



بنية المادة الكثيفة : البلورات

د. اسكندر منيف

4/9/2013

نتناول فيما يلي المفاهيم الأولية المستخدمة في دراسة بنية المادة الصلبة.

1.1 الجسم البلّوري والجسم اللابلّوري

تُعتبر الحالة الصلبة الحالة الفيزيائية التي تتمتع بها معظم المواد الكيميائية في الشروط الاعتيادية من الضغط الجوي والحرارة. يمكن لجميع المركبات أن تتصلب عندما تنخفض درجة الحرارة بشكل كافٍ و/أو عند زيادة الضغط المطبق عليها بشكل كافٍ أيضاً.

1.1.1 الحالة البلّورية الدقيقة أو الميكروبلّورية والحالة الزجاجية

يدل الفحص المجهرى لسطح قطعة من معدن لم تخضع لعمليات التصنيع (صقل، سحب...)، على وجود مناطق صغيرة متوضعة جنباً إلى جنب تدعى البلّورات الدقيقة أو الميكروبلّورات تفصل بينها حدود واضحة، كما ونلاحظ أنه عند كسر قطعة من الزجاج تكون أطراف أو حدود الكسر حادة وواضحة.

تدلنا دراسة الصخور البركانية إلى وجود علاقة وثيقة بين بنية الجسم الصلب المتشكل وسرعة التبريد التي يخضع لها السائل المصهور ونميز في ما يلي عدة حالات:

• تصلّب بطيء جداً

مثال ذلك الصخور الغرانيتية المكونة للجبال البركانية، والتي تشكّلت عبر ملايين السنين من تصلّب المصهور البركاني، حيث نلاحظ احتواءها على حبيبات بلّورية كبيرة بالإضافة لبعض الشوائب .

• تصلّب سريع

مثال ذلك الصخور البازلتية التي تشكّل طبقات ذات ثخانة قليلة و امتداد كبير والتي تصلبت بشكل أسرع، تتألف الصخور البازلتية من تجمع بلّورات صغيرة، وتحتوي على فراغات كبيرة ناتجة عن تشكل فقاعات هوائية أثناء التصلب.

• تصلب فجائي

يتصلب المصهور البركاني بشكل مفاجئ لدى تعرضه لتبريد سريع كغمره في ماء بارد فيبيدي عند ذلك مظهراً لامعاً وسهولة للكسر كالزجاج ومثال ذلك السبج (حجر زجاجي أسود)، ومن هنا جاء مفهوم الحالة الزجاجية للمواد الصلبة.

نتيجة: نميز بشكل أساسي حالتين للجسم الصلب هما:

الجسم الصلب المتبلور والذي يحوي بلّورات دقيقة أو ميكروبلّورات، والجسم الصلب في الحالة الزجاجية

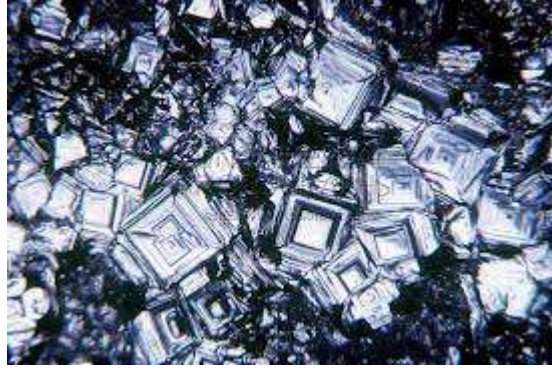
اهتم الباحثون بشكل كبير بعلم البلّورات خلال القرن التاسع عشر، حيث أعطى برافيه A.Bravais (1863-1811) تصوراً ووصفاً دقيقاً للبناء الهندسي للحالة البلّورية قبل تطور الأساليب العلمية لدراسة المادة والذرة.

ومع اكتشاف انعراج الأشعة السينية RX في البلّورات (فون لو M.Von Laue 1912) وتصنيع أول مقياس لانعراج الأشعة السينية RX Diffractometre من قبل براغ (W.H et W.L Bragg 1913) تم التحقق المباشر للطبيعة الدورية للترتيب البلّوري وبذلك أصبح تعيين البنية البلّورية للمادة حقيقة ملموسة. ومن الطرق الأخرى التي ساهمت في دراسة البلّورات كان المجهر أوميكروسكوب الإلكتروني ومطياف الطنين المغناطيسي RMN ومطياف مووس باور Mossbauer .

وهكذا وبمعرفة البنية البلّورية الذرية، وتحديد مواقع الذرات في الفراغ، أصبح بمقدورنا وصف الجسم البلّوري من وجهة نظر كيميائية، كتحديد ماهية الروابط بين الذرات و الجزيئات، كما أصبح المجال مفتوحاً أمام المختصين في دراسة الجسم الصلب لربط الخواص الفيزيائية والكيميائية للمركبات الصلبة ببنيتها البلّورية.

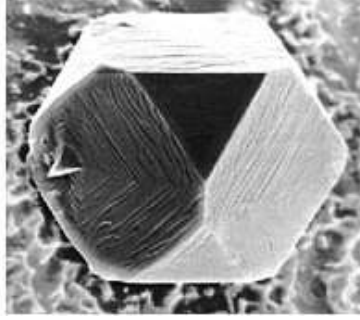
تُصنّف بعض المواد الكيميائية التي تأخذ شكلاً خاصاً بها مثل السكر والملح الصخري والكبريت ...، كأجسام بلّورية. حيث تبدو حبيبات كلور الصوديوم كمكعبات صغيرة ولكن بوضعها تحت المجهر نلاحظ تعرض رؤوس هذه المكعبات للكسر نتيجة الاحتكاك الميكانيكي مع مرور الزمن وتشكل وجوه مثلثية (مثلث متساوي الأضلاع) يمكن لها أن تزداد حتى نحصل في بعض الحالات على ثماني وجوه منتظم كما في الشكل 2.

إن ما يثير الانتباه في هذه الانكسارات أو التقصفات التي تتعرض لها بلّورات الملح هو حدوثها دائماً بشكل عمودي على القطر الكبير للمكعب، مما يدل على أن التأثيرات الذرية المتبادلة تكون قوية ضمن مستويات معينة.



الشكل 1. بلّورات كلور الصوديوم تحت المجهر .

إن تعميم تلك الظاهرة يفسر لنا صعوبة تغيير الشكل الطبيعي للبلّورات والمثال الأكثر شهرةً هو الماس الخام الذي تنكسر زوايا بلّوراته دائماً بزاوية ثنائية مقدارها 109,47 درجة.



الشكل 3. بلورات الماس

نستنتج مما سبق أن للبلّورات اتجاهات أو مستويات مميزة تحدد الخواص الفيزيائية للمادة كنفق التيار الكهربائي والخواص المغناطيسية والضوئية والمقاومة الميكانيكية... الخ، نسمي هذه الأجسام أجساماً لا متساوية المناحي، ولكن بالمقابل هناك مواد أو مركبات كيميائية صلبة أخرى مثل الزجاج والمطاط والمواد البلاستيكية التي يمكننا التحكم بشكلها بعمليات التصنيع حسب رغبتنا، دون أن تعتمد خواصها على اتجاه تطبيق التأثير نسمي هذه الأجسام أجساماً متساوية المناحي Isotropic وتسلق هذه الأجسام سلوكاً خاصاً عند تسخينها فهي تأخذ شكلاً "عجيباً" قبل انصهارها وتصنف ضمن المواد اللابلّورية amorphous

1.1.2 الحالة المرتبة والحالة غير المرتبة

يوجي انتظام الشكل الخارجي للجسم البلّوري بالتوزّع المنتظم للذرات (الجزيئات، الشوارد) في الجسم

