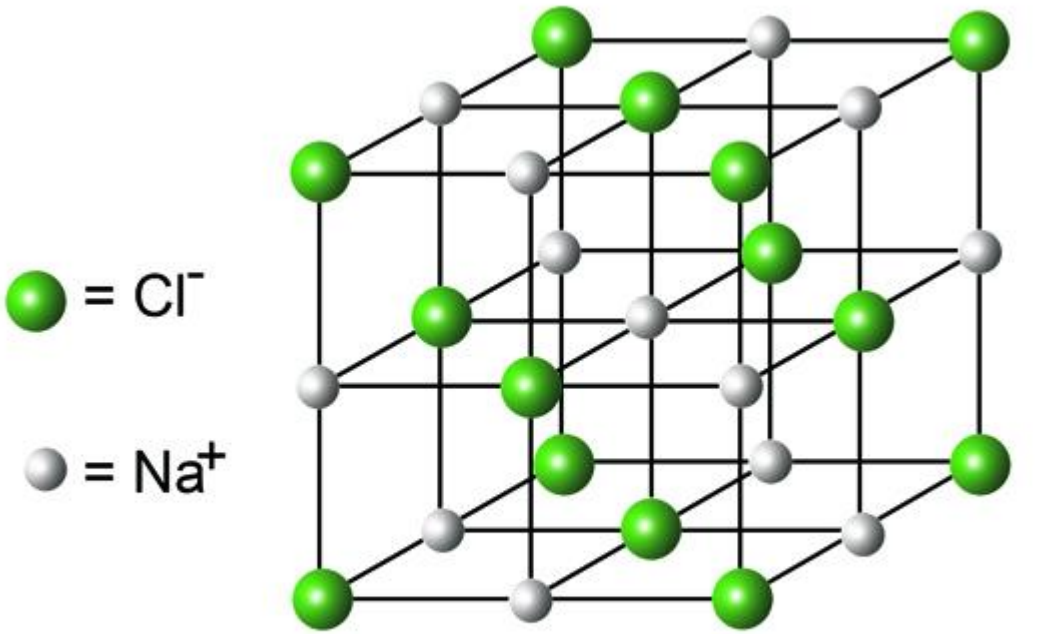
التراكيب البلورية Crystal Structures

علم البلورات Crystallography: هو العلم الذي يهتم بدراسة الشكل الهندسي وصفات فيزيائية اخرى للمواد الصلبة البلورية Crystalline Solids باستخدام الأشعة السينية و الحزم الألكترونية و النيوترونية ...الخ.

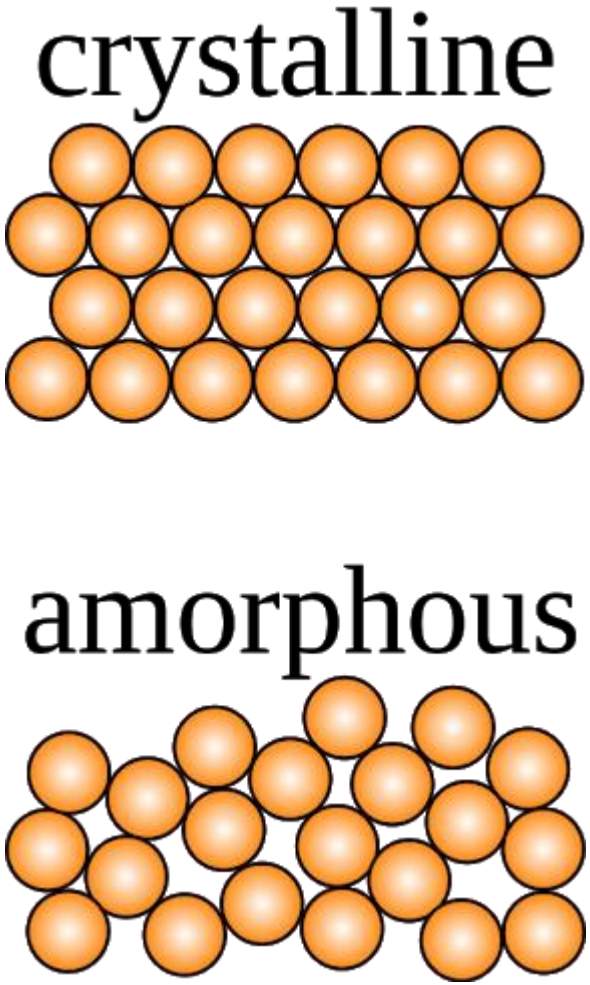
- تصنف المواد الصلبة الى نوعين:
- ١- المواد البلورية: وهي تلك المواد التي يكون فيها ترتيب الذرات او الأيونات او الجزيئات منتظم ودوري مثل بلورة كلوريد الصوديوم



الشبكة البلورية لكلوريد الصوديوم

www.chemistrysources.com

- المواد اللابلورية او العشوائية: ذراتها او جزيئاتها لاتمتلك ترتيبا معينا في تركيبها.



CRYSTALLINE SOLIDS

1. Crystalline solids have regular periodic Arrangement of particles (atoms, ions, Or molecules).
2. They are un-isotropic i.e., they differ in Properties with direction.
3. They have well defined melting and Freezing points.
   Melting and freezing points occurs at different temperatures at different locations in the solids.
4. Crystalline solids my be made up of materials are metallic crystals or non-metallic crystals. Some of the metallic crystals are Copper, silver, aluminum, tungsten, and manganese. Non-metallic crystals are crystalline carbon, crystallized polymers or plastics.
5. Metallic crystals have wide use in engineering because of their favorable Properties of strength, ductility, conductivity and reflection.

