أحد الجوانب. عادة، يكون للذرات القريبة من السطح نفس التركيب البلوري ولكن يوجد اختلاف صغير في متغيرات الشبكة عنها في حالة الذرات الموجودة في العمق، وهذا يمثل نوعاً من التشوه، كما يوضح الشكل (16-5).



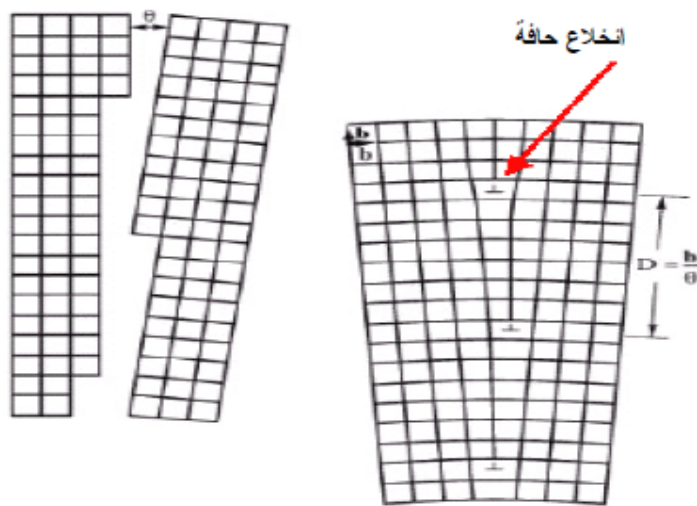
الشكل (16-5) تصور مبسط للتشوه الذي يحدث عند سطح المادة المتبلورة.

ربما تكون أهم سمة للأسطح الحرة هي طاقة السطح المصاحبة لأسطح أي جسم صلب. يمكن رؤية مصدر طاقة السطح هذه باعتبار بيئة كل من الذرات على السطح والذرات الموجودة في الداخل. فمثلاً، لكي يتم جلب ذرة من الداخل إلى السطح يجب إحداث كسر أو تشوه بعض الروابط وبذلك تزداد الطاقة. ويمكن تعريف طاقة السطح بأنها مقدار الزيادة في الطاقة لكل وحدة مساحة من السطح الجديد المتكون. في المواد المتبلورة تعتمد طاقة السطح على الاتجاه البلوري للسطح. الأسطح التي تكون عبارة عن مستويات ذات تعبئة ذرية كثيفة يكون لها طاقة سطح صغيرة، وذلك بسبب صغر نسبة روابط الذرات المكسورة والموجودة على هذه الأسطح. وهذا يعني أن للذرات عدد كبير من أقرب الجيران في مستوى السطح. تتراوح قيم طاقة السطح في المواد الصلبة من 10 جول/م² إلى 1 جول/م². بشكل عام، يمكن القول أنه كلما كانت الروابط قوية في البلورة فإن طاقة السطح تكون أعلى. يمكن تقليل طاقات السطح عن طريق إمتزاز ذرات أو جزيئات غريبة من الهواء. على سبيل المثال، في مادة الميكا تكون طاقة السطح المقطوع تحت ضغط مخلخل أعلى بكثير منها في حالة نفس السطح المقطوع في الهواء. يقوم الأكسجين الممتز من الهواء بواسطة

السطح المقطوع بتعويض الروابط المكسورة نتيجة القطع. من المستحيل حفظ أسطح المواد الصلبة نظيفة بشكل تلقائي بسبب عملية إمتزاز السطح لذرات الشوائب، ويترتب على ذلك أن خصائص السطح مثل الانبعاث الالكتروني، معدلات التبخر ومعدلات التفاعلات الكيميائية تعتمد، إلى حد بعيد، على وجود أي شوائب ممتزة. سوف تختلف هذه الخصائص إذا تمت القياسات تحت ظروف تعطي إمتزاز مختلف على السطح.