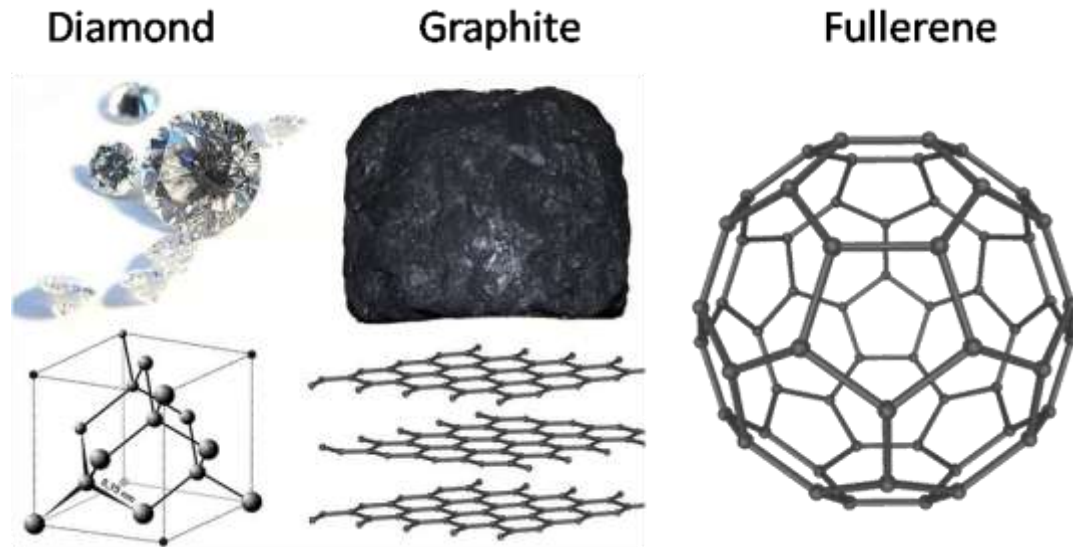


البلّوري ولكن ماذا عن الجسم اللابلّوري؟

يمكننا أن نشبه حالة الانتظام واللاانتظام بحالة عربة البائع المتجول والذي يبدأ عمله بعربة من الفاكهة مرتبة بشكل هرمي ومنتظم ولا يلبث أن تتحول سحالة العربة إلى حالة غير مرتبة حتى تصبح في النهاية عشوائية (الشكل 3). إن الحالة الابتدائية للعربة هي حالة الجسم البلّوري والحالة النهائية هي حالة الجسم الزجاجي أو اللابلّوري.

الشكل 4. الحالة المرتبة والحالة غير المرتبة

إن تصنيف الأجسام الصلبة كأجسام بلّورية أو لابلّورية يعتمد على التوزّع الداخلي للذرات، ولكن هل يمكن اعتبار ذلك معياراً للتمييز فيما بينها؟ إن الجواب على هذا السؤال غير واضح فالكربون يأخذ عدة أشكال في الحالة الصلبة: بلّورات ثلاثية الأبعاد (الماس) وصفائح ثنائية البعد (الغرافيت) وكرات من الكربون تشبه كرة القدم (الفوليرين C_{60}) والكربون في الحالة الزجاجية.



يبين فحص أي سطح بلّوري أن التوزيع المنتظم، والذي يمثل المعيار الأساسي للحالة البلّورية، لا يكون محققاً بشكل كامل في أغلب الحالات، فهناك دائماً بعض العيوب التي تمنع من وجود البلّورة المثالية كظهور بقع لونية تدل على اللاتجانس في التركيب أو وجود بعض الشوائب، ووجود تدرجات عند حواف البلّورة أو تجمعات بلّورية صغيرة موجهة باتجاه مغاير أو مختلف. ومن العيوب الأخرى على مستوى البناء الذري للبلّورة وجود ذرة فائضة أو غياب ذرة من مكانها أو توضع ذرة في غير مكانها .

نتيجة. لا وجود للجسم البلّوري المثالي فهو مجرد نموذج نظري. ويمثل الجسم البلّوري والبلّوري حالتان حديتان لانتظام المادة في حالتها الصلبة وبين هاتين الحالتين يوجد كل الإمكانات الأخرى من الانتظام واللاتنظام .

نصطلح عملياً أنه يمكن اعتبار الجسم البلّوري مثالياً إذا كان الترتيب الذري يمتد حوالي 50 مسافة بين ذرية أي حوالي 5 نانومتر ($1nm = 10^{-9}m$) إذا اعتبرنا أن حجم الذرات يتراوح بين 50 إلى 200 بيكومتر. ($1pm = 10^{-12}m$).

سنعتبر فيما يلي الأجسام المتبلّورة المدروسة مثالية وسنقوم بدراسة العلاقة بين بنيتها وخواصها بعد تصنيفها في فئات حسب تناظرها ومن ثم حسب نوعية الروابط الكيميائية الموجودة.

تعريف أولية في البنية البلّورية

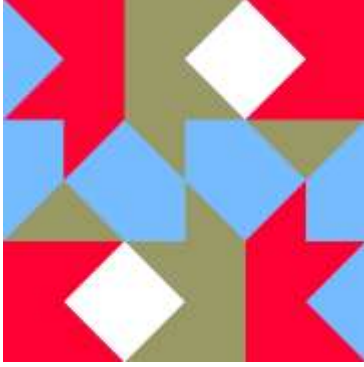
1.2 عناصر التناظر

توصل علماء البلّورات منذ حوالي 150 سنة إلى تصنيف البلّورات وفق طريقتين، كانت الطريقة الأولى معتمدة على الخواص التناظرية الخارجية والمرئية للبلّورات، والتي تحدد الخواص الفيزيائية للمادة، أما الطريقة الثانية فتعتمد على المستوى المكروسكوبي الدقيق لها والذي يأخذ بعين الاعتبار الترتيب الحقيقي للذرات داخل البلّورة أو الشوارد أو الجزيئات المؤلفة للبلّورة.

يُبرز انتظام الشكل الخارجي للبلّورات الدور الهام الذي تلعبه عناصر التناظر في البلّورة، هذه العناصر إما أن تصف التناظر الهندسي لمجسم متعدد الوجوه المشكل للجسم البلّوري على المستوى الماكروسكوبي ونسميها في هذه الحالة عناصر تناظر الاتجاه أو أن تصف البنية الدورية ثلاثية البعد، غالباً، للوسط البلّوري ونسميها في هذه الحالة عناصر تناظر الموقع

1.2.1 عناصر تناظر التوجه أو الاتجاه

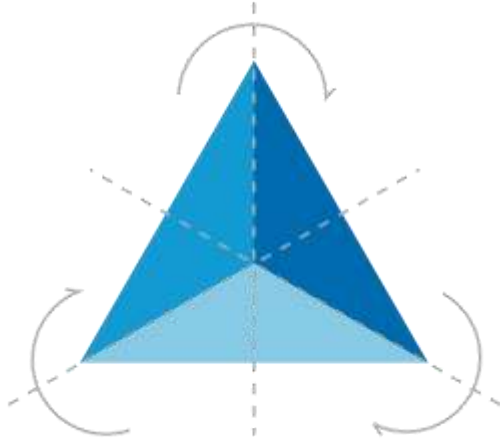
نقول عن شكل ما (F) أنه يتمتع بخاصة تناظر عندما يوجد على الأقل عملية تناظر تكون صورة هذا الشكل (F') مطابقة له تماماً، يعتبر عنصر تناظر الاتجاه عملية قادرة على جعل الشكل مطابق لنفسه ولكن هذا لا يعني بالضرورة أن جميع نقاط الشكل سوف تكون مطابقة لنفسها بل تحتل النقطة A (الشكل 4) بعد تطبيق عملية التناظر مكان نقطة ثانية B مكافئة لها تماماً من الشكل نفسه، ويحدد عدد النقاط المكافئة درجة تناظر الشكل F .



1.2.1.1 مركز التناظر C

(تناظر الجسم بالنسبة لنقطة منه).
إذا كان الجسم F يملك مركز تناظر C فإنه يكون مطابقاً لـ F' الناتج عن عملية تطبيق التناظر بالنسبة لهذا المركز .

الشكل 2. مركز التناظر



1.2.1.2 محور الدوران A_n

إذا كان الجسم يملك محور دوران A_n فإنه ينطبق على نفسه بعد دورانه حول هذا المحور بزاوية مقدارها $\alpha=2\pi/n$.