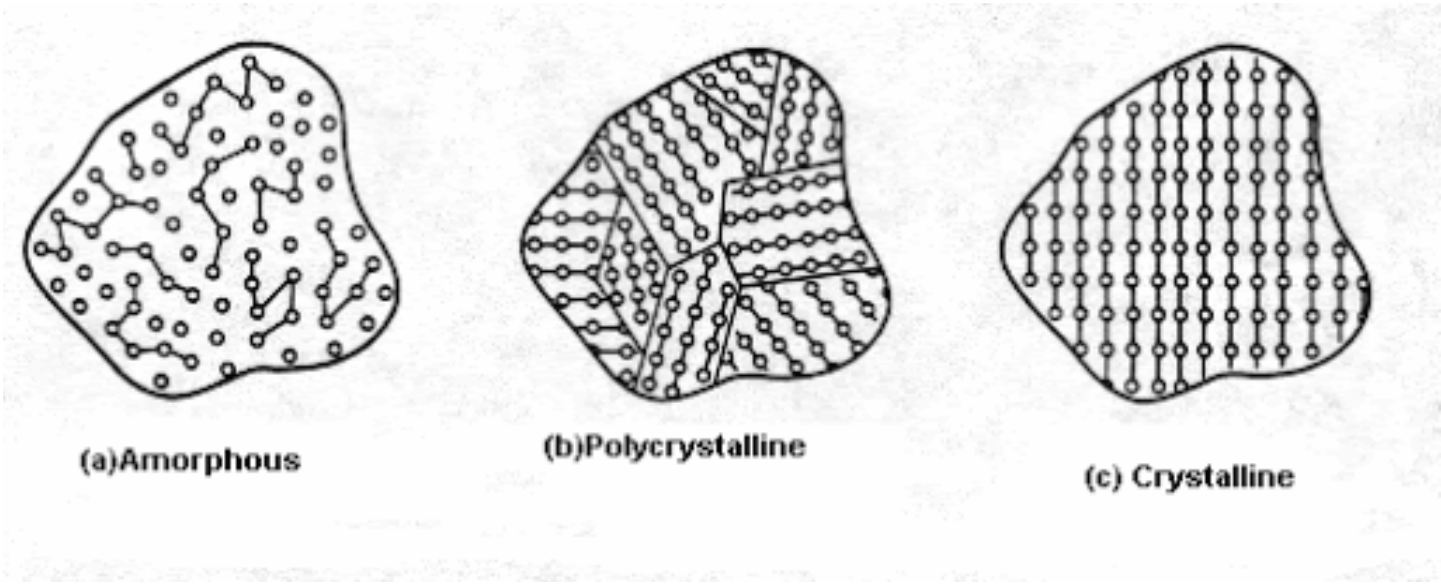
AMORPHOUS SOLIDS

1. Amorphous solids have no regularity in the arrangement Of particles.
2. They are usually isotropic i.e., They possess same properties in different directions.
3. They do not posses well defined melting and freezing points.
4. Most important amorphous glasses, plastics and rubber.
5. An amorphous structure does not generally posses elasticity but only plasticity.