2-5- حدود الحبيبية: Grain boundaries

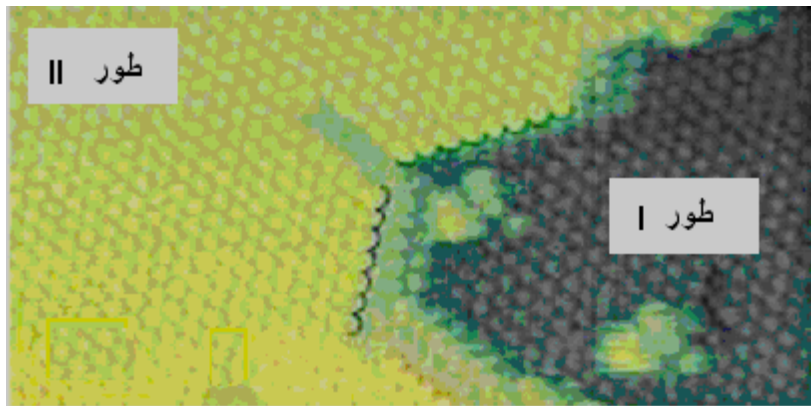
الحبيبية هي تجمع بلوري بحيث تكون جميع وحدات خلايا الحبيبية الواحدة منتظمة في نسق إتجاهي خاص بها ولها حدود خارجية (سطح) تفصلها عن الحبيبات المجاورة وهكذا فإن حدود الحبيبية تفصل بين مناطق ذات توجيه بلوري مختلف. أبسط شكل لحدود الحبيبية يكون عبارة عن سطح بيني يتكون من صفوف متوازية من إنخلاعات حافة. يسمى هذا النوع الخاص من الحدود بالحد المائل وذلك لأن عدم التوجيه يكون في شكل ميل صغير على محور موازي للإنخلاعات، كما يوضح الشكل (5-17). ويكون التركيب الناتج مكافئ لإنخلاعات حافة مفصولة بمسافة تساوي b/θ ، حيث b هو طول متجه بيركر و θ هي زاوية ميل الإنخلاعات. يشار إلى الحد المائل بحد الزاوية المنخفضة عندما تكون زاوية عدم التوجيه أقل من 10° .



الشكل (5-17) تركيب حد حبيبية مبسط يسمى بالحد المائل لأنه يتكون عندما تميل حبيبتين

متبلورتين على بعضهما بعض بزواوية مقدارها بضع درجات.

عندما يكون لحد الحبيبية عدم توجيه أكبر من 10° أو من 15° درجة، فإنه من الناحية العملية لا يمكن التفكير بأن الحد مركب من إنخلاعات لأن المسافة الفاصلة بين الإنخلاعات سوف تصبح صغيرة، الأمر الذي معه تفقد الإنخلاعات تماثلها الخاص. يمثل حد الحبيبية منطقة لها إتساع يساوى ثخانة مقدارها بضع ذرات، حيث يوجد انتقال (تغير) في الدورية الذرية بين البلورات أو الحبيبات المتجاورة لحدود الحبيبية طاقة سطح بيني (interfacial energy) ناتج عن الاضطراب في الدورية الذرية للمنطقة المجاورة للحد أو بسبب الروابط المكسورة التي توجد على السطح البيني. عموماً، تكون طاقة السطح البيني أقل من طاقة السطح الحر وذلك لأن الذرات في حدود الحبيبية تكون محاطة من كل الجوانب بذرات أخرى وعدد الروابط المكسورة أو المشوهة فيه يكون أقل. يطلق على المواد الصلبة التي تحتوى على حدود حبيبات بالمواد المتعددة التبلور، حيث أن البناء التركيبي يتكون من العديد من المناطق (البلورات) يكون لكل منها توجيه بلوري مختلف، كما يبين الشكل (5-18).

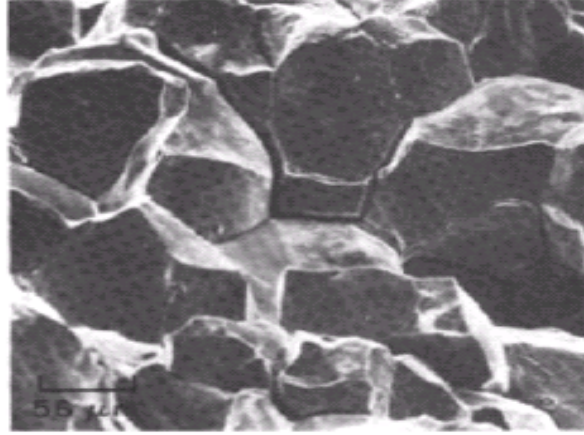


الشكل (5-18) سطح مكون بين طورين.

