

الأكاديمية العربية الدولية



الأكاديمية العربية الدولية
Arab International Academy

الأكاديمية العربية الدولية المقررات الجامعية

فيزياء الحالة الصلبة

تأليف

الأستاذ الدكتور

يسرى مصطفى

جامعة السابع من ابريل

مقدمة

أن التحدي الحقيقي الذي تواجهه الشعوب العربية هو الاهتمام باللغة العربية والهروب من بئر الإذلال الثقافي الذي نعيشه اليوم وذلك بتعريب مختلف العلوم حتى تتحقق الاستفادة المرجوة والتحول من دور المتلقي إلى دور المنتج وبالتالي نفتح الباب أمام المبدعين. ولا يغيب عن الكثيرين منا أن حركة التعريب تسير متباطئة جدا وربما تحارب أحيانا من قبل الغرب وخاصة في مجال العلوم الأساسية حتى وصل الأمر إلى خلو المكتبة العربية من المراجع العربية في معظم تخصصات الفيزياء اللهم إلا من عدد قليل جدا من محاولات بعض العلماء المخلصين الذين نالوا شرف المسؤولية والسير على الدرب الصحيح.

يرجع الفضل في النهضة العلمية التي نعيشها الآن إلى التقدم الذي أحرزه العلماء في مجال فيزياء الحالة الصلبة وما ترتب على ذلك من ظهور علم المواد الذي استفاد من مختلف المواد في تصميم العديد من المواد التي لها تطبيقات تكنولوجية أدت إلى قفزة عملاقة في مختلف مناحي الحياة. فقد نال علم فيزياء الحالة الصلبة اهتماما كبير لتتنوع تطبيقاته وتعدد مجالاته.

أساس هذا الكتاب هو محاضرات لمقررات فيزياء الحالة الصلبة أعطيت من قبل المؤلف لطلاب السنوات الأخيرة فيزياء بكلية العلوم بجامعة السابع من ابريل - الزاوية بالجماهيرية الليبية وقد وضع هذا الكتاب بشكل ملائم للطلبة الجامعيين ولا يدعى الأصالة في المحتوى أو في شكل العرض ولكن تم اختيار مادته لكي تؤكد الطرق الأساسية لدراسة الخصائص الفيزيائية للجسم الصلب واعتماد هذه الخصائص على التركيب البنائي للمادة، حيث تم عرض محتوياته بشكل تربوي شيق ليسهل تناول مادته العلمية وليكون مرجعا مفيدا لطلاب الفيزياء والكيمياء بكليات العلوم وأيضا للطلاب المهتمين بدراسة علوم المواد في كليات الهندسة أو المعاهد الفنية العليا.

ويتميز هذا الكتاب باستهلال كل باب بالأهداف التي يجب أن يحققها الطالب بعد استكمال دراسة الباب، كما يتميز بغزارة مادته، وتكامل معلوماته، وشمول عرضه، وعمق تناوله ووفرة رسومه التوضيحية وكثرة الأمثلة المحلولة. كما تم تذييل كل باب بملخص مبسط بالإضافة إلى المسائل والتمارين في نهاية الباب.

يتكون هذا المرجع من جزئين ويحتوي على ستة عشر بابا تغطي معظم مجالات فيزياء الحالة الصلبة. يتكون الجزء الأول من ثمانية أبواب يشمل الباب الأول مراجعة مختصرة لبعض المفاهيم التي يحتاجها الدارس مثل الارتباط الذري ونظرية الأنظمة كما يعالج قوى الربط بين الذرات وأنواع الروابط و حركية التنوى و الطرق العملية لإنماء البلورات. ويعالج البابان الثاني والثالث خصائص التركيب البلوري للحالة الصلبة والأنظمة والاتجاهات البلورية وأمثلة لتركييب بعض المواد المهمة. يعالج الباب الرابع أنواع العيوب التركيبية في المواد المتبلورة. ويشمل الباب الخامس دراسة حيود الأشعة السينية، النيوترون والإلكترونات في البلورات ومختلف الطرق العملية لدراسة التشتت. كما يعالج الباب السادس اهتزازات

الشبيكة بواسطة الموجات المرنة وحساب أنماط الاهتزاز وكثافة الحالات في الشبيكة ثم دراسة امتصاص الأشعة تحت الحمراء بواسطة البلورة. يهتم الباب السابع بالخصائص الحرارية للشبيكة مثل الحرارة النوعية والسعة الحرارية والتوصيل والتمدد الحرارى. وأخيرا يعالج الباب الثامن النظرية التقليدية لغاز الإلكترون الحر في الفلزات ودراسة الخصائص الكهربائية للمعادن. سيجد الدارس في نهاية الكتاب سردا للمصطلحات العلمية والتي تتجاوز الأربعمئة، مرتبة طبقا للأبجدية العربية والإنجليزية، هذا بالإضافة إلى بعض الملاحق المفيدة والتي تخدم الدارس.

ولاشك في أن هذا الكتاب يسد حاجة لا تخفى في المكتبة العربية، وأرجو من الله أن يوفقني في استكمال الجزء الثاني، وأمل أن أكون قد قدمت لأبنائي الطلاب يد العون من خلال هذا الجهد المتواضع وإن أكون قد أضفت لبنة في صرح تعريب العلوم وأقدم عظيم شكري وامتناني لكل من ساهم في إخراج هذا الكتاب سواء بمراجعة اللغة أو بالتدقيق والله الموفق.

المؤلف

الباب الأول

النظرية الذرية وقوى الربط

Atomic Theory and Bonding



الباب الأول

النظرية الذرية وقوى الربط

Atomic Theory and Bonding

المحتوى

- 1-1 مقدمة.
- 2-1 مراجعة للتركيب الذري.
- 3-1 الارتباط الذري ونظرية الأنطقة.
- 4-1 قوى الربط بين الذرات.
- 5-1 أنواع الروابط.
- 6-1 حركية التنوى والإنماء البلوري.
- 7-1 الطرق المعملية للنمو البلورات.

الأهداف

بعد استكمال دراسة هذا الباب يجب أن يكون الدارس قادرا على:

- تذكر وفهم معنى بعض مصطلحات التركيب الذري.
- وصف الذرة ومعرفة كيفية مشاركة الإلكترونات في البناء الذري.
- حساب عدد الذرات في وحدة الحجم بدلالة كثافة المادة.
- المقارنة بين مستويات الطاقة في الذرة الحرة وفي الجسم الصلب.
- معرفة أنواع قوى الربط المختلفة الموجودة بين الذرات.
- مناقشة الأنواع المختلفة من الروابط في الجسم الصلب.
- معرفة الخصائص المختلفة للمركبات الأيونية و التساهمية والمعدنية.
- معرفة العوامل التي تؤثر في حركية التنوى المتجانس ومتعدد التجانس والإنماء البلوري.
- استنتاج معدل التنوى كدالة في تبريد السائل.
- شرح الطرق المعملية المختلفة لإنماء البلورات.

1-1 مقدمة

توجد المادة في اربعة حالات هي: الحالة الغازية، والحالة السائلة والحالة الصلبة وحالة البلازما. يختلف التركيب البنائي للمادة من حالة إلى أخرى حسب قوى الربط المسيطرة على المادة، ففي الغازات تكون قوى الربط بين الجزيئات صغيرة جداً أو منعدمة تقريباً، الأمر الذي معه، تكون جزيئات الغاز متباعدة وفي حركة دائمة في الفراغ الذي يحتويها. وفي الحالة السائلة تكون قوى الربط بين الجزيئات أكبر منها في الحالة الغازية لدرجة أنها تجعل الجزيئات متلامسة وتكون حركة الجزيئات في شكل سريان للجزيئات أو تدفق للسائل، وبالتالي تظهر السوائل معامل لزوجة أكبر منه في الحالة الغازية. بينما في الحالة الصلبة تكون قوى الربط كبيرة جداً، الأمر الذي معه، تأخذ المادة شكلاً جامداً ومحدداً ويكون لها معامل لزوجة متناهي في الكبر ويكون لها تركيب بنائي ثابت. حالة البلازما هي وجود المادة على هيئة انوية الذرات و تمثل هذه الحالة 99 % من مكونات الكون المنظور. طبعاً، يمكن تحويل المادة من شكل إلى آخر وذلك بتغير الظروف المحيطة مثل الضغط ودرجة الحرارة. فعند تسخين الصلب يتحول الى سائل والذي يتحول بدوره الى غاز بارتفاع درجة الحرارة، وعند رفع درجة حرارة الغاز فإنه يتحول الى بلازما. وتختلف الخصائص الفيزيائية للمادة طبقاً لحالتها نظراً لاختلاف التركيب البنائي لحالات المادة المختلفة.

يمكن تقسيم المواد الصلبة على قسمين رئيسيين وهما: المواد الصلبة المتبلورة (crystalline) والمواد الصلبة غير المتبلورة (noncrystalline or amorphous). يعتمد هذا التقسيم على التركيب البنائي للمادة الصلبة والذي يعنى شكل أو هيئة الترتيب الهندسي للذرات أو الجزيئات في الحالة الصلبة. في المواد المتبلورة، تكون الذرات أو الجزيئات مرتبة بشكل منتظم ومتكرر ودوري مكونة ما يسمى بالبلورة. يختلف الشكل الهندسي للبلورة من مادة إلى أخرى. على النقيض، لا يكون التركيب البنائي للمواد غير المتبلورة منتظماً تماماً كما في الحالة السائلة، حيث توزع الذرات أو الجزيئات في الفراغ بشكل عشوائي. يطلق على هذه المواد، أحياناً، بالصلب السائل تشبيهاً بتركيب السائل كما تسمى، أحياناً، مواد زجاجية (glassy materials) تشبيهاً بالتركيب البنائي العشوائي لمادة الزجاج.

تأتى أهمية الحالة الصلبة بسبب كثرة استخداماتها في مختلف التطبيقات التكنولوجية. وتهتم فيزياء الحالة الصلبة، أساساً، بدراسة التركيب البنائي والخصائص الفيزيائية للأنظمة الدورية (أو المواد التي هي أقرب إلى الدورية) والتي يكون تركيز الذرات فيها في الحدود 10^{22} ~ ذرة/سم³ عند الاتزان الديناميكي الحراري. وحيث أن الذرات هي وحدات بناء المادة، وقبل الخوض في فيزياء الحالة الصلبة، فإنه من المفيد أن نقدم مراجعة مختصرة على التركيب البنائي للذرة وبعض الخصائص الذرية للعناصر والتي تؤثر بشكل فعال في الروابط المختلفة التي تؤدي إلى تكون الحالة الصلبة للمادة.

تتكون المواد الصلبة من الذرات أو أيونات أو جزيئات مترابطة بعضها مع بعض وهذا الترابط يعطى للمواد الصلبة الصفات الخاصة بها. يوجد العديد من الروابط التي تسبب تكون المواد الصلبة مثل: الروابط التساهمية والروابط الأيونية وروابط فاندرفال والروابط المعدنية. وتكون البلورات المتكونة هي اما بلورات ايونية او جزيئية او معدنية حسب نوع الترابط الموجود بين جزيئات البلورة. سنتعرف فى هذا الباب على كيفية تكون الروابط المختلفة وخصائص المواد الصلبة المتكونة نتيجة لهذه الروابط.

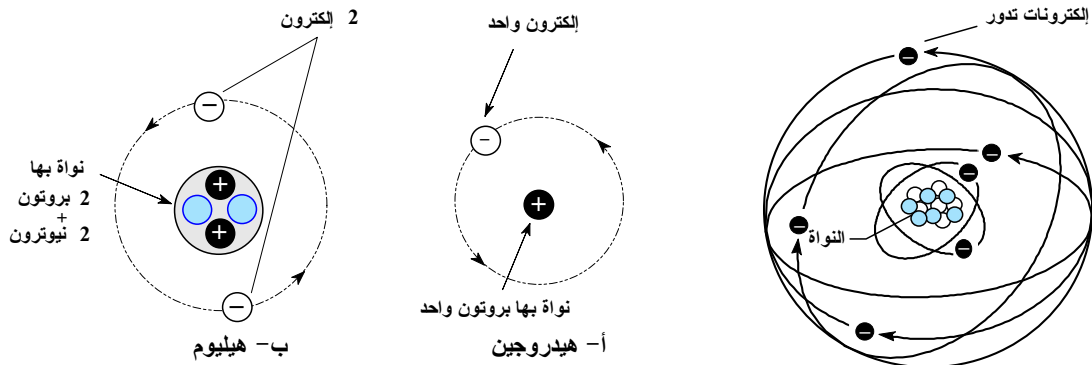
1-2 مراجعة للتركيب الذرى Review of atomic structure

مع بداية القرن التاسع عشر، أصبحت فكرة أن المادة تتكون من ذرات متعادلة كهربيا فكرة مقبولة. بعد ذلك، توالى الأبحاث في هذا المجال بسرعة كبيرة مروراً بالنماذج الذرية لطومسون (Thomson) و رانفورد (Rutherford) و جيجر- مارسدين (Geiger & Marsden) وأخيراً نموذج بوهر (Bohr) حتى أصبح النموذج الذرى في أوضح صورته. سوف لا نتعرض هنا إلى كل هذه النماذج الذرية ولكن سنلخص بعض الصفات الذرية التي يحتاجها دارس فيزياء الحالة الصلبة.

1-2-1 الذرة Atom

تعتبر الذرة أصغر جسيم يكون عنصراً ما ويحتفظ بخصائصه. ولكل عنصر معروف ذراته التي تختلف عن ذرات باقي العناصر، وهذا يجعل لكل عنصر بناء ذرى وحيدا وفريداً لا يتمتع به عنصراً آخر غيره. طبقاً لنموذج بوهر التقليدي فإن للذرة بناء

يتكون من نواة مركزية تتحرك حولها إلكترونات في مدارات، كما هو موضح بالشكل 1-1-
 1. تتكون النواة من جسيمات موجبة الشحنة تسمى بروتونات وأخرى غير مشحونة تسمى نيوترونات. تكون كتلة البروتون مساوية تقريباً لكتلة النيوترون ($1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$) وتكون أكبر بكثير من كتلة الإلكترون ($9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$). وتعتبر الإلكترونات هي الجسيمات الأولية ذات الشحنة السالبة التي تدور حول النواة ليكتمل البناء الذري. تتساوى شحنة الإلكترون مع شحنة البروتون في المقدار ($1.6 \times 10^{-19} \text{ Coulombs}$) وتختلف عنها في الإشارة. تحتوى كل ذرة على عدد محدد من الإلكترونات والبروتونات يميزها عن ذرات باقي العناصر.



الشكل 1-2 ذرتي الهيدروجين والهيليوم.

الشكل 1-1 نموذج "بوه" للتركيب الذري.

ATOMIC NUMBER AND ATOMIC WEIGHT

2-2-1 العدد والوزن الذري

تم ترتيب العناصر لأول مرة بواسطة العالم مندليف في جدول دوري طبقاً للعدد الذري وذلك تحقيقاً لما سمي بالقانون العظيم. يعرف العدد الذري (Z) بأنه عدد البروتونات أو عدد الإلكترونات في الذرة المتعادلة كهربياً. كما يعرف الوزن الذري (A) بأنه مجموع عدد البروتونات والنيوترونات في الذرة. فمثلاً، يوضح الشكل 1-2 أن ذرة

الهيدروجين تحتوى على بروتون واحد وإلكترون واحد لذلك يقال أن العدد الذرى للهيدروجين (${}^1\text{H}$) هو الواحد ووزنه الذرى يساوى واحد، أما في حالة الهليوم، تحتوى الذرة على زوج من البروتونات وزوج من النيوترونات وعدد اثنين من الإلكترونات ولذلك يقال أن العدد الذرى للهليوم (${}^4\text{He}$) هو اثنين ووزنه الذرى أربعة.

ويكون لكل ذرات عنصر معين في حالتها الطبيعية نفس عدد الإلكترونات وهذا العدد يكون مساويا لعدد البروتونات فيها، لذلك تكون الشحنة الظاهرية للذرة الطبيعية مساوية للصفر (أي أن الذرة متعادلة كهربيا).

1-2-3 وحدة الكتلة الذرية (AMU) THE ATOMIC MASS UNIT

تستخدم وحدة الكتلة الذرية (و ك ذ) للتعبير عن الوزن الذرى للعنصر. تعرف وحدة الكتلة الذرية بأنها تساوى $\frac{1}{12}$ من الوزن الذرى لأكثر نظائر الكربون شيوعا (وهو الكربون 12) والذي تحتوى نواته على 6 بروتونات و 6 نيوترونات. وحيث أن وزن البروتون يساوى تقريبا وزن النيوترون يساوى $1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$ أو $1.67 \times 10^{-24} \text{ g}$ ، فإن الوزن الذرى للكربون (${}^{12}\text{C}$) يكون 12 و ك ذ. ونظراً لوجود نظائر مختلفة للكربون تتوفر في الطبيعة بنسب مئوية مختلفة فإنه يمكن حساب الوزن الذرى للعنصر على أساس أن متوسط الوزن الذرى للكربون هو 12.011 و ك ذ.