Crystalline Materials المواد البلورية

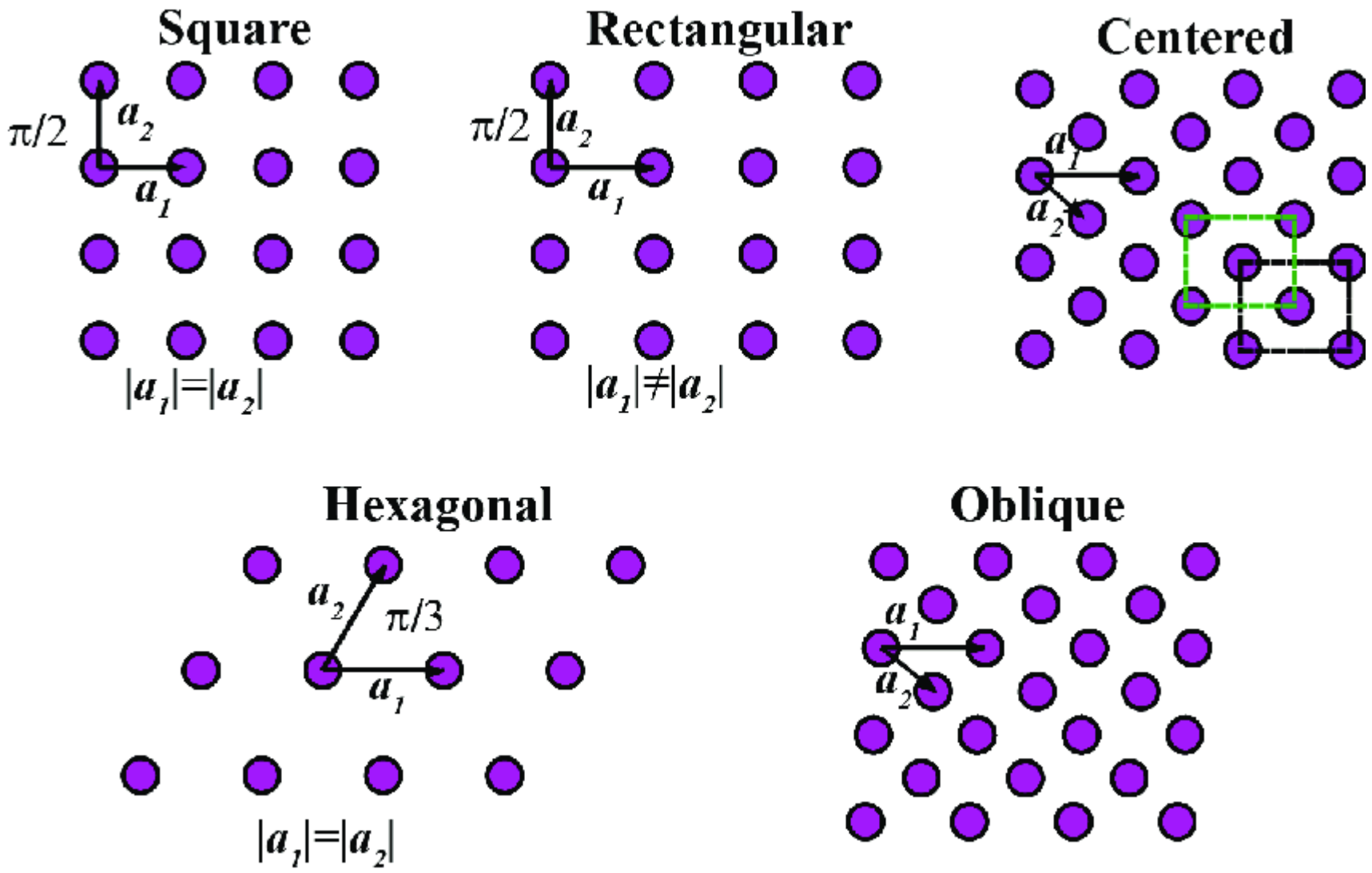
متعددة التبلور Polycrystalline

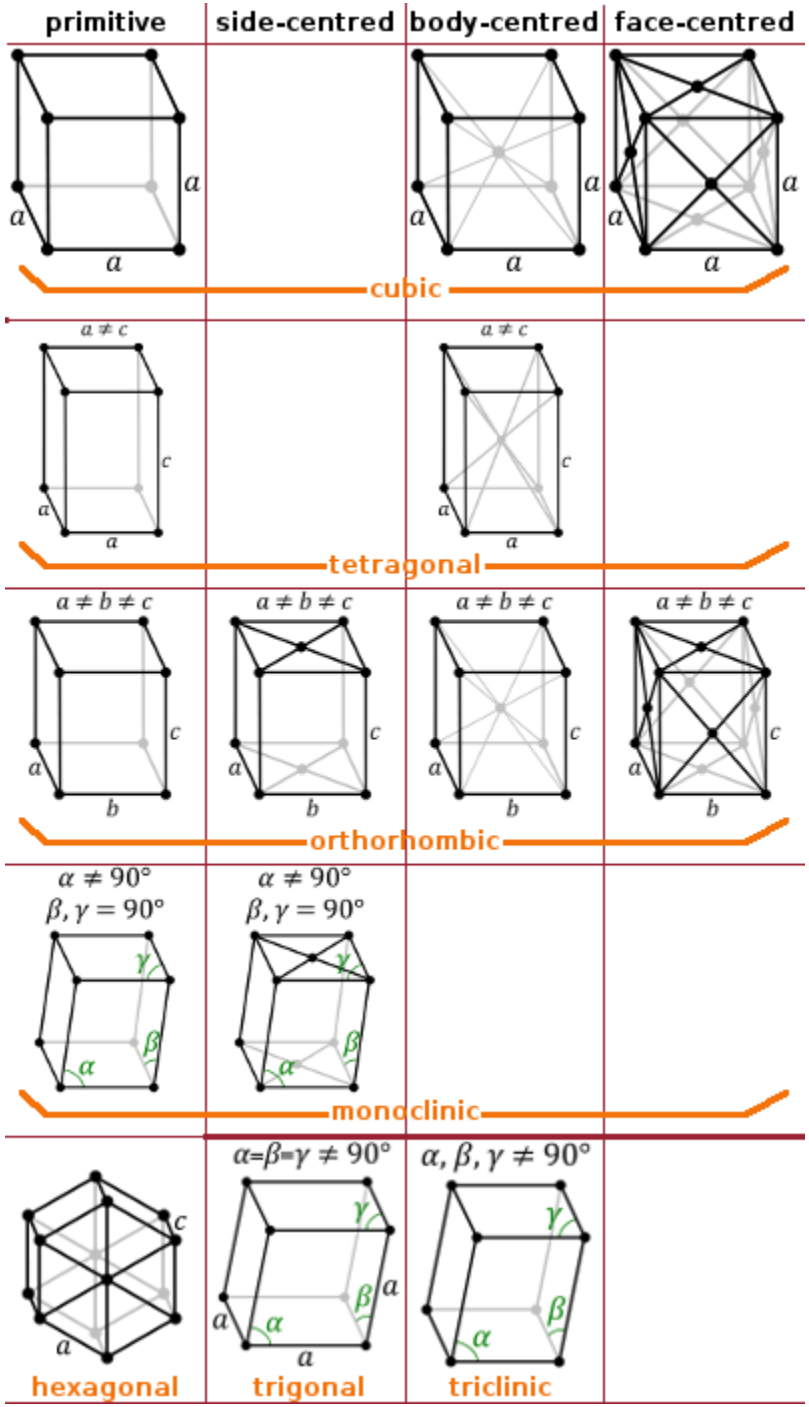
- في المواد متعددة التبلور هنالك عدة مناطق كل منطقة لها بنية منتظمة تختلف عن المنطقة المجاورة لها وتفصل بينها حدود الحبيبة grain boundaries