الشكل 3. محور تناظر من المرتبة 2

محاور الدوران في البلّورات :

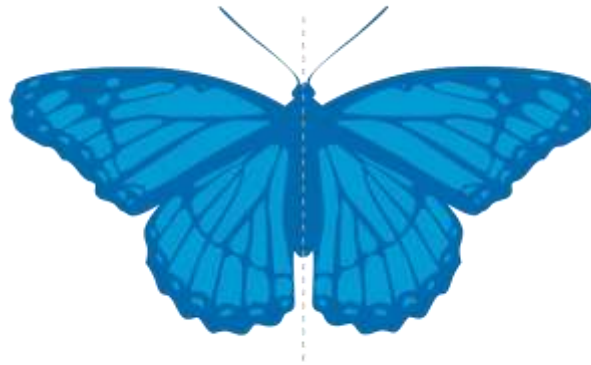
المرتبة	رمز محور الدوران	زاوية الدوران بالدرجة
2	A_2	180
3	A_3	120
4	A_4	90
6	A_6	60

جدول 1. محاور الدوران في البلّورات

لاحظ عدم وجود محور دوران تناظري من المرتبة الخامسة؟ علل ذلك.

1.2.1.3 مستوى تناظر M_n

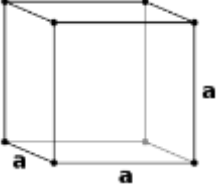
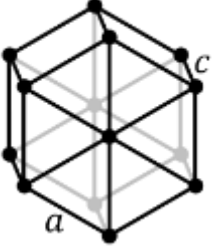
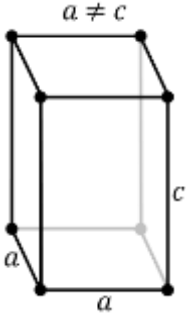
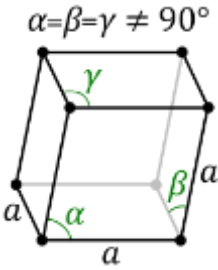
عندما يتمتع الجسم بمستوي تناظر فإنه يتطابق مع صورته بالنسبة لهذا المستوي كما يوضح الشكل المجاور، إذا كان مستوي التناظر هذا متعامداً مع محور دوران تناظري درجته n نرسم للمستوي في هذه الحالة بـ M_n يكافئ المستوي M_n في الشكل المجاور دورانياً A_2 متبوعاً بالتناظر بالنسبة لمركز تناظر C (نقطة تقاطع المستوي M مع A_2).

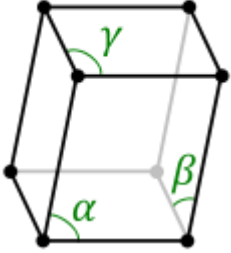
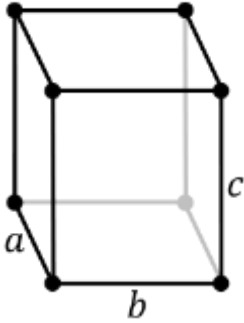
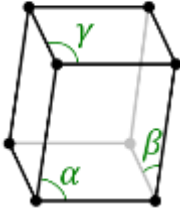


الشكل 4. مستوى التناظر

1.3 الجمل البلّورية

تقود دراسة التناظر في البلّورات الصلبة على المستوى المرئي إلى دراسة تناظر المجسمات الفراغية التي لا تملك سوى عناصر التناظر من النوع محور، مستوي، مركز وتسمح عناصر التناظر هذه بتمييز سبع جمل بلّورية ينتمي إليها كل أنواع البلّورات الموجودة في الطبيعة. يميز كل جملة بلّورية بشكل عام مجسم متعدد الوجوه نقطة تقاطع أقطاره هي مركز تناظر بالنسبة للجملة البلّورية. يتضمن الجدول الآتي هذه الجمل السبعة.

التمثيل الفراغي	متعدد الوجوه	اسم ورمز الجملة
	المكعب	المكعبة C Cubic
	موشور سداسي منتظم	السداسية h Hexagonal
	موشور قاعدته مربع	الرباعية tetragonal
	معين الوجوه	المعينة r <u>Rhombohedral</u>

<p>$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$</p> 	<p>متوازي الوجوه</p>	<p>ثلاثية الميل a Triclinic</p>
<p>$a \neq b \neq c$</p> 	<p>موشور قاعدته مستطيل</p>	<p>متوازي المستطيلات orthorhombic</p>
<p>$\beta \neq 90^\circ$ $\alpha, \gamma = 90^\circ$</p> 	<p>موشور قائم قاعدته متوازي أضلاع</p>	<p>أحادية الميل a Monoclinic</p>

الشكل 5. الجمل البلورية السبعة

1.4 توصيف البلّورات

وضع برافيه (عام 1850) فرضية تنص على أنه يوجد بالضرورة من أجل كل جملة من الجمل البلّورية السابقة توزيع فراغي للذرات أو الجزيئات في رؤوس الشبكة (أو عقدها) الثلاثية الأبعاد. وهذا ما سنشرحه فيما يلي.

1.4.1 مفاهيم أولية

1.4.1.1 مولّد البلّورة

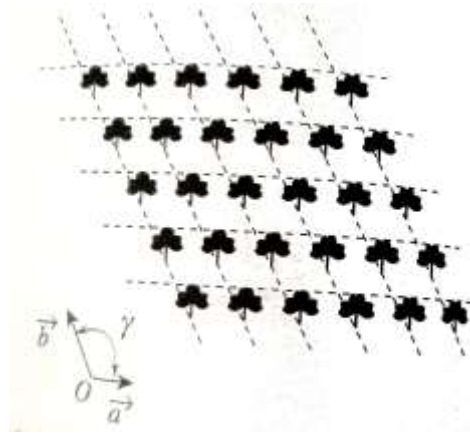
سوف نعرف مولّد البلّورة في فضاء ثنائي البعد، وسنعمم هذا التعريف من أجل فضاء ثلاثي الأبعاد.

تعريف المولّد:

هو أصغر عيّنة من المادة تتكرر بشكل دوري في الفضاء، مثال: ذرة، جزيئة، شاردة ...، ففي حالة بلّورة معدن النحاس المولّد هو ذرة النحاس، وفي كربونات الكالسيوم المولّد هو Ca CO_3 : ذرة من الكالسيوم وذرة من الكربون و3 ذرات من الأكسجين .

1.4.1.2 الشبكة

يتكرر المولّد دورياً في فضاء ثنائي البعد بواسطة شعاعين هما a و b مستقلين خطياً طويلتيهما a و b والزاوية المحصورة بينهما هي γ . يكفي إضافة شعاع ثالث مستقل خطياً عن الشعاعين الآخرين لكي نعمم هذه الظاهرة في فضاء ثلاثي البعد .



الشكل 6. البنية الدورية ثنائية البعد وشبكة برافيه.

نسمي الأشعة الثلاثة $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ أشعة القاعدة.

إذاً كل انسحاب شعاعه $\vec{t} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}$ (حيث m, n, p هي أعداد صحيحة) يعطي جملة جديدة مطابقة تماماً للجملة الأصلية، وكل انتقال مركزه O وشعاعه \vec{t} يولد نقطة جديدة نسميها عقدة ومجموعة العقد المتولدة هذه تشكل الشبكة الانسحابية.

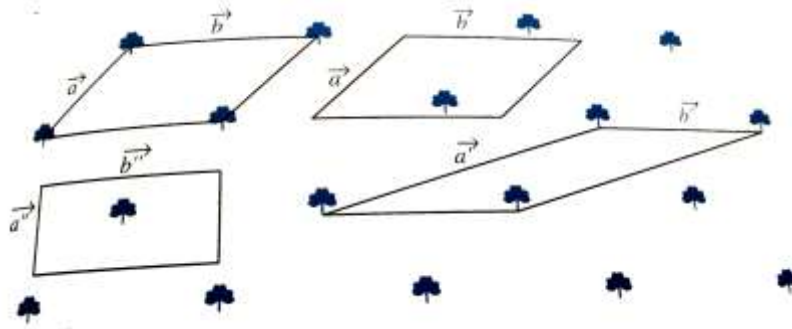
من الواضح أن مركز الانسحاب هو عقدة من عقد الشبكة الانسحابية. عندما نطبق انسحاباً شعاعه \vec{t} على مولد البلورة ينتقل هذا المولد لمكان مولد آخر مطابق له تماماً، وبشكل عام ينتقل التوزيع الإلكتروني الذي يميز التوزيع الذري لتوزيع مطابق له تماماً.