THE MOLE 4-2-1 المول

عادة، يوصف الوزن الذرى للعنصر بوحدات كتله لكل مول. يعرف المول بأنه كمية من المادة لها كتلة بالجرامات تساوى الوزن الذرى للمادة (بمعنى، أن مول واحد من الكربون يحتوى على 12 جرام من الكربون وأن واحد مول من الأكسجين يحتوى على 16 جرام من الأكسجين... وهكذا). يحتوى المول الواحد من أي مادة على عدد ثابت من الذرات يسمى عدد افوجادرو (Avogadro number) وهو يساوى $N_{av} = 6.023 \times 10^{23}$. يمكن تعريف عدد افوجادرو بأنه عدد وحدة الكتل الذرية التي توجد في واحد جرام من المادة أو بالعلاقة الآتية.

$$N_{av} = \frac{1 \text{ gram}}{1 \text{ amu}}$$

وبناء على ما سبق فإن الوزن الذرى للحديد يساوى 55.85 و ك ذ لكل ذرة وهذا يساوى 55.85 جراماً لكل مول.

5-2-1 بعض الحسابات البسيطة

يمكن حساب عدد ذرات العنصر لكل سم³، n، بمعرفة كثافة العنصر، d (جم/سم³)، والوزن الذرى له، M (جم/مول)، طبقاً للعلاقة،

$$n = N_{av} \frac{d}{M} \quad 1-1$$

فعلى سبيل المثال، كثافة الجرافيت (الكربون) هي 2.3 جم/سم³ ووزنه الذرى 12 جم/مول، نجد أن عدد ذرات الكربون في وحدة الحجم من الجرافيت هو

$$n = 6.023 \times 10^{23} \text{ atom/mol} \frac{2.3 \text{ g/cm}^3}{12 \text{ g/mol}} = 11.544 \times 10^{22} \text{ atom/cm}^3 ,$$

وكذلك، بمعلومية كثافة الماس (الكربون) 3.5 جم/سم³ ووزنه الذري 12 جم/مول، نجد أن عدد ذرات الكربون في وحدة الحجم من الماس هو

$$n = 6.023 \times 10^{23} \text{ atom/mol} \frac{3.5 \text{ g/cm}^3}{12 \text{ g/mol}} = 17.567 \times 10^{22} \text{ atom/cm}^3 ,$$

وبالمثل، تكون كثافة الماء (H₂O) هي 1 جم/سم³ ووزنها الذري هو 18 جم/مول، نجد أن عدد جزيئات الماء في وحدة الحجم من الماء هو

$$n = 6.023 \times 10^{23} \text{ molecule/mol} \frac{1 \text{ g/cm}^3}{18 \text{ g/mol}} = 3.346 \times 10^{22} \text{ molecule/cm}^3 .$$

كما يمكن حساب متوسط المسافة بين الذرات، L، في المواد التي يكون فيها عدد الذرات لوحدة الحجم في حدود $n = 6 \times 10^{22}$ ذرة/سم³ بالتعويض في العلاقة $L = (n)^{1/3}$.

$$L = (n)^{1/3} = (6 \times 10^{22})^{1/3} = 0.3915 \text{ nm}$$

وهكذا، نجد أن المقياس الذري في الحالة الصلبة هو كسر من النانومتر (0.4 nm ≈) أو بضع أنجستروم (4 Å ≈).

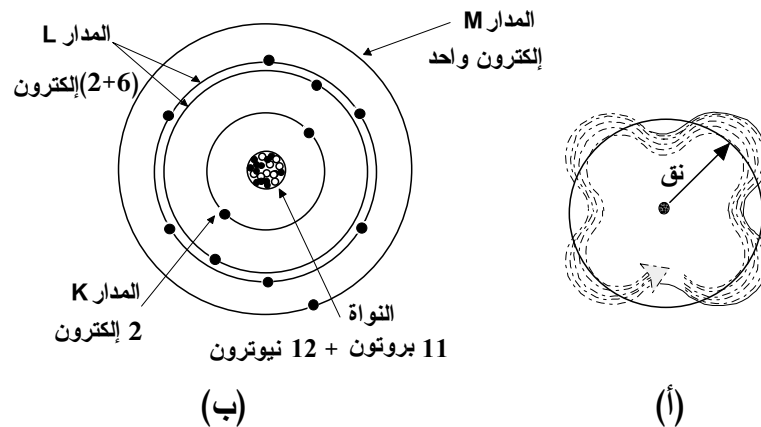
6-2-1 الإلكترونات في الذرة ELECTRONS IN ATOM

تدور الإلكترونات حول النواة في مسارات لها نصف قطر يتراوح بين 0.05

نانومتر و 2 نانومتر. وبالرغم من أن هذه الصورة تشبه منظومة شمسية صغيرة إلا أن

ميكانيكا الكم تخبرنا بأن هذا التماثل غير صحيح. طبقا لميكانيكا الكم، لا تتحرك

الإلكترونات في مدارات دائرية ولكن في مدارات ضبابية (أي على شكل سحابة)، كما هو مبين بالشكل 3-1 (أ). في الحقيقة، لا يمكننا القول كيف تتحرك الإلكترونات (بسبب صغر حجمها المتناهي وعدم إمكانية رصدها) ولكن يمكننا التحدث عن احتمال وجودها على مسافة ما من النواة. كما تخبرنا ميكانيكا الكم أيضاً، أنه توجد مدارات (أو أغلفة) تكون فيها كثافة الاحتمال مسموحة. تمّ تعريف هذه الأغلفة بواسطة مجموعة من الأعداد الكمية تدل على متغيرات الحركة الإلكترونية ومنها: العدد الكمي الأساسي، (principal quantum number, n) والذي يرتبط بطاقة الإلكترون أو حجم الغلاف، حيث يكون الغلاف $n=1$ هو الغلاف الأصغر و الأغلفة $n=2,3,4,.....$ تكون أكبر ويرمز لهذه الأغلفة بالرموز $K, L, M, N, ...$ وهكذا. العدد الثاني هو العدد الكمي المداري (orbital quantum number, l) ويرتبط بالعزم الزاوي للمدارات الفرعية الموجود خلال الغلاف ويأخذ القيم، $l = 0, 1, ..., (n-2), (n-1)$ ويرمز إلى المدارات الفرعية بالرموز s, p, d, f وهكذا. يوجد رقمين كميّين آخرين هما العدد الكمي المغناطيسي، (magnetic quantum number, m) والعدد الكمي المغزلي (spin quantum number, s). العدد الكمي m يحدد عدد حالات الطاقة (الإلكترونات) في المدار الفرعي و يأخذ القيم $l+1, l, l-1, ..., -l, -l-1, ..., -l-1$. أما العدد الكمي المغزلي s فينشأ من العزم المغزلي الذاتي للإلكترون و يأخذ القيم $\pm \frac{1}{2}$ بناء على اتجاه الدوران. وهكذا نجد أن هذين العددين (s, m) يصفان حالات طاقة الإلكترون الموجود خلال المدارات الفرعية.



الشكل 1-3 (أ) حركة الإلكترون حول النواة، (ب) ذرة الصوديوم ($^{23}_{11}\text{Na}$) طبقاً لنظرية بوهر.

تنشأ هذه الأعداد الكمية الأربعة من حل معادلة شرودنجر (Schrödinger) و مبدأ

باولي (Pauli) لاستبعاد وجود أكثر من إلكترون له نفس الأعداد الكمية الأربعة في نفس

الوقت. يبين الجدول 1-1 عدد حالات الطاقة المسموحة للإلكترون في بعض الأغلفة

الإلكترونية الرئيسية والفرعية. كما يبين الشكل 1-3 (ب) تركيب ذرة الصوديوم

($^{23}_{11}\text{Na}$) طبقاً لنموذج بوهر.

الجدول 1-1 حالات الطاقة في المدارات الإلكترونية

العدد الكمي الرئيسي، n	رمز المدار	قيم l	اسم المدار الفرعي	عدد المدارات الفرعية	عدد الإلكترونات في المدار الفرعي الرئيسي
1	K	0	s	1	2
2	L	0	s	1	2
		1	p	3	6
3	M	0	s	1	2
		1	p	3	6
		2	d	5	10
4	N	0	s	1	2
		1	p	3	6
		2	d	5	10
		3	f	7	14

تسمى الإلكترونات التي تحتل المدارات الخارجية بالإلكترونات التكافؤ (valence

electrons) وتكون هذه الإلكترونات هي المسؤولة عن الربط بين الذرات لتكوين جزيئات

أو بلورات. تستخدم الأعداد والرموز السابقة لوصف حالات (مستويات) الطاقة الإلكترونية (التركيب الإلكتروني للذرة)، في الذرة حيث يدل كل رمز على حالة طاقة

معينة، على النحو الآتي: $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, \dots$

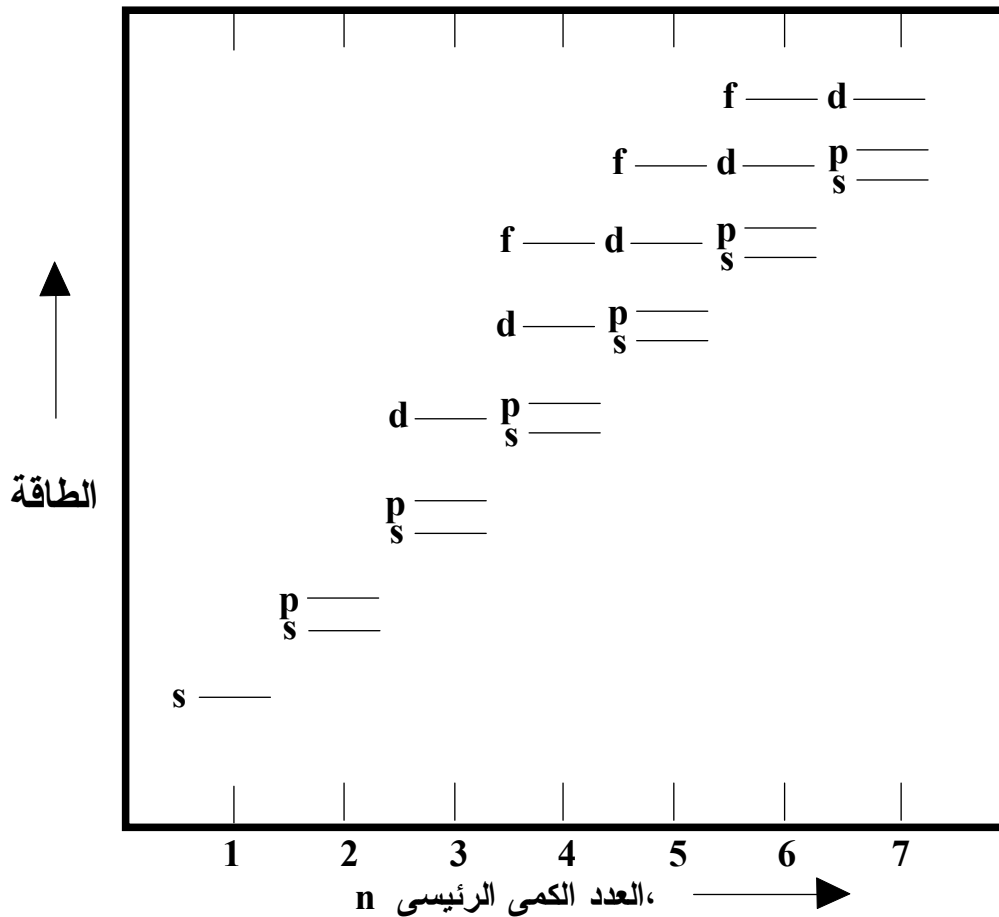
يبين الشكل 4-1 طاقة المستويات الذرية الفرعية كدالة في العدد الكمي الرئيسي.

وطبقاً للمناقشة السابقة، يمكن كتابة التركيب الإلكتروني للحديد ($Z=26$)، على سبيل

المثال، على النحو $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$ ، حيث يشير المدلول العددي العلوي إلى عدد

حالات الطاقة المسموح به في كل مدار (عدد الإلكترونات). يبين الجدول 2-1 عملية

الامتلاء لبعض المدارات الذرية الأولى لبعض العناصر.



الشكل 4-1 مخطط طاقة المستويات الذرية كدالة في العدد الكمي الرئيسي.

الجدول 1-2 عملية ترتيب امتلاء لبعض المدارات الذرية الأولى لبعض العناصر.

رقم المدار	العنصر	رقم المدار	العنصر	رقم المدار	العنصر
1s	He ، H	4s	Ca ، K	5p	Xe ، In
2s	Be ، Li	3d	انتقالية Zn..Sc	6s	Ba ، Cs
2p	NeB	4p	Kr.....Ga	4f	الأقلاء Lu...Ce
3s	Mg ، Na	5s	Sr ، Rb	5d	انتقالية Hg...La
3p	Ar..... Al	4d	انتقالية Cd..Y	6p	Rn.....Tl

1-2-7 الجدول الدوري PERIODIC TABLE

ترتب العناصر في الجدول الدوري طبقاً للعدد الذري، (انظر الشكل 1-5). من تتبع خصائص العناصر في الجدول نجد أن العناصر الموجودة في نفس العمود (تسمى مجموعة رأسية) لها خصائص متشابهة. يدل رقم المجموعة على عدد الإلكترونات المناسبة للربط (أي لعمل رابطة). تتضمن المجموعة 0 الغازات الخاملة (He, Ne, Ar...) وفيها تكون المدارات الفرعية ممتلئة ولذلك فهي خاملة كيميائياً. تتضمن المجموعة 1A عناصر الفلزات (Li, Na, K...) وهي عناصر تحتوى على إلكترون واحد في المدار الخارجي وهذا الإلكترون يحتل المدار الفرعي s. تتلف هذه العناصر إلى إعطاء هذا الإلكترون ولذلك فهي نشطة كيميائياً.

تتضمن المجموعة VIIA عناصر الهالوجينات (F, Cl, Br...) وفيها ينقص المدار الخارجي إلكترون واحد لكي يمتلئ ولذلك تتلف هذه العناصر إلى كسب إلكترون وبالتالي فهي نشطة كيميائياً. تتدرج الخصائص الكيميائية بين المجموعات في الجدول مثل السالبية الكهربائية والميل الإلكتروني، كما سنرى لاحقاً.

IA																								0
1 H 1.008	IIA																		2 He 4.003					
3 Li 6.941	4 Be 9.012													5 B 10.81	6 C 12.01	7 N 14.01	8 O 16.00	9 F 19.00	10 Ne 20.18					
11 Na 22.99	12 Mg 24.31	III B	IV B	V B	VI B	VII B	VIII			I B	II B	13 Al 26.98	14 Si 28.09	15 P 30.97	16 S 32.06	17 Cl 35.45	18 Ar 39.95							
19 K 39.10	20 Ca 40.08	21 Sc 44.96	22 Ti 47.90	23 V 50.94	24 Cr 52.00	25 Mn 54.94	26 Fe 55.85	27 Co 58.93	28 Ni 58.71	29 Cu 63.55	30 Zn 65.38	31 Ga 69.72	32 Ge 72.59	33 As 74.92	34 Se 78.96	35 Br 79.90	36 Kr 83.80							
37 Rb 85.47	38 Sr 87.62	39 Y 88.91	40 Zr 91.22	41 Nb 92.91	42 Mo 95.94	43 Tc 98.91	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.4	47 Ag 107.87	48 Cd 112.4	49 In 114.82	50 Sn 118.69	51 Sb 121.75	52 Te 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.30							
55 Cs 132.91	56 Ba 137.33	57 La 138.91	72 Hf 178.49	73 Ta 180.95	74 W 183.85	75 Re 186.2	76 Os 190.2	77 Ir 192.22	78 Pt 195.09	79 Au 196.97	80 Hg 200.59	81 Tl 204.37	82 Pb 207.2	83 Bi 208.98	84 Po (210)	85 At (210)	86 Rn (222)							
87 Fr (223)	88 Ra 226.03	89 Ac (227)																						

2-7-2-1 السالبيّة الكهربيّة

تعتبر السالبية الكهربائية من أهم الخصائص الكيميائية المهمة للعنصر، فهي التي تتحكم في تكون الروابط بين الذرات. تعرف السالبية الكهربائية بأنها متوسط الميل الإلكتروني وجهد التأين للذرة، كما يمكن تعريفها على أنها مقدرة الذرة على جذب الإلكترونات عند عمل روابط كيميائية. يبين الشكل 1-6 قيم السالبية الكهربائية للعناصر في الجدول الدوري.

