Wigner Seitz Primitive Cell
خلية فيجنر– زايتس الأولية

تعتبر طريقة فيجنر-زايتس نسبة للعالم فيجنر-زايتس طريقة مبسطة لتعيين الخلية الأولية، حيث تتلخص هذه الطريقة بالخطوات التالية:

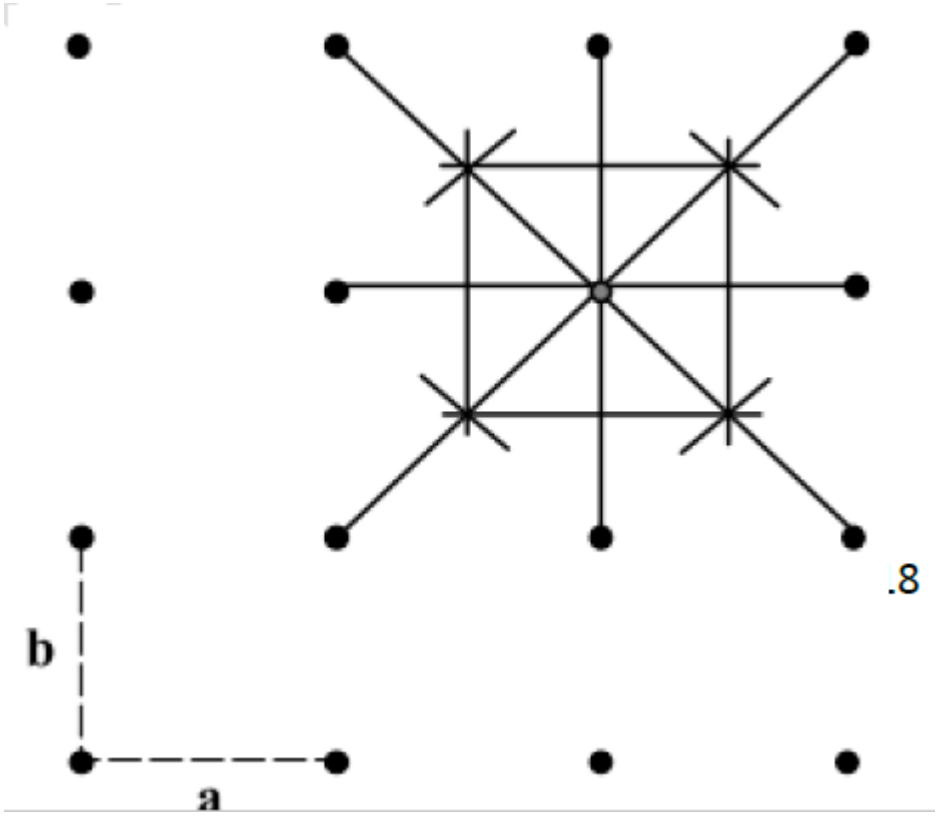
١- نختار نقطة شبيكة معينة .

٢- نوصل بين نقطة الشبيكة المعينة و النقاط المجاورة لها بواسطة خطوط مستقيمة .

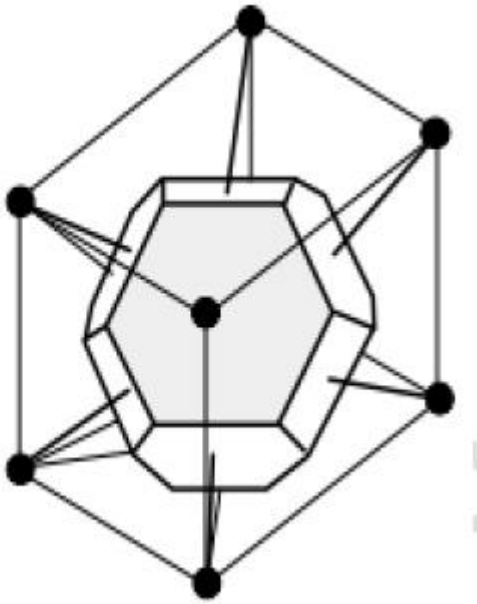
٣- نرسم خطوط او مستويات متعامدة في منتصف الخطوط المستقيمة الموصلة .

٤- المساحة في حالة بعدين او الحجم الاصغرفي حالة ثلاثة ابعاد المحصور بين المستقيمات او المستويات المتعامدة تمثل وحدة خلية فيجنر-زايتس وهى خلية تحتوى على نقطة شبيكة واحدة .

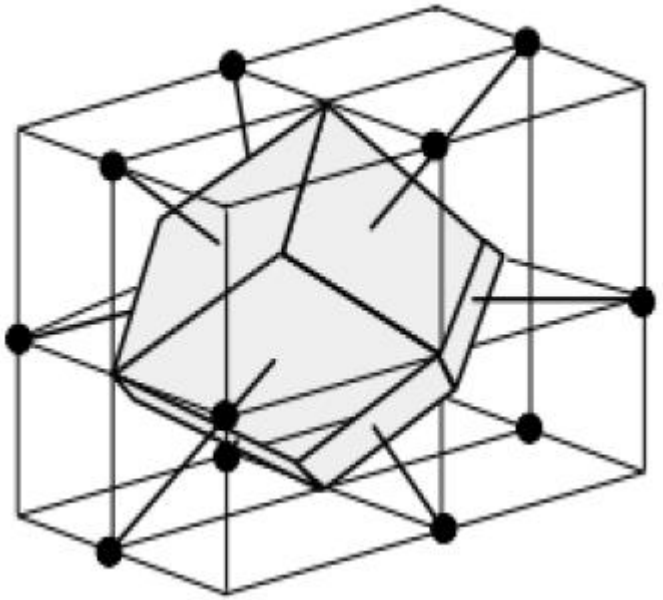
خلية فيجنر- زايتس في بعدين



خلية فيجنر- زايتس في ثلاثة ابعاد



مكعب متمركز الجسم



مكعب متمركز الاوجه

التماثل في البلورات Symmetry Of Crystals

- التماثل : تكرار أو تطابق أجزاء معينة لشكل ما عند اجراء مجموعة من العمليات.
- ويعتبر التماثل أهم الخصائص الهندسية التي تميز وحدة الخلية Unit Cell للجسم الصلب المتبلور.
- حيث تتميز كل خلية بنوع واحد أو أكثر من أنواع التماثل الهندسي.