الحالة البلورية التعاريف الأساسية

- نقاط الشبيكة Lattice Points: وهي نقاط خيالية او افتراضية حولها تتموضع الذرات.
- الشبيكة Lattice: وهي التكرار المنتظم للوحدات الذرية او الأيونية او الجزيئية في بعدين او ثلاثة ابعاد.
- الأساس basis: وهو تموقع الذرات او الأيونات او الجزيئات من التركيب والترتيب والأتجاه وعند تكرارها بالتكرار الصحيح في جميع الأتجاهات تتولد البلورة الحقيقية.
- Crystal Structure=basis + lattice
- البلورة حقيقية بينما الشبيكة خيالية
- الخلية البرافيزية Bravais Cell: وهي الخلية التي بتكرارها يمكن ان تملأ الحيز. الشبيكة تولد بثلاثة متجهات a1,a2,a3 ومجموعة من الأعداد الصحيحة n1,n2,n3 حيث ان كل نقطة شبيكة يمكن ان تعرف بالمتجه r
- $r=n_1a_1+n_2a_2+n_3a_3$
- في المستوي ثنائي البعد هنالك خمسة خلايا برافيزية، بينما في ثلاثة ابعاد هنالك ١٤ خلية برافيزية اساسية.


Square
π/2
a2
a1
|a1|=|a2|
Rectangular
π/2
a2
a1
|a1|≠|a2|
Centered
a1
a2
Hexagonal
a2
π/3
a1
|a1|=|a2|
Oblique
a1
a2

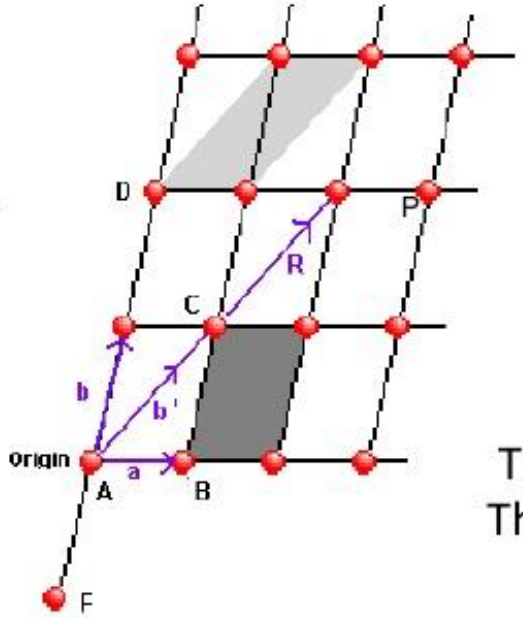


primitive
side-centred
body-centred
face-centred
cubic
a ≠ c
tetragonal
a ≠ b ≠ c
orthorhombic
α ≠ 90°
β, γ = 90°
monoclinic
α=β=γ ≠ 90°
α, β, γ ≠ 90°
hexagonal
trigonal
triclinic

متجهات الأنتقال الأساسية

- رياضيا الشبيكة تعرف بثلاثة متجهات تدعى متجهات الشبيكة الأساسية a1,a2,a3 متجهات ثلاثية الأبعاد تعتمد على الشكل الهندسي للشبيكة.
- ان هذه المتجهات تحدد تركيب الشبيكة ابدائية.
- الشبيكة اللا نهائية تولد من خلال متجه الشبيكة
- $T=n1a1+n2a2+n3a3$
- n1,n2,n3 اعداد صحيحة و T مولد نقاط الشبيكة وكل نقطة شبيكة تعرف من خلال هذه الأعداد

Translational Lattice Vectors – 2D



Point D(n1, n2) = (0,2)

Point F (n1, n2) = (0,-1)

A space lattice is a set of points such that a translation from any point in the lattice by a vector;

$$R_n = n_1\, a + n_2\, b$$

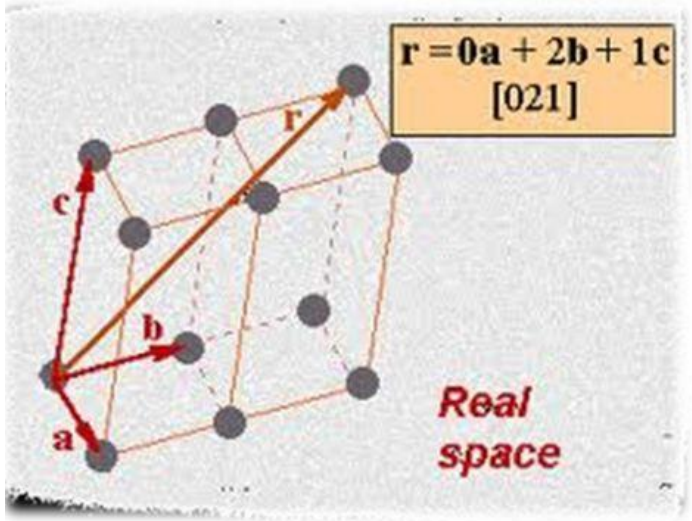
locates an exactly *equivalent* point, *i.e.* a point with the same environment as *P* .