يتضح من الشكل أن السالبية الكهربائية تزداد في الدورة الأفقية بزيادة العدد الذري وبنقص نصف قطر الذرة، بينما تقل السالبية الكهربائية في المجموعة الرأسية بزيادة العدد الذري. يلعب الفرق في السالبية الكهربائية للعناصر دوراً أساسياً في تحديد نوع الترابط بينهما، فكلما كان الفرق كبيراً كانت الرابطة أشد قوة والعكس صحيح.

																																0
IA											IIIA		IVA		VA		VIA		VIIA		2											
1 H 2.1	IIA										5 B 2.0	6 C 2.5	7 N 3.0	8 O 3.5	9 F 4.0	10 Ne --																
3 Li 2.0	4 Be 1.5									13 Al 1.5	14 Si 1.8	15 P 2.1	16 S 2.5	17 Cl 3.0	18 Ar --																	
11 Na 0.9	12 Mg 1.2	IIIB	IVB	VB	VIB	VII B	VIII B			IB	IIB						36 Kr --															
19 K 0.8	20 Ca 1.0	21 Sc 1.3	22 Ti 1.5	23 V 1.6	24 Cr 1.6	25 Mn 1.5	26 Fe 1.8	27 Co 1.8	28 Ni 1.8	29 Cu 1.9	30 Zn 1.6	31 Ga 1.6	32 Ge 1.8	33 As 2.0	34 Se 2.4	35 Br 2.8																
37 Rb 0.8	38 Sr 1.0	39 Y 1.2	40 Zr 1.4	41 Nb 1.6	42 Mo 1.8	43 Tc 1.9	44 Ru 2.2	45 Rh 2.2	46 Pd 2.2	47 Ag 1.9	48 Cd 1.7	49 In 1.7	50 Sn 1.8	51 Sb 1.9	52 Te 2.1	53 I 2.5	54 Xe --															
55 Cs 0.7	56 Ba 0.9	57-71 La-Lu 1.1-2	72 Hf 1.3	73 Ta 1.5	74 W 1.7	75 Re 1.9	76 Os 2.2	77 Ir 2.2	78 Pt 2.2	79 Au 2.0	80 Hg 1.9	81 Tl 1.8	82 Pb 1.8	83 Bi 1.9	84 Po 2.0	85 At 2.2	86 Rn --															
Fr 0.7	Ra 0.9	Ac 1.2																														

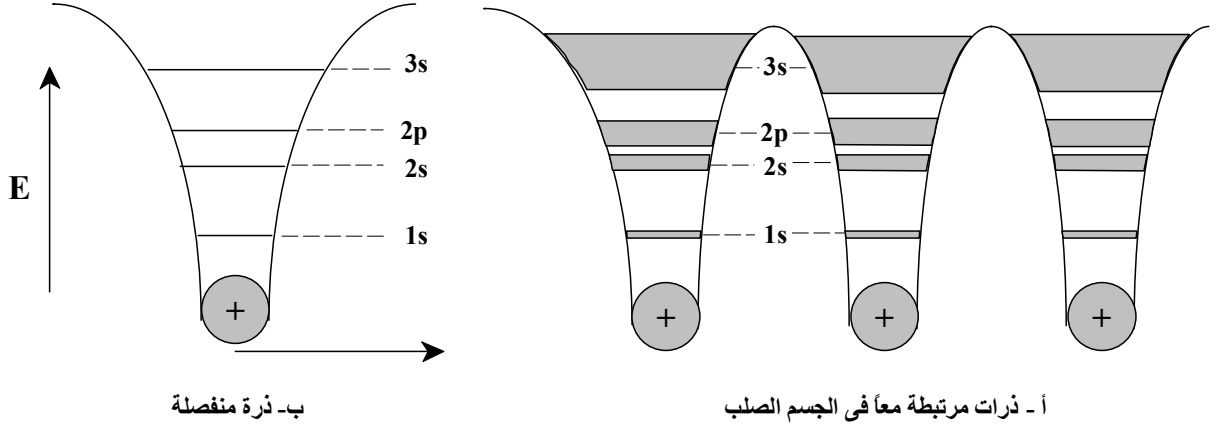
السالبية الكهربية

السالبية الكهربية

الشكل 1-6 الجدول الدوري للعناصر موضعا السالبية الكهربية.

تتكون المادة بأشكالها المختلفة عند ارتباط الذرات الحرة بعضها مع بعض. وكما رأينا من قبل، يكون للإلكترونات في الذرة الحرة مستويات طاقة محددة تتفصل هذه المستويات بعضها عن بعض بمناطق غير مسموحة ويكون مخطط مستويات الطاقة للذرة ثابت ولا يتغير طالما كانت الذرة حرة (منفصلة). عند ارتباط الذرات الحرة معا لتكوين مادة صلبة فإنها تقع تحت تأثير قوى جديدة مختلفة في مقدارها وطبيعتها عن القوى التي تؤثر في حالة الذرات الحرة، الأمر الذي معه، يحدث تشويها لمخطط الطاقة الإلكتروني للذرات. يكون التشويه عبارة عن تغير في شكل مستويات الطاقة حيث تصبح على شكل مجموعات متصلة من المستويات تكون أنطقه (أشرطة) طاقة بدلا من مستويات محددة. تتكون الأنطقة بسبب التداخل بين مستويات الطاقة للذرات المختلفة عند ارتباطها، سواء كانت الذرات من نفس نوع العنصر أو كانت لعناصر مختلفة. يرجع الفضل في الكشف عن هذه النظرية إلى المعالجة الرياضية لحركة الإلكترونات بواسطة ميكانيكا الكم، حيث أدى حل معادلة شرودنجر إلى ظهور حالات من الطاقة تكون محظورة على الإلكترون تسمى فجوات طاقة. معنى هذا أنه يوجد في الذرة مناطق ممتدة ومتصلة من مستويات الطاقة المسموحة للإلكترون تتفصل عن بعضها بمناطق ممنوعة ومحظورة على الإلكترون التواجد فيها. مما سبق، يمكن وصف مخطط الطاقة في الجسم الصلب بأنه عبارة عن

أنطقه مسموحة من الطاقة يوجد فيها الكترونات وتتفصل هذه الأنطقة بعضها عن بعض بمناطق محظورة.



الشكل 1-7 مستويات الطاقة في الذرة الحرة وفي الصلب.

يبين الشكل 1-7 مخطط الطاقة في كل من ذرة منفردة وذرات من نفس النوع

موجودة معها لتكون الجسم الصلب، بغرض المقارنة. سوف يتم مناقشة هذه النظرية بالتفصيل لاحقاً في باب منفصل.

4-1 قوى الربط بين الذرات BINDING FORCES BETWEEN ATOMS

عند البحث عن قوى الربط بين الذرات يجب التعامل مع الذرات كما لو كانت

تتكون من: 1- كرات لها محصلة شحنة موجبة ناتجة عن النواة بالإضافة إلى إلكترونات

القلب الداخلي للذرة. 2- قليل من الإلكترونات تكون موجودة في مدار التكافؤ الخارجي.

أي أنه يجب الأخذ في الاعتبار وجود شحنات كهربائية متشابهة وأخرى مختلفة. وبناءً على

ما سبق، يوجد بين الذرات قوى تجاذب (attractive forces) وقوى تنافر (repulsion)

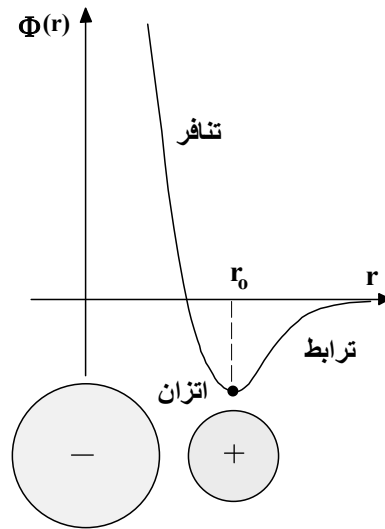
(forces). كما هو معروف، تحدث قوى التجاذب بين الشحنات المختلفة، بينما تحدث قوى التنافر بين الشحنات المتشابهة.

عند اقتراب الذرات بعضها من بعض لتتحد وتكون جزئياً فإنها تقع تحت تأثير قوى جديدة تختلف عن القوى الموجودة في حالة الذرة المنفردة . فعلى سبيل المثال، تتداخل مدارات التكافؤ (التي لها، بشكل عام، حيز مكاني أكبر) إلى الحد الذي يجعل نطاقها يزداد اتساعاً في حالة وجود أكثر من ذرة ويكون الارتباط. يتعين نوع الارتباط بين الذرات (نوع الرابطة) بمقدار التداخل المذكور سابقاً. عندما تتداخل المدارات تبدأ إلكترونات التكافؤ في إعادة ترتيب نفسها حتى تصل إلى ترتيب أكثر استقراراً. خلال إعادة الترتيب هذه تنشأ بين الذرات أنواعاً مختلفة من الروابط وتؤدي إعادة الترتيب هذه إلى جعل الذرات أكثر تماسكاً وتكون الحالة الصلبة. تؤدي قوى الجذب إلى تقارب الذرات من بعضها إلى الحد الذي تنشأ معه قوى تنافر بين الإلكترونات، وعند الاتزان تستقر الذرات على مسافة ثابتة في وضع مستقر. ولتوضيح هذا المفهوم نعتبر طاقة الوضع لذرتين متجاورتين. تتغير طاقة الوضع، $\Phi(r)$ ، لذرتين متجاورتين بينهما مسافة r ، طبقاً للعلاقة،

$$\Phi(r) = -\frac{a}{r^m} + \frac{b}{r^c}, \quad 2-1$$

حيث a و b مقادير ثابتة.

يبين الشكل 1-8 اعتماد طاقة الوضع على المسافة بين الذرات. يتضح من هذا الشكل أنه عندما تكون المسافة بين الذرتين r_0 تكون محصلة قوى التناظر والتجاذب قيمة صغرى وبالتالي تصبح طاقة الوضع أقل ما يمكن ويمثل هذا الوضع حالة الاستقرار وتتكون الرابطة بين الذرتين. عند التأثير على الرابطة بمؤثر خارجي يجعل المسافة بين الذرات أكبر من r_0 فإن قوى الجذب تكون مسيطرة وتعمل على إبقاء الذرتين في حالة ترابط. تعتمد قيم الثوابت m و c على حالة الارتباط، فمثلا في حالة البلورات الأيونية تكون $m=1$ وفي حالة البلورات الجزيئية تكون $c=6$.



الشكل 1-8 رسم مبسط يبين اعتماد طاقة الوضع على المسافة بين الذرات.

5-1 أنواع الروابط TYPES OF BONDS

تتعدد أنواع الروابط بين ذرات العناصر المختلفة طبقاً لأنواع الذرات وظروف الارتباط. وتؤدي الروابط إلى تراص بلايين الذرات بشكل متقارب وتكون الجسم في الحالة الصلبة. يوجد العديد من أنواع الروابط في الجسم الصلب منها روابط أساسية مثل: الروابط الأيونية، الروابط التساهمية، الروابط الفلزية والروابط الهيدروجينية، ومنها

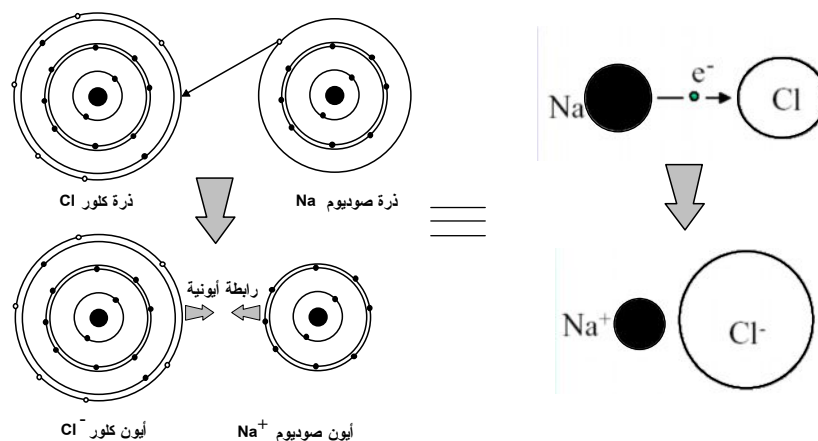
روابط ثانوية مثل الرابطة الجزيئية التي تتضمن قوى فان درفال. سنناقش فيما يلي خصائص وظروف تكون كل نوع من هذه الروابط.

1-5-1 الرابطة الأيونية IONIC BOND

تتكون الرابطة الأيونية غالباً بين الفلزات و اللافلزات وتعد هذه الرابطة من أقوى الروابط الموجودة في الحالة الصلبة. تتميز ذرات الفلزات بكبر حجمها وصغر جهد تأينها وبالتالي سهولة فقد الذرة إلكتروناتاً والتحول إلى أيون موجب (كاتيون). على النقيض، تتميز ذرات اللافلزات بصغر حجمها وكبر جهد تأينها وكبر ميلها للإلكترونات وبالتالي سهولة اكتساب الذرة إلكتروناتاً والتحول إلى أيون سالب (أنيون). تكون الأيونات السابقة أكثر استقراراً من الذرات لأن تركيب الذرات يتحول إلى تركيب يشبه تركيب ذرات أقرب غاز خامل. بناء على ما سبق، عند تقارب ذرة فلز وذرة لا فلز يتم انتقال إلكترون من ذرة الفلز إلى ذرة اللا فلز ويتكون كاتيون وأنيون ذات شحنات مختلفة، الأمر الذي يؤدي إلى حدوث قوى تجاذب كهربائي بينهما وتكوين رابطة أيونية. تعتبر بلورة ملح الطعام (كلوريد الصوديوم، NaCl) خير مثال لتكون مثل هذه الرابطة.

يكون التركيب الإلكتروني لذرة الصوديوم ($_{11}\text{Na}^{23}$) هو $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ ، بينما يكون التركيب الإلكتروني لذرة الكلور ($_{17}\text{Cl}^{35}$) هو $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ ، ومن هذا التركيب يتضح أن ذرة الصوديوم تميل إلى فقد الإلكترون الموجود في المدار الأخير ($3s^1$) وتتحول إلى كاتيون ذو تركيب $1s^2 2s^2 2p^6$ وهو تركيب أكثر استقراراً لأنه يشبه تركيب أقرب غاز

خامل ($_{10}\text{Ne}^{20}$). على الجانب الآخر نجد أن ذرة الكلور تميل إلى اكتساب إلكترون (ينقصها في المدار الأخير، $3p^5$) وتتحول إلى أنيون ذو تركيب $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ وهو تركيب أكثر استقراراً لأنه يشبه تركيب أقرب غاز خامل ($_{18}\text{Ar}^{40}$)، أيضاً. وبذلك عندما تتقارب الذرتين إلى مسافة كافية يحدث انتقال إلكترون من ذرة الصوديوم إلى ذرة الكلور ويتكون أيون صوديوم موجب (Na^+) وأيون كلور سالب (Cl^-) ويتجاذب الأيونان بقوى تجاذب كولومية (Coulomb forces) ويتكون جزئ كلوريد الصوديوم، كما يوضح الشكل 9-1.



تتنظم أيونات الصوديوم والكلور في الشبكة البلورية بشكل مرتب ومتكرر وتكون

بلورة ملح الطعام التي لها الشكل المكعبي، كما هو مبين بالشكل 10-1.

في بلورة كلوريد الصوديوم تنشأ بين أيونات الصوديوم وإيونات الكلور قوى

تجاذب وقوى تنافر وتكون محصلتها النهائية قوى جاذبة. يمكن إيجاد القوة بين الذرات

$F(r)$ من الجهد $U(r)$ وذلك باستخدام العلاقة الآتية،

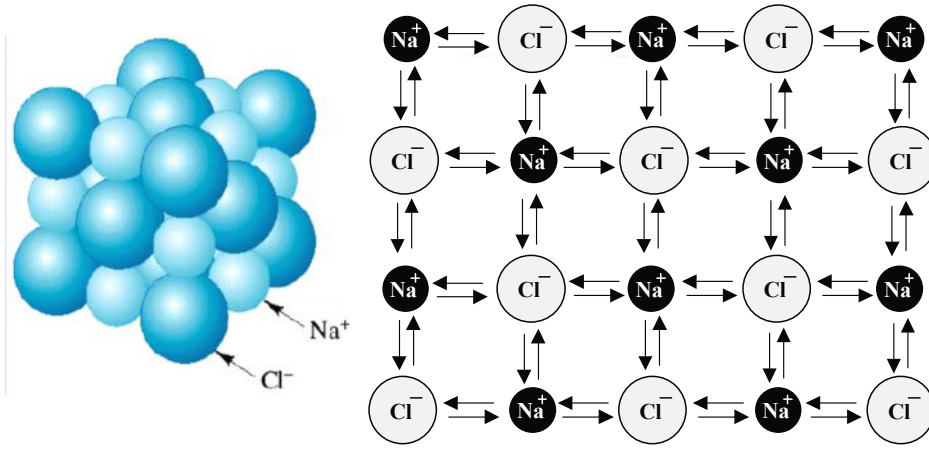
$$F(r) = -\frac{U(r)}{r} \quad 3-1$$

حيث r هي المسافة التي تفصل الأيونات. بالرجوع إلى الشكل 1-11، فإن قوى الجذب

الكولومى بين الأيون الموجب والأيون السلب تعطى بالعلاقة،

$$F_A = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \quad 4-1$$

هي شحنة الإلكترون (e) هو ثابت كولوم، $\frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 9 \times 10^9 \text{ N.m}^2/\text{C}^2$ ، حيث)



الشكل 1-10 الشبكة البلورية لبلورة ملح الطعام فى بعدين وفى ثلاثة أبعاد.