عناصر التماثل Symmetry Elements

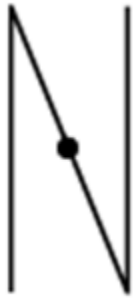
- ١- محور التماثل Symmetry axis: وهو عبارة عن مستقيم اذا ما دار الشكل حوله بزاوية معينة حل الشكل محل نفسه.
- وتسمى أصغر زاوية يدورها الشكل حول محور التماثل كي يحل الشكل محل نفسه بزاوية الدوران البدائية primitive rotation angle لذلك المحور.
- تحدد زاوية الدوران لمحورالدوران بعدد المرات التي يحل الشكل فيها محل نفسه عند دورانه حول ذلك المحور دورة كاملة، فإذا كان عدد مرات احلال الشكل محل نفسه عند الدوران ° ٣٦٠ هو n فأن :

- $n = \frac{360}{\theta}$

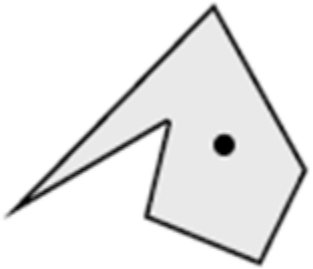
- فاذا كان تكرار الشكل مرة واحدة في الدورة الكاملة اي ان البلورة تعيد نفسها كل ٣٦٠° فيقال لمحور التماثل الدوراني بأنه احادي التماثل.
- أما اذا كان التكرار للأشكال مرتين ف ي الدورة الكاملة، أي تعيد نفس الوضع كل ١٨٠° فيقال لمحور التماثل الدوراني بأنه ثنائي التماثل.
- اما اذا استعاد ت البلورة وضعه ثلا ث مرا ت في الدورة الكاملة أي كل١٢٠° فيسمى المحور في هذه الحالة بثلاثي التماثل.
- وهكذا للمحور رباعي التماثل أي كل ٩٠° وسداسي التماثل أي كل ٦٠°. لذا تكون المحاور الدورانية(١ ، ٢ ، ٣ ، ٤ ، ٦) و لا وجود للمحاورالخماسية و السباعية و الثمانية في البلورات و ذلك لأنه لا يتفق مع الترتيب الذري في النظم البلورية المختلفة.

n= 4 (د)

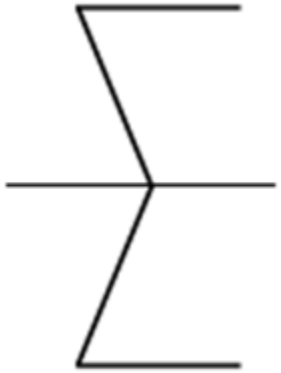
n= 3 (ج)



n= 2 (ب)

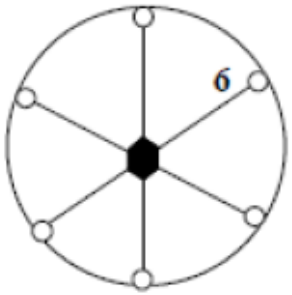


n= 1 (أ)



n= m (و)

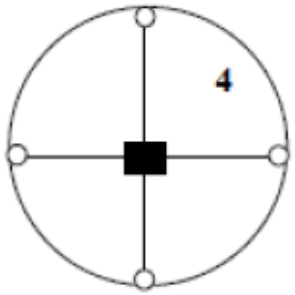
n= 6 (هـ)



n=6

Six fold axis

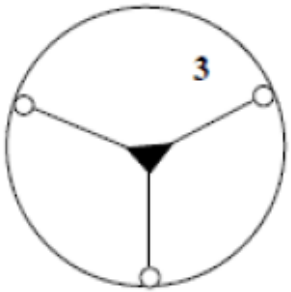
محور سداسی



n=4

Four fold axis

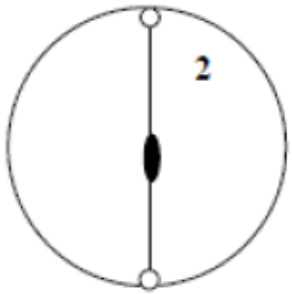
محور رباعی



n=3

Three fold axis

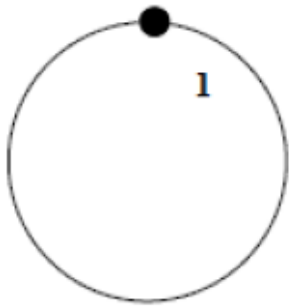
محور ثلاثی



n=2

Two fold axis

محور ثنائی

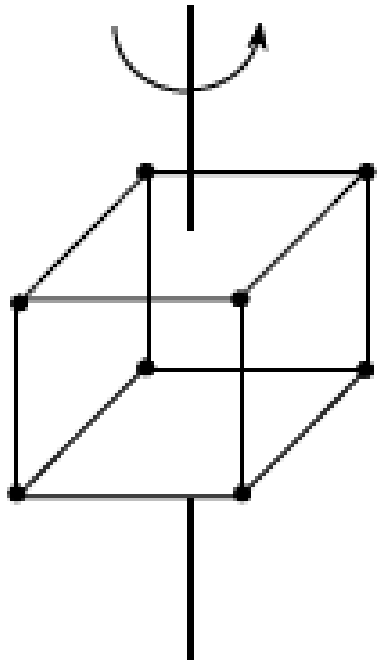


n=1

Identity axis

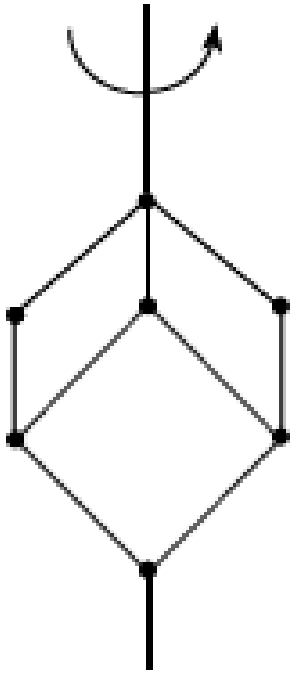
محور أحادی

- على سبيل المثال الخلايا المكعبة تمتلك ثلاثة عشر محور تماثل هي :
- ١- عدد ٣ محاور من الرتبة الرابعة يصل كل منها بين مراكز الأوجه المتقابلة.
- ٢- عدد ٤ محاور من الرتبة الثالثة يصل كل منها بين زاويتين مجسمتين متقابلتين.
- ٣- عدد ٦ محاور من الرتبة الثانية يصل كل منها بين النقطتين المنصفتين لحرفين متقابلين.