This is translational symmetry.

The vectors *a, b* are known as lattice vectors and (n_1, n_2) is a pair of integers whose values depend on the lattice point.

Lattice Vectors – 3D

A three dimensional crystal is described by 3 fundamental translation vectors a, b and c (AKA: a_1, a_2 and a_3)



$$\mathbf{r} = u_1 \boldsymbol{a} + u_2 \boldsymbol{b} + u_3 \boldsymbol{c}$$

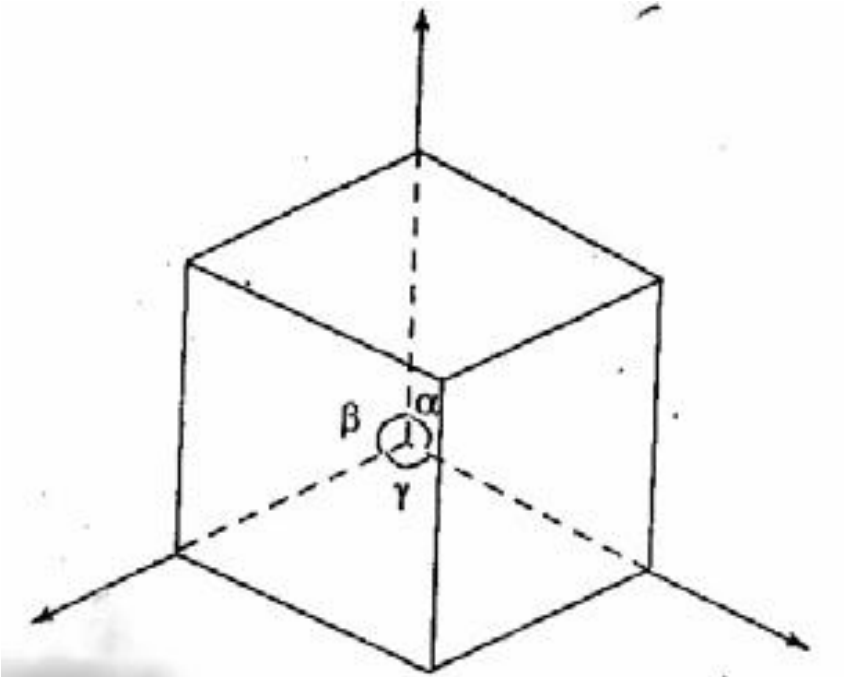
Also common:

$$\mathrm{R} = h \boldsymbol{a_1} + k \boldsymbol{a_2} + l \boldsymbol{a_3}$$

Sometimes people will use [h k l] instead of u's. (more common to see in reciprocal space, later)

وحدة الخلية وعوامل الشبيكة

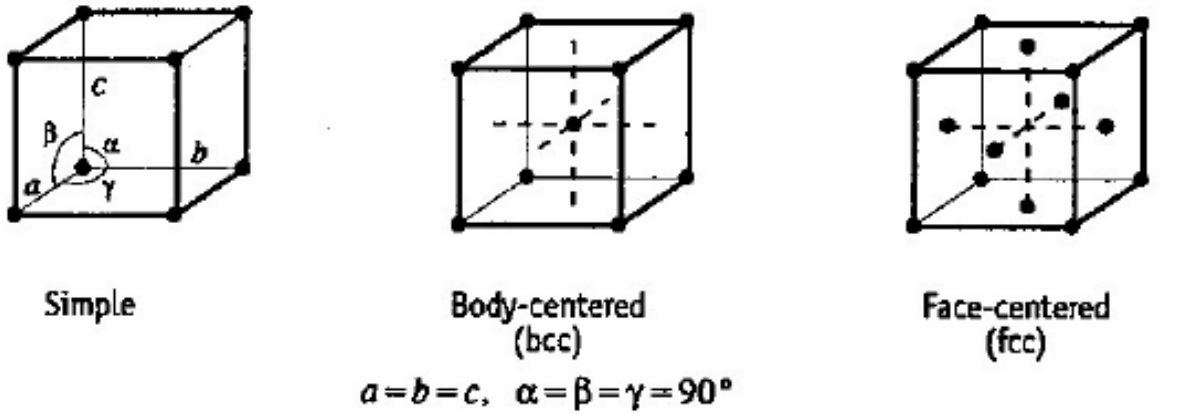
- وحدة الخلية: هي اصغر جزء في البلورة يحمل صفاتها ويمكن بتكرارها توليد البلورة. وهي وحدة بناء البلورة.



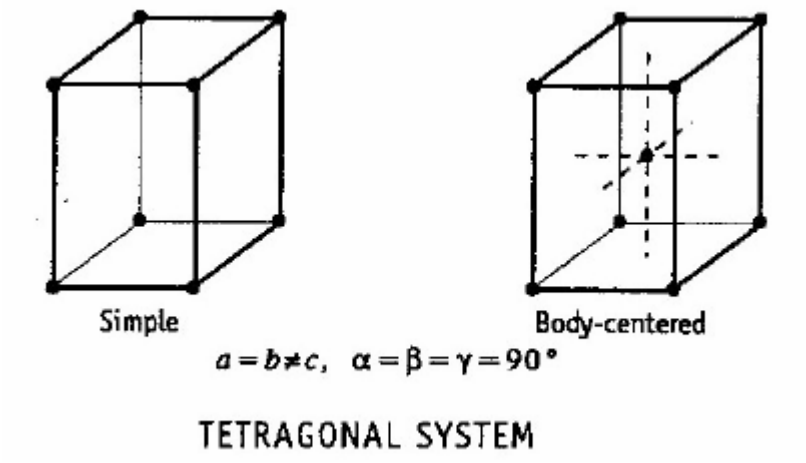
Lattice parameters of an unit cell.