($1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$). يبين الشكل 1-11 اعتماد قوى الجذب الكولومى على المسافة بين

الأيونات. عندما تقترب الأيونات من بعضها بشكل كبير تتولد قوى تنافر تنشأ عن تداخل

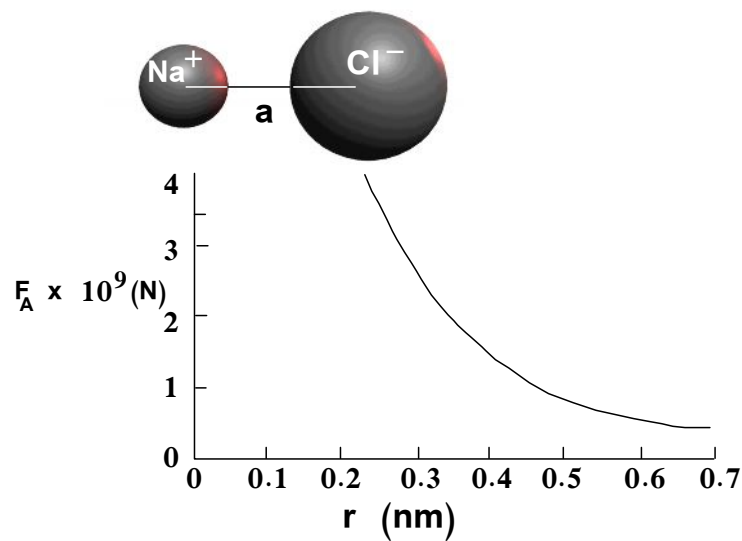
السحابات الإلكترونية وتكون عبارة عن قوى قصيرة المدى ويمكن كتابتها على الصورة،

$$F_R = \frac{B}{r^n} \quad 5-1$$

حيث B و n مقادير ثابتة. من المعادلات السابقة يمكن الحصول على محصلة طاقات

التجاذب والتنافر على الصورة،

$$E_t = -\frac{e^2}{r} + \frac{B}{r^n} \quad 6-1$$



الشكل 11-1 اعتماد قوى كولوم على المسافة بين الأيونات.

يوضح الشكل 12-1 اعتماد الطاقات على المسافة r ، ومن الشكل يتضح أن القيمة

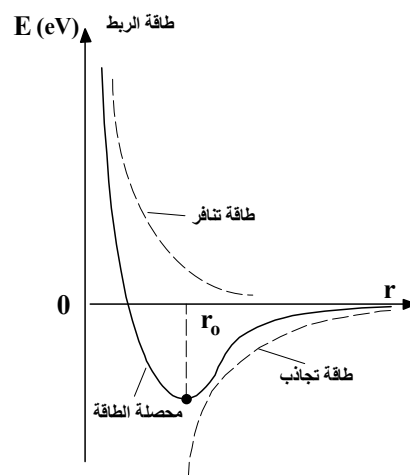
المطلقة لطاقة التجاذب تزداد مع تناقص المسافة بين الأيونين، في نفس الوقت تزداد طاقة

التنافر.

عندما تصل المسافة بين الأيونين إلى أقل ما يمكن ($r = r_0$) تتساوى قوى التجاذب

مع قوى التنافر وتكون محصلة الطاقة أقل ما يمكن، وعندئذ تتكون الرابطة ويستقر وضع

الأيونات.



الشكل 12-1 اعتماد طاقة الرابط على المسافة r .

يمكن كتابة الطاقة الكلية للشبيكة على الصورة،

$$E_t = -NA \frac{ke^2}{r_o} \left(1 - \frac{1}{n}\right) \quad 7-1$$

حيث A يمثل ثابت لنوع التركيب ويعرف بثابت ماديلنج (Madelung constant)، و N هو عدد جزيئات كلوريد الصوديوم في الشبيكة.

يمكن تلخيص بعض ملامح الرابطة الأيونية في النقاط الآتية:

- الرابطة الأيونية هي رابطة تنشأ نتيجة انتقال إلكترون من ذرة إلى أخرى.
- تحدث هذه الرابطة في مركبات المواد الصلبة وليست بين ذرات العنصر الواحد.
- الرابطة الأيونية هي رابطة غير موجهة (not directional) ولذلك تتمتع المركبات بكثافة عالية وعدد تناسقي كبير.
- الرابطة الأيونية هي رابطة قوية ولذلك تتمتع المركبات بنقطة انصهار عالية ومعامل صلابة كبير.
- وحيث أن الإلكترونات في الرابطة الأيونية تحتاج كمية طاقة كبيرة جدا لكي تتحرر، فإن المركبات تكون عازلة للكهرباء (ماعدا بالقرب من نقطة الانصهار) وتكون شفافة للأشعة فوق البنفسجية (UV).

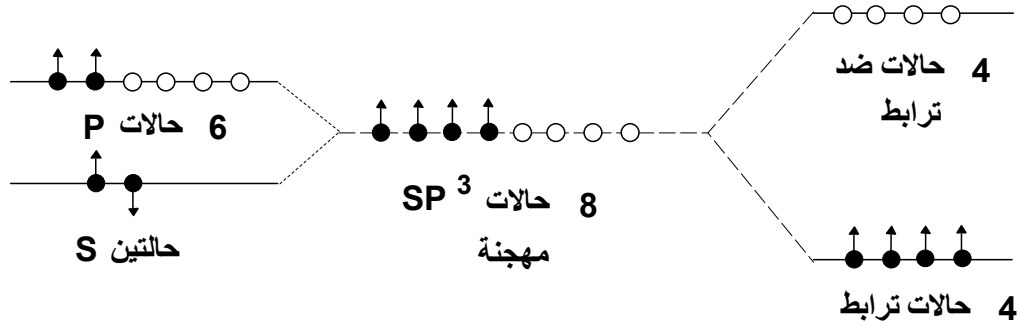
2-5-1 الرابطة التساهمية COVALENT BOND

تنشأ الرابطة التساهمية بين الذرات عندما تساهم كل ذرة، بالتساوي، بالإلكترونات تكافؤ مع بعضها البعض، حيث تكتمل الاغلفة الخارجية وتصل كل من الذرتين إلى حالة أكثر استقراراً. تحدث هذه الرابطة بين الذرات المتشابهة (كما في حالة جزيئات الغازات او جزيئات العنصر الصلب)، كما تحدث بين الذرات المختلفة (كما في حالة المركبات التساهمية).

يتحدد عدد الذرات التي ترتبط معا لتكوين رابطة تساهمية طبقا لنظرية الثمانيات (Octa rule) التي وضعها كوسل ولويس عام 1916. تنص هذه النظرية على أنه بخلاف الهيدروجين والليثيوم والبريليوم تميل ذرات جميع العناصر إلى الوصول إلى التركيب الثماني (أى يكون فى المدار الأخير 8 إلكترونات). وبناء على ذلك فإن عدد الذرات التي تكون رابطة تساهمية يكون $(8 - N)$ ، حيث N هو عدد الإلكترونات فى المدار الاخير. وكمثال لتكون الروابط التساهمية نعتبر تكون بلورة السيليكون النقى.

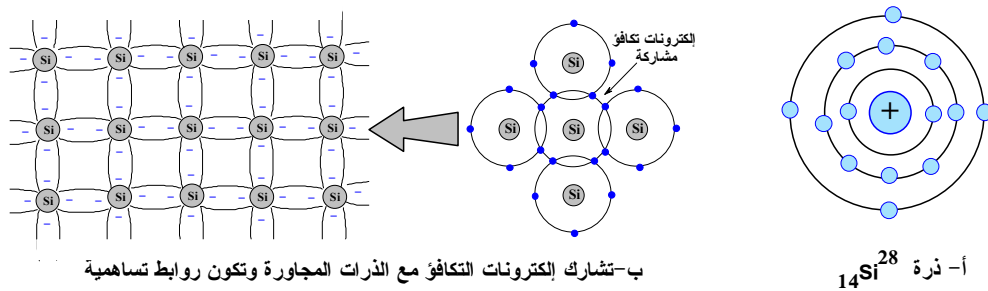
تتكون هذه البلورة من ذرات سيليكون المرتبة بشكل منتظم ومتكرر والتي ترتبط بعضها مع بعض. ولتوضيح هذا الارتباط، نعلم أن ذرة السيليكون (${}^{28}_{14}\text{Si}$) لها التركيب الالكترونى $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$ ويمثل المدار الخارجى وبالتالي يحتوى على أربعة إلكترونات. تتكون الرابطة التساهمية بواسطة التغير فى مستويات الطاقة لالكترونات التكافؤ لذرة السيليكون، كما يتضح من الشكل 1-13، حيث تكون حالة المدار $3s$ مشغولة تماما بعدد الكترنين اثنين لهما عزم مغناطيسى متعاكس ويكون فى المدار $3p$ الكترنين اثنين مع اربعة فجوات. عندما تقترب الذرتان من بعضهما تنشأ بينهما رابطة تساهمية وذلك نتيجة تكون ترابط هجينى من النوع sp^3 يجعل الذرتين فى وضع أقل طاقة ويشغل الالكترونات الاربعة هذه الحالات الجديدة. أما الفجوات فتكون مايسمى حالات ضدّ الترابط (anti-bonding). عند اعطاء الالكترونات كمية كافية من الطاقة فانها تشغل حالات ضد الترابط وتصبح أئذاك طليقة من حالات الترابط وتستطيع ان تساهم فى التوصيلية

الكهربية وهذه الخاصية مهمة جدا عند دراسة التوصيلية الكهربائية كما سيتضح في الابواب القادمة.



الشكل 1-13 التغير في مستويات الطاقة للإلكترونات التكافؤ في السليكون.

ويمكن استخدام لنظرية الثمانيات لمعرفة عدد الذرات اللازمة لعمل روابط تساهمية مع ذرة السليكون. وطبقا لهذه النظرية فإن عدد الذرات اللازمة لعمل روابط تساهمية مع ذرة السليكون هو اربعة (4 = 8 - 4)، وبذلك، تشارك كل ذرة سليكون أربع ذرات أخرى في الجوار كل إلكترون واحد من إلكترونات تكافؤها الأربعة، كما يوضح الشكل 1-14 (أ).

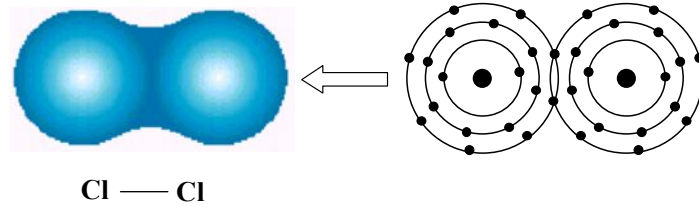


الشكل 1-14 الروابط التساهمية في بلورة السليكون النقية.

تؤدي هذه المشاركة إلى وجود 8 إلكترونات تكافؤ في المدار الخارجي لكل ذرة سليكون مما يخلق حالة ثبات كيميائي في البلورة نتيجة تكون أربعة روابط تساهمية وهذه

الروابط تجعل ذرات السيليكون متماسكة بعضها مع بعض داخل البلورة، كما يبين الشكل 14-1 (ب).

يبين الشكل 15-1 مثلاً آخرًا للرابطة التساهمية وهو تكون جزيء الكلور. يكون التركيب الذري لذرة الكلور ($_{17}\text{Cl}^{35}$) هو ($1\text{S}^2 2\text{S}^2 2\text{P}^6 3\text{S}^2 3\text{P}^5$) ويتضح أن المدار الأخير يحتوى على 7 إلكترونات ($2+5$) وبذلك فإنه طبقاً لنظرية الثمانية نجد أن ($8-7=1$)، أي أن ذرة الكلور تحتاج إلى ذرة أخرى لتكوين رابطة تساهمية تتكون كما يتضح فيما يلي. عند ارتباط ذرتين من الكلور تساهم كل ذرة بإلكترون واحد من المدار الأخير، وبذلك يصبح المدار الأخير في كلتا الذرتين ممتلئاً (أي يحتوى على 8 إلكترونات) وهكذا يتكون جزيء الكلور (Cl_2).



الشكل 15-1 تكون جزيء كلور، Cl_2 .

يمكن تلخيص ملامح الرابطة التساهمية في النقاط الآتية:

- لا تتكون الرابطة التساهمية عن طريق انتقال إلكترونات من ذرة إلى أخرى ولكن تتكون عن طريق تداخل أحد المدارات الخارجية لأحدى الذرتين الذي به إلكترون واحد مفرد مع أحد المدارات الخارجية في الذرة الأخرى والذي به إلكترون واحد أيضاً ويشار إلى هذه العملية بالتهجين (hybridization).

- يتحدد عدد الذرات اللازمة لعمل روابط تساهمية مع ذرة طبقاً لقاعدة الثمانية.

➤ توصف الرابطة التساهمية بأنها نقية إذا ما كانت الذرتين المرتبطتين متماثلتين تماماً كما في حالة بلورة السليكون والعكس صحيح.

➤ لا تعتمد طاقة وضع النظام الذي يتكون من روابط تساهمية على المسافة بين الذرات فقط ولكن على الزوايا المتكونة بين الروابط.

➤ من أمثلة الروابط التساهمية غير النقية منها الروابط الجزيئية والروابط التناسقية وهي روابط أقل قوة من الروابط النقية.

➤ يكون التوصيل الكهربائي للمركبات التساهمية ضعيف بشكل عام (ماعدا بعض الاستثناءات)، ويتفاوت معامل الصلابة ودرجة حرارة الانصهار للمواد تفاوتاً كبيراً نظراً لتباين التراكيب البلورية للمادة الواحدة .

➤ تتميز المواد الصلبة التي تتكون عن طريق الروابط التساهمية بأنها تتخذ أشكالاً بلورية مختلفة من المادة نفسها، مثل أشباه الموصلات وأكسيد الألمونيوم والسليكون وتعتمد خصائص المادة إلى حد كبير على الشكل البلوري الذي انتهت إليه المادة بعد ارتباطها بهذه الطريقة. فعلى سبيل المثال، رغم أن التركيب الكيميائي لكل من الماس والجرافيت واحد (كل منهما عبارة عن كربون) إلا أنه يوجد تباين كبير في خصائصهما نظراً لاختلاف الشكل البلوري لكل منهما، حيث تكون الشبكة البلورية للماس ثلاثية الأبعاد بينما يكون الجرافيت على شكل صفائح سداسية متوازية توجد بينها قوى ربط ضعيفة.

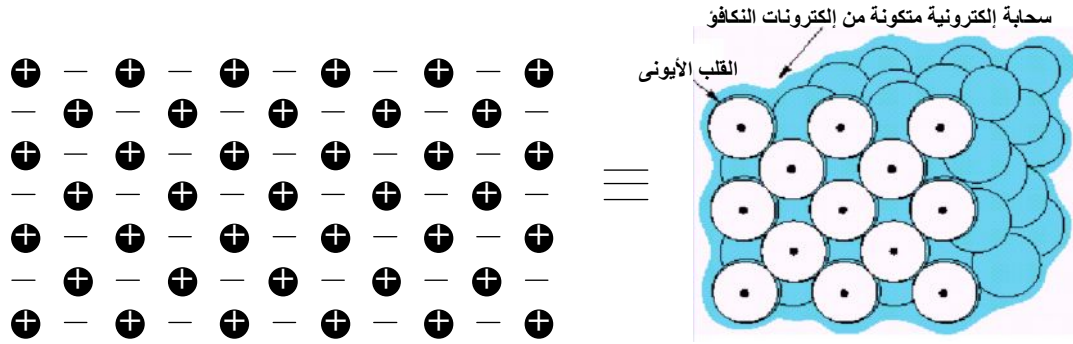
من الجدير بالذكر أنه توجد مواد تكون فيها الروابط عبارة عن خليط من الروابط

الأيونية والروابط التساهمية مثل بلورات GaAs و InSb.