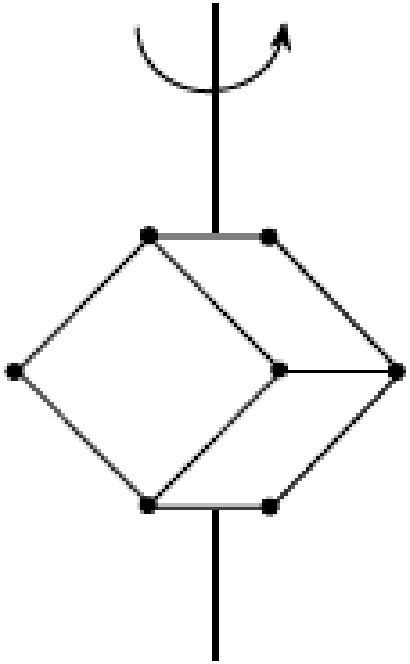
$\Theta=90^{o}$

أ- 3 محاور رباعية الرتبة



$\Theta=120^{o}$

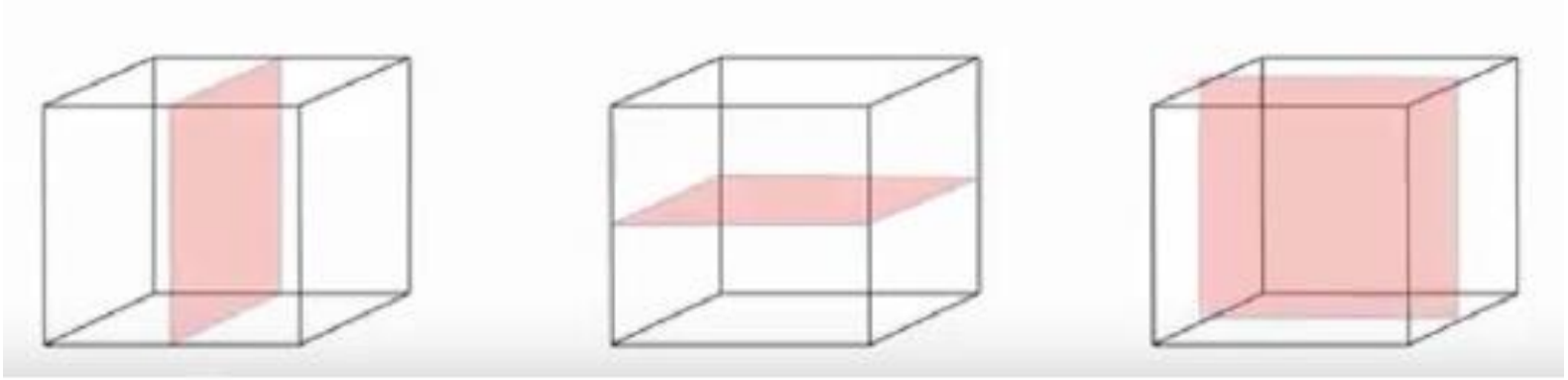
ب- 4 محاور ثلاثية الرتبة

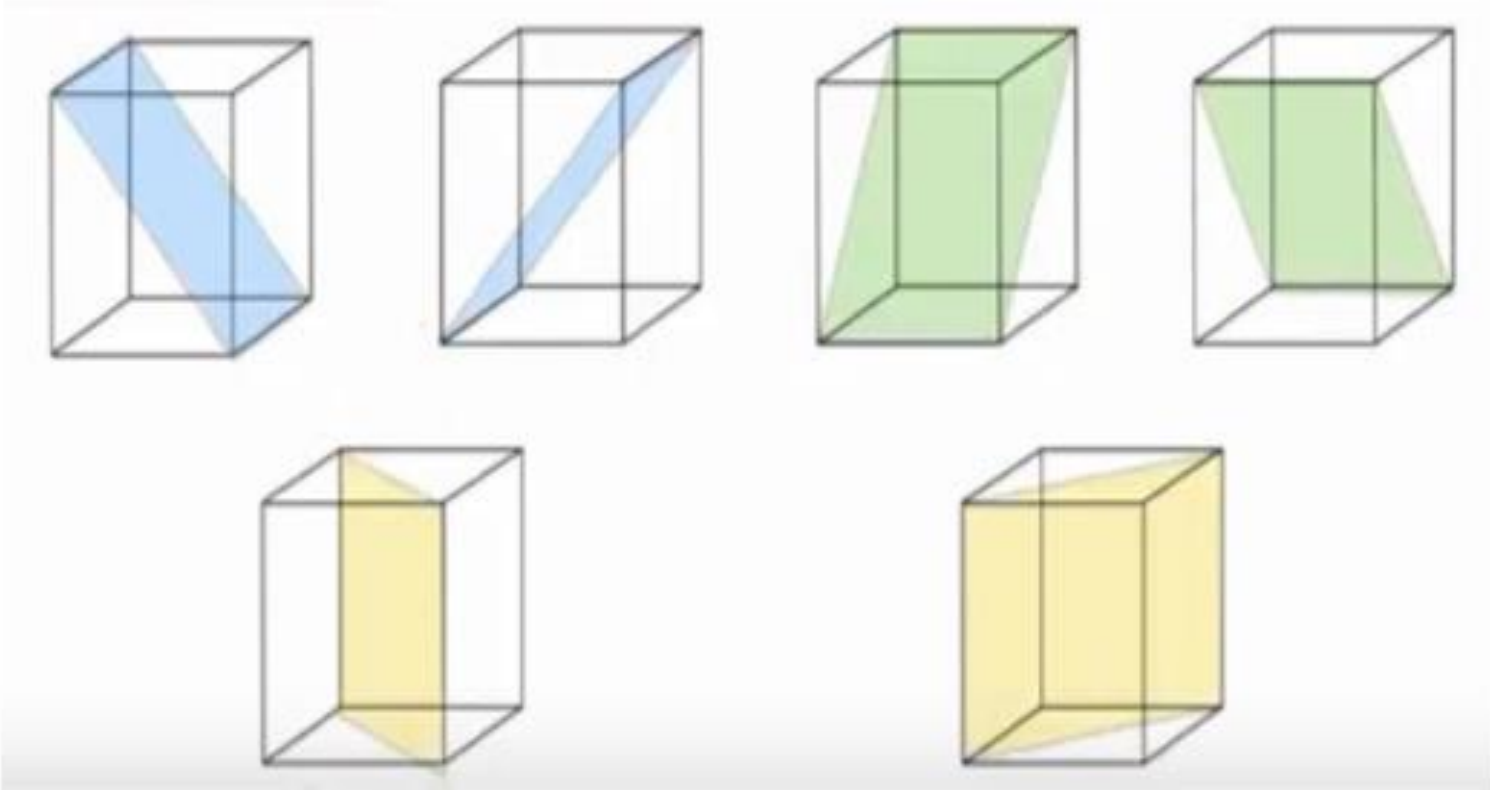


$\Theta=180^{o}$

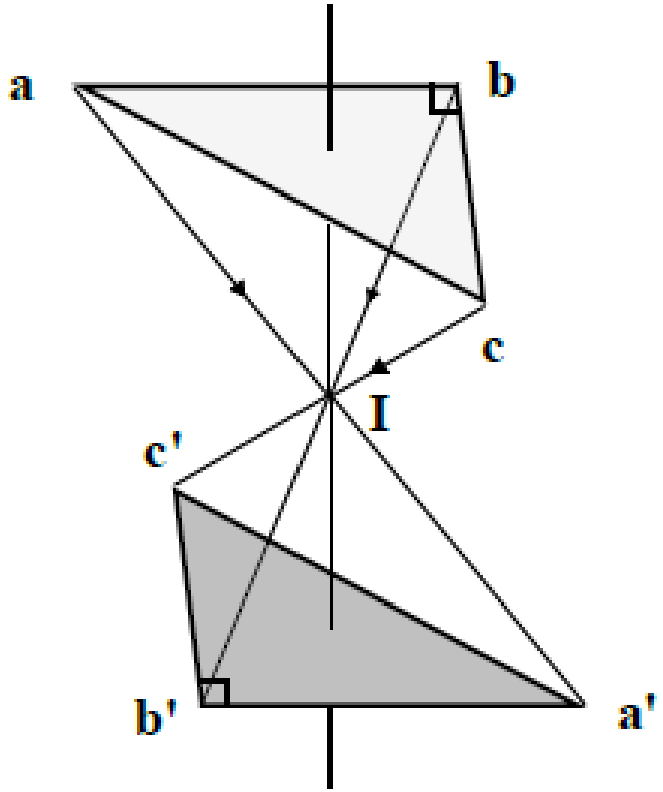
ج- 6 محاور ثنائية الرتبة

- **٢- مستوى التماثل Plane of symmetry:**
- يعرف مستوى التماثل بأنه المستوى الذي يقسم البلورة إلى نصفين متساويين ومتشابهين بحيث يكون أحد النصفيين صورة مرآة للنصف الأخر و يرمز لمستوى التماثل بالرمز m في البلورة المكعبة.
- هناك ثلاثة مستويات تماثل كل منها يوازي وجهيين متقابلين من المكعب وستة مستويات تماثل باتجاه اقطار المكعب اذ يمتلك المكعب تسعة مستويات تماثل.