3-5- حدود الطور: Phase boundaries

يعرف الطور بأنه جزء أو منطقة من المادة قابلة للانفصال وتكون متجانسة ولها تركيب فيزيائي وكيميائي معين. توجد الأطوار في شكل سائل متجمد تخلي، أو سائل متجمد تعويضي أو سبيكة منتظمة التركيب أو مركبات ومواد عشوائية (غير متبلورة) أو حتى على شكل بخار عناصر نقية. يوجد الطور المتبلور في الحالة الصلبة في شكل بلورة واحدة أو في شكل متعدد التبلور. يبين الشكل

(5-19) صورة لسطح كسر فولاذ لا يصدأ مأخوذة بواسطة ميكروسكوب الكتروني ماسح يظهر وجود أطوار عديدة.



الشكل (5-19) صورة من مجهر الالكتروني ماسح يوضح عدة اطوار.

تتركب المواد الصلبة التي تتكون من أكثر من عنصر، عادة، من عدد من الأطوار. تجد مثل هذه المواد الكثير من التطبيقات، فعلى سبيل المثال، يتركب مثقاب الأسنان، الذي لا ننسى الألم الذي سببه لمعظمنا، من خليط من بلورات كربيد السليكون الصغيرة تحيط هيكل من معدن الكوبالت. هنا، يكون الكوبالت طور متصل و طور آخر يتماسك مع بلورات كربيد السليكون التي تتميز بصلابتها العالية. وعموما، يشار إلى المواد المتعددة الطور، مثل المادة السابق ذكرها بمواد مركبة (composite materials)، وتجد هذه المواد أهمية كبيرة في مجال الهندسة وذلك لأن لها العديد من الخصائص المميزة التي تجعلها أفضل من المواد وحيدة الطور في الكثير من التطبيقات.

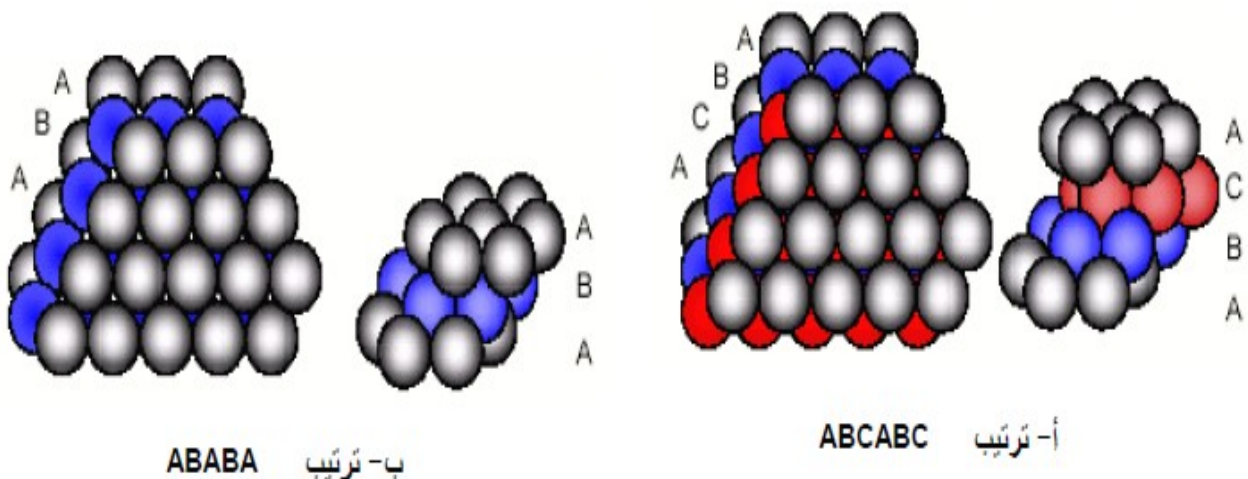
يؤثر التركيب البلوري والكيميائي على طبيعة الأسطح البينية للأطوار. عندما تكون الأطوار مختلفة في التركيب الكيميائي والبلوري فإن طبيعة السطح تكون شبيهة إلى حد كبير بسطح الحبيبة (حدود الحبيبة). وعندما تكون الأطوار لها نفس التركيب والتوجيه البلوري فإن الأسطح التي تفصل بينها ربما تكون مماثلة في الطاقة والتركيب لحدود الحبيبة ذات زاوية الميل الصغيرة. يؤدي مفهوم أن المادة تتركب من أطوار متصلة وأطوار متقطعة إلى تصنيف بسيط لمختلف أنواع المواد المركبة. يقدم الجدول (5-1) بعض الأمثلة مصنفة طبقا للتركيب البنائي (مواد متبلورة أو مواد غير متبلورة) وطبيعة كل طور.