- وحدة الخلية توصف بثلاثة محاور a,b,c وهي مساقط وحدة الخلية على المحاور الثلاثة والزوايا α,β,γ المحصورة بينهما. اذا علمت هذة الأبعاد والزوايا علم حجم وشكل وحدة الخلية. قد تكون متساوية او غير متساوية. وتبعا لهذه العوامل هنالك سبعة انظمة بلورية:

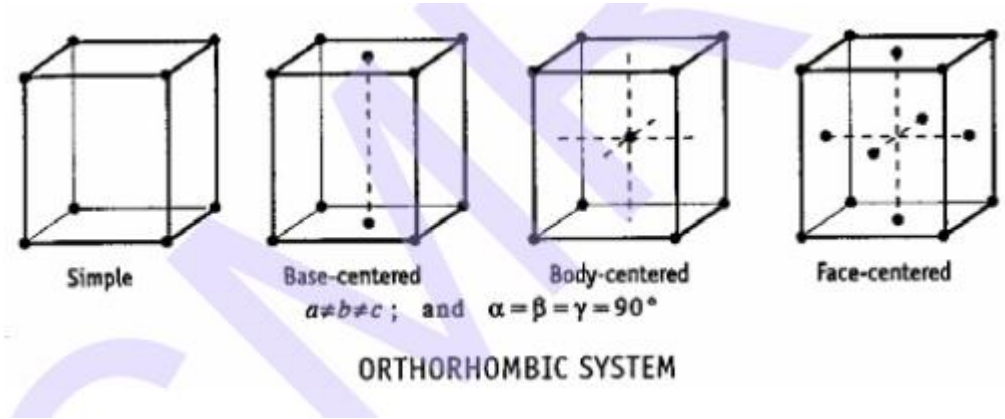
- 1- Cubic system a=b=c and $\alpha=\beta=\gamma$



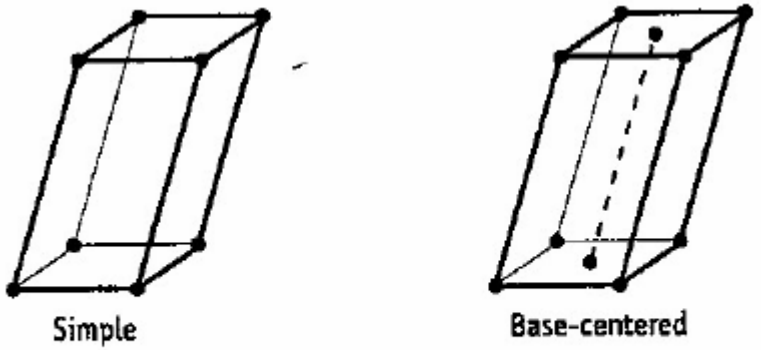
- 2- Tetragonal crystal system a=b≠c and $\alpha=\beta=\gamma=90$



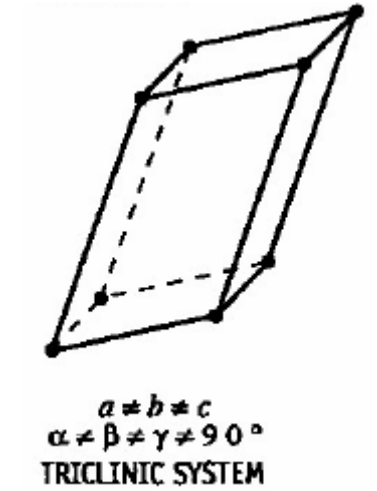
- 3- Orthorhombic crystal system a=b≠c and $\alpha=\beta=\gamma=90$



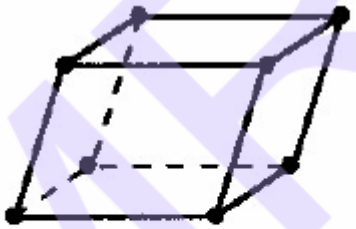
- 4- Monoclinic crystal system a≠b≠c and $\alpha=\beta=90 \neq\gamma$



- 5- Triclinic crystal system a≠b≠c and $\alpha\neq\beta\neq\gamma$

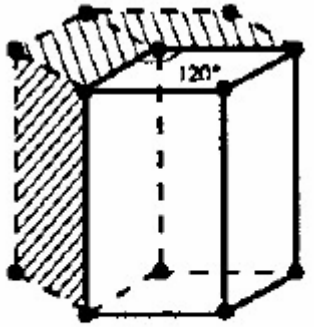


- 6- Trigonal(rhombohedral) crystal system a=b=c and $\alpha=\beta=\gamma\neq90$
-