تمثل مجموعة نقاط الشبكة الانسحابية المحل الهندسي الذي تتوضع عليه جميع المولدات في البلورة وبهذا نعرّف ما يدعى شبكة برافيه Bravais.

اصطلاح: لتسهيل عملية الرسم نضع مكان كل مولد نقطة تميزه في كل عقدة من الشبكة وغالباً ما يستعاض عن المولد بالعقدة المطابقة.

1.4.1.3 الخلية العنصرية

تمثل الخلية العنصرية في فضاء ثنائي البعد المساحة الصغرى التي يمكن أن نمسح بها كل المستوي بتطبيق الانسحاب $(\vec{t} = m\vec{a} + n\vec{b})$ حيث m و n هي أعداد صحيحة.



الشكل 7. الخلية العنصرية لشبكة مستوية

تحتوي الخلية العنصرية مولد البلورة بحيث نحصل بتكرارها على البلورة كاملةً. وبما أنه يمكن اختيار الشعاعين \vec{a} , \vec{b} بطرق عديدة فإنه من الممكن أن نمسح فضاء البلورة بعدد كبير من الخلايا العنصرية.

يمثل الشكل 10 أربع خلايا عنصرية لنفس البلورة وما يميز هذه الخلايا العنصرية كلها هو أنها تتمتع بنفس المساحة وفي حال تم اختيار خلية عنصرية ذات مساحة أكبر سوف يكون سطحها بالضرورة مضاعفاً للسطح الأصغر .

النتيجة مماثلة في الفضاء ثلاثي الأبعاد فالخلية العنصرية لجملة بلورية هي منطقة من الفراغ ذات حجم أصغر بحيث يمكننا مسح الفراغ كله بتطبيق انسحاب قدره \vec{t} لنحصل في النهاية على البلورة كاملةً.

إذاً يوجد عدد كبير من الخلايا العنصرية ذات الحجم V نفسه. يمثل متوازي السطوح المتشكل من الأشعة الثلاث $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ والتي تحصر بينها الزوايا $\alpha(a,b); \beta(c,a); \gamma(b,c)$ خليةً عنصرية للبلورة. يساوي حجم الخلية العنصرية للشبكة البلورية القيمة العددية للجداء الشعاعي المختلط:

$$V = (\vec{a} \otimes \vec{b}) \cdot \vec{c}$$

تأخذ الأعداد m, n, p قيماً عددية مساوية للصفر أو الواحد بالنسبة للمولدات التي تتوضع في رؤوس الخلية العنصرية إذاً يكفي لتعريف رأس معين من رؤوس الخلية، معرفة قيم الأعداد m, n, p والتي سنضعها دائماً بين قوسين كالتالي : (m, n, p) .

ملاحظة : عندما يكون أحد الأعداد m, n, p سالباً نضع الإشارة السالبة فوق العدد .

مثال: لتكن النقطة P من الشبكة البلورية والناجمة عن الانسحاب $t = a + b - c$ انطلافاً من مركز الاحداثيات تمثل هذه النقطة أو العقدة بالثلاثية التالية : $(1, 1, \bar{1})$ وليس $(1, 1, -1)$.

1.4.1.4 متحولات الخلية العنصرية

يمثل الجدول التالي المتحولات المميزة لكل جملة بلورية :

الزوايا	الأطوال	الجملة البلورية
$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$	$a = b = c$	المكعبية
$\alpha = \beta = \pi/2,$ $\gamma = 2\pi/3$	$a = b \neq c$	السداسية
$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$	$a = b \neq c$	الرباعية الوجوه
$\alpha = \beta = \gamma \neq \pi/2$	$a = b = c$	المعينية
$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$	$a \neq b \neq c$	المتوازية المستطيلات
$\alpha = \gamma = \pi/2 \neq \beta$	$a \neq b \neq c$	أحادية الميل
$\alpha \neq \beta \neq \gamma$	$a \neq b \neq c$	ثلاثية الميل

جدول 2. الجمل البلورية

عند دراسة البنية البلورية لا تُستخدم عناصر تناظر الجملة فقط بل تُستخدم المتحولات الستة السابقة (ثلاثة أطوال وثلاث زوايا). وفي أغلب الأحيان تكون هذه المتحولات مرتبطة ببعضها البعض نتيجة لتناظر الجملة البلورية.

1.4.2 نماذج الشبكات أو شبكات برافيه Modes de réseau ou maille de Bravais :

نقول عن خلية عنصرية أنها أحادية **unitaire** إذا احتوت على مولّد واحد فقط وفي حال احتوائها على أكثر من مولّد تكون خلية مضاعفة **عمفهمث** وعندها يظهر في البلورة انسحاب جديد هو :

$$t' = m' a + n' b + p' c$$

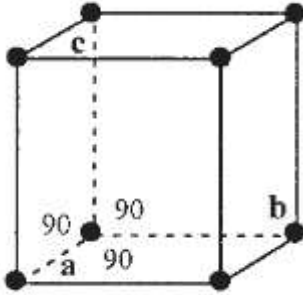
حيث m', n', p' تأخذ القيمة 0 أو 0,5.

يوجد لدينا أربع أنواع من نماذج الشبكات وذلك حسب نوع الخلية العنصرية (أحادية أو مضاعفة) وهي:

1.4.2.1 النموذج البسيط (P) simple ou Primitif :

نرمز له بالحرف اللاتيني (P)

يعبر الشكل المجاور عن هذا النموذج .

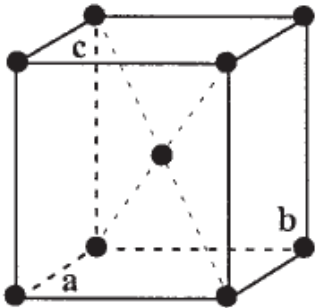


الشكل 8. النموذج البسيط

1.4.2.2 النموذج المتمركز (I) :

أو *Internal centered mode*

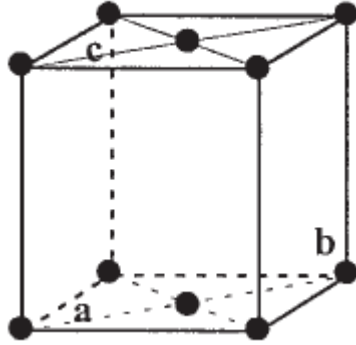
نرمزه بالحرف اللاتيني (I) يتميز هذا النموذج بوجود مولّد في مركز الخلية العنصرية بالإضافة لوجود مولّد آخر في المبدأ (0,0,0) ووجوده في الرؤوس الثمانية للخلية العنصرية والانسحاب الإضافي هنا هو $t' = 1/2 a + 1/2 b + 1/2 c$



الشكل 9. النموذج المتمركز

1.4.2.3 نموذج ذو القاعدة المتركزة (S) *Side-face centered mode* :

نرمز له بالحرف اللاتيني (S) يتميز هذا النموذج بوجود مولد إضافي في مركز أحد الوجوه بالإضافة إلى وجوده في الرؤوس الثمانية للخلية العنصرية، ويمكن الحصول على هذا النموذج انطلاقاً من النموذج (P) وذلك بإضافة أحد الانسحابات التالية :



$$t' = 1/2 a + 1/2 b \text{ أو}$$

$$t' = 1/2 b + 1/2 c$$

$$\text{أو } t' = 1/2 a + 1/2 c$$

الشكل 10 النموذج ذو القاعدة المتركزة.

ملاحظة : الوجه المقابل للوجه المتركز سيكون بالضرورة متركزاً كونه ينتج عنه بانسحاب قدره أحد الأشعة $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$.