الجدول (5-1) تصنيف المواد المركبة (متعددة الاطوار).

طور متصل	طور متقطع	امثلة
متبلور	متبلور	كل الأنظمة المعدنية مثل الحديد الزهر ، الصلب، سبيكة اللحام، معظم الصخور الطبيعية مثل الجرانيت والرخام.
متبلور	غير متبلور	مواد ليس لها أهمية تطبيقية.
غير متبلور	متبلور	معظم المواد السيراميكية الصناعية، مثل قرميد البناء، البور سليين العازل كهربائية، البوليمرات المتماصة جزئياً، بعض المركبات المتبلورة-البوليمرية.
غير متبلور	غير متبلور	الألياف الزجاجية، الزفت) الإسفلت(، الخشب، الأسمت المتميع.

4-5- عيوب الرص (التعبئة): Packing defects

يفرض أن البلورة عبارة عن رصات لمستويات تتكون من ذرات بعضها فوق بعض، وكان أحد المستويات مزاحا عن المستوى المجاور بإزاحة لا تساوى متجه في الشبكة البلورية فإنه يتكون عيباً في التركيب يسمى خطأ رص. تحدث هذه الأخطاء في البلورات المتراسة مثل البلورة المكعبة المتمركزة الأوجه التي سوف تدرس لاحقاً. يكون الرص في هذه البلورة ذات أنماط متعددة مثل الرص على الهيئة ABCABC او الرص على الهيئة ABAB، كما هو موضح بالشكل (20-5). عندما ينتج ترتيب ABABC مثلاً بدلاً من الترتيب ABCABC فإننا نقول أنه حدث خطأ في الرص.



الشكل (20-5) رسم توضيحي لرص مستويات من الذرات في بلورة مكعبة متمركزة الأوجه.

6- إيجاد تركيز وطاقة التنشيط لتكوين الفراغ:

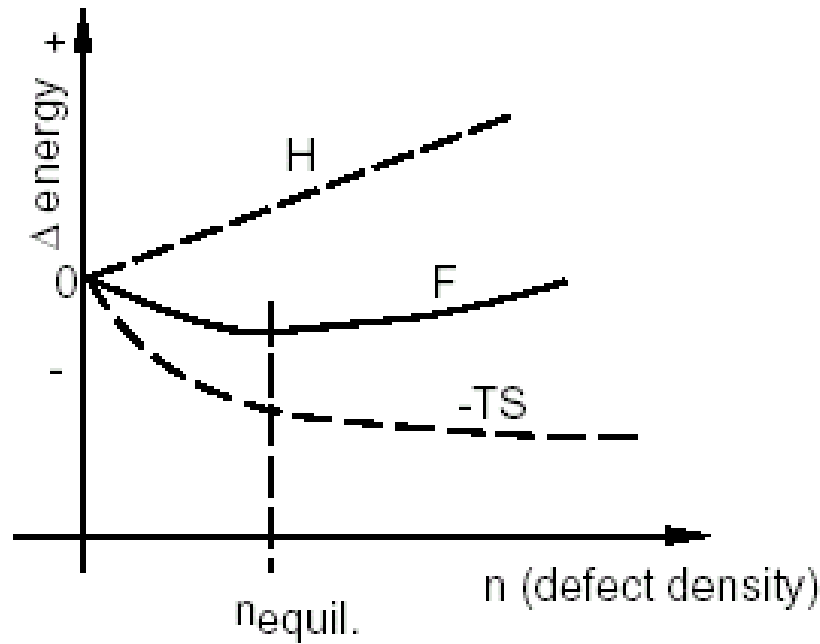
لتعيين العلاقة بين طاقة تكوين الفراغ وعدد الفراغات عند درجة حرارة معينة يجب اعتبار أن البلورة في حالة اتزان حراري ديناميكي بمعنى أن عدد الفراغات التي تتكون في البلورة في وحدة الزمن يساوي عدد الفراغات التي تختفي من البلورة في نفس الزمن تماما مثل ما يحدث لسائل في حالة اتزان ديناميكي مع بخاره. سوف نعتبر فيما يلي تكون عيب شوتكي من القانون الثاني للديناميكا الحرارية نجد أن إجمالي الطاقة الحرة للنظام (طاقة هولمولتز)، يكون على الصورة،

$$F = H - TS \quad 5-1$$

حيث F هي الطاقة الحرة للنظام قيد الدراسة، و H هو المحتوى الحراري (الانثالي enthalpy) و S هو الأنتروبيا أو الفوضى (الاختلاج) (entropy) و T هي درجة الحرارة المطلقة.

إذا حدث التفاعل عند درجة الحرارة T ، يحدث تغير في قيمة F مقداره ΔF طبقا للتغير في ΔH ويكون التغير المحتمل في الأنتروبيا هو $T\Delta S$. هذه هي الحالة التي تصف تكون العيوب في الجسم الصلب التام طبقا لتوزيع الطاقة (ماكسويل-بولتزمان) فإنه يعتقد أن عددا من الذرات الفردية يمكن أن تكتسب طاقة حرارية تكون كافية لإزاحتها عن موضع الاتزان في الشبكة إلى مكان بيني وتعتبر بمثابة عيب نقطي. تحتاج عملية تكوين العيب النقطي هذه إلى طاقة وتؤدي إلى تكون إجهاد في الشبكة و بالتالي إلى زيادة في المحتوى الحراري للنظام (ΔH) تكون موجبة وتزداد خطيا مع عدد العيوب المتكونة). يؤدي الانحراف عن الكمال بتوليد العيوب النقضية إلى زيادة العشوائية أو الفوضى (ΔS موجبة). يكون مقدار الفوضى المتولدة (ΔS) كبيرا جدا خلال الخطوة الأولى من الكمال (التركيب المثالي) في الاتجاه إلى إفساد ترتيب النظام، ولكن يتناقص (مع تكون عدد معين من العيوب) كلما ازدادت الفوضى الكلية في النظام. وبناء على ذلك فإن الحد $T\Delta S$ يتناقص بسرعة عند البداية ثم يميل إلى الثبات. يبين الشكل (5-21) النتيجة النهائية، حيث تظهر الطاقة الحرة قيمة صغرى عند تكون عدد معين من العيوب في الجسم الصلب. تكون كثافة العيوب (n) عند الاتزان دالة في درجة الحرارة. وتخبرنا النهاية الصغرى للطاقة الحرة F أن التحول من الكمال إلى التركيب ذي العيوب (اي في اتجاه الفوضى) عند الاتزان يحدث تلقائيا، أي بشكل طبيعي. تعتبر

عملية تكون الفراغات الذرية في المواد الصلبة غير واضحة ومازالت ميكانيكية التكوين هدفا للأبحاث المكثفة.



الشكل (5-21) ديناميكية تكون العيوب النقطية في الجسم الصلب.