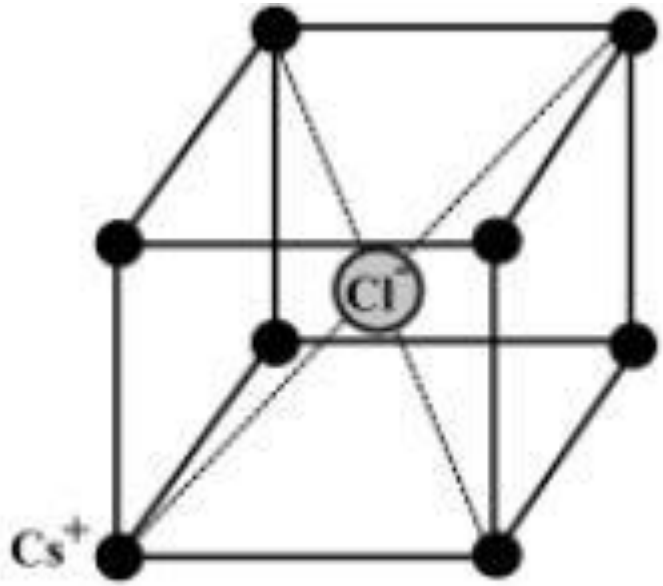
- **٣- مركز التماثل Center of Symmetry:**
- هو عبارة عن نقطة وهمية تتوسط البلورة حيث تتميز بأن أي وجهين أو حرفين أو زاويتين مجسمتين تتماثلان عبرها.
- **٤- مركز الانقلاب Center of Inversion:**
- مركز انقلاب هي نقطة تماثل انقلابي التي تبقي الخلية كما هي عند اجراء الانتقال الرياضي $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$
- $\vec{r} = i_x a + j_y a$
- $-\vec{r} = -i_x a - j_y a$

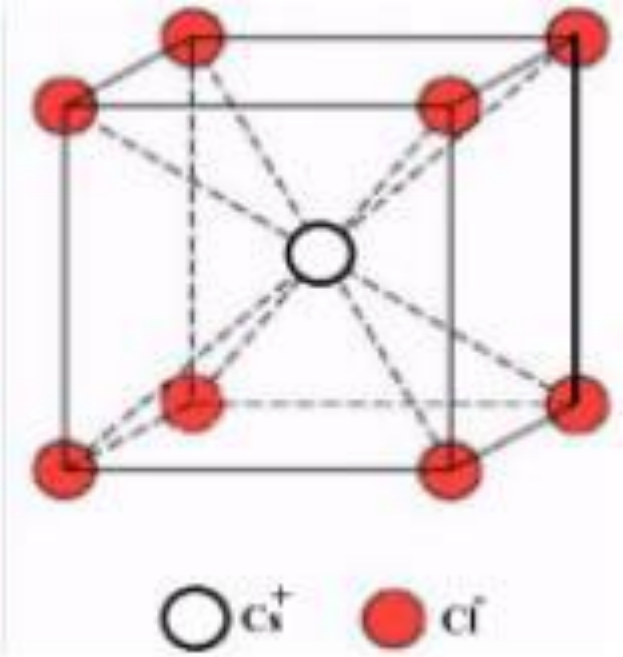


المثلث abc ينطبق على نفسه بعملية انقلاب عبر مركز الانقلاب I فيتحول إلى المثلث a′ b′c′ في هذا المثال يقال للمثلث بانها متماثل تماثلا انقلابيا عبر مركز التماثل I