1-5-3 الرابطة الفلزية METALLIC BOND

عند تجمع ذرات الفلز معا في شبكة بلورية تنشأ بين الذرات رابطة من نوع جديد (تسمى الرابطة الفلزية) تجعل هذه الرابطة أيونات الفلز الموجبة تترتب على شكل شبكة بلورية وتجعل إلكترونات مستوى الطاقة الخارجي تتجمع معا مكونة سحابة إلكترونية حرة الحركة تغمر كل تجمع أيونات الفلز الموجبة. وبذلك يمكن تخيل المعدن كما لو كان مكون من أيونات موجبة (مرتبة الشكل) تسبح في بحر من الإلكترونات السالبة. أي أنّ الرابطة الفلزية تنتج من السحابة المتكونة من إلكترونات التكافؤ الحرة في الفلز وإيونات الفلز الموجبة وتؤدي هذه الرابطة إلى تقليل قوى التنافر بين الأيونات الموجبة في الشبكة البلورية. وهكذا، في الشبكة البلورية للفلز، تنشأ الرابطة من التأثير المتبادل بين الأيونات الموجبة وبين الغاز الإلكتروني (السحابة الإلكترونية)، كما يبين الشكل 1-16. تعزى جودة كل من التوصيل الكهربائي والتوصيل الحراري في الفلزات إلى السحابة الإلكترونية المتكونة من إلكترونات التكافؤ الحرة. تعتمد قوة الرابطة الفلزية على عدد إلكترونات التكافؤ في ذرة الفلز، حيث تزداد قوة الربط كلما زاد عدد إلكترونات التكافؤ في ذرة الفلز وبالتالي تصبح البلورة أكثر صلابة وأعلى في درجة الانصهار وفي التوصيل الكهربائي والحراري. فعلى سبيل المثال، فلز الصوديوم أحادي التكافؤ يكون لين ودرجة انصهاره تكون 98°C ، ويكون فلز الماغنسيوم ثنائي التكافؤ طرياً ودرجة انصهاره 650°C ، في

حين يكون الالومنيوم ثلاثي التكافؤ صلب ودرجة انصهاره 660°C ومما سبق نلاحظ تدرج الخصائص مع زيادة تكافؤ الفلز.



الشكل 1-16 مخطط مبسط للروابط في البلورات الفلزية.

يبين الجدول 1-3 أن نوع الرابطة التي تتكون بين مدارين في ذرتين يتحدد بما تمليه كمية تداخل المدارين بالنسبة إلى المسافة الفاصلة بين الذرتين a وبالتالي نوع التركيب البنائي (التعبئة).

جدول 1-3 اعتماد أنواع الروابط المتكونة بين الذرات على المسافة الفاصلة a .

نوع الرابطة	مقدار التداخل بين المدارات	نوع تعبئة الشبكة	نوع المكونات
أيونية	صغير جداً (أصغر من a)	تعبئة متراصة مشجعة	مختلفة
تساهمية	صغير ($\sim a$)	يتحدد بواسطة تركيب المدارات	متشابهة
فلزية	كبير جداً (أكبر بكثير من a)	تعبئة متراصة	مدارات التكافؤ غير الممتلئة

يمكن تلخيص بعض ملامح الرابطة الفلزية في النقاط الآتية:

➤ يمكن تصور نموذج بسيط للرابطة الفلزية هو اعتبار أن أيونات الفلز تسبح في بحر من الإلكترونات.

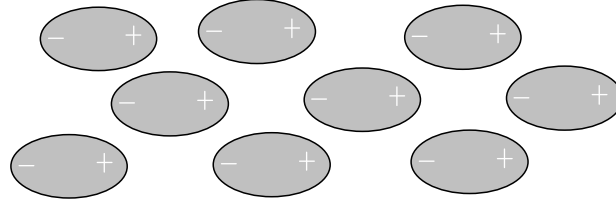
➤ طبقاً لنظرية الأنطقة، يولد التفاعل بين عدد لانهائي من مستويات الطاقة الذرية عدداً لانهائياً من أنطقه الطاقة الجزيئية (نصفها مترابط والنصف الآخر متنافر)، ومن ثم، يغيب مفهوم الطبيعة المقننة لمستويات الطاقة الذرية في بلورة الفلز.

- يمكن تصور بلورة الفلز كما لو كانت جزئ كبير لا تتبع الإلكترونات فيه ذرة بعينها.
- تتميز الفلزات بخاصية الانعكاسية الجيدة وذلك نظراً لحالات الطاقة المتصلة وبالتالي فإن جميع الفوتونات تمتص بواسطة المادة وبسرعة يعاد انبعاثها.
- عند تطبيق فرق جهد على الفلز فإن الفجوات (الأيونات الموجبة) تتحرك نحو المهبط، بينما تتحرك الإلكترونات الفردية نحو المصعد. ونظراً لوجود فجوات عديدة في نطاق التوصيل جاهزة للإتحاد مع الإلكترونات الفردية فإن حركة الشحنات تكون سريعة.

1-5-4 الرابطة الجزيئية MOLECULAR BOND

تتكون هذه الرابطة في كثير من المواد التي لا تحتوي على أي من الروابط السابقة، كما هو الحال في الغازات الخاملة. في هذه الغازات نجد أن المدار الأخير يكون ممتلئاً ويكون التجاذب بينها ضئيلاً جداً في درجات الحرارة والضغط العادي. لا يمكن تكثيف هذه الغازات إلا عند درجات حرارة منخفضة. وقد أعزى بعض العلماء ذلك إلى وجود قوى ضعيفة جداً بين الذرات أو الجزيئات وتسمى قوى فان درفال (Van Der Waal). فقد افترض العالم فان درفال أن الذرات أو الجزيئات تكون ما يسمى بثنائي القطب الكهربائي. تنشأ قوى جاذبة بين الذرات نتيجة التجاذب الكهروستاتيكي بين نواة ذرة ما وإلكترونات ذرة أخرى، كما توجد قوى تنافر بين نواة ذرة ما ونواة الذرة الأخرى، كما يوضح الشكل 1-17. تكون محصلة هذه القوى السابقة قوى جاذبة ضعيفة ولكنها فعالة على المدى القصير بين الذرات وتؤدي إلى ترابط ضعيف وتكوين ثنائي قطب ولذلك تكون الرابطة طويلة. من أمثلة المواد التي تتضمن هذه الروابط: الجرافيت

وبلورات الغازات الخاملة، كما تتواجد هذه الروابط بين أسطح طبقات مادة المايكا. تتميز المركبات التي تتضمن هذه الروابط بمعامل تمدد كبير.



تنشأ الرابطة من التجاذب بين ثنائيات القطب الكهربى

الشكل 17-1 رسم مبسط للرابطة الجزيئية.

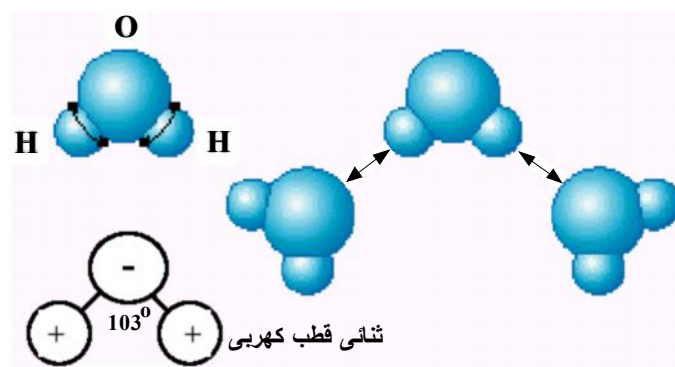
يمكن سرد بعض ملامح الرابطة الجزيئية في النقاط الآتية:

- يكون التوصيل الكهربى في المركبات الجزيئية فقير جداً ويمكن اعتبارها مواد عازلة (ما عدا بعض الاستثناءات).
- يكون معامل الصلابة للمركبات الجزيئية صغير ومعظمها لين، كما يكون لمعان هذه المركبات باهت وغير واضح.
- تتفاوت كثافة المركبات الجزيئية و معظمها يكون أقل من 1 g/cm^3 ، وتكون درجة حرارة انصهارها منخفضة وتزداد بزيادة الوزن الجزيئي (مع بعض الاستثناءات).
- تكون طاقة الربط التساهمية بين الذرات لتكوين الجزيئات قوية ($100-400 \text{ kJ/mole}$)، وتكون القوة بين الجزيئات لتكوين الحالة الصلبة ضعيفة ($5-20 \text{ kJ/mole}$).

5-5-1 الرابطة الهيدروجينية HYDROGEN BOND

تنشأ هذه الرابطة عند إتحاد ذرتين مختلفتين في السالبية الكهربائية وتكوين رابطة تساهمية. والمثال الجيد لهذه الرابطة هو عندما تتحد ذرات الهيدروجين مع ذرات الأكسجين لتكوين جزئ الماء. نظراً للاختلاف الكبير في السالبية الكهربائية وفى الحجم

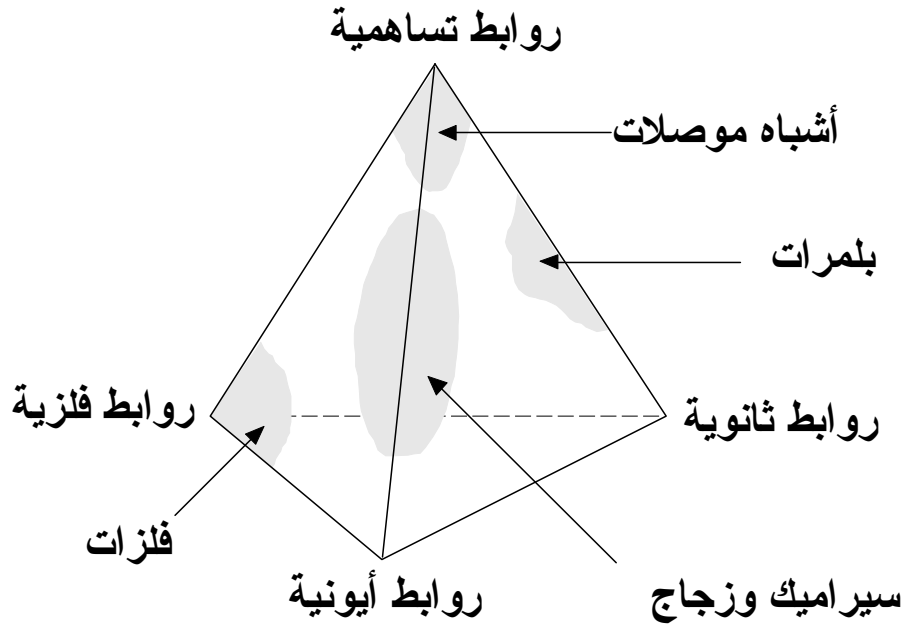
بين ذرتي الهيدروجين والأكسجين المتصلين برابطة تساهمية فإن الإلكترونات المساهمة في الرابطة تقضى وقتاً أكبر نسبياً حول نواة الذرة الأكثر سالبية كهربية (الأكسجين في هذه الحالة)، الأمر الذي معه تظهر على هذه الذرة شحنة سالبة جزئياً وتظهر على الذرة الأخرى شحنة موجبة جزئياً (الهيدروجين). نتيجة ظهور هذه الشحنات ينشأ تجاذب بين ذرات الأكسجين و ذرات الهيدروجين وتتكون الرابطة. في هذه الرابطة تقوم ذرات الهيدروجين بعمل قنطرة مع ذرة الأكسجين ولذلك تسمى هذه الرابطة، بالرابطة الهيدروجينية. ويمكن القول أن الرابطة الهيدروجينية هي رابطة ثانوية تتكون بين ثنائيات القطب الكهربى لجزيئات الماء المتجاورة. يوضح الشكل 1-18 مخطط لهذه الرابطة الهيدروجينية في جزيئات الماء.



الشكل 1-18 الرابطة الهيدروجينية في جزيئات الماء.

يلخص الشكل 1-19 مخطط الطور لأنواع الروابط المختلفة في المواد الصلبة،

كما يتضمن الجدول 1-4 بعض الخصائص الفيزيائية مثل طاقة الربط ودرجة حرارة الانصهار لبعض المركبات المختلفة.



الشكل 1-19 مخطط الطور لأنواع الروابط المختلفة في المواد الصلبة.

الجدول 1-4 بعض الخصائص الفيزيائية مثل طاقة الربط ودرجة حرارة الانصهار للمركبات.

درجة الانصهار	طاقة الربط			
	eV/atom	KJ/mol	المركب	نوع الربط
801	3.3	640	NaCl	أيونية
2800	5.2	1000	MgO	
1410	4.7	450	Si	تساهمية
>3550	7.4	713	C (الماس)	
-39	0.7	68	Hg	
660	3.4	324	Al	فلزية
1538	4.2	406	Fe	
3410	8.8	849	W	
-189	0.08	7.7	Ar	فان در فال
-101	0.32	31	Cl ₂	
-78	0.36	35	NH ₃	
0	0.52	51	H ₂ O	هيدروجينية

NUCLEATION AND GROWTH KINETIC

1-6 حركية التئوى والإنماء البلورى

تبدأ عملية تكون البلورة بما يسمى بالنواة وهى عبارة عن مجموعة من الذرات أو الجزيئات لها تركيب ذرى منتظم (بلورة دقيقة). تعتبر نواة البلورة بمثابة البذرة التي يتم إنمائها بالشكل المناسب حتى تصبح بلورة كبيرة تصلح لأجراء التجارب المعملية. وتعتمد حركية التئوى (تكون النويات) والإنماء البلورى على العديد من العوامل مثل: شكل النويات من حيث التجانس، نصف قطر النويات ومعدل التئوى، بيئة التئوى (من مصهور أو من البخار)، ميكانيكية الإنماء ومعدل التحول الطورى (من حالة إلى أخرى). في هذا الفصل سوف نتحدث بشئ من التفصيل عن بعض هذه العوامل.

عند تبريد السائل (المصهور) إلى درجة حرارة أسفل درجة حرارة الانصهار فإنه توجد قوة تدفع السائل إلى التجمد. يمكن التعبير عن التغير في الطاقة الحرة للنظام بدلالة الطاقة الحرة لجيبس (Gibbs free energy) لكل من الطور السائل والطور الصلب على النحو الآتي.

$$\Delta G_V = G_V^L - G_V^S \quad 8-1$$

حيث G_V^L و G_V^S هما الطاقة الحرة لوحدة الحجم من النظام لكل من الطور السائل والطور الصلب على الترتيب. عند درجة الحرارة T^* فإن

$$G_V^L = H_V^L - T^* S_V^L \quad \& \quad G_V^S = H_V^S - T^* S_V^S \quad 9-1$$

حيث H_V و S_V هما المحتوى الحراري (الانثالبى enthalpy) والأنثروبيا (أو الفوضى entropy) لوحدة الحجم على نحو الترتيب. بالتعويض بالمعادلة 9-1 في المعادلة 8-1 نحصل على مقدار التغير في الطاقة الحرة للنظام على الصورة،

$$\Delta G_V = H_V - T^* S_V \quad 10-1$$

وعند درجة حرارة التحول (من سائل إلى صلب أو العكس)، T_m ، وعند الاتزان الديناميكي فإن التغير في الطاقة الحرة للطور السائل يساوى التغير في الطاقة للطور الصلب، أي أن التغير الكلى في الطاقة الحرة يساوى صفراً، وتصبح المعادلة 10-1 على الصورة،

$$\Delta G_V = H_V^m - T_m S_V^m = 0،$$

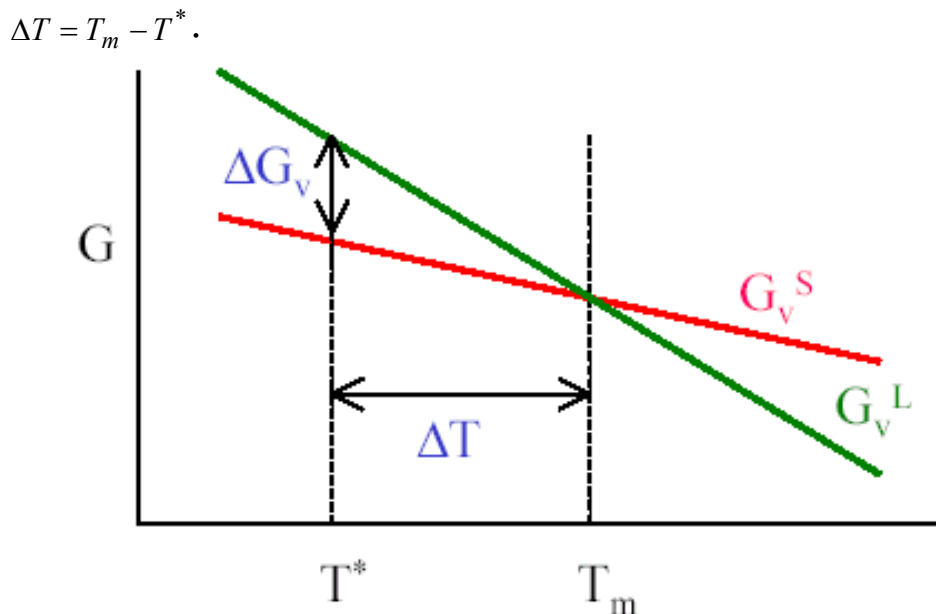
ومنها نحصل على،

$$\Delta S_V^m = \frac{\Delta H_V^m}{T_m} . \quad 11-1$$

يبين الشكل 20-1 اعتماد الطاقة الحرة على درجة حرارة النظام. عند التغير الطفيف في درجة الحرارة، ΔT ، يمكن افتراض أن كل من ΔH_V و ΔS_V لا تعتمد على درجة الحرارة (وذلك بإهمال الفرق في الحرارة النوعية C_p بين السائل والصلب). يمكن الحصول على التغير في الطاقة الحرة نتيجة التغير في كل من H و S واستخدام المعادلة 11-1 على الصورة،

$$\Delta G_V \approx \Delta H_V^m - T^* \Delta S_V^m = \Delta H_V^m - T^* \frac{\Delta H_V^m}{T_m} = \frac{\Delta H_V^m \Delta T}{T_m} , \quad 12-1$$

حيث



الشكل 1-20 اعتماد الطاقة الحرة على درجة حرارة النظام

يتضح من هذه المعادلة أنه عند أي درجة حرارة أقل من T_m فإنه توجد قوة تدفع

السائل إلى التجمد. بالرغم من ذلك فإن السائل عادة لا يتجمد عند الدرجة T_m . إذا تم

إضافة أو سحب طاقة من النظام بمعدل سريع فإن النظام يمكن أن يبرد بشكل فائق

(مفاجئ) (supercooled). للإجابة على تساؤل لماذا يحدث هذا، يجب أخذ حركية التحول

الطوري في الاعتبار، كما سنبين فيما يلي.