1.4.2.4 النموذج متركز الوجوه (F) *Mode à faces centré* :

أو *Face centered*

mode نرمز له بالحرف

اللاتيني (F)، يتميز هذا

النموذج بوجود مولد في كل

وجه من أوجه الخلية العنصرية

بالإضافة للمولدات في الرؤوس

الثمانية.

ويمكن الحصول على هذا النموذج

انطلاقاً من النموذج (P) وذلك

بإضافة الانسحابات التالية :

$$t' = 1/2 a + 1/2 b$$

الشكل 11. النموذج متركز الوجوه

$$t' = 1/2 b + 1/2 c \quad \text{و}$$

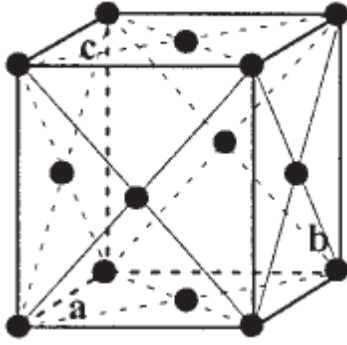
$$t' = 1/2 a + 1/2 c \quad \text{و}$$

1.4.3 عدد المولدات Z :

نرمز لعدد المولدات بالحرف Z ، إذا تفحصنا النماذج السابقة نجد أن بعض العناصر المولدة للمولدات تنتمي لخلية واحدة في حين أن بعضها الآخر مشترك بين n خلية. في هذه الحالة تحتسب هذه العناصر ك $1/n$ من المولد لكل خلية .

حساب عدد المولدات في الخلية العنصرية

لحساب عدد المولدات ضمن خلية عنصرية ما نتبع القواعد التالية:



- لا يحتسب أي عنصر يقع خارج الخلية
- بالنسبة لعنصر في رأس الخلية يكون مشترك بين 8 خلايا يحسب ك $1/8$ من المولد.

الشكل 12. المواقع المحتملة لمولد أو عنصر في خلية

- بالنسبة لعنصر يقع على ضلع مشترك بين 4 خلايا، يحسب ك $1/4$ من المولد.
 - بالنسبة لعنصر يقع على أحد السطوح ينتمي لخليتين متجاورتين يحسب ك $1/2$ من المولد.
 - بالنسبة لعنصر داخل الخلية يحسب كواحد من المولدات.
- لتسهيل الحساب نرسم المولد كنقطة مادية وهكذا يمكننا أن نعبر عن المولد بأحد عناصره كرسمة ذرة الكربون فقط في كربونات الكالسيوم لتعبر عن المولد بكامله بدلاً من رسم كل ذرات المولد . في هذه الحال يكون لدينا:
- من أجل الخلية البسيطة (P) $z = 8 \times \frac{1}{8} = 1$ وبالتالي فهي أحادية لوجود مولد واحد.

- من أجل الخلية المتمركزة (I) : $z = 8 \times \frac{1}{8} = 1$ و بالتالي فهي مزدوجة لوجود مولدين فيها.

- من أجل الخلية المتمركزة القاعدة (S) $z = 8 \times \frac{1}{8} + 2 \times \frac{1}{2} = 2$ و بالتالي فهي مزدوجة لوجود مولدين فيها.

- من أجل الخلية المتمركزة الوجوه (F) $z = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ و بالتالي فهي رباعية لوجود 4 مولدات فيها.

1.4.4 الكتلة الحجمية

يمكننا حساب الكتلة الحجمية ρ للمادة الصلبة وذلك بمعرفة متحولات الشبكة البلورية وعدد المولدات فيها، فإذا اعتبرنا V حجم الخلية العنصرية. تساوي كتلة الخلية العنصرية كتلة المولد M/N_a (M):
الكتلة المولية للمولد و N_a هو عدد أفوكادرو (مضروبة بعدد المولدات Z فنحصل على الكتلة الحجمية من العلاقة التالية:

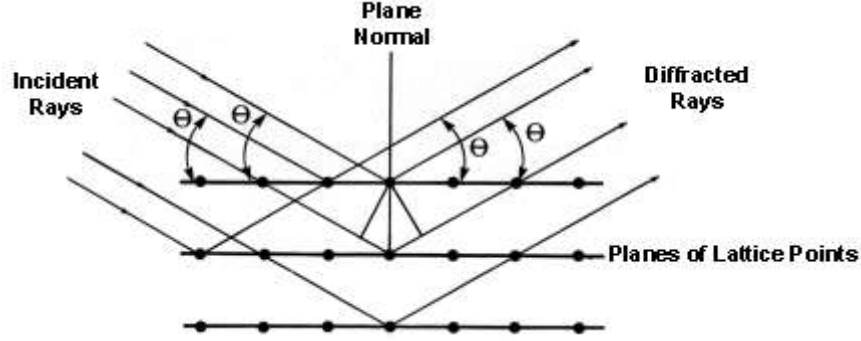
$$\rho = \frac{M \cdot z}{V \cdot N_a} \quad \text{الواحدة } \text{kg m}^{-3}$$

1.5 الدراسة التجريبية

تعتبر الأعمال التجريبية التي قام بها براغ (W.H et W.L Bragg) حول انعراج الأشعة السينية أساسية في دراسة الحالة الصلبة. بالرغم من أن تفاصيل هذا الموضوع تندرج تحت علم الفيزياء لا بد من أن نذكر بالنتائج النظرية لهذه الدراسة:
مبدأ الدراسة.

عندما تسقط حزمة ضوئية ذات طول موجة معين λ من الأشعة السينية وبزاوية θ على مجموعة من المستويات الذرية المتوازية والمتساوية البعد عن بعضها البعض (مستويات عقدية) من بلورة تخضع هذه الحزمة لانعراج في كل الاتجاهات. نحصل على إضاءة عظيمة عندما تكون الأشعة المنعرجة على توافق في الصفحة فيما بينها، وتعتمد شدة الإضاءة لحزمة منعرجة على زاوية ورود على المستوي العقدي.

يقيس مقياس الانعراج فقط شدة الإضاءة الناتجة عن الحزم الضوئية المنعرجة بزوايا تساوي زاوية ورود (المنعكسة)



الشكل 13. انعراج الأشعة السينية في البلورات

إن وجود شدة ضوئية عظيمة من أجل زاوية θ يعطي علاقة براغ التالية :

$$2 d \sin (\theta) = n \lambda$$

محققة، حيث n عدد صحيح يدل على رتبة الانعراج التي تكون غالباً مساوية للواحد .

البعد الشبكي d :

هي المسافة التي تفصل مستويين متتاليين من مجموعة المستويات العقدية المأخوذة بعين الاعتبار والتي أدت إلى انعراج الأشعة وهو متحول هام لمعرفة بنية البلورة لأنه يكتب بدلالة متحولات الخلية العنصرية فمثلاً يمكننا أن نكتب في الجملة البلورية المكعبة العلاقة التالية :

$$d = \frac{a}{\sqrt{(h^2 + k^2 + l^2)}}$$

حيث h, k, l هي عبارة عن أعداد صحيحة تتعلق بإحداثيات النقاط A, B, C ، وبما أن h, k, l تأخذ قيمة متعددة وذلك حسب نوع المستويات العقدية، فإن d تأخذ قيم متعددة أيضاً، فإذا اعتبرنا فقط المرتبة الأولى للانعراج (أي $n = 1$) فإن عدد القيم الممكنة التي تأخذها الزاوية θ كبير جداً وبالتالي يعتبر تفسير طيف انعراج الأشعة السينية أمراً ليس باليسير .