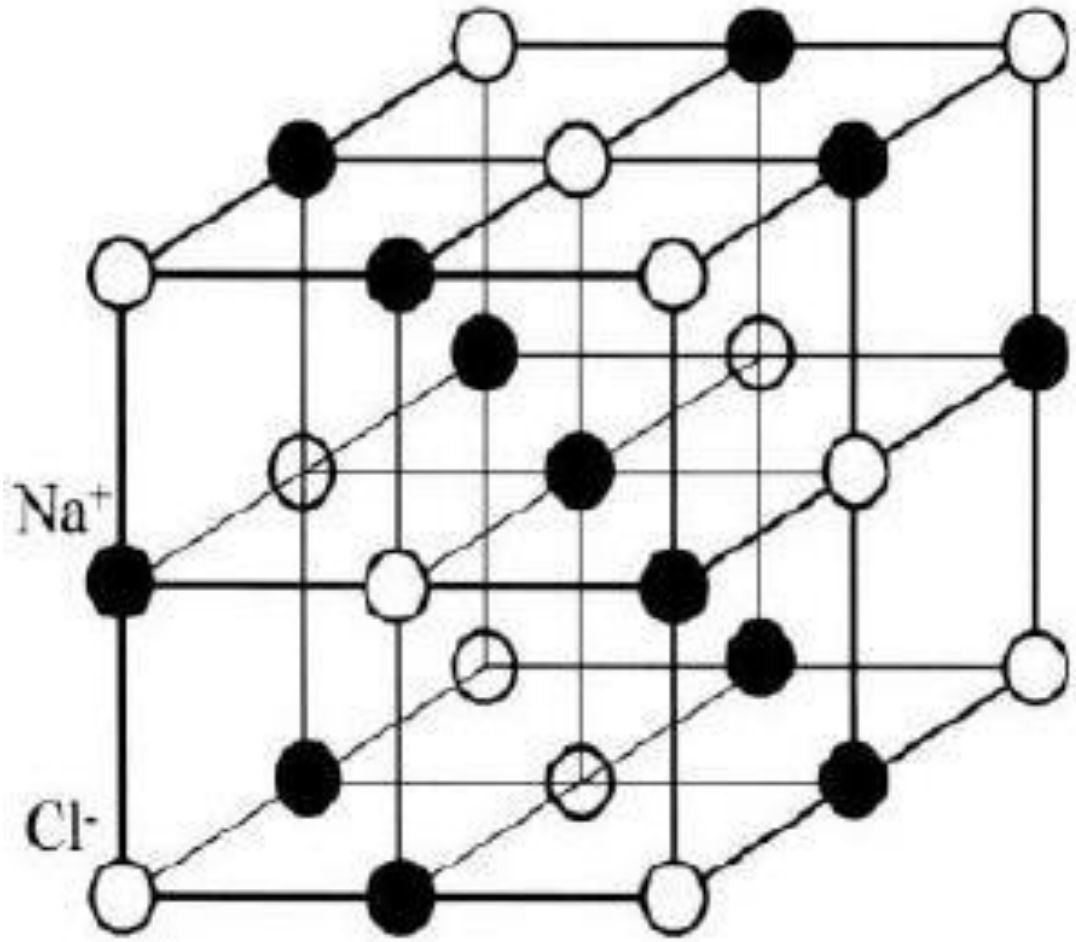
تراكيب بلورية بسيطة شائعة

- ١- **كلوريد السيزيوم CsCl:** تمتلك هذه البلورة شبيكة مكعبة متمركزة الجسم bcc تحتل فيها ايونات السيزيوم Cs^{+} اركان خلية الوحدة أي النقاط 000 ، بينما تحتل ايونات الكلور Cl^{-} مركز جسم الخلية $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$
- وبذلك تمتلك وحدة الخلية جزيئا واحدا من كلوريد السيزيوم.
- تعتبر بلورة كلوريد السيزيوم بلورة غير برافيسية لانها تتكون من بلورتين من نوع المكعب البسيط تبعد كل منهما عن الاخرى بمسافة نصف قطر المكعب


Cl⁻
Cs⁺


Cs⁺
Cl⁻

- ٢- كلوريد الصوديو NaCl: تمتلك هذه البلورة شبيكة مكعبة متمركزة الوجه. تمتلك وحدة الخلية اربعة جزيئات NaCl ومواضع الاحداثيات لايوناتها هي :
- Cl^-: (000); (½½0); (½0½); (0½½)
- Na^+: (½½½); (00½); (0 ½0); (½00)
- في هذا التركيب تشغل ايونات الصوديوم Na^+ رؤوس المكعب ومراكز وجوهه ، بينما تحتل ايونات الكلور Cl^- منصفات اضلاع ومركز المكعب او بالعكس.
- يعتبر التركيب البلوري لكلوريد الصوديوم بانها متكونة من شبيكتين متداخلتين من نوع المكعب متمركز الوجوه، إحداهما لأيونات الصوديوم والأخرى لأيونا ت الكلور، ثم أزيحت هاتان الشبيكتان الفرعيتان بالنسبة لبعضهما البعض بمقدار نصف طول ضلع المكعب a/2.