$a=b=c$
$\alpha=\beta=\gamma\neq90°$
IOMBOHEDRAL (TRIGONAL) SYSTEM

- 7- Hexagonal crystal system a=b≠c and $\alpha=\beta=90$ $\gamma=120$



$a=b\neq c$
$\alpha=\beta=90°,\ \gamma=120°$
HEXAGONAL SYSTEM

التراكيب الأساسية للبلورة Basic Crystal Structures

- اهم الكميات الأساسية والتي تستخدم في دراسة الترتيبات المختلفة للذرات لتكوين تركيب مختلف هي:
- ١- البعد عن اقرب المجاور (Nearest neighboring distance (2r: وهي المسافة بين مركزي اقرب ذرتين متجاورتين واذا كان نصف قطر الذرة r فان المسافة بين اقرب متجاوربين هو 2r.
- ٢- نصف قطر الذرة (r) **Atomic radius** المسافة من مركز الذرة الى الغلاف الخارجي.
- ٣- العدد التناسقي **Coordination number N:** هو عدد اقرب المجاورات بمسافات متساوية عن ذرة ما في تركيب معين.
- عامل التعبئة الذري **Atomic packing factor or fraction:** وهو نسبة الحجم الملئ بالذرات v الى نسبة الحجم الكلي من وحدة الخلية V
- P.F.= v/V

التركيب المكعب البسيط Simple cubic structure(SC)

- في هذا التركيب مكعب بسيط هنالك نقطة شبيكة في كل ركن من الأركان الثمانية للمكعب.

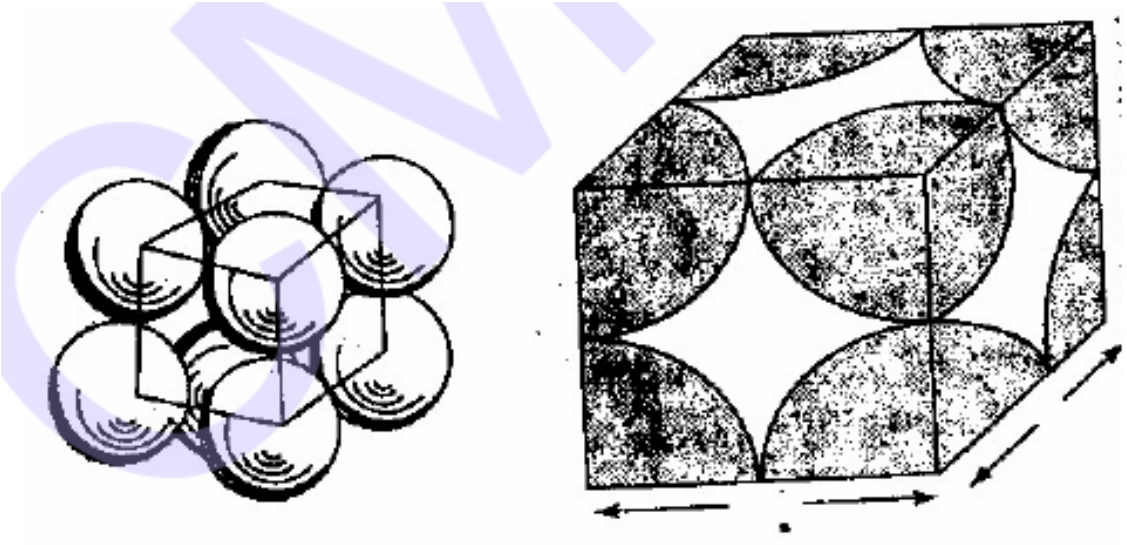


Fig. Simple Cubic Structure

- Nearest neighboring distance = 2r = a
- Atomic radius = r = a / 2
- Lattice constant = a = 2r
- Coordination number = 6 (since each corner atom is surrounded by 6 equidistant nearest neighbors)
- Effective number of atoms belonging to the unit cell or no. of atoms per unit cell = (⅛)x8 =1 atom per unit cell.
- Atomic packing factor = v/ V = volume of the all atoms in the unit cell volume of the unit cell.
- = 1 x (4 / 3) π r3 / a^3 = 4π r3 / 3(2 r)^3
- = π/6=0.52=52%

التركيب المكعب المتمركز الجسم **Body centered cube structure (BCC)**

- في هذا التركيب هنالك ذرة في مركز المكعب بلأضافة الى ثمان ذرات في اركان المكعب حيث ان ذرة المركز تمس جميع ذرات الأركان.