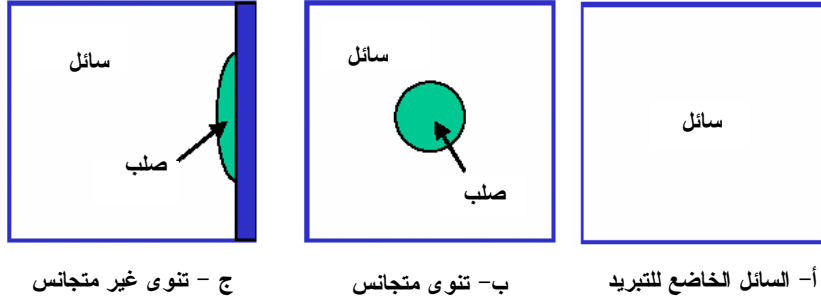
يحتاج التحول من الطور السائل إلى الطور الصلب إلى عمليتين أساسيتين هما:

أولاً، عملية تنوى لطور جديد (الطور الصلب)، ثانياً، عملية تنمية هذا الطور. يمكن أن

تكون عملية التنوى غير متجانسة (حيث يظهر الطور الجديد على الجدار الداخلي للإناء

الذي يحوى المصهور نتيجة وجود جسيمات شائبة)، كما يمكن أن تكون متجانسة (حيث

تظهر النويات الصلبة تلقائياً خلال الطور الخاضع للتبريد)، كما هو موضح في الشكل 1-



الشكل 21-1 حالات التنوى المتجانس وغير المتجانس.

1-6-1 التنوى المتجانس HOMOGENOUS NUCLEATION

يمكن التعبير عن الطاقة الحرة للنظام السائل الذي يحتوى على عناقيد (تجمعات) كروية صغيرة من الصلب بالعلاقة الآتية.

$$G_2 = V_S G_V^S + V_L G_V^L + A^{SL} \gamma^{SL} \quad 13-1$$

حيث V_S هو حجم الكرة الصلبة و V_L هو حجم السائل و A^{SL} هي مساحة السطح الجانبية بين الصلب والسائل و G_V^L و G_V^S هما الطاقة الحرة لوحدة الحجم للصلب والسائل على الترتيب و γ^{SL} هي طاقة السطح الجانبية بين الصلب والسائل، كما فى الشكل 21-1 (ب). عند نفس درجة الحرارة إذا كان لدينا سائل مبرد تبريد فائق ولا يحتوى على أي أنوية صلبة (الشكل 21-1 (أ)) فإن الطاقة الحرة للنظام ستكون على الصورة،

$$G_1 = -(V_S + V_L) G_V^L. \quad 14-1$$

ويؤدى تكون النواة الصلبة إلى تغير في الطاقة الحرة بمقدار،

$$\Delta G_2 = G_2 - G_1 = -V_S (G_V^L - G_V^S) + A^{SL} \gamma^{SL}. \quad 15-1$$

يكون الحد الثاني في هذه المعادلة دائماً موجبا، بينما يكون الحد الأول سالبا فقط عند

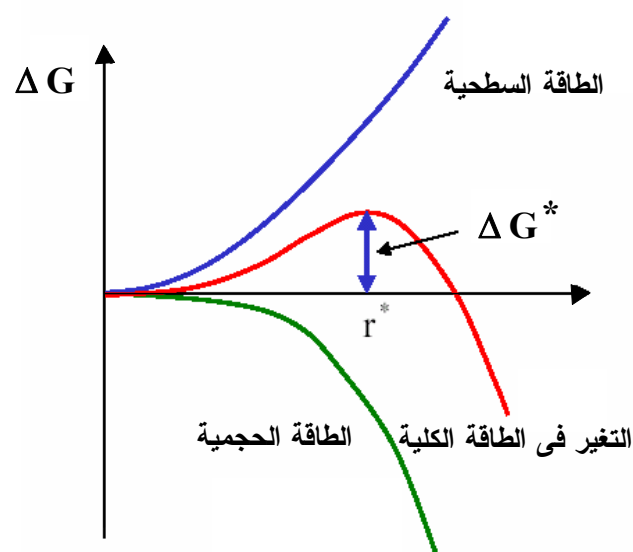
درجات الحرارة الأقل من T_m ، حيث

$$G_V^L - G_V^S = \Delta G_V = \frac{\Delta H_V^m \Delta T}{T_m} . \quad 16-1$$

بفرض أن النواة كروية ولها نصف القطر r ، فإن التغير الكلى في الطاقة الحرة هو مجموع التناقص في الطاقة الحجمية الحرة والتزايد في الطاقة السطحية للنواة ويكون على الصورة الآتية،

$$\Delta G_r = -\Delta V_S \Delta G_V + A^{SL} \gamma^{SL} = -\frac{4}{3} \pi r^3 \Delta G_V + 4 \pi r^2 \gamma^{SL} . \quad 17-1$$

يبين الشكل 22-1 التغير في الطاقة الحرة للنظام على نصف قطر النواة. من المعادلة السابقة يتبين أنه بالنسبة للنواة ذات نصف قطر أكبر من نصف القطر الحرج (r^*)، فإن الطاقة الحرة الكلية للنظام تتناقص مع نمو النواة، كما يبين الشكل 22-1. يحدث التئوى المتجانس عندما تتجمع الذرات تلقائياً وتكون نواة ذات حجم مساوياً أو أكبر من الحجم الحرج (r^*)، حيث أن التغير الكلى في الطاقة الحرة يتناقص مع نمو البلورة ويستمر الإنماء حتى نهاية التجمد.



الشكل 22-1 اعتماد التغير في الطاقة الحرة للنظام على نصف قطر النواة.

من المعادلة السابقة (17-1)، عند نصف القطر الحرج، $r = r^*$ ، نحصل على

$$\frac{d\Delta G_r}{dr} = -4\pi r^2 \Delta G_v + 8\pi r \gamma^{SL} = 0$$

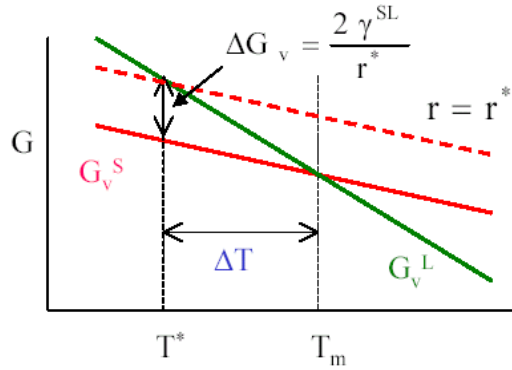
$$\therefore r^* = \frac{2\gamma^{SL}}{\Delta G_v} \quad \& \quad \Delta G^* = \frac{16\pi(\gamma^{SL})^3}{3(\Delta G_v)^2} \quad 18-1$$

وحيث أن $\Delta G_v = \frac{\Delta H_v^m \Delta T}{T_m}$ (من المعادلة 16-1)، فإن

$$\therefore r^* = \left(\frac{2\gamma^{SL} T_m}{\Delta H_v^m} \right) \frac{1}{\Delta T} \quad \text{و} \quad \Delta G^* = \left(\frac{16\pi(\gamma^{SL})^3 T_m^2}{3(\Delta G_v)^2} \right) \frac{1}{(\Delta T)^2} \quad 19-1$$

من هذه المعادلة، نلاحظ أن كل من r^* و G^* تتناقصان مع زيادة التبريد، كما هو مبين

بالشكل 23-1.



الشكل 23-1 اعتماد الطاقة الحرة للنظام على درجة الحرارة.

يعتمد معدل التئوى المتجانس بشدة على معدل تبريد السائل، كما سوف نبين الآن.

توجد قيمة حرجة للطاقة الحرة تسمى حاجز الطاقة (G^*) وذلك عند تكون نواة صلبة ذات

الحجم الحرج، r^* . يعتمد معدل التئوى المتجانس (I^{hom}) على احتمال التموج في طاقة

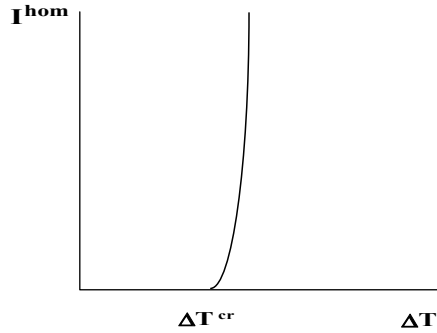
الحجم الحرج (G^*) ويعطى بعلاقة أرهينيوس (Arrhenius) التالية.

$$I^{\text{hom}} = I_o \exp\left(-\frac{\Delta G^*}{kT}\right), \quad 20-1$$

حيث يقاس معدل التتوى بوحدات نواة لكل متر مكعب لكل ثانية. بالتعويض عن ΔG^* من المعادلة 19-1 في المعادلة 20-1 نحصل على معدل التتوى المتجانس على الصورة،

$$I^{\text{hom}} = I_o \exp\left(-\frac{A}{(\Delta T)^2}\right). \quad 21-1$$

يتضح من هذه المعادلة أن معدل التتوى المتجانس يعتمد بشدة على درجة الحرارة بالرغم من الاعتماد الضعيف للمساحة الجانبية A على درجة الحرارة (مقارنة مع ΔT^2). وهكذا، يوجد معدل تبريد حرج، ΔT^{cr} ، لعملية التتوى المتجانس، حيث لا يحدث تتوى عمليا قبل الوصول إلى معدل التبريد هذا، بمعنى أنه توجد عملية تتوى متفجرة عند الوصول إلى معدل التبريد الحرج، ΔT^{cr} ، كما يوضح الشكل 24-1.

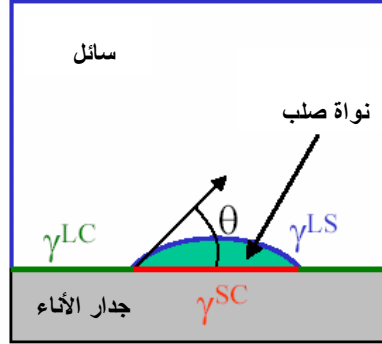


الشكل 24-1 اعتماد معدل التتوى المتجانس على معدل تبريد السائل.

1-6-2 التتوى متعدد التجانس HETEROGENEOUS NUCLEATION

لفهم عملية التتوى المتعدد التجانس والعوامل التي تعتمد عليها، سوف نعتبر مثالا بسيطا وهو تكون نواة على جدار الإناء الذي يحتوى السائل لها شكل طاقة كروية. توجد في هذه الحالة ثلاثة أنواع من الطاقة السطحية هي: γ^{LC} ، γ^{LS} و γ^{SC} وتمثل طاقة السطح

بين السائل والإناء، طاقة السطح بين السائل والصلب و طاقة السطح بين الصلب والإناء
على الترتيب، كما يوضح الشكل 1-25.



الشكل 1-25 قوى الأسطح البينية في التئوى المتعدد التجانس.

من ائزان قوى الشد (التوتر) السطحي في مستوى جدار الإناء نحصل على،

$$\gamma^{LC} = \gamma^{SC} + \gamma^{LS} \cos(\theta), \quad 22-1$$

حيث θ هي زاوية البلل (التلامس) ويمكن التعبير عنها على الصورة الآتية،

$$\cos(\theta) = \frac{\gamma^{LC} - \gamma^{SC}}{\gamma^{LS}}. \quad 23-1$$

يؤدى تكون النواة إلى تغير في الطاقة الحرة للنظام يعطى بالمعادلة الآتية،

$$\Delta G = -V_s \Delta G_v + A^{SL} \gamma^{SL} + A^{SC} \gamma^{SC} - A^{SC} \gamma^{LC}, \quad 24-1$$

حيث :

$$\begin{aligned} V_s &= \pi r^3 (2 + \cos(\theta))(1 - \cos(\theta))^{2/3} & \& \\ A^{SL} &= 2\pi r^2 (1 - \cos(\theta)) & \& \quad A^{SC} = \pi r^2 \sin^2(\theta) \end{aligned} \quad 25-1$$

الآن يمكن كتابة التغير في الطاقة الحرة للتئوى متعددة التجانس كدالة في نصف

قطر النواة على الصورة ،

$$\Delta G_r^{\text{het}} = \left\{ -\frac{3}{4} \pi r^3 \Delta G_v + 4\pi r^2 \gamma^{SL} \right\} S(\theta) = \Delta G_r^{\text{hom}} S(\theta), \quad 26-1$$

حيث ΔG_r^{hom} التغير في الطاقة الحرة للنظام للتوى المتجانس و $S(\theta)$ مقدار يعتمد على زاوية البلل ويعطى بالعلاقة،

$$S(\theta) = (2 + \cos\theta)(1 - \cos^2\theta)/4. \quad 27-1$$

عند نصف القطر الحرج ($r = r^*$) يكون التغير في الطاقة الحرة قيمة عظمى وبالتالي من المعادلة 26-1 نحصل على ،

$$\frac{d\Delta G_r}{dr} = (-\pi r^2 \Delta G_v + 8\pi r \gamma^{SL}) S(\theta) = 0.$$

ويكون

$$\therefore r^* = \frac{2\gamma^{SL}}{\Delta G_v} \quad \& \quad \Delta G_{het}^* = S(\theta) \frac{16\pi(\gamma^{SL})^3}{(\Delta G_v)^2} = S(\theta) \Delta G_{hom}^*.$$

ويمكن كتابة المعادلة السابقة على الصورة،

$$\therefore r^* = \frac{2\gamma^{SL}}{\Delta G_v} \quad \& \quad \Delta G_{het}^* = S(\theta) \Delta G_{hom}^*. \quad 28-1$$

يبين الشكل 26-1 اعتماد التغير في الطاقة الحرة الحرجة على التغير في درجة الحرارة (التبريد) و يشير الخط الصلب الأفقي إلى قيمة التغير في الطاقة الحرة التي يبدأ عندها عملية التتوى نشطة. من الشكل يتبين أيضا، وجود معدلات تبريد مختلفة لكل من التتوى المتجانس والمتعدد التجانس.