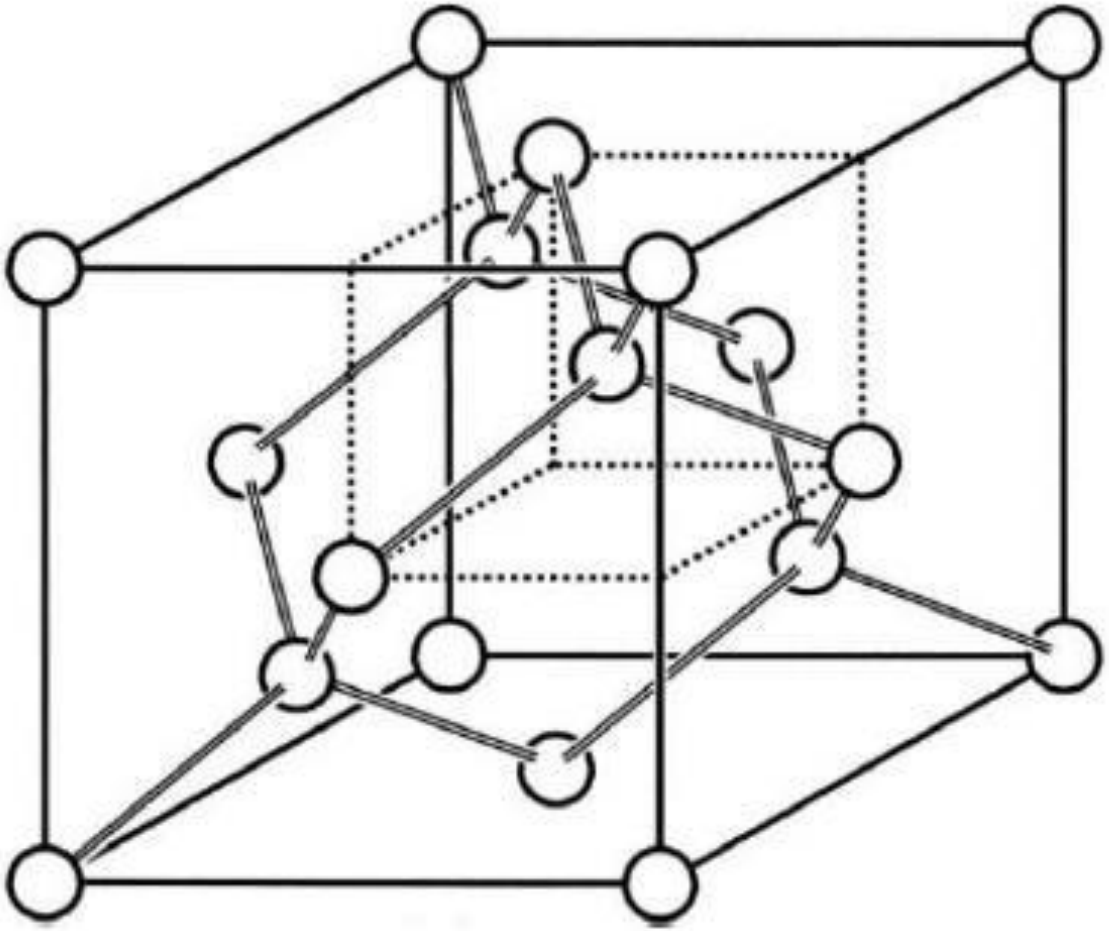

Na+
Cl-

- ٣- **تركيب الماس Diamond:** تمتلك هذا التركيب شبيكة مكعبة متمركزة الأوجه بحيث تحتل ذرات الكاربون رؤوس المكعب و مراكز وجوهه وتقسمه الى ثمانية مكعبات صغيرة وتشغل اربع ذرا ت كاربون مراكز أربعة من هذه المكعبات وفي هذه الحالة تحاط كل ذرة كاربون بأربع ذرات مجاورة. احداثيات الذرات في هذا التركيب هي :

$$C : 000 \ , \quad 0\frac{1}{2}\frac{1}{2} \ , \quad \frac{1}{2}0\frac{1}{2} \ , \quad \frac{1}{2}\frac{1}{2}0$$

$$C : \frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} \ , \ \frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4} \ , \ \frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4} \ , \quad \frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}$$

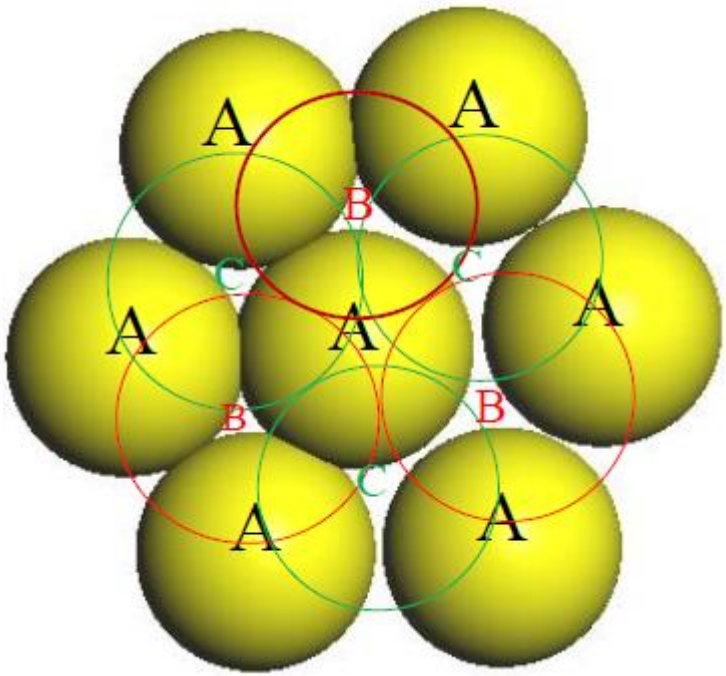
ويمكن اعتبار التركيب الماسي مكونا من شبيكتين متداخلتين من نوع المكعب متمركز الأوجه .

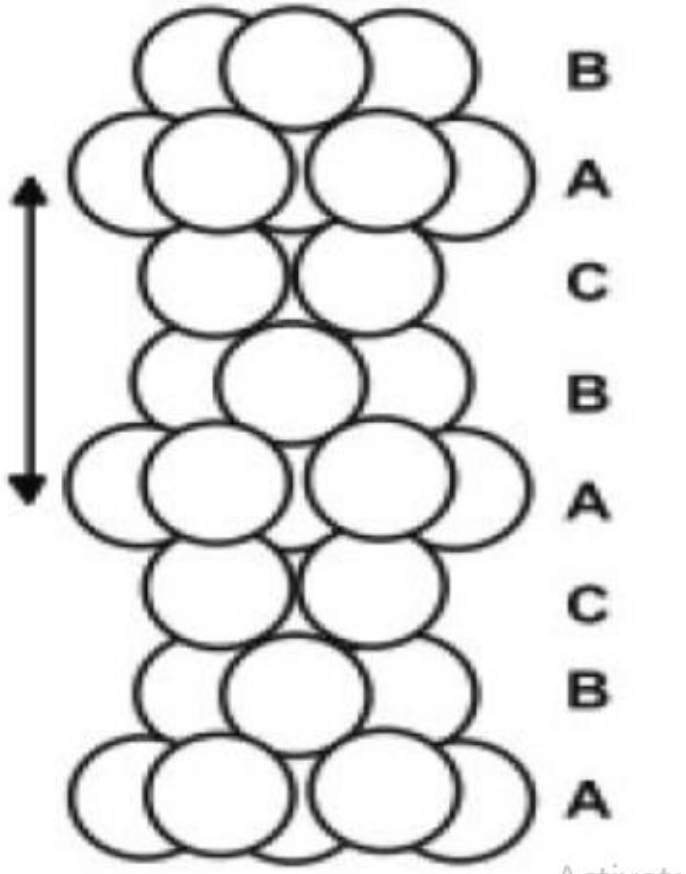


تركيب الرص المتلاصق
Closed-Packed Structure

- ترص ذرات المادة الصلبة والتي تشبه كرات صلدة متساوية الحجم ومتمركزة حول نقطة الشبيكة، بطريقتين بحيث يكون حجم الفراغات المحصورة بينها أقل وفي كلتا الطريقتين نبدأ برص الطبقة الأولى A بحيث تلامس كل ذرة (كرة) ست ذرات أخرى تحيط بها، ثم توضع الطبقة الثانية B فوق الأولى بنفس الكيفية ، بشرط أن تلامس أي ذرة فيها ثلاث ذرات في الطبقة الأولى، أي تكون كل ذرة في الطبقة B فوق احدى الفجوات في الطبقة A.