أظهرت حسابات الطاقة الحرارية المصاحبة للذرات في الشبكة أن متوسط طاقة اهتزاز ذرات الشبكة تكون أقل بكثير من 1 eV (أقل كمية من الطاقة تلزم لتكون فراغ) عند درجة حرارة الغرفة. ولهذا، فإن ذرة الشبكة ستحتاج فقط إلى طاقة ΔH_d وهي الطاقة اللازمة لتكون العيب (أثناء حدوث تأرجح كبير في الطاقة). الاحتمال النسبي لأن يكون لذرة ما مقدار طاقة ΔH_d أعلى من طاقة المستوى الأرضي لها هو $\Delta H_d/kT$ ، حيث أنه يمكن تكوين فراغ عندما تكون طاقة الذرة مساوية لطاقة تكوين الفراغ، فإن احتمال تكون فراغ مكان الذرة هو نفس الاحتمال السابق. لكي نستنتج تركيز الفراغات في البلورة، نعتبر بلورة مولارية تحتوي على عدد N . من الذرات يكون عدد مواقع الفراغات المتكونة هو n_d ويكون عدد الطرق الممكنة التي تتوزع بها الفراغات هي،

$$\frac{N!}{(N-n)!n!} \quad 5-2$$

تدل انتروبيا النظام على احتمال الحصول أي توزيع من التوزيعات السابقة، بمعنى ان ΔS تمثل الفوضى (الأنتروبيا) في النظام نتيجة تكون فراغ واحد (عيب) وبالتالي يكون الاحتمال هو

$$p = k \ln \left(\frac{N!}{(N-n)!n!} \right) \quad 5-3$$

وإذا كان تركيز الفراغات في الشبكة هو $c = \frac{n_d}{N}$ وباستخدام تقريب ستيرلنج $\ln(N!) = N \ln(N) - N$ نحصل من المعادلة (5-3) بالشكل

$$p = Nk[clnc - (1 - c)\ln(1 - c)] \quad 5-4$$

وتكون الزيادة في الأنتروبيا الذاتية نتيجة إدخال عدد n_d هي $n_d \Delta S$ وبالتالي يكون التغير الكلي في الأنتروبيا بإدخال هذا العدد من الفراغات هو

$$n_d \Delta S = Nk[clnc - (1 - c)\ln(1 - c)] \quad 5-5$$

وحيث أن الطاقة الحرة تعطى بالعلاقة ($F=H-TS$) فإن التغير في الطاقة الحرة يساوى الطاقة الحرة للفراغات المتكونة ويكون على الصورة،

$$n_d \Delta H = T[n_d \Delta S - Nk(clnc - (1 - c)\ln(1 - c))] \quad 5-6$$

بمفاضلة المقدار السابق بالنسبة لعدد الفراغات n_d ومساواة الناتج بالصفر نحصل على حالة الاتزان الديناميكي الحرارى كالاتي،

$$\Delta H_d - T \Delta S + Tk \ln \frac{c}{1-c} = 0$$

$$\frac{c}{1-c} = e^{-\left(\frac{\Delta H_d - T \Delta S}{kT}\right)}$$

وإذا كان التركيز c صغيراً $1-c=1$ وتصبح المعادلة السابقة على الصورة الآتية،

$$c = e^{\frac{\Delta S}{k}} e^{-\frac{\Delta H_d}{kT}} \quad 5-7$$

ويمكن كتابة عدد الفراغات على الصورة التالية

$$n_d = N e^{\frac{\Delta S}{k}} e^{-\frac{\Delta H_d}{kT}} \quad 5-8$$

حيث n_d هو عدد الفراغات أو العيوب (عند الاتزان عند T)، و N هو العدد الكلي للمواقع الذرية لكل مول، و ΔH_d هي الطاقة اللازمة لتكون العيب (الفراغ) و T درجة الحرارة المطلقة.