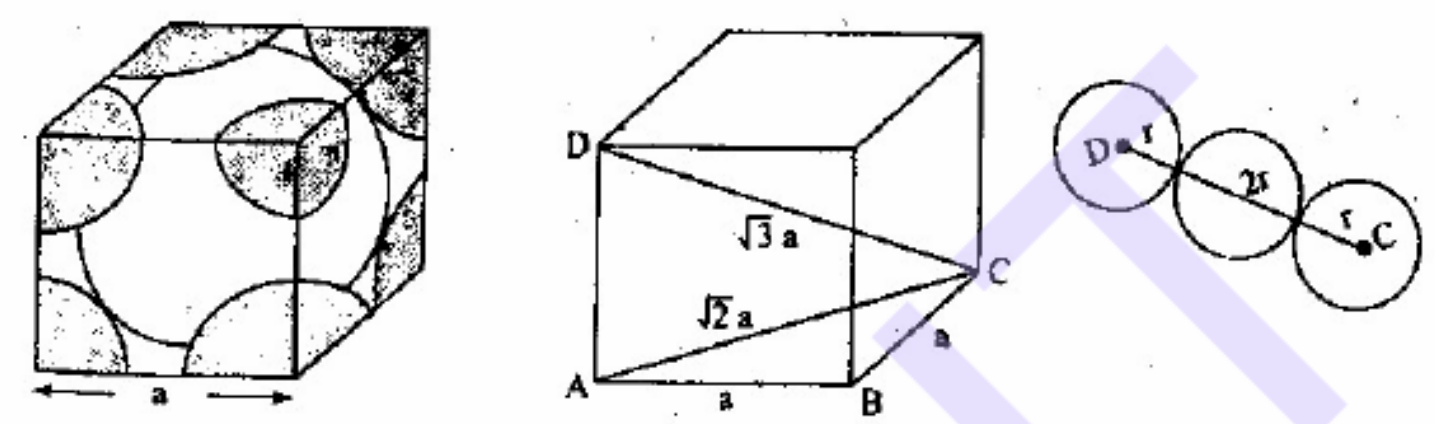


Fig. Body Centered Cubic Structure

- Diagonal length = 4r
- Body diagonal = $(\sqrt{3})a$
- i.e. $4r = (\sqrt{3})a$
- Nearest neighboring distance = $2r = (\sqrt{3})a / 2$
- Atomic radius = $r = (\sqrt{3})a / 4$
- Lattice constant = $a = 4r / \sqrt{3}$
- Coordination number = 8 (since the central atom touches all the corner 8 atoms)
- Effective number of atoms belonging to the unit cell or no. of atoms per unit cell = (⅛)x8 +1 = 2 atom per unit cell.
- i.e. each corner atom contributes ⅛ th to the unit cell. In addition to it, there is a centre atom.
- Atomic packing factor = v/ V = volume of the all atoms in the unit cell.
- Atomic packing factor = v/ V
- $= 2 \times (4 / 3) \pi r^3 / a^3 = 8\pi r^3 / 3(4r /\sqrt{3})^3$
- $= \sqrt{3}\pi/8 = 0.68 = 68\%$

التركيب المكعب المتمركز الأوجه Face centered cubic (FCC) structure

- في هذا التركيب هنالك ذرة في كل ركن من اركان المكعب الثمانية بالأضافة الى ذلك ذرة واحدة في مركز كل وجه من اوجه المكعب الستة.

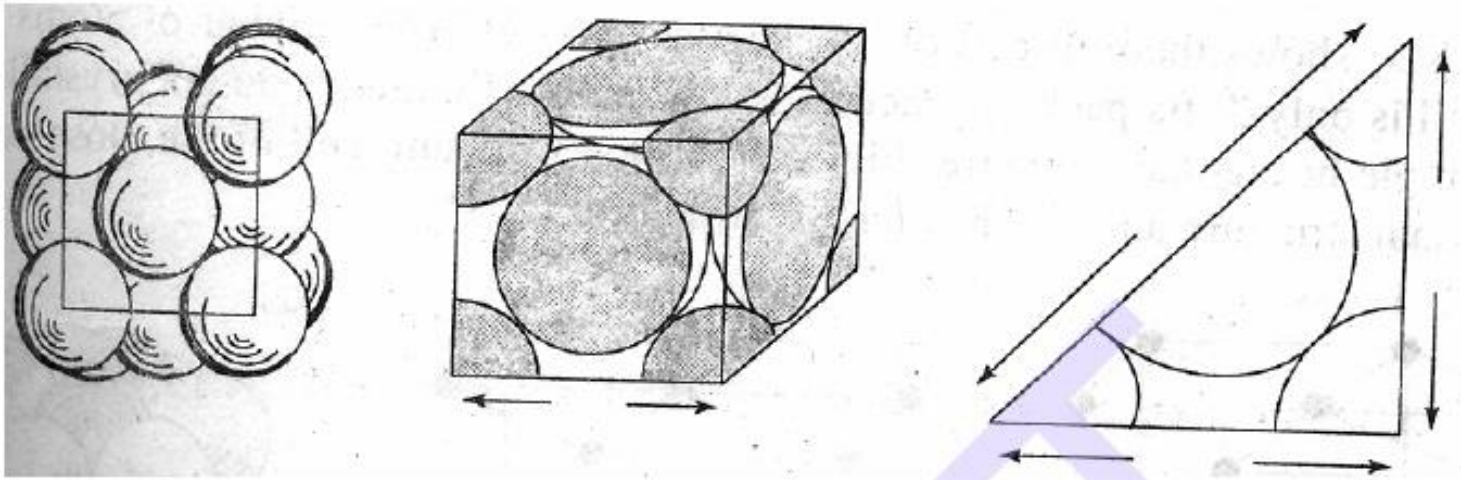


Fig. Face Centered Cubic Structure

- Face diagonal length = 4r = ($\sqrt{2}$) a
- Nearest neighboring distance = 2r = ($\sqrt{2}$)a **/** 2 = a / $\sqrt{2}$
- Atomic radius = r = a / 2$\sqrt{2}$
- Lattice constant = a = 2$\sqrt{2}$ r
- Coordination number = 12 (the center of each face has one atom. This center atom touches 4
- corner atoms in its plane, 4 face centered atoms in each of the 2 planes on either side of its plane)
- Effective number of atoms belonging to the unit cell or no. of atoms per unit cell = (⅛)x8 + (1/2)x 6 = 1 + 3 = 4 atom per unit cell.
- i.e. each corner atom contributes ⅛th to the unit cell. In addition to it, there is a center atom on each face of the cube.
- Atomic packing factor = v/ V =
- = 4 * (4 / 3) πr^3 / a^3 = 16π r^3 / 3(2$\sqrt{2}$ r)^3
- = π/3$\sqrt{2}$=0.74=74%