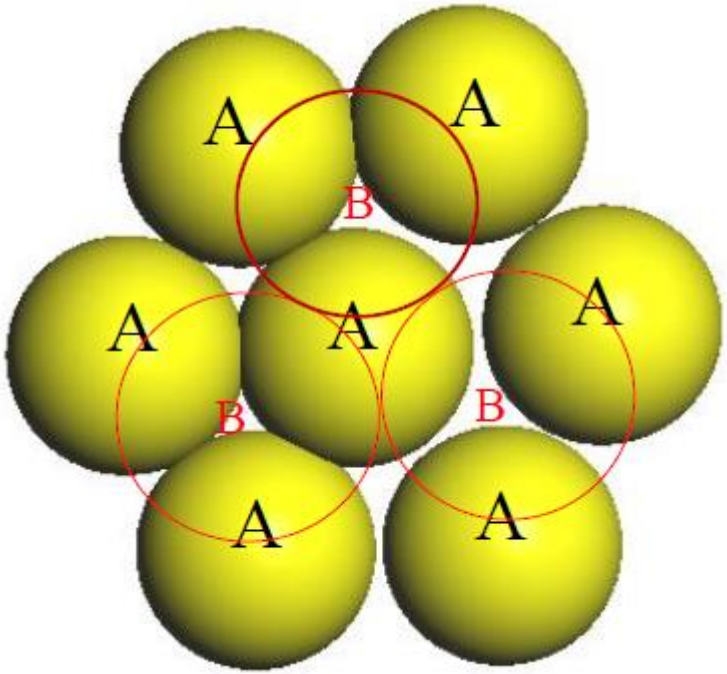
- **اذا اضيف طبقة ثالثة سوف ينشأ نوعين من الرص: -**
- **١- الرص المكعبي المحكم Cubic Close Packing (ccp)**
- تترتب كرات الطبقة الثالثة C فوق فجوات الطبقة الأولى التي لم تحتلها كرات الطبقة الثانية وتتكرر البنية في هذا الترتيب بعد ثلاث طبقات أخرى وبذلك نحصل على ترتيب ABCABC والذي يكّون وحدة خلية مكعبة متمركزة الأوجه. ان كل كرة في هذه البنية تكون في تماس مع ثلاث كرات التي فوقها والتي تحتها.

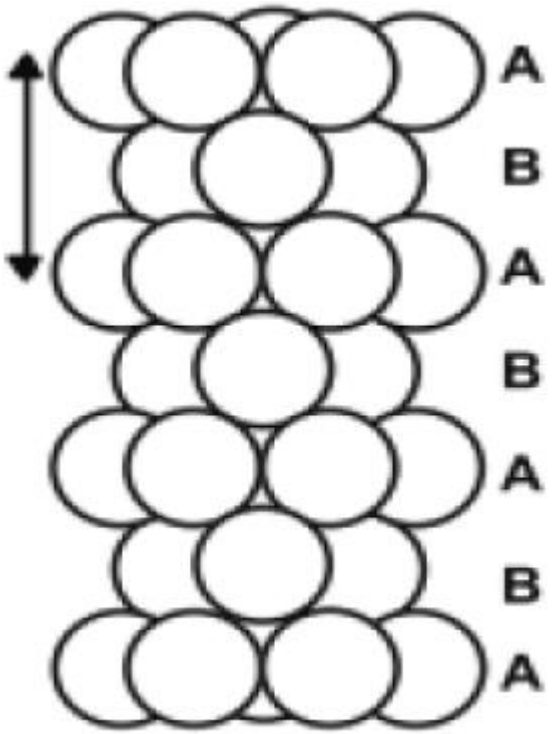




Activate

- ٢- الرص السداسي المحكم **Hexagonal Close-Packing (hcp)**
- تترتب كرات الطبقة الثالثة فوق طبقات الكرة الأولى مباشرة وعند تكرار هذا النوع من الترتيب نحصل على بنية متكررة بعد كل طبقتين أي ان ABAB. ان كل كرة في هذا البنية مع تماس مع ست كرات بنفس المستوي ومع ثلاث كرات في الطبقة التي فوقها ومع ثلاث كرات في الطبقة التي تحتها.


A
A
B
A
A
A
B
B
A
A


A
B
A
B
A
B
A

نسبة الملئ (عامل الرص)
Filling Factor or Packing Factor

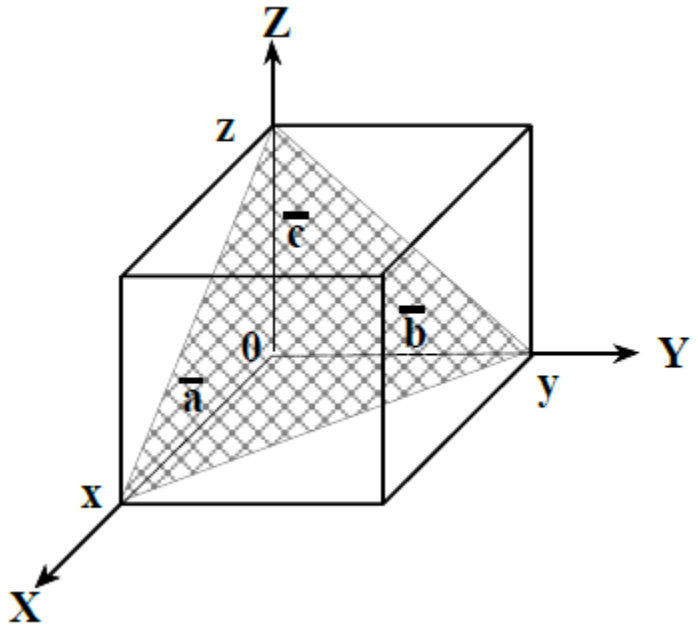
- يعرف عامل الرص على انه أعظم نسبة من حجم الخلية الاعتيادية يمكن أن تشغله ذرات متماثلة موجودة في مواضع نقاط الشبيكة اومرافقة لنقاط الشبيكة.
- عند حساب نسبة الملئ نفترض ان الذرات المتجاورة في حالة تلامس وهذا يعني ان اقصر مسافة بين نقطتي شبيكة تمثل قطر الذرة عندما ترافق نقطة شبيكة واحدة ، وعندما ترافق ذرتان نقطة شبيكة واحدة كما في بلورة الماس او كلوريد الصوديوم حيث تمثل المسافة بين ذرتين او ايونين قطر الذرة.

$$\text{Filling Factor} = \frac{\text{The volume of one atom} \times \text{The number of atoms in the unit cell}}{\text{The volume of unit cell}} \quad 100\%$$

معاملات ميلر Miller Indices

- تختلف الخواص الفيزيائية للمواد البلورية باختلاف اتجاهات البلورة او مستويات البلورة نظرا لعدم تجانس خوا ص البلورة في الأبعاد الثلاثة. لذا اصبح من الضروري تحديد هذه الاتجاهات والمستويات البلورية عند دراسة الخواص الفيزيائية المختلفة.
- يمكن وصف هذه الاتجاهات والمستويات بواسطة احداثيات معينة تدعى معاملات ميلر Miller Indices نسبة العالم الانجليزى ميلر.
- تحدد المستويات البلورية بإحداثيات ميلر طبقا للخطوات التالية:
- ١- نختار نقطة اصل وثلاث محاور كمرجع .
- ٢- نقيس المسافة بين نقطة الأصل ونقطة تقاطع المستوي مع المحاور ولتكن aعلى المحور X ولتكن b على المحور Yو c على المحور Z من المحتمل ان تكون aو bو c اعداد صحيحة سالبة او موجبة او كسرية .