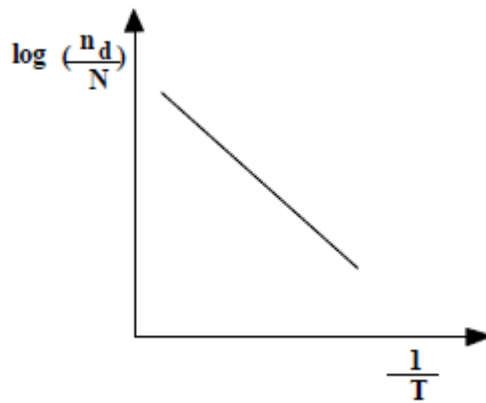
يكون عدد الفراغات المتكونة صغيراً عند درجات الحرارة المنخفضة حيث $KT \ll \Delta H_d$ ويزداد

هذا العدد بسرعة مع زيادة درجة الحرارة. فعلى سبيل المثال، بفرض ان $N=10^{29}$ atoms/m³

يكون عدد الفراغات $n_d = 10^{12}$ vacancy/m³ عند $T = 300$ k بينما يكون عدد الفراغات $n_d = 10^{22}$ vacancy/m³ عند $T = 900$ k.

طبقا للمعادلة السابقة يمكن رسم العلاقة بين $\log\left(\frac{n_d}{N}\right)$ و $\frac{1}{T}$ كما هو مبين بالشكل (5-22) ونحصل

على خط مستقيم ميله يساوى $-\frac{\Delta H_d}{kT}$ ، وبذلك، يمكن حساب طاقة التنشيط لتكوين الفراغ، ΔH_d .



الشكل (5-22) اعتماد عدد الفراغات على درجة الحرارة.

7- أيجاد طاقة تكون الفراغ عمليا:

Determination of vacancy formation energy experimentally

توجد العديد من الطرق العملية لتعيين عدد الفراغات وكل هذه الطرق تعتمد على أن وجود الفراغات في عينة من المادة الصلبة المتبلورة يؤدي إلى تغير في إحدى الخصائص الفيزيائية للعينة وبقياس التغير في الخاصية الفيزيائية يمكن الحصول على كثافة الفراغات في العينة. فعلى سبيل المثال، يسبب وجود الفراغات زيادة في حجم العينة ومن ثم يمكن قياس التغير في الحجم ومعرفة كثافة الفراغات في العينة. كذلك، يؤدي وجود الفراغات إلى تغير المقاومة النوعية الكهربائية وقد وجد أن،

$$\Delta\rho = Ae^{-\frac{\Delta H_d}{kT}} \quad 5-9$$

حيث A ثابت. في مثل هذه التجارب يتم استخدام عينات مبردة تبريدا فجائيا، حيث أن التبريد الفجائي يعمل على المحافظة على الفراغات المتكونة عند درجات الحرارة العالية. وعند تغيير درجة التبريد الفجائي باستمرار وقياس المقاومة النوعية في كل حالة يمكن تحديد كيفية تغير عدد الفراغات مع درجة الحرارة ومن ثم حساب طاقة التنشيط لتكوين الفراغات.

مثال: بينت الدراسات المعملية أن النسبة بين كثافة الفراغات في المولبديوم (Mo) عند درجات الحرارة 500 °C و 900 °C هي 2×10^{-3} فما قيمة طاقة تكوين فراغ في هذا النظام.

الحل: بما أن عدد الفراغات المتكونة في البلورة عند درجة الحرارة (T k) فان n_d تعطى

$$n_d = Ne^{-\frac{\Delta H_d}{kT}}$$

حيث n_d هو عدد العيوب (الاتزان عند T) و N هو العدد الكلي للمواقع الذرية لكل مول، و ΔH_d هي الطاقة اللازمة لتكون العيب (الفراغ) و T هي درجة الحرارة المطلقة. وحيث أن نسبة الفراغات المتكونة عند 500 °C إلى الفراغات المتكونة عند 900 °C هي 2×10^{-3} فإنه باستخدام العلاقة السابقة والتعويض عن النسبة ودرجات الحرارة (بالكلفن)، نحصل على

$$\frac{n_{d500}}{n_{d900}} = 2 \times 10^{-3} = \frac{Ne^{-\frac{\Delta H_d}{k(500+273)}}}{Ne^{-\frac{\Delta H_d}{k(900+273)}}} = \frac{e^{-\frac{\Delta H_d}{k(773)}}}{e^{-\frac{\Delta H_d}{k(1173)}}}$$

