$$d_{333}=\frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2}+\frac{k^2}{a^2}+\frac{l^2}{a^2}}}=\frac{1}{\sqrt{\frac{3^2}{a^2}+\frac{3^2}{a^2}+\frac{3^2}{a^2}}}=\sqrt{\frac{a^2}{27}}=\frac{a}{3\sqrt{3}}$$

$$d_{511}=\frac{1}{\sqrt{\frac{25}{a^2}+\frac{1}{a^2}+\frac{1}{a^2}}}=\sqrt{\frac{a^2}{27}}=\frac{a}{3\sqrt{3}}$$

نلاحظ ان هذه السطوح لها نفس المسافات البينية مع اختلاف معاملات ميلر لها .

تمرين: احسب المسافة البينية في البلورة المكعبة للمستويات: $(422), (600)$.

تمرين: اثبت ان المسافة بين المستويات *(111)* في بلورة المكعب البسيط هي $\frac{a}{\sqrt{3}}$ حيث ***a*** طول ضلع المكعب.

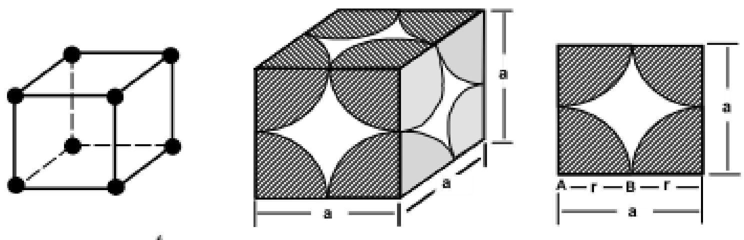
التركيب الذرى للبلورات ATOMIC STRUCTURE OF CRYSTALS

تتأثر الخصائص الفيزيائية للمواد البلورية بالشكل الهندسي للبلورة وكما تتأثر أيضا بالتركيب الذرى لها. يقصد بالتركيب الذرى للبلورة شكل ترتيب الذرات فيها بالإضافة إلى عدد الذرات في وحدة الخلية والتي تؤثر بشكل كبير في حجم وكثافة الخلية وبالتالي معظم الخصائص البلورية.

عدد الذرات في وحدة الخلية

لتعيين عدد الذرات في وحدة الخلية يجب معرفة الشكل الهندسي للخلية ونصف القطر الذرى لها. يعَرف نصف القطر الذرى على أنه نصف المسافة بين أقرب ذرتين متجاورتين في بلورة عنصر نقى مع مراعاة أن أقرب ذرتين متجاورتين يجب أن تلامس كل منهما الأخرى، كما سنبين لاحقا.

أ- المكعبى البسيط SIMPLE CUBIC, SC



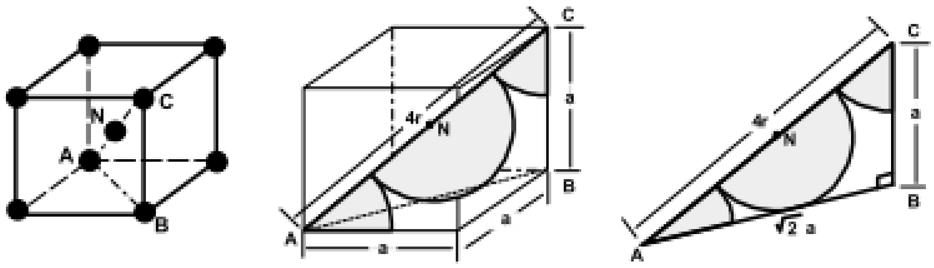
في حالة المكعبى البسيط، SC، توجد ذرة عند كل ركن من أركان الخلية الثمانية وتشارك هذه الذرة ثمانية خلايا مجاورة. يكون نصيب كل خلية من هذه الذرة هو $\frac{1}{8}$ ذرة.

وحيث أن لكل خلية 8 أركان فإن عدد الذرات في وحدة الخلية في هذه الحالة هو $1 = 8 \times \frac{1}{8}$

أي ذرة واحدة. ويمكن حساب نصف قطر الذرة في المكعبى البسيط، بالرجوع إلى الشكل طبقا للتعريف، تكون المسافة AB هي نصف القطر الذرى، ومن الشكل

يتضح أن $r = \frac{a}{2}$، حيث a هو طول ضلع الخلية المكعبة.