- ٣- نأخذ مقلوب قيم هذه الاعداد ونضرب كل مقلوب باصغر قاسم مشترك بحيث يحول جميع المقلوبات الى اعداد صحيحة فيكون الناتج ح ينئذ هو معاملات ميلر لذلك المستوي .
- نضع المعاملات بين قوسين صغيرين من دون فارزة أو إشارة بين هذه الاعداد ويرمز لها hkl أي (hkl).



- ١- المستوي الذي يقطع المحور في المالانهاية ∞ يوازي ذلك المحور و له معام ل ميل ر على هذا المحوريساو ى صفر.
- ٢- لا تصف معاملا ت ميلر مستوى معين فقط بل تصف أيضا مجموعة المستويا ت الموازية له. فعلى سبيل المثال ، المستوي (٦٢٢) هو نفسه المستوي (٣١١)، المستوي (٤٤٢) هو نفسه المستوي (٢٢١) ، المستوي (٢٤٦) هو نفسه المستوي (١٢٣).
- ٣- اذا قطع المستوي احد الاحداثيات بالاتجاه السالب للمحور، عندئذ تكتب لمعامل ميلر المقابل للإشارة السالبة
- $\bar{h}$, $\bar{k}$, or $\bar{l}$

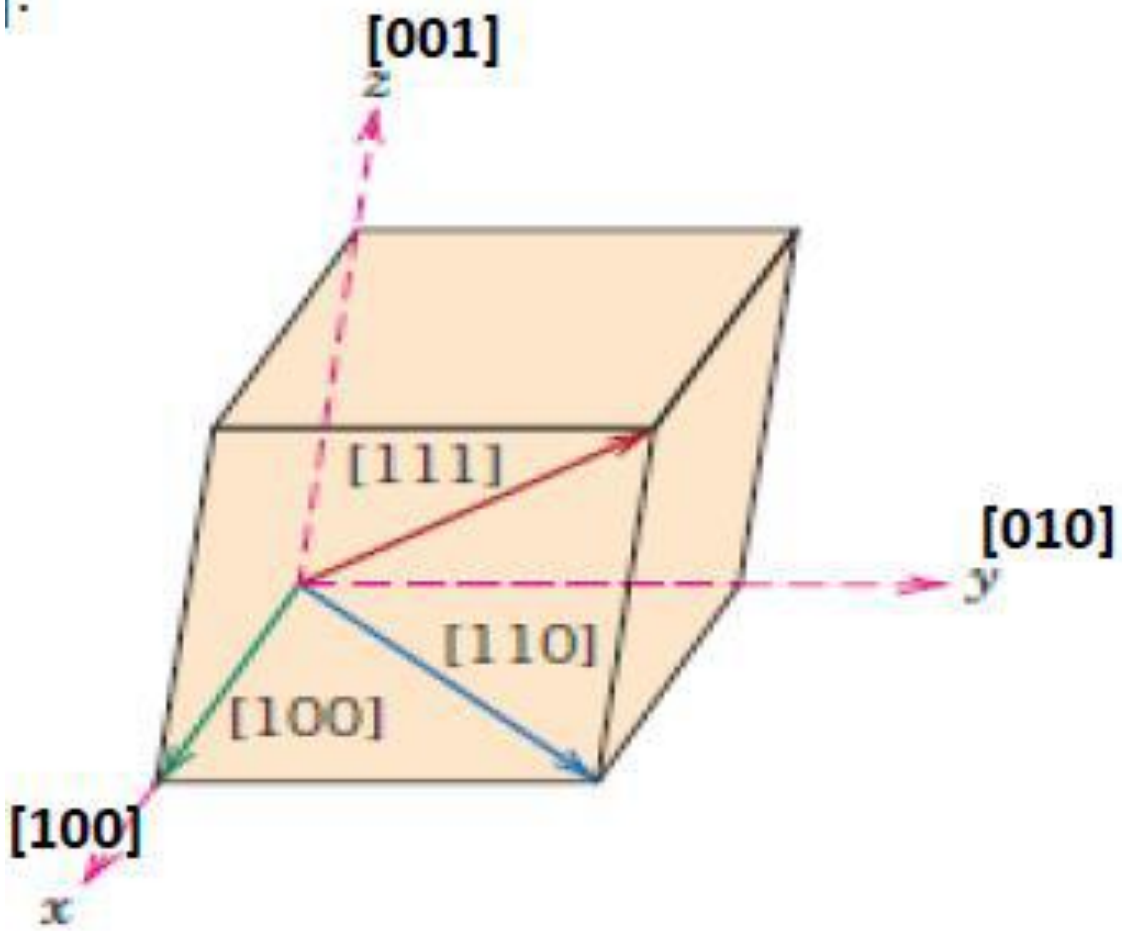
- **مثال : جد معاملات ميلر للمستوي الذي يقطع الاحداثيات الديكارتية عند x=3 , y=2 , z=1.**
- نأخذ مقلوب الاعداد فنحصل على $\frac{1}{1}$ ، $\frac{1}{2}$ ، $\frac{1}{3}$
- نضرب الكسور الناتجة في المضاعف المشترك الأصغر هنا = ٦ اي ان :
- $\frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{1}$ x 6= 2 3 6
- (hkl)=(236)

اتجاهات المستويات البلورية

- لتحديد اتجاه المستويات في البلورة نستخدم ثلاث معاملات
- h , k , l توضع بين قوسين مربعين بالشكل[h k l]ويعبرعن الصيغة الاتجاهية :

$$\vec{R} = h\vec{a} + k\vec{b} + l\vec{c}$$

- معاملات الاتجاه [h k l]هي معاملات الاتجاه العمودي على المستوي (h k l) فعلى سبيل المثال اتجاه المستوي (111) يعبر عنه بالمتجه [111].


[001]
z
[111]
[010]
y
[110]
[100]
[100]
x

- هناك مجموعة من السطوح تكون متكافئة ، لذا توضع بين اقواس كبيرة ذات الشكل { } ، فمثلا

١- الأوجه الستة للمكعب تعبر عنها كالاتي:

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

- ٢- هناك مجموعة من الاتجاهات المتكافئة في البلورة تكون متكافئة ، لذا توضع بين اقواس كبيرة ذات الشكل < >
- ان <100> في البلورة المكعبة يشير الى الاتجاهات التالية:

$$[\mathbf{100}], [\mathbf{010}], [\mathbf{001}], [\bar{\mathbf{1}}\mathbf{00}], [\mathbf{0}\bar{\mathbf{1}}\mathbf{0}], [\mathbf{00}\bar{\mathbf{1}}]$$