تمارين ومسائل

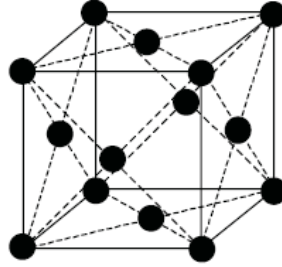
1. البنية البلورية لمعدن الألمنيوم

يتبلور الألمنيوم وفق الجملة المكعبة متمركزة الوجوه. والمطلوب:

1. ارسم الخلية العنصرية لمعدن لبلورة الألمنيوم.
 2. ما الأتساق الموافق لهذه البنية البلورية؟
 3. احسب نسبة التراص
 4. إذا علمت أن بعد الخلية العنصرية هو $a = 404pm$ احسب نصف قطر ذرة الألمنيوم r .
 5. احسب الكتلة الحجمية للألمنيوم
 6. ما هي القوى المسؤولة عن ترابط هذه البنية
- معطيات: $N_A = 6.023 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$, $M_{Al} = 27 \text{ g.mol}^{-1}$

الحل:

1. يوضح الشكل التالي الخلية العنصرية للألمنيوم



الخلية العنصرية المكعبة متمركزة الوجوه في الألمنيوم

2. عدد الإتساق هو 12 لأن كل ذرة ألمنيوم في البنية السابقة تحيط بها 12 ذرة مجاورة.
3. بمأن أن التراص هو نسبة حجم ذرات الخلية على حجم الخلية نفسها والذي نعبر عنه بالعلاقة التالية:

$$C = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3}$$

وبما أن التماس بين ذرات المعدن يكون وفق قطر وجه الخلية العنصرية المكعبة لذا يمكننا أن نكتب العبارة التالية:

$$4r = a\sqrt{2}$$

بالتعويض في العبارة السابقة نجد :

$$C = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{\left(\frac{4r}{\sqrt{2}}\right)^3} = \frac{\pi\sqrt{2}}{6} = 0.74$$

وبالتالي نستنتج أن نسبة الحيز الذي تشغله ذرات المعدن في هذه البنية هي 74% ونسبة الفراغ في هذه البنية هي 26%.

4. يمكننا حساب نصف قطر ذرة الألمنيوم بالتطبيق العددي المباشر للعلاقة التالية:

$$4r = a\sqrt{2}$$

ومنه نجد:

$$r = \frac{a\sqrt{2}}{4} = 142.83 \text{ pm}$$

5. نحسب الكتلة الحجمية للألمنيوم بحساب نسبة كتلة ذرات الخلية العنصرية إلى حجم هذه الخلية أي:

$$\rho_{Al} = \frac{4 \times m_{Al}}{a^3} = \frac{4 \times \frac{M_{Al}}{N_A}}{a^3} = \frac{4 \times \frac{27 \cdot 10^{-3}}{6.02 \cdot 10^{23}}}{(404 \cdot 10^{-12})^3} = 2720 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$$

وهي قيمة منخفضة إذا ما قورنت بالمعادن الأخرى المشابهة ويستفاد في تطبيقات الطيران والفضاء.

6. الرابطة المعدنية هي المسؤولة عن ترابط ذرات الألمنيوم فيما بينها.

2. البنية البلورية لليورانيوم

تعرف ظاهرة التآصل (allotropy) في علم البلورات بوجود العنصر في أكثر من شكل بلوري [1]، كما يشاهد في الكثير من الحالات مثل الكبريت والفسفور والقصدير والكربون وغيرها. سنهتم في هذه التمرين بدراسة ظاهرة التآصل عند اليورانيوم الذي يتمتع بثلاثة أشكال بلورية وفق درجة الحرارة. ينصهر اليورانيوم في الدرجة 1130 C ويبين الجدول التالي الشكل البلوري حسب درجة الحرارة:

1132-775	775 - 668	أقل من 668	درجة الحرارة
γ	β	α	الشكل البلوري

1. احسب كثافة اليورانيوم γ

2. أذكر أحد التطبيقات العملية المعتمدة على كثافة اليورانيوم.

معطيات $a = 350 \text{ pm}$, $N_A = 6.023 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$, $M_U = 238 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$

الحل:

3. حساب الكثافة : لحساب الكثافة نحسب الكتلة الحجمية لليورانيوم γ والذي يتبلور

وفق الجملة البلورية المكعبة متمركزة الوجوه وبالتالي يكون لدينا:

$$\rho_U = \frac{4 \times \frac{M_U}{N_A}}{a^3} = \frac{4 \times \frac{238 \cdot 10^{-3}}{6.02 \cdot 10^{23}}}{(350 \cdot 10^{-12})^3} = 36 \, 865 \, \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$$

وتكون الكثافة :

$$d_U = \frac{\rho_U}{\rho_{H_2O}} = \frac{36 \, 865}{1000} = 36.87$$

وهي قيمة عالية جداً مقارنةً مع المعادن الأخرى تجعل اليورانيوم المستنفذ خياراً جيداً لصنع رؤوس القذائف

3. البنية البلورية للحديد

يتبلور معدن الحديد وفق شكلين: الحديد α ذو بنية مكعبة متمركزة والحديد β ذو بنية مكعبة متمركزة الوجوه. والمطلوب:

1. ارسم شكلاً توضيحياً لبنى الحديد السابقة.

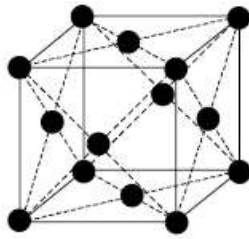
2. احسب التراص وقارن بين البنيتين

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

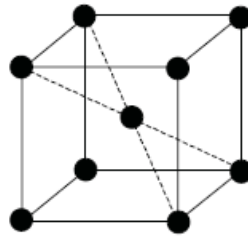
معطيات : $a_\alpha = 291 \text{pm}$, $a_\gamma = 365 \text{pm}$

الحل:

1. الشكل التوضيحي لبنى الحديد:



رسم توضيحي 39. البنية غاما للحديد



رسم توضيحي 40: البنية ألفا للحديد

2. حساب التراص:

التراص هو نسبة حجم ذرات الخلية على حجم الخلية نفسها والذي نعبر عنه بالعلاقة التالية:

$$C = \frac{\text{عدد الذرات} \times \frac{4}{3}\pi r^3}{a^3}$$

1. البنية ألفا : يكون التماس بين ذرات المعدن يكون وفق قطر الخلية العنصرية المكعبة

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

لذا يمكننا أن نكتب العبارة التالية: بالتعويض في العبارة السابقة نجد :

$$C = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{\left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^3} = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} = 0.68$$

2. البنية غاما يكون التماس بين ذرات المعدن يكون وفق قطر وجه الخلية العنصرية

$$4r = a\sqrt{2}$$

المكعبة لذا يمكننا أن نكتب العبارة التالية: بالتعويض في العبارة السابقة نجد :

$$C = \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{\left(\frac{4r}{\sqrt{2}}\right)^3} = \frac{\pi\sqrt{2}}{6} = 0.74$$

التراص أكبر في حالة البنية المكعبة متمركزة الوجوه منه في البنية المكعبة المتمركزة.

3. حساب نصف قطر ذرة الحديد:

a. البنية ألفا : لدينا العلاقة التالية والنتيجة من تطبيق شرط التماس بين الذرات

وفق قطر وجه الخلية المكعبة:

$$4r_\alpha = a_\alpha\sqrt{2}$$

بالتطبيق العديد نجد :

$$r_\alpha = \frac{a_\alpha\sqrt{2}}{4} = 129pm$$

b. البنية غاما: لدينا العلاقة التالية والنتيجة من تطبيق شرط التماس بين

الذرات وفق قطر الخلية المكعبة:

$$4r_\gamma = a_\gamma\sqrt{3}$$

بالتطبيق العديد نجد :

$$r_\gamma = \frac{a_\gamma\sqrt{3}}{4} = 126pm$$

ومنه نستنتج أن نصف قطر ذرة الحديد يختلف حسب البنية البلورية التي يتبلور وفقها المعدن.

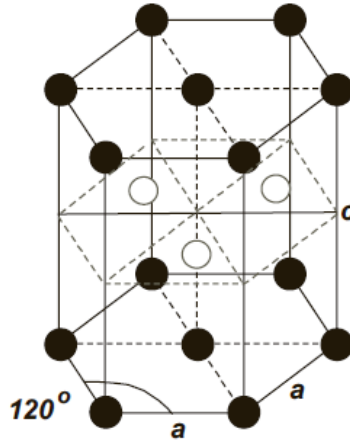
4. البنية البلورية للمغنزيوم

يتبلور المغنزيوم وفق البنية السداسية المتراس والتي سنفترض بأنها مثالية ($a = 320pm$) المطلوب:

1. ارسم شكلاً توضيحياً للخلية العنصرية لهذه البنية.
2. احسب تراس هذه البنية
3. احسب الكتلة الحجمية لهذه البنية.
4. قامت شركة فولسفاكن لصناعة السيارات باستبدال 30kg من الحديد بمعدن المغنزيوم. مكنت هذه العملية من تحميل راكب إضافي في السيارة. بيّن ذلك.