ب- المكعبى المتمركز الجسم BCC



خلية المكعبى المتمركز الجسم — مخطط الخلية — علاقة r مع a

في هذه الحالة، بالإضافة إلى الثماني ذرات الموجودة عند الأركان توجد **ذرة** كاملة عند مركز الخلية وعلى ذلك يكون عدد الذرات في وحدة الخلية هو $2 = 1 + 8 \times \frac{1}{8}$،

أي ذرتين فقط. ولحساب نصف القطر الذرى في هذه الحالة نشير إلى

يتضح من الشكل أن الذرتين C و N هما أقرب الجيران كل منهما للأخر. ومن هندسة الشكل نجد أن $r = \frac{CN}{2}$ وحيث أن

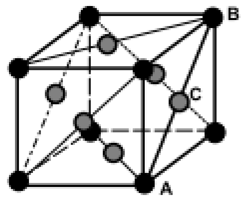
$$AC = \sqrt{\overline{AB}^2 + \overline{BC}^2} = \sqrt{\left(\sqrt{2}a\right)^2 + a^2} = \sqrt{3}\,a$$

ويكون نصف القطر الذرى هو

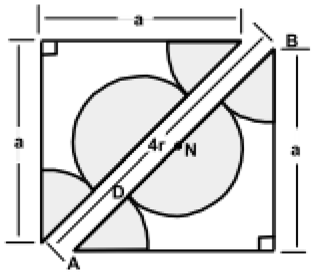
$$r = \frac{CN}{2} = \frac{AC}{4} = \frac{\sqrt{3}\ a}{4}$$

أو

$$a = \frac{4r}{\sqrt{3}}$$



خلية المكعبى المتمركز الوجه



علاقة r مع a

ج- المكعبى المتمركز الأوجه FACE CENTERED CUBIC, FCC

في المكعبى المتمركز الأوجه توجد ذرة واحدة في مركز كل وجه وتكون هذه الذرة مشاركة بين خليتين متجاورتين، هذا بالإضافة إلى الثماني ذرات الموجودة عند الأركان. مما سبق يتضح أن عدد الذرات في وحدة الخلية في هذه الحالة هو $4 = 8\times\frac{1}{8} + 6\times\frac{1}{2}$، أي أربع ذرات.

من الشكل يمكن تعيين العلاقة بين نصف القطر الذرى و أبعاد الخلية كما يلى: يتضح أن الذرتين A و C هما أقرب الجيران كل منهما للأخر وبالتالي يكون نصف القطر الذرى هو

$$r = AD = \frac{AC}{2} = \frac{AB}{4}$$
$$\because AB = \sqrt{2}\ a$$
$$\therefore r = \frac{\sqrt{2}\ a}{4} \quad \& \quad a = \frac{4r}{\sqrt{2}}$$

من الشكل يتضح أنّ القطر AB يساوى أربعة أمثال نصف القطر الذرى.

مثال: أحسب طول ضلع خلية الوحدة لكلٍ من :

(أ) شبيكة الفضة المتمركز الأوجه إذا كان نصف قطر ذرة الفضة هو 1.441 أنجستروم.

(ب) شبيكة النحاس المتمركز الأوجه إذا كان نصف قطر ذرة النحاس هو 1.276 أنجستروم.

الحل:

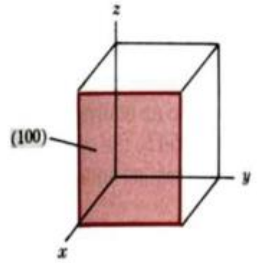
(أ) في حالة الفضة يكون $a = \frac{4r}{\sqrt{2}} = \frac{4x1.441}{\sqrt{2}} = 3.078\,\mathring{A}$

(ب) في حالة النحاس يكون $a=\frac{4r}{\sqrt{2}}=\frac{4x1.276}{\sqrt{2}}=3.08\,\mathring{A}$

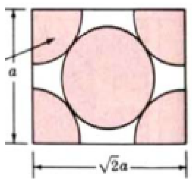
مثال: في بلورة الرصاص، أحسب الكثافة الذرية للمستويات :أ- (100) ، ب- (111) و

ج- (110)، إذا علمت أن الرصاص يتبلور على شكل مكعبي متمركز الأوجه وله $a=4.93\,\mathring{A}$.