$$\frac{e^{-\frac{\Delta H_d}{k(773)}}}{e^{-\frac{\Delta H_d}{k(1173)}}} = 2 \times 10^{-3}$$

$$-\frac{\Delta H_d}{k773} - \frac{-\Delta H_d}{k1173} = \frac{-\Delta H_d}{k773} + \frac{\Delta H_d}{k1173} = \ln(2 \times 10^{-3})$$

$$\frac{-400\Delta H_d}{1173 \times 773k} = -6.214608$$

بالتعويض عن ثابت بولتزمان، $k=1.38 \times 10^{-23}$ J/k نحصل على

$$\Delta H_d = \frac{6.214608 \times 1173 \times 773 \times 1.38 \times 10^{-23}}{400} = 19440.63 \times 10^{-23}$$

$$\Delta H_d = 1.944 \times 10^{-19} \text{ joule} \times 6.242 \times 10^{18} = 1.21 \text{ eV}$$

مثال: في الحديد Fe إذا كان مقدار الطاقة المصاحبة لتوليد فراغ هو 1.05 eV عند أي درجة حرارة T بالدرجات المئوية سوف يتكون فراغ واحد لكل 10^5 ذرة.

الحل: يعطى عدد الفراغات المتكونة في البلورة كدالة في درجة الحرارة المطلقة T بالعلاقة،

$$n_d = Ne^{-\frac{\Delta H_d}{kT}}$$

حيث أن عدد الفراغات هو $n_d=1$ وعدد الذرات هو $N=10^5$ وطاقة التكوين هي

$$1 = 10^5 e^{-\frac{\Delta H_d}{kT}}$$

بما أن مقدار الطاقة المصاحبة لتوليد فراغ هو 1.05 eV عند أي درجة حرارة T

$$\Delta H_d = \frac{1.05 \text{ eV}}{6.242 \times 10^{18}} = 1.6822 \times 10^{-19} \text{ joule}$$

بالتعويض عن طاقة التنشيط وثابت بولتزمان $k=1.38 \times 10^{-23} \text{ J/k}$ في المعادلة السابقة نحصل على،

$$1 = 10^5 e^{-\frac{1.6822 \times 10^{-19}}{1.38 \times 10^{-23} T}}$$

بأخذ لوغاريتم طرفي المعادلة نجد أن

$$-\frac{1.6822 \times 10^{-19}}{1.38 \times 10^{-23} T} = \ln(10^{-5}) = -11.52925$$

وتكون درجة الحرارة هي

$$T = \frac{1.6822 \times 10^{-19}}{1.38 \times 10^{-23} \times 11.52925} = 1058 \text{ k}$$

$$T = 1058 \text{ k} - 273 = 785 \text{ }^\circ\text{C}$$

مثال: نظرياً، تدق استنتاج أن طاقة التنشيط اللازمة لتكوين ذرة تخلليه واحدة من النحاس هي 4 eV تقريباً. بفرض أن هذه القيمة صحيحة، عين تركيز هذه العيوب (فراغ/سم³) عند الاتزان عند 1350 k.

الحل

يعرف تركيز الفراغات بالعلاقة

$$c = \frac{n_d}{N} = e^{-\frac{\Delta H_d}{kT}}$$

حيث n_d هو عدد العيوب (عند الاتزان عند T) و N هو العدد الكلي للمواقع الذرية لكل مول، و ΔH_d هي الطاقة اللازمة لتكون العيب (الفراغ) و T هي درجة الحرارة المطلقة. تكون طاقة تكوين الفراغ هي $\Delta H_d = \frac{4 \text{ eV}}{6.242 \times 10^{18}} = 0.64102 \times 10^{-18} \text{ joule}$ وبالتعويض عن

طاقة التكوين ودرجة الحرارة 1350 k و ثابت بولتزمان $1.38 \times 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{k}}$ نحصل على

$$c = \frac{n_d}{N} = e^{-\frac{0.64102}{1.38 \times 10^{-23} \times 1350}} = 1.18 \times 10^{-5} \frac{\text{فراغ}}{\text{cm}^3}$$