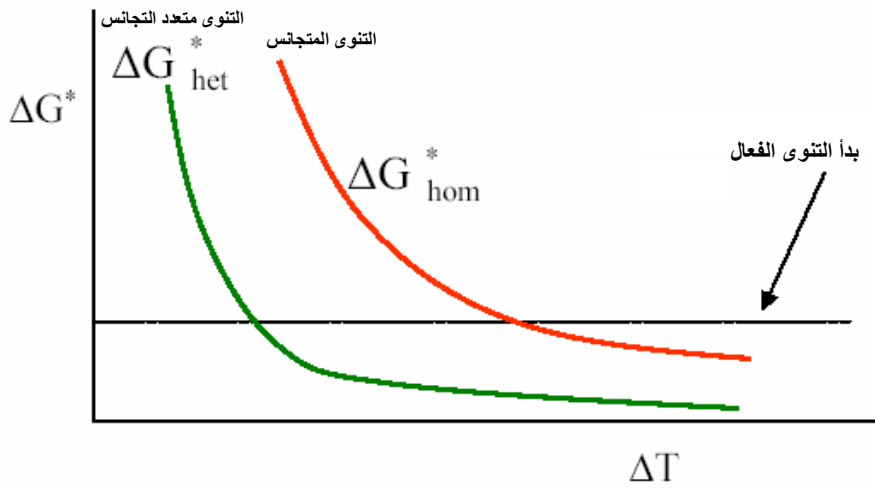
من المعادلة 27-1 وبفرض أن زاوية البلل تساوى 10° نجد أن المقدار $S(\theta) \approx 10^{-4}$ ويبين الشكل 27-1 اعتماد التغير في الطاقة الحرة للنظام نتيجة عملية التتوى على نصف قطر النواة ومنه يتضح أن التغير الحرج للطاقة الحرة للتتوى المتجانس اكبر

منه في حالة التئوى متعدد التجانس. وكما فعلنا في حالة التئوى المتجانس (المعادلة 1-

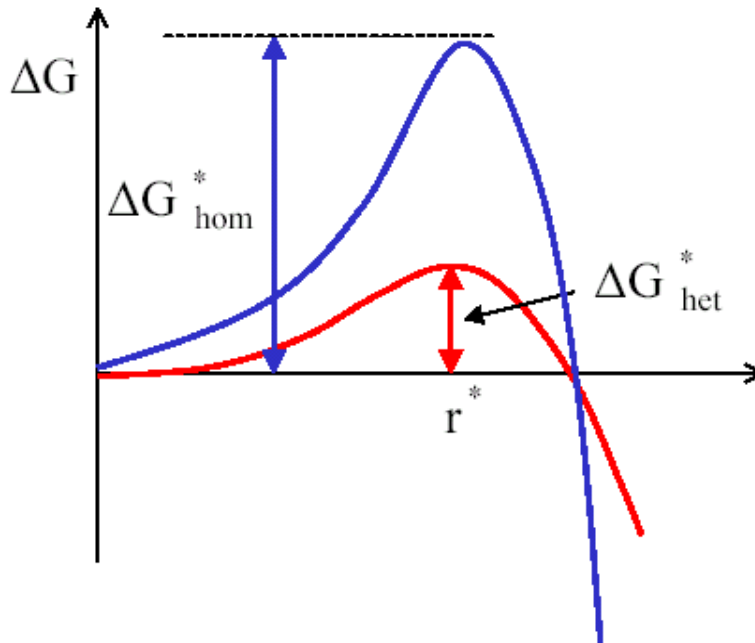
20)، يمكن الحصول على العلاقة الرياضية التي تصف معدل التئوى متعدد التجانس

وتكون على الصورة

$$I^{\text{hom}} = I_o \exp\left(-\frac{\Delta G_{\text{hom}}^*}{kT}\right) \& \quad I^{\text{het}} = I_o \exp\left(-\frac{\Delta G_{\text{het}}^*}{kT}\right). \quad 29-1$$



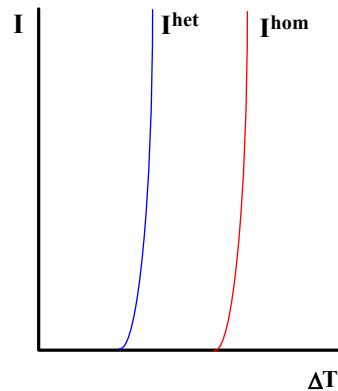
الشكل 1-26 اعتماد التغير في الطاقة الحرة للتئوى على تبريد السائل.



الشكل 1-27 اعتماد التغير في الطاقة الحرة للنظام على نصف قطر النواة.

يبين الشكل 1-28 اعتماد معدل التتوى المتجانس ومتعدد التجانس على تبريد

السائل.



الشكل 1-28 اعتماد معدل التتوى المتجانس ومتعدد التجانس على تبريد السائل.

1-6-3 الإنماء و معدل التحول الطوري

GROWTH AND THE RATE OF A PHASE TRANSFORMATION

تكون الخطوة التالية لعملية التتوى هي عملية الإنماء. وتكون عبارة عن عملية نمو

الطور الجديد والتي تكون محكومة بالانتشار والذي يصبح أكثر نشاطا مع زيادة درجة

الحرارة، طبقا للمعادلة،

$$D = D_o \exp\left(-\frac{E_d}{RT}\right). \quad 1-30$$

يكون المعدل الكلى للتحول الطوري عبارة عن حاصل ضرب معدل التتوى (حيث

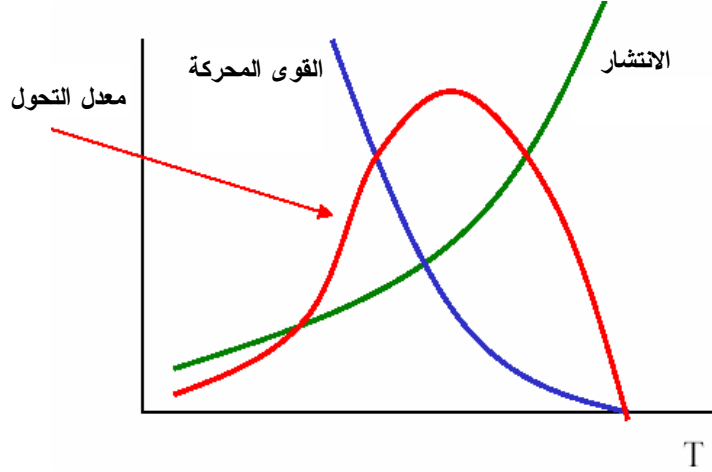
تزداد القوى المحركة ومع التبريد، بينما يقل الانتشار المطلوب لترتيب الذرات مع

انخفاض درجة الحرارة) ومعدل الإنماء (المحكوم بالانتشار)، كما يوضح الشكل 1-29.

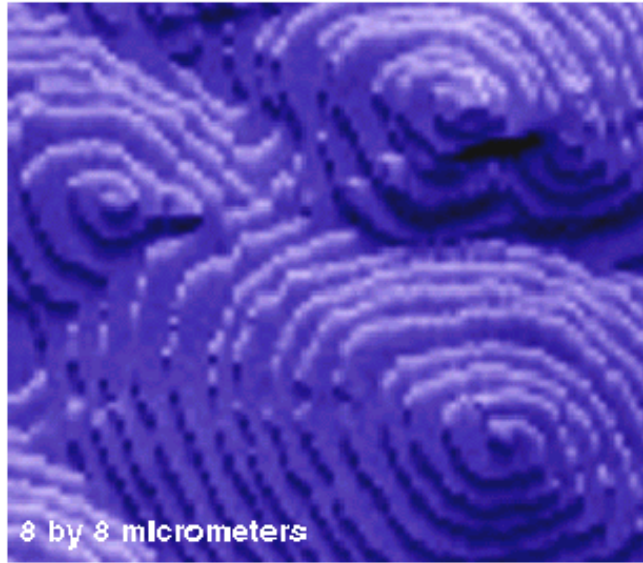
يعجل السطح الناعم الموجود بين الصلب والسائل النمو جانبي (سطحي) لعروق

صلبة. يمكن أن تنتج العروق من التتوى السطحي أو من الانخلاعات التي تتقاطع مع

السطح البيني. يبين الشكل 1-30 نمو حلزوني متكون على انخلاعات فى بلورة فوسفات البوتاسيوم ثنائي الهيدروجين.



الشكل 1-29 اعتماد كل من معدل التحول، القوى المحركة ومعدل الانتشار على درجة الحرارة.



الشكل 1-30 نمو حلزوني على إنخلاعات فى بلورة فوسفات البوتاسيوم ثنائي الهيدروجين.

مثال 1-1

احسب الحجم اللازم للنواة لكي يستمر النحاس السائل فى التجمد، مستعينا

بالمعلومات الآتية: درجة انصهار النحاس هي $T_m = 1083^\circ C = 1083 + 273 = 1358^\circ K$

الطاقة السطحية هي $\sigma = 177 \times 10^{-3} \text{ joule/m}^2$ والحرارة الكامنة (طاقة التحول الطوري) هي

$$\Delta H = 1628 \times 10^6 \text{ joule/m}^3$$

الحل

عند تجمد معظم السبائك قد يكون المعدن في الحالة السائلة عند درجة حرارة أقل

من درجة التجمد T_m ويعرف الفرق بين درجة الحرارة ودرجة التجمد بالتبريد الفائق، أي

أن

$$\Delta T = T_m - T$$

للعديد من السبائك المعدنية قد وجد أن التبريد الفائق هو

$$\Delta T = 0.2 T_m$$

$$\therefore \Delta T = 0.2 T_m = 0.2 \times 1358 = 272 \text{ }^\circ\text{K}.$$

ويكون نصف القطر الحرج للنواة هو

$$r^* = \frac{2\sigma T_m}{\Delta H \Delta T}$$

$$\therefore r^* = \frac{2(177 \times 10^{-3})(1358)}{1628 \times 10^6 (272)} = 10.85 \times 10^{-10} \text{ m}.$$

وبالتالي يكون حجم النواة هو

$$V^* = \frac{4}{3} \pi r^3 = \frac{4 \times 3.14 \times (10.85 \times 10^{-10} \text{ m})^3}{3} = 5.35 \times 10^{-27} \text{ m}^3.$$

7-1 الطرق المعملية للإتماء البلوري EXPERIMENTAL METHODS OF CRYSTAL

GROWTH

نعلم أن الذرات أو الجزيئات أو المجموعات الجزيئية في مصهور الفلز تكون موزعة بشكل عشوائي نظراً للحركة المستمرة للذرات، كما في الحالة السائلة. عند تبريد المصهور تقل حركة الذرات ويستمر ذلك مع استمرار التبريد. عند نقطة تجمد المصهور يبدأ ظهور الطور المتجمد من المادة موزعاً في الطور السائل وينمو هذا الطور المتجمد مع استمرار التبريد. يكون الصلب الناتج مادة غير متبلورة عندما يكون معدل التبريد عالياً، بينما يمكن الحصول على صلب متبلور عند جعل معدل التبريد صغيراً. وحيث أن عملية التبلور هي العملية التي ترتب فيها الذرات أو الجزيئات أو المجموعات الجزيئية نفسها في شكل متكرر، فإن معدل التبريد الصغير يعطى الفرصة للذرات للبحث عن الموضع أو المكان الذي تكون فيه أكثر استقراراً. تبدأ عملية التبلور بظهور نويات بلورية (ذات ترتيب منتظم) تأخذ في النمو بشكل متشعب مكونة حبيبات (dendrite) (وهي عبارة عن الطور المتجمد) وتستمر الحبيبات في النمو حتى تتلامس كل حبيبة مع حبيبة أخرى ويعم الطور الصلب كل المادة. يعتمد حجم الحبيبة المتكونة على عدد أنوية البلورات (البذور)، فكلما كانت عدد الانوية كبير كانت الحبيبات ذات حجم صغير والعكس صحيح. يكون تركيب الصلب عبارة عن أطوار متعددة التركيب البلوري والتي هي عبارة عن الحبيبات المتكونة (كما يبين الشكل 1-31).

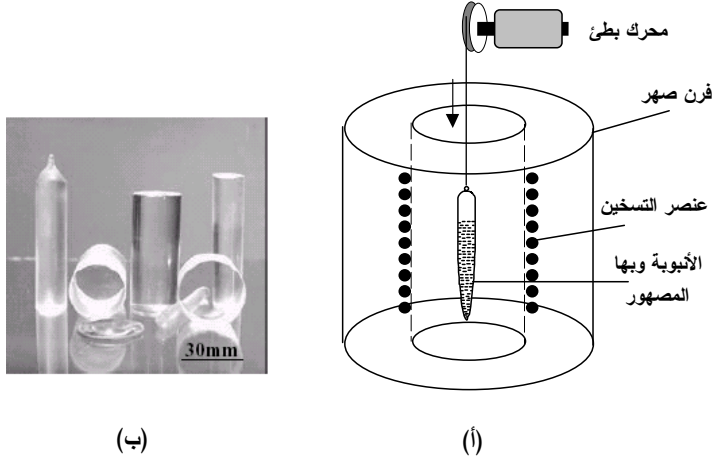


الشكل 1-31 جزئ أكسيد الألومنيوم المتكون بواسطة إعادة الانصهار يبين نمو متشعب.

في مصهور الفلزات، تختلف الحبيبات بعضها عن بعض في التوجيه البلوري. ولكي تصلح المادة لفحوصات الأشعة السينية يجب أن تكون المادة متبلورة، كما يجب أن تكون أبعاد البلورات كبيرة (تتراوح من 0.1 إلى 0.5 مم)، ويفضل أن تكون على شكل بلورة أحادية و قريبة من الشكل الكروي. لذلك يجب معالجة المادة المتعددة التبلور معالجة حرارية لزيادة درجة تبلورها وتنقيتها من الشوائب الغريبة. يوجد العديد من الأساليب المستخدمة لتنمية البلورات والتي بواسطتها يمكن الحصول على مثل هذه البلورة، ومعظمها يعتمد على تنمية بذرة البلورة من المصهور أو إعادة صهر المادة المتعددة التبلور ثم تبريدها ببطء. يبين الشكل 1-31 نمو متشعب (dendrite) لبلورة أكسيد الألومنيوم بواسطة إعادة الصهر.

1-7-1 طريقة بريدجمان BRIDGMAN METHOD

تتلخص طريقة بريدجمان في أنه توضع المادة في أنبوبة من زجاج كوارتز ذات نهاية مخروطية مغلقة ومفرغة من الهواء أو في وجود غاز معين يوضع قبل الإغلاق. توضع الأنبوبة معلقة رأسياً في فرن رأسي مفتوح الطرفين، كما هو موضح بالشكل 1-32.



الشكل 1-32 طريقة بريدجمان لتنمية البلورات.

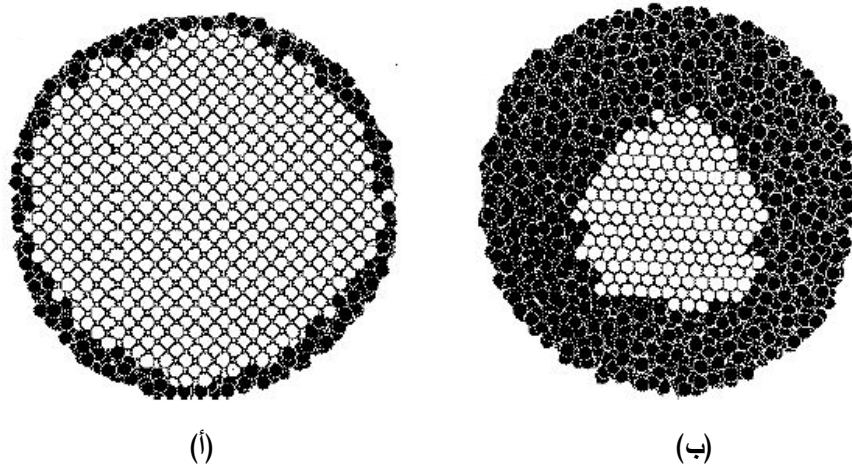
يفضل استخدام الكوارتز كوعاء لأن درجة حرارة انصهاره عالية بالإضافة إلى عدم تفاعله مع المصهور. بعد صهر المادة يتم إنزال الأنبوبة ببطء شديد (0.5 سم في ساعة) وبذلك فإن الجزء المخروطي من المصهور يصل أولاً إلى نهاية المنطقة المرتفعة الحرارة ويبرد أولاً وتتكون عنده بلورة صغيرة تعتبر بمثابة نواة تبلور (بذرة) والتي تنمو مع استمرار نزول الأنبوبة حتى يتحول كل المصهور. بعد وصول درجة حرارة الأنبوبة ومكوناتها إلى درجة حرارة الغرفة يتم كسر الأنبوبة الزجاجية برفق وإخراج البلورة المتكونة. يبين الشكل 1-32(ب) بلورات فلوريد الكالسيوم متكونة بهذه الطريقة.

2-7-1 طريقة التنمية من المصهور GROWING FROM THE MELT

بالنسبة للأسطح البينية سطح/سائل/بخار تكون القوى السطحية $\gamma^{LV} < \gamma^{SL} < \gamma^{SV}$ وبالتالي لا توجد حاجة للتبريد الفائق لحدوث التنوى فى السائل عند سطح المصهور لأنه موجودا عند درجة حرارة أسفل T_m . تبدأ عملية التنوى عند الأسطح الحرة. يبين الشكل

33-1 محاكاة عملية صهر عناقيد ذرية صغيرة حيث يبين مقطع يمر خلال مركز

العنقود.