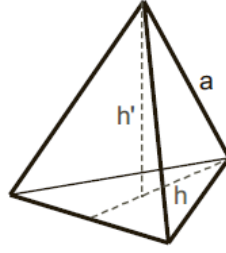
الحل:

1. الشكل التوضيحي للبنية البلورية للمغنيز:



رسم توضيحي 41. البنية السداسية للمغنزيوم

2. حساب التراس لحساب التراس نحتاج لحساب حجم الخلية العنصرية
لحساب ارتفاع الخلية العنصرية أو البعد الثاني لها ($c = 2h'$) حيث h' هو المسافة بين
مستوي القاعدة والمستوي المنصف:

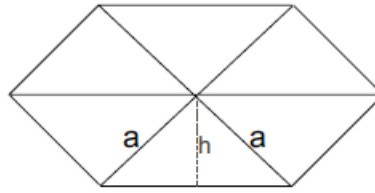


الشكل 42: رباعي الوجوه المنتظم

لحساب ارتفاع رباعي الوجوه h' نكتب حسب فيثاغورث :

$$(أ) \quad a^2 = \left(\frac{2}{3}h\right)^2 + (h')^2$$

ولحساب h نستنتج العلاقة التري تربطه بالبعد a من خلال مثلث القاعدة كما هو موضح في الشكل:



الشكل 43. القاعدة السداسية للخلية العنصرية

من المثلث المنتظم يمكننا أن نكتب :

$$a^2 = \left(\frac{a}{2}\right)^2 + (h)^2$$

ومنه نجد عبارة ارتفاع مثلث القاعدة h :

$$h = \frac{a\sqrt{3}}{2}$$

ومنه يمكن حساب ارتفاع رباعي الوجوه h' بالتعويض في العبارة (أ) فنجد :

$$a^2 = \left(\frac{2}{3} \frac{a\sqrt{3}}{2}\right)^2 + (h')^2$$

$$h' = \sqrt{\frac{2}{3}} a$$

ومنه نجد :

حجم الخلية

$$V = 6 \times h' \times \frac{ah}{2}$$

$$V = 6 \times \sqrt{\frac{2}{3}} a \times \frac{a \left(\frac{a\sqrt{3}}{2}\right)}{2}$$

$$V = 3\sqrt{2}a^3$$

بالعودة لتعريف التراص يمكن أن نكتب:

$$C = \frac{6 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{3\sqrt{2}a^3}$$

وبما أن التماس بين الذرات يكون وفق طول ضلع القاعدة السداسية أي $2r = a$:
نكتب:

$$C = \frac{6 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{3\sqrt{2}(2r)^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0.74$$

وهي القيمة نفسها التي وجدناه من أجل البنية المكعبة متمركزة الوجوه.

3. حساب الكتلة الحجمية: بما أن عدد الذرات في الخلية السداسية هو 6 وهي كالتالي:

3 في المستوي المنصف +12 في رؤوس الخلية السداسية وينتمي كل منها لستة خلايا لذا يكون عددها مضروباً بـ $\frac{1}{6} + 2$ في منتصف القاعدتين تنتمي كل منها لخليتين متجاورتين لذا لذا يكون عددها مضروباً بـ $\frac{1}{2}$
وبالتالي يكون العدد الكلي $= 12 \times \frac{1}{6} + 3 + 2 \times \frac{1}{2} = 6$
فتكون الكتلة الحجمية للمغنزيوم هي:

$$\rho_{Mg} = \frac{6 \times \frac{M_{Mg}}{N_A}}{3\sqrt{2}a^3} = \frac{6 \times \frac{24.3 \cdot 10^{-3}}{6.02 \cdot 10^{23}}}{3\sqrt{2}(320 \cdot 10^{-12})^3} = 1742.1 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$$

نلاحظ أنه قيمة منخفضة إذا ما قورنت ببقية المعدن الصناعية مثل الحديد.

4. استبدال الحديد بالمغنزيوم

حساب حجم 30kg من المغنزيوم :

$$\rho_{Mg} = \frac{m}{v} \Rightarrow v = \frac{m}{\rho_{Mg}} = \frac{30}{1742.1} = 1.72 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3$$

نحسب الكتلة المكافئة للحجم نفسه من الحديد فنجد أن:

$$m = \rho_{Fe} v = 7860 \times 1.72 \cdot 10^{-2} = 136.1 \text{ kg}$$

نلاحظ أنها الفرق في الكتلة قريب من كتلة راكب إضافي.

5. البنية البلورية للكوبالت

يفرض أن الكوبالت يتبلور وفق الجملة السداسية المتراسة المثالية فإذا علمت أن أبعاد الخلية هي:

$$a = 252pm, c = 452pm$$

المطلوب:

1. تحقق من الفرضية السابقة.

2. أحسب نصف قطر ذرة الكوبالت في البنية السابقة.

الحل

1. في البنية السداسية المتراسة تكون النسبة $\frac{c}{a}$ مساوية لـ 1.633 بنسبة الأبعاد السابقة نجد

1.635 وهي قيمة مساوية للنسبة السابقة بفرق أقل من 0.12%

2. نعم أن التماس في هذه البنية السداسية المتراسة يمون وفق طلع القاعدة السداسية أي :

$$a = 2r$$

$$r = 126pm$$

6. البنية البلورية لخليطة النحاس والفضة Cu-Ag.

يتبلور النحاس وفق الجملة البلورية المكعبة متمركزة الوجوه.

1. ارسم شكلاً توضيحياً لهذه البنية

2. احسب نصف قطر ذرة النحاس في هذه البنية

بنية الخليطة المعدنية نحاس- فضة هي أيضاً مكعبة متمركزة الوجوه ويمكن اشتقاقها من بنية النحاس

السابقة باستبدال ذرات النحاس الثمانية المتواجدة في رؤوس الخلية المكعبة بذرات فضة.

3. ما اسم هذا النوع من الخلائط؟

4. احسب بعد الخلية العنصرية المكعبة a' للخليطة المعدنية نحاس- فضة علماً أن نصف

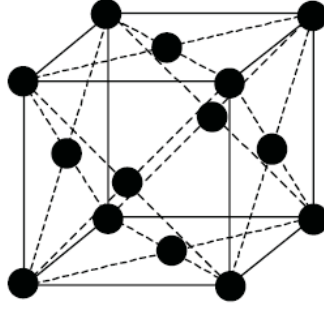
قطر ذرة الفضة هو $144pm$

5. احسب الكتلة الحجمية للخليطة والنسبة الكتلية للفضة فيها

$$M_{Cu} = 36.5 g.mol^{-1}, M_{Ag} = 108 g.mol^{-1}, \rho_{Cu} = 8920 kg.m^{-3}$$

الحل

1. الرسم التوضيحي للبنية البلورية المقترحة للنحاس



رسم توضيحي 44. بنية النحاس البلورية

2. حساب نصف قطر ذرة النحاس في هذه البنية: انطلاقاً من عبارة الكتلة الحجمية علماً أن عدد ذرات النحاس في الخلية هو 4 نجد:

$$\rho_{Cu} = \frac{4 \times \frac{M_{Cu}}{N_A}}{a^3} \Rightarrow a = \sqrt[3]{\frac{4 \times \frac{M_{Cu}}{N_A}}{\rho_{Cu}}}$$

نستنتج: بالتطبيق العددي قيمة a :

$$a = 361.7pm$$

وبما أن التماس بين ذرات النحاس يكون وفق قطر وجه الخلية المكعبة أي: $a\sqrt{2} = 4r_{Cu}$

$$r_{Cu} = \frac{a\sqrt{2}}{4} \quad \text{أي :}$$

$$r_{Cu} = 127.9pm \quad \text{بالتطبيق العددي نجد :}$$

3. يسمى هذا النوع من الخلطات بخلائط الإستبدال Substitution حيث تحل فيها ذرات معدن محل ذرات معدن آخر.