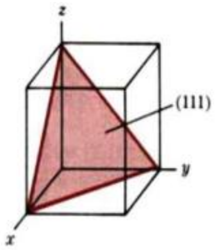
الحل:



(أ) فى المستوى (100) يكون توزيع الذرات كما هو مبين بالشكل 3-11 (أ). يحتوى هذا المستوى على ذرتين اثنتين $\left(2=1+4\times\frac{1}{4}\right)$ وبالتالي تكون الكثافة الذرية لهذا المستوى ، $\rho_{(100)}$ ، بأنها تساوى عدد الذرات مقسوم على المساحة، أي



$$\rho_{(100)}=\frac{2\ \text{atoms}}{(\text{a mm})^2}=\frac{2\ \text{atoms}}{\left(4.93\times10^{-7}\right)^2\ \text{mm}^2}=8.23\text{x}10^{12}\ \ \text{atoms/mm}^2$$



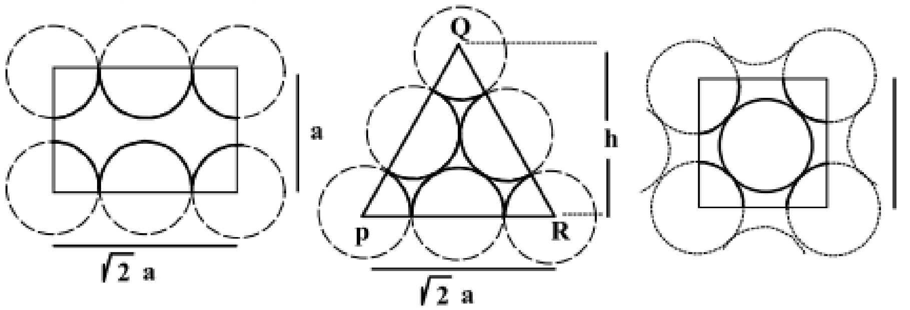
(ب) فى المستوى (111) يكون توزيع الذرات كما هو مبين بالشكل

المستوى على ذرتين اثنتين $\left(2=3\text{x}\frac{1}{6}+3\times\frac{1}{2}\right)$ لكل مثلث PRQ، ارتفاعه $h=\sqrt{2}\,a\cos30^\circ$

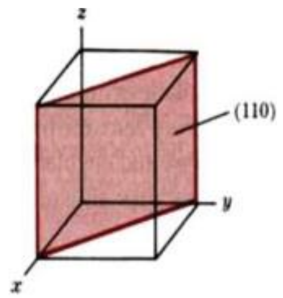
وطول قاعدته تساوى $\sqrt{2}\,a$ وبالتالي تكون مساحته تساوى $\frac{1}{2}\times\sqrt{2}a\times\sqrt{2}a\times\cos30^\circ=\frac{\sqrt{3}}{2}a^2$

و تكون الكثافة الذرية لهذا المستوى تساوى

$$\rho_{(111)}=\frac{4\ \text{atoms}}{\sqrt{3}\ \ a^2}=\frac{4\ \text{atoms}}{\sqrt{3}\ (4.93\times10^{-7})^2\ \text{mm}^2}=9.5\text{x}10^{12}\ \ \text{atoms/mm}^2$$



ج- المستوى (110) **ب- المستوى (111)** **أ- المستوى (100)**



(ج) فى المستوى (110) يكون توزيع الذرات كما هو مبين بالشكل 3-11 (ج). يحتوى هذا المستوى على ذرتين اثنتين $\left(2 = 4\times\frac{1}{4} + 2\times\frac{1}{2}\right)$ لكل وجه من أوجه خلية الوحدة وبالتالي تكون الكثافة الذرية لهذا المستوى هى

$$\rho_{(110)} = \frac{2 \text{ atoms}}{\sqrt{2}\ a^2\ \text{mm}^2} = \frac{2 \text{ atoms}}{\sqrt{2}\ (4.93\times10^{-7})^2\ \text{mm}^2}.$$
$$= 5.82\times10^{12}\ \text{atoms/mm}^2$$

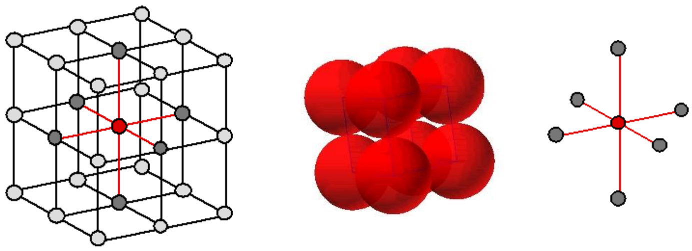
عدد التناسق للذرة ATOMIC COORDINATION NUMBER

يمثل عدد التناسق لعقدة الشبيكة (الذرة) مدى قدرة تراص الذرات في الشبيكة البلورية.

ويعرف: بانه عدد اقرب العقد في الشبيكة بالنسبة الى عقدة معينة، أي عدد اقرب العقد المجاورة لتلك العقدة.

المكعب البسيط *(SC)*

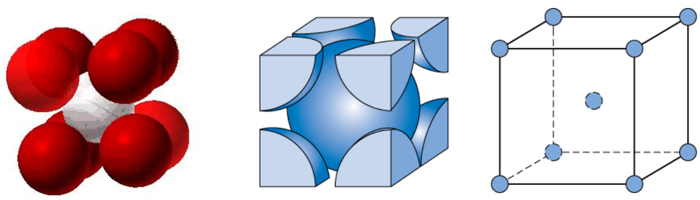
عدد التناسق= *6*



عدد الذرات لوحدة الخلية: 1 atoms/unit cell: (8 corners x 1/8)

المكعب متمركز الجسم *(BCC)*

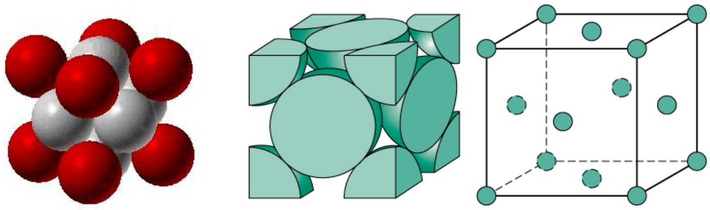
عدد التناسق= *8*



عدد الذرات لوحدة الخلية: 2 atoms/unit cell: (1 center) + (8 corners x 1/8)

المكعب متمركز الأوجه *(FCC)*

عدد التناسق= *12*



عدد الذرات لوحدة الخلية: 4 atoms/unit cell: (6 face x 1/2) + (8 corners x 1/8)

مواضع النقاط داخل خلية الوحدة

تحدد النقاط داخل خلية الوحدة بواسطة احدثيات الشبيكة بان تؤخذ نقطة الاصل عند ركن خلية الوحدة ويعبر عن الموضع بالاحداثيات x,y,z:

- احداثيات نقطة تتوسط خلية الوحدة هى$(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$
- احداثيات مراكز الاوجه هى ، .... ,....... ,....., $\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$, $\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right)$, $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$ اكمل .
- احداثيات الأركان هي: ....

Comparison of the 3 Cubic Lattice Systems

Unit Cell Contents

Counting the number of atoms ***within*** the unit cell

Atom Position	Shared Between:	Each atom counts:
corner	8 cells	1/8
face center	2 cells	1/2
body center	1 cell	1
edge center	2 cells	1/2

Lattice Type	Atoms per Cell
P (Primitive)	1 [= 8 × 1/8]
I (Body Centered)	2 [= (8 × 1/8) + (1 × 1)]
F (Face Centered)	4 [= (8 × 1/8) + (6 × 1/2)]
C (Side Centered)	2 [= (8 × 1/8) + (2 × 1/2)]

25

الجدول 3−1 بعض خصائص الشبيكة المكعبة

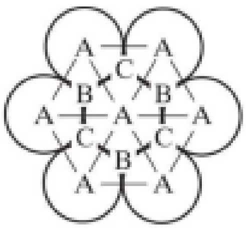
الخصائص	المكعبى البسيط	المكعبى المتمركز الجسم	المكعبى المتمركز الأوجه
حجم خلية الوحدة	a^3	a^3	a^3
حجم الخلية الأولية	a^3	$\frac{a^3}{2}$	$\frac{a^3}{4}$
عدد العقد لكل وحدة خلية	1	2	4
عدد العقد لوحدة الحجم	$\frac{1}{a^3}$	$\frac{2}{a^3}$	$\frac{4}{a^3}$
العدد التناسقى	6	8	12
عدد العقد المجاورة للجوار المباشر	12	6	6
المسافة بين أقرب عقدتين	A	$\frac{\sqrt{3}\ a}{2} = 0.86a$	$\frac{a}{\sqrt{2}} = 0.7a$

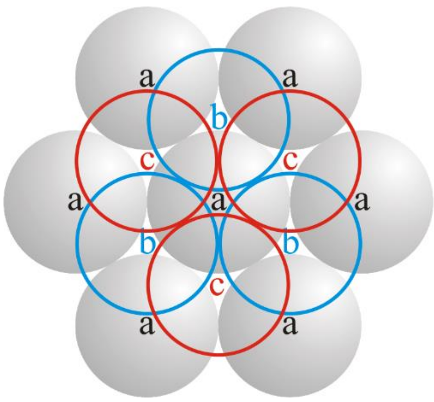
تركيب الرص المتلاصق (close- packed-structures):

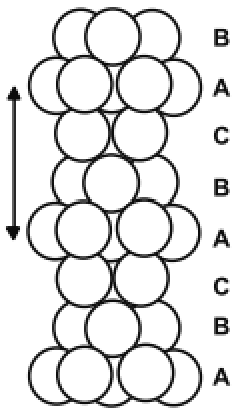
عند تعبئة كرات متشابهة (لها نصف القطر r) في وعاء كبير، فإن مراكز هذه الكرات تكون بمثابة نقط فراغية وتكون شبيكة، ولكي يكون الرص جيدا يجب أن يكون الفراغ المتروك (الحجم الخالي) بين الكرات أقل ما يمكن، نرتب في البداية مجموعة من الكرات لتكون طبقة متراصة نسميها الطبقة A، كما بالشكل 3−14(أ)، بحيث تتماس كل كرة مع ستة كرات مجاورة. نقوم بتعبئة طبقة ثانية من الكرات (B) فوق الطبقة الأولى.

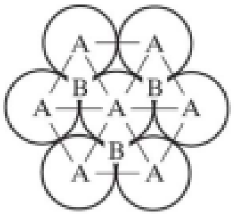
لاحظ أن كل كرة من الطبقة B ستقع في الفجوات بين الكرات A وتتماس مع ثلاث كرات من الطبقة A. عند وضع الطبقة الثالثة على الطبقة الثانية هناك احتمالين لترتيب الطبقة الثالثة:

الأول : أن تشغل كرات الطبقة C (التي تقع فوق كرات الطبقة B) موقعا يقع مباشرة فوق الفجوات (بين كرات الطبقة A). تقع كرات الطبقة الرابعة تماما فوق كرات الطبقة A، وهكذا نحصل على توزيع للكرات على الصورة (ABCABC...) الذي يكون وحدة خلية مكعبة متمركزة الأوجه. تشغل طبقات الكرات المستويات العمودية على القطر تسمى هذه الخلية المكعبة بالعبوة المكعبة المتلاصقة الرص.

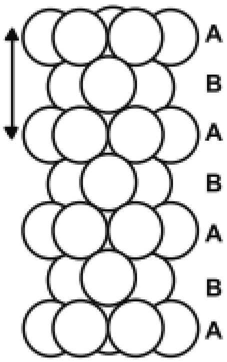


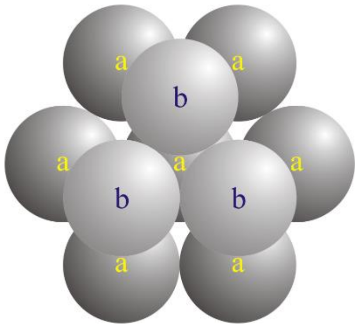


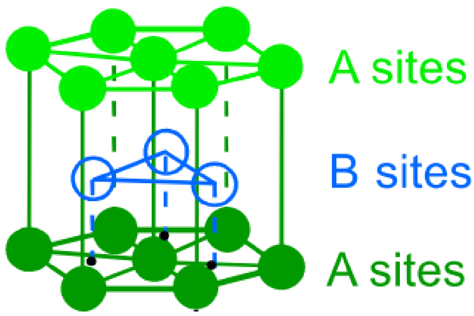




الثاني: أن تشغل كرات الطبقة الثالثة (C) مكانا يقع تماما فوق كرات الطبقة A، ولذلك تسمى الطبقة الثالثة A أيضا. نلاحظ في هذه الحالة وجود فراغات بين الكرات، كما يتبين من الشكل 3–15 (أ). بهذا الأسلوب نحصل على توزيع للكرات على الصورة (ABABAB...) وهذا النوع من الرص يكون وحدة خلية سداسية الشكل،







تعرف كثافة الرص (Packing Density, PD) بأنّها النسبة بين الحجم المشغول بالذرات إلى حجم الخلية. في المكعبى المتمركز الأوجه تحتوى الخلية على أربع ذرات $\left(4=8\times\frac{1}{8}+6\times\frac{1}{2}\right)$ ويكون نصف القطر الذرى هو $\frac{\sqrt{2}}{4}\,a$، وحيث أن حجم الذرة هو $\frac{4}{3}\pi r^3$ فإن الحجم الفعلي للذرات الأربعة يكون $4\times\frac{4}{3}\pi(\frac{\sqrt{2}}{4}a)^3=0.74\,a^3$. بناء على ما سبق، نجد أن كثافة الرص في المكعبى المتمركز الأوجه هي،

$$PD=\frac{0.74\,a^3}{a^3}=0.74 \qquad \text{or} \qquad 74\%$$

<u>**تمرين**</u> جد كثافة الرص *PD* في حالة المكعب البسيط *SC* وحالة المكعب المتمركز الجسم *BCC*.

الجدول 3–1 بعض خصائص الشبيكة المكعبة

الخصائص	المكعبى البسيط	المكعبى المتمركز الجسم	المكعبى المتمركز الأوجه
حجم خلية الوحدة	a^3	a^3	a^3
حجم الخلية الأولية	a^3	$\frac{a^3}{2}$	$\frac{a^3}{4}$
عدد العقد لكل وحدة خلية	1	2	4
عدد العقد لوحدة الحجم	$\frac{1}{a^3}$	$\frac{2}{a^3}$	$\frac{4}{a^3}$
العدد التناسقى	6	8	12
عدد العقد المجاورة للجوار المباشر	12	6	6
المسافة بين أقرب عقدتين	A	$\frac{\sqrt{3}\,a}{2}=0.86\,a$	$\frac{a}{\sqrt{2}}=0.7a$

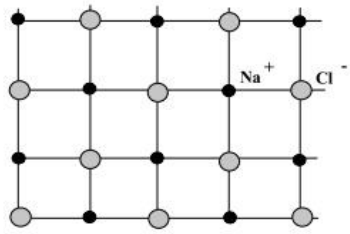
أمثلة على بعض البنى البلورية البسيطة والشهيرة:

1- ان معظم البلورات المعدنية تنتمي الى الشبيكات المكعبة والسداسية .

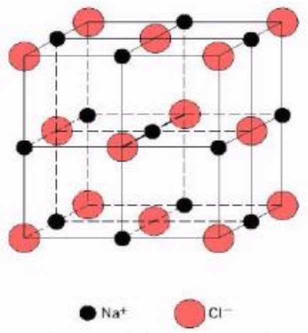
2- المركبات مثل ملح الطعام (*NACl*)

بلورة كلوريد الصوديوم تشكل ايونات الصوديوم *Na+* رؤوس المكعب ومراكز وجوهه في حين تشكل ايونات الكلور *Cl-* منتصفات الاحرف ومركز المكعب او العكس. ويمكن تصور البلورة على انها مؤلفة من شبكتين من النوع *FCC* احدهما شبكة الصوديوم والأخرى شبكة الكلور وكل واحدة منهما مزاحة عن الأخرى بمقدار *1/2 a* ويمكن تصور بنية هذا الملح على شكل كرات متراصة من *Cl-* تحتل كرات *Na+* الفراغات الكائنة بينها.

ويلاحظ ان كل ايون محاط بستة ايونات من النوع الاخر وتحوي وحدة الخلية على اربع جزيئات، كما في الشكل. وتكون مواضع أيونات الصوديوم الأربعة هي 000 و $\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$ و $\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$ و $0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$، بينما تتواجد أيونات الكلور الأربعة في المواضع $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ و $00\frac{1}{2}$ و $\frac{1}{2}00$ و $0\frac{1}{2}0$



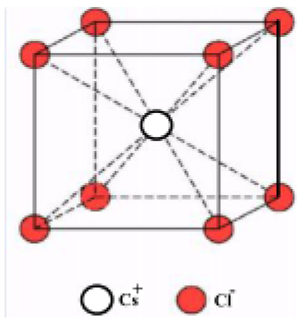
أ- البلورة مرسومة في بعدين



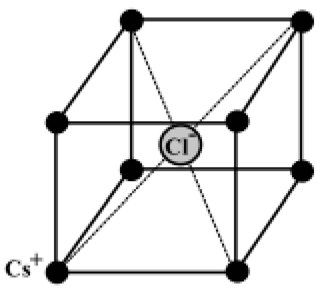
ب- بلورتين متمركزتين الأوجه متداخلتين

3- اما كلوريد السيزيوم *CsCl* فهو على شكل شبيكة مكعبة متمركزة الجسم *BCC* يحتل ايون الكلور مركز المكعب ويحاط بثمانية ايونات موجبة من السيزيوم ووحدة الخلية تحوي جزيء واحد من *CsCl*. كما في الشكل.

توجد في كل وحدة خلية أيون سيزيوم واحدة موضوعة عند النقطة 000 وايون كلور عند $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$. ولهذا فإن بلورة كلوريد السيزيوم هي بلورة غير برافية تتكون من بلورتين مكعب بسيط تبعد كل منهما عن الأخرى بمسافة تساوى نصف قطر المكعب.

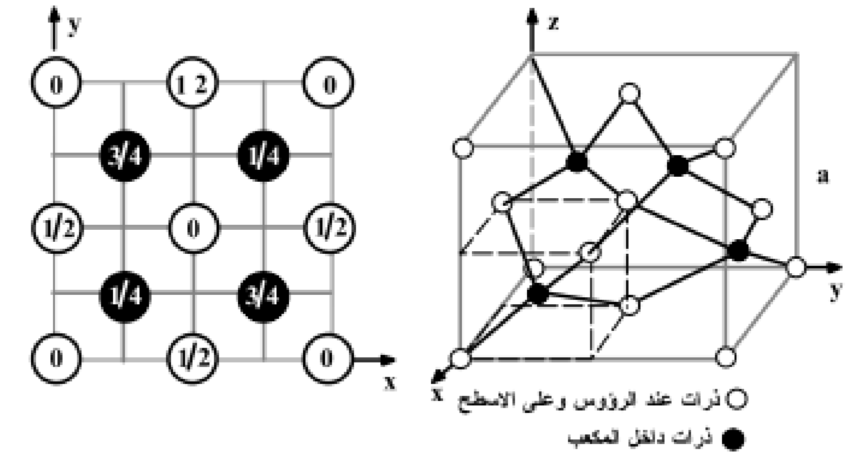


أ- بلورة كلوريد السيزيوم



ب- خلية الوحدة

4- تركيب الماس *Diamond* : بنية الماس على شكل شبيكة مكعبة متمركزة الأوجه *FCC* بحيث تشكل ذرات الكاربون رؤوس المكعب ومراكز وجوهه قاسمة إياه الى ثمانية مكعبات صغيرة وتحتل اربع ذرات كاربون مراكز أربعة من هذه المكعبات وفي هذه الحالة تحاط كل ذرة كربون بأربع ذرات مجاورة ، كما في الشكل وفيها يتكون الأساس من ذرتين من الكربون مصاحبتين لكل عقدة (نقطة) عند الإحداثيات : 000 و $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$. ويمكن تصور شبيكة الماس المكعبة على أنها تتكون من شبيكتين (fcc) متماثلتين ومتداخلتين. تتكون الشبيكة الأولى من الذرات المظللة في الشكل (ب) وتتكون الشبيكة الثانية من الذرات غير المظللة. تكون هاتين الشبيكتين مزاحتان عن بعضهما



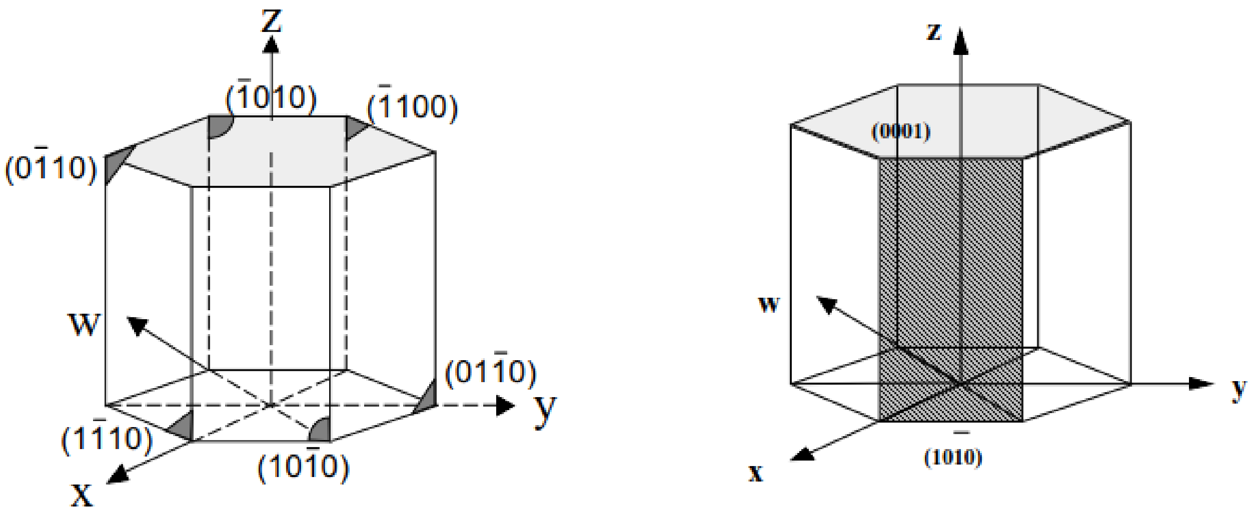
ب إحداثيات مساقط الذرات على المستو الأفقي

أ- تركيب بلورة الماس

ادلة ميلر في فصيلة السداسي

لفصيلة السداسي أربعة محاور بلورية: ثلاث منها في مستوى واحد (مستوى السطح العلوي أو مستوى القاعدة) والمحور الرابع عمودي على هذا المستوى. وبالتالي يرسم الشكل السداسي في الفراغ بدلالة محاور أربعة هي x و y و w و z وتكتب أدلة ميلر على الصورة (hkil). الأدلة h و k و i و l تمثل المحاور x و y و w و z على وجه الترتيب. وحيث انه يمكن إثبات العلاقة $h+k+i=0$، وأن السطح العلوي للشكل السداسي يقطع المحاور x,y,w في ما لانهاية ويقطع محور z بمقدار وحدة الخلية، فإن أدلة ميلر لهذا السطح تكون (0001). وعلى سبيل المثال، تكون أدلة ميلر لهذا السطح السفلى (القاعدة) هي $(000\bar{1})$، كما هو مبين بالشكل

الوجه الجانبي المظلل في الشكل يقطع المحاور x, y, w, z في $1, \infty, -1, \infty$ على وجه الترتيب، ولهذا فإن أدلة ميلر لهذا الوجه تكون $(10\bar{1}0)$.



أدلة ميلر لفصيلة السداسي.

مثال: عين أدلة ميلر للأوجه الستة الرأسية للشكل السداسي

الحل: بإتباع نفس الطريقة السابقة تكون أدلة ميلر للأوجه الرأسية في الشكل السداسي كما هي مبينة في الشكل الجانبي.