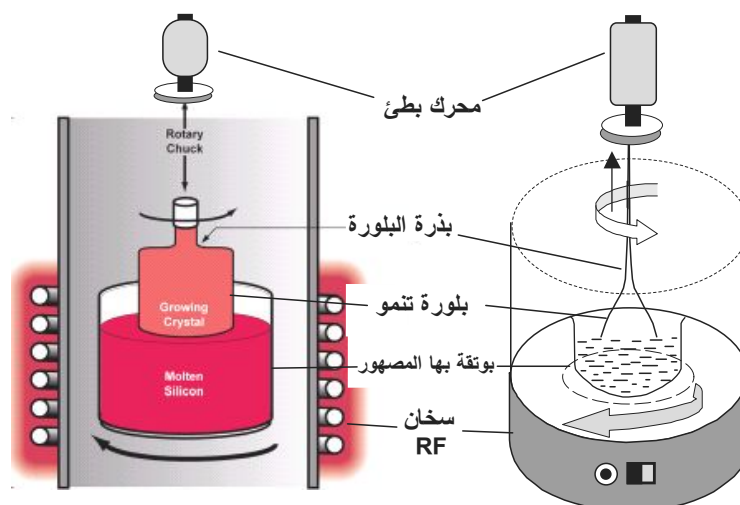
الشكل 33-1 محاكاة عملية صهر عناقيد ذرية صغيرة. يبين الشكل (أ) بداية الصهر و الشكل (ب) مقطع يمر خلال مركز العنقود

تستخدم طريقة زوخرالسكى (Zochralski) للإنماء البلوري والمفهوم السابق

وتعتمد على إنزال بلورة صغيرة (بذرة) يراد تنميتها لتلامس طرف مصهور موضوع

داخل وعاء موضوع في فرن صهر (سخان تردد راديوى RF)، كما هو موضح بالشكل

34-1.



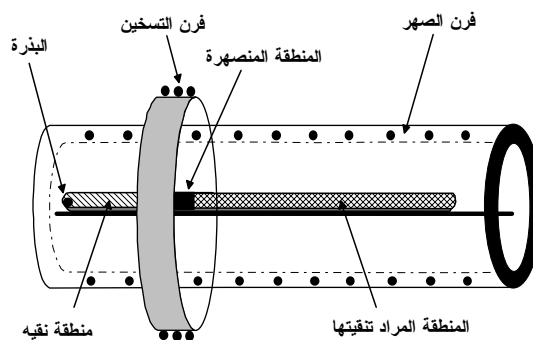
الشكل 34-1 طريقة زوخرالسكى لتنمية البلورات.

يراعى في هذه الطريقة ألا تكون درجة حرارة المصهور أعلى من اللازم. يتم تدوير البلورة حول نفسها وسحبها إلى أعلى ببطء شديدين. تعتمد فكرة هذه الطريقة على إضافة جزيئات إلى سطح مشابه في التركيب الكيميائي. يؤدي السحب والتدوير إلى تجمع ذرات المادة على البذرة وتنميتها إلى الحجم المطلوب ونحصل في النهاية على بلورة أحادية كبيرة.

3-7-1 طريقة الصهر النطاقي ZONE MELTING METHOD

تستخدم هذه الطريقة لتحضير البلورات من مادة متعددة التبلور. تتميز هذه الطريقة بأنه بواسطتها يمكن التحكم في نسبة الشوائب في البلورة. في هذه الطريقة توضع العينة في وعاء طويل على شكل قارب أو أنبوبة أفقية في فرن صهر، كما هو مبين بالشكل 1-35. وبواسطة فرن آخر ذات أبعاد صغيرة (فرن تسخين) يتحرك أفقياً حول الأنبوبة يمكن تسخين جزء صغير (نطاق) من العينة إلى درجة حرارة أعلى من درجة حرارة الانصهار. توضع بذرة البلورة عند أحد طرفي الوعاء وتوضع في الفرن الكبير عند درجة حرارة أقل من درجة الانصهار بقليل ثم يضبط فرن التسخين عند درجة حرارة أعلى من درجة الانصهار ويتم تحريك فرن التسخين على طول الوعاء ببطء شديد مبتعدين عن البذرة (المنطقة التي انصهرت). بهذه الطريقة فإن منطقة صغيرة سوف تتصهر وتتجمد المنطقة السابقة ببطء. يؤدي هذا الأسلوب إلى نمو البلورة في المنطقة التي تبرد وتستمر حركة الفرن إلى نهاية الأنبوبة. وحيث أن للشوائب قابلية أكبر للانتقال

من المادة الصلبة إلى المادة السائلة نجد أن تركيز الشوائب في المنطقة التي تبرد تكون أقل منه في المنطقة المنصهرة، أي أن الشوائب سوف تتحرك مع فرن التسخين بعيدا عن البذرة إلى النهاية الطرفية للوعاء (بعيدا عن البذرة).



الشكل 1-35 طريقة الصهر النطاقي.

للحصول على بلورة ذات درجة نقاء أكبر يمكن تكرار العملية السابقة عند درجة حرارة أعلى بقليل لدرجة التبلور فيحرك ما تبقى من الشوائب مع فرن التسخين الصغير إلى نهاية الوعاء وتكون البلورة الناتجة أعلى نقاء. بعد الانتهاء وتبريد البلورة يمكن التخلص من الجزء الذي يحتوي على الشوائب بالقطع والحصول على بلورة أحادية من المادة.

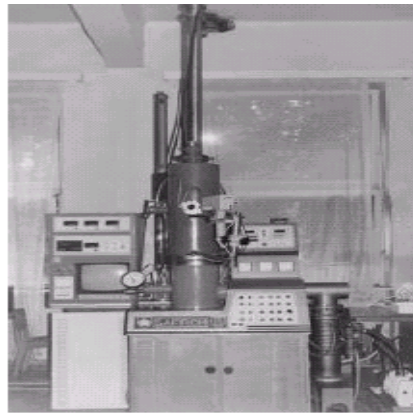
4-7-1 طريقة نمو الغشاء المحدد الحدود بواسطة تغذية EFG METHOD

هي طريقة تم تصميمها بواسطة نيكوارا (Nicoara) عام 1987 للحصول على بلورات ياقوت ذات أشكال محددة. تتلخص هذه الطريقة في أنه يتم تنمية البلورة بواسطة تغذية غشاء محدد الحدود (Edge-defined Film-fed Growth, EFG). في هذه الطريقة يتم استخدام سخان جرافيت محدد الشكل في جو مفرغ وهي طريقة تختلف بشكل جوهري

عن طريقة بريدجمان. بواسطة طريقة بريدجمان يتم الحصول على كتل بلورية تقطع فيما بعد إلى الحجم المطلوب، بينما في طريقة EFG يمكن الحصول على بلورات ذات الأشكال الداخلية والخارجية المطلوبة (باستخدام قوالب لها شكل محدد). يبين الشكل 1-36 الجهاز المستخدم وبعض أشكال بلورات الياقوت المتكونة بهذه الطريقة. في هذه الطريقة، يملأ قالب مصنوع من مادة معينة بالمصهور وذلك بواسطة الخاصية الشعرية خلال فتحة ضيقة جدا في القالب وتكوين سطح سائل مقعر (على شكل غشاء) أعلى القالب. يتم وضع بذرة البلورة لتلامس سطح السائل وتكون على اتصال مع القالب. عند جذب البذرة إلى أعلى فإن البلورة تبدأ في التكون على البذرة. يدفع الضغط الشعري (الرفيع) عمود المصهور إلى أعلى ليغذى نمو البلورة. يتحدد شكل البلورة الناتجة بالحدود العلوية للقالب ومن هنا جاءت تسمية هذه الطريقة. تم تعديل هذه التقنية، لاحقا، بتطبيق مجال مغناطيسي يتحكم في معدل تدفق المصهور والتحكم في معدل الإنماء.



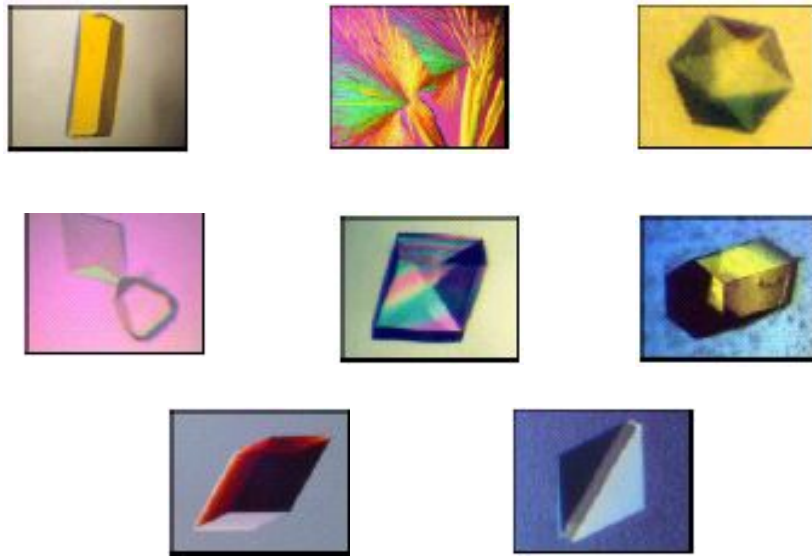
(ب)



(أ)

الشكل 1-36 (أ) الجهاز المستخدم، (ب) قطاع مستعرض بسماكة 1.5 مم لبلورات ياقوت مشكلة.

بالإضافة إلى الطرق السابقة توجد طرق كثيرة أخرى للحصول على بلورات ذات حجم وجودة مناسبين تصلح لتجارب حيود الأشعة السينية. وتتضمن هذه الطرق أساليب التسامي، الحمل والتبريد المنضبط لمصهور الصلب وطرق أخرى تعتمد على إذابة مادة في مادة أخرى. يبين الشكل 1-37 بعض الصور لبلورات متنوعة للعرض فقط وللاطلاع على الجمال الذي يكتنف التركيب البلوري.



الشكل 1-37 صور لبعض البلورات المتنوعة.

ملخص الباب

✕ تقسم المواد الصلبة على قسمين رئيسيين وهما المواد الصلبة المتبلورة والمواد الصلبة غير المتبلورة.

يعرف العدد الذري (Z) بأنه عدد البروتونات أو عدد الإلكترونات في الذرة

المتعادلة كهربيا. كما يعرف الوزن الذري (A) بأنه مجموع عدد البروتونات والنيوترونات في الذرة.

تعرف وحدة الكتلة الذرية بأنها تساوي $\frac{1}{12}$ من الوزن الذري للكربون 12.

✕ يعرف المول بأنه كمية من المادة لها كتلة بالجرامات تساوي الوزن الذري للمادة.

✕ يمكن حساب عدد ذرات العنصر لكل سم³ بمعرفة كثافة العنصر والوزن الذري له.

✕ يمكن وصف الأغلفة الذرية بواسطة مجموعة من الأعداد الكمية هي : العدد الكمي الأساسي، العدد الكمي المداري، العدد الكمي المغناطيسي، والعدد المغزلي. يعرف الميل الإلكتروني بأنه مقدار الطاقة المنطلقة عندما تكتسب الذرة المنفردة إلكترونًا.

✕ تعرف السالبية الكهربائية بأنها مقدرة الذرة على جذب الإلكترونات عند عمل رابطة كيميائية.

✕ تتكون الأنطقة في المادة الصلبة بسبب التداخل بين مستويات الطاقة للذرات المختلفة عند ارتباطها.

✕ يوجد بين الذرات في الحالة الصلبة قوى تجاذب وقوى تنافر.

✕ تتعدد أنواع الروابط بين ذرات العناصر طبقا لأنواع الذرات وظروف الارتباط.

✕ الرابطة الأيونية هي رابطة تنشأ نتيجة انتقال إلكترون من ذرة إلى أخرى.

✗ تحدث هذه الرابطة الأيونية في مركبات المواد الصلبة وليست بين ذرات العنصر الواحد.

✗ الرابطة الأيونية هي رابطة غير موجهة (not directional) ولذلك تتمتع مركباتها بكثافة عالية وعدد تناسقي كبير.

✗ الرابطة الأيونية هي رابطة قوية ولذلك تتمتع مركباتها بنقطة انصهار عالية ومعامل صلابة كبير.

✗ الإلكترونات في الرابطة الأيونية تحتاج كمية طاقة كبيرة جدا لكي تتحرر.

✗ تكون المركبات الأيونية عازلة للكهرباء (ماعدا بالقرب من نقطة الانصهار) وشفافة

للأشعة فوق البنفسجية (UV).

لا تتكون الرابطة التساهمية عن طريق انتقال إلكترونات من ذرة إلى أخرى ولكن

تتكون عن طريق تداخل أحد المدارات الخارجية للذرات.

تحدد عدد الذرات اللازمة لعمل روابط تساهمية مع ذرة طبقا لقاعدة الثمانية.

توصف الرابطة التساهمية بأنها نقية إذا ما كانت الذرتين المرتبطتين متماثلتين

تماما كما في حالة بلورة السليكون.

✗ لا تعتمد طاقة وضع النظام الذي يتكون من روابط تساهمية على المسافة بين الذرات فقط ولكن على الزوايا المتكونة بين الروابط.

✗ توجد روابط تساهمية غير النقية منها الروابط الجزيئية والروابط التناسقية وهي روابط أقل قوة من الروابط النقية.

✗ تنشأ الرابطة الفلزية من التأثير المتبادل بين الأيونات الموجبة وبين الغاز الإلكتروني وتؤدي هذه الرابطة إلى تقليل قوى التآفر بين الأيونات الموجبة في الشبكة البلورية.

- ✕ تعتمد قوة الرابطة الفلزية على عدد إلكترونات التكافؤ في ذرة الفلز، حيث تزداد قوة الربط كلما زاد عدد إلكترونات التكافؤ في ذرة الفلز.
- ✕ توجد بين الذرات أو الجزيئات التي تكون ما يسمى بثنائي القطب الكهربائي قوى تسمى بقوى فان ديرفال.
- ✕ تنشأ الرابطة الهيدروجينية عند اتحاد ذرتين مختلفتين في السالبية الكهربائية وتكوين رابطة تساهمية وهي رابطة ثانوية تتكون بين ثنائيات القطب الكهربائي لجزيئات الماء المتجاورة.
- ✕ توجد طرق عدة لتنمية البلورات منها طريقة بريدجمان، طريقة الإنماء من المصهور، طريقة الصهر النطاقي، وطريقة نمو الغشاء المحدد الحدود بواسطة تغذية.

أسئلة وتمارين

1. ما هي الأعداد الكمية الأربعة وما مدلول كل منها؟
2. أشرح البنية الإلكترونية للذرات الحرة؟
3. قارن بين خصائص المركبات الأيونية والمركبات التساهمية؟
4. ناقش كل من الروابط الأيونية و التساهمية موضحا أهميتها ومدللا بأمثلة لهذه الروابط؟
5. أكتب نبذة مختصرة عن أنواع الروابط الثانوية؟
6. لماذا تكون درجة انصهار المركبات الأيونية أعلى منها في حالة المركبات التساهمية؟
7. حدد نوع الرابطة المتكونة في كل من المواد الآتية:
(أ) عنصر عدده الذرى 9. (ب) الجرافيت. (ج) كلوريد البوتاسيوم.
(د) بلورات الجرمانيوم. (هـ) ملح الطعام. (و) الماء
(ز) أكسيد الكالسيوم.
8. قارن بين الروابط التساهمية والروابط الأيونية من حيث طريقة التكوين والخصائص؟
9. قارن بين الأنواع المختلفة للروابط التي تتكون في الجسم الصلب من حيث شدتها النسبية وأهميتها؟
10. قارن بين الرابطة الفلزية والرابطة التساهمية.
11. ما هي الأسس المستخدمة لتصنيف الجسم في الحالة الصلبة؟
12. أشرح طريقة بريدجمان لتنمية البلورات؟
13. ما فائدة الصهر الجزئي؟
14. قارن بين الطرق المختلفة لتنمية البلورات؟

الباب الثاني
التركيب البلوري

Crystalline Structure



الباب الثاني

التركيب البلوري

Crystalline Structure

المحتوى

- 1-2 الانتظام المحدود والانتظام الممتد للذرات.
- 2-2 الحالة المتبلورة.
- 3-2 تعريفات أساسية.
- 4-2 الأنظمة البلورية السبعة.
- 5-2 خلية فيجنر-زايترس الأولية.
- 6-2 عناصر التماثل في البلورات.
- 7-2 أنظمة المستويات المهمة في فصيلة المكعبى.
- 8-2 أدلة ميلر للمستويات البلورية.

الأهداف

بعد استكمال دراسة هذا الباب يجب أن يكون الدارس قادرا على:

- ☐ تعريف والمقارنة بين المادة غير المتبلورة والمادة المتبلورة.
- ☐ التمييز بين الشبكة البرافية والشبكة غير البرافية.
- ☐ التفريق بين الخلية الأولية وغير الأولية.
- ☐ تقسيم الأنظمة البلورات إلى سبعة أنظمة تتكون من أربع عشرة شبكة برافية مختلفة.
- ☐ تعريف وتعيين خلية فيجنر-زايترس الأولية.
- ☐ تعريف عناصر التماثل الداخلية والخارجية في البلورة.
- ☐ تحديد مجموعات المستويات المهمة في فصيلة المكعبى.