4. حساب بعد الخلية العنصرية المكعبة a' للخليطة :

شرط التماس بين الذرات وفق وجه الخلية المكعبة يبقى متحققاً ونكتب هذا الشرط وفق العبارة التالية:

$$a'\sqrt{2} = 2r_{Cu} + 2r_{Ag}$$

ومنه نجد أن :

$$a' = \frac{2r_{Cu} + 2r_{Ag}}{\sqrt{2}}$$

بالتطبيق العددي نجد : $a' = 384.5pm$ وهي قيمة أكبر من قيمة البعد السابق a في النحاس مما يدل أن الخلية العنصرية أصبحت أكبر حجماً.

5. حساب الكتلة الحجمية للخليطة:

$$\rho = \frac{\frac{M_{Ag}}{N_A} + 3 \times \frac{M_{Cu}}{N_A}}{a'^3}$$

بالتطبيق العددي نجد $\rho = 8722 \text{ kg.m}^{-3}$

النسبة الكتلية للفضة في الخليطة تعطى بالعلاقة التالية:

$$w_{Ag} = \frac{\frac{M_{Ag}}{N_A}}{\frac{M_{Ag}}{N_A} + 3 \times \frac{M_{Cu}}{N_A}}$$

بالتطبيق العددي نجد: $w_{Ag} = 36.12\%$

7. البنية البلورية لخليطة الذهب والنيكل Au-Ni

يتبلور معدن الذهب وفق البنية البلورية المكعبة المتمركزة الوجوه ويبلغ نصف قطر ذرة الذهب $r_{Au} = 144.2 \text{ pm}$ ويمكن للذهب أن يشكّل نوعين من الخلائط بالإستبدال Substitution أو الإدراج Insertion.

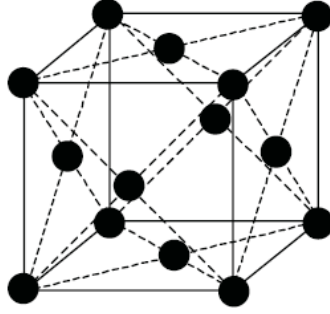
1. عرّف ما هي خلائط الإستبدال وخلائط الإدراج.
2. ارسم شكلاً توضيحياً للخلية العنصرية لمعدن الذهب.
3. احسب بعد الخلية العنصرية لمعدن الذهب.
4. تحوي البنية البلورية لمعدن الذهب نوعين من المواقع البلورية. ما هما؟ أرسم شكلاً يوضح كل من هذين النوعين في الخلية العنصرية.
5. استنتج نصف القطر الأعظمي R_0 للذرة الغريبة التي يمكن لها أن تحتل موقع ثماني وجوه ونصف القطر الأعظمي R_T للذرة الغريبة التي يمكن لها أن تحتل موقع رباعي وجوه .
6. الذهب الأبيض هو عبارة عن خليطة من النيكل ($r_{Ni} = 124.6 \text{ pm}$) والذهب . بيّن أنه لا يمكن للنيكل أن يشكّل خلائط إدراج (Insertion) مع الذهب.
7. إذا علمت أن النيكل يستبدل ذرة ذهب واحدة في رأس الخلية العنصرية، احسب بعد الخلية العنصرية للخليطة a'

معطيات : $\rho_{Cu} = 1763 \text{ kg.m}^{-3}$, $M_{Ni} = 58.7 \text{ g.mol}^{-1}$, $M_{Au} = 197 \text{ g.mol}^{-1}$

الحل

1. تحتل ذرات المعدن الضيف في خلائط الإستبدال محل ذرات المعدن المضيفة وتحل محلها في حين تحتل ذرات المعدن الضيف في مواقع بلورية متاحة في الخلية العنصرية في خلائط الإدراج.

2. الرسم التوضيحي للخلية العنصرية الكعبة متمركزة الوجوه

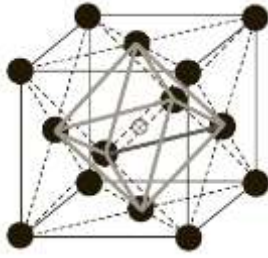


3. وبما أن التماس بين ذرات الذهب يكون وفق قطر وجه الخلية المكعبة أي : $a\sqrt{2} = 4r_{Au}$

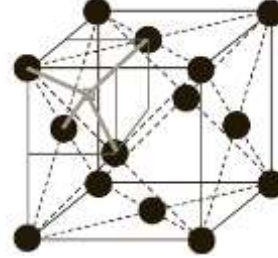
$$\frac{4r_{Au}}{\sqrt{2}} = a \quad \text{أي :}$$

$$a = 407.9pm \quad \text{بالتطبيق العددي نجد :}$$

4. المواقع البلورية المحتواة في الخلية المكعبة متمركزة الوجوه هي نوعين: رباعية الوجوه وعددها 8 وثمانية الوجوه وعددها 4. ويوضح الشكلان التاليان تموضع هذه المواقع



رسم توضيحي 46: موقع بللوري ثماني وجوه



رسم توضيحي 45: موقع بللوري رباعي الوجوه

نصف القطر الأعظمي R_T في الموقع الرباعي: عند احتلال ذرة ما نصف قطرها R_T مركز موقع رباعي تشكله ذرات الذهب يكون لدينا:

$$\frac{a\sqrt{3}}{2} = 2r_{Au} + 2R_T$$

وبما أن التماس بين ذرات الذهب يكون وفق قطر وجه الخلية المكعبة أي: $a\sqrt{2} = 4r_{Au}$ نعوض في العلاقة السابقة فنجد:

$$R_T = r_{Au} \left(\sqrt{\frac{3}{2}} - 1 \right) = 0.225 r_{Au}$$

بالتطبيق العددي نجد أن $R_T = 32.4 \text{ pm}$

نصف القطر الأعظمي R_O في الموقع الثماني: عند احتلال ذرة ما نصف قطرها R_O مركز موقع ثماني تشكله ذرات الذهب يكون لدينا:

$$a = 2r_{Au} + 2R_T$$

وبما أن التماس بين ذرات الذهب يكون وفق قطر وجه الخلية المكعبة أي: $a\sqrt{2} = 4r_{Au}$ نعوض في العلاقة السابقة فنجد:

$$R_O = r_{Au}(\sqrt{2} - 1) = 0.414 r_{Au}$$

بالتطبيق العددي نجد أن $R_O = 59.7 \text{ pm}$ بالمقارنة نجد أن الموقع الثماني أوسع من الموقع الرباعي

5. بمقارنة نصف قطر النيكل $r_{Ni} = 124.6 \text{ pm}$ مع أنصاف أقطار الذرات المتاحة استضافتها في المواقع الرباعية أو الثمانية نستنتج أن النيكل لا يمكن أن يشغل أي نوع من المواقع المتاحة نظراً لكبر ذرات النيكل وبالتالي لا يمكن أن يشكّل خلائط إدراج مع الذهب.

6. حساب بعد الخلية العنصرية للخليطة a' : نحسب عدد ذرات الذهب والنيكل في الخلية العنصرية.

النيكل يشغل رأس واحد في الخلية ($n_{Ni} = 1/8$) والذهب يشغل باقي الرؤوس ($7/8$) فيكون لدينا بالإضافة لمراكز الوجوه (3) وبالتالي نكتب عبارة الكتلة الحجمية على الشكل التالي:

$$\rho = \frac{3.875 \times \frac{M_{Au}}{N_A} + 0.125 \times \frac{M_{Ni}}{N_A}}{a'^3}$$

ومنه نجد عبارة بعد الخلية العنصرية للخليطة

$$a' = \sqrt[3]{\frac{3.875 \times \frac{M_{Au}}{N_A} + 0.125 \times \frac{M_{Ni}}{N_A}}{\rho}}$$

بالتطبيق العددي نجد: $a' = 417.2 \text{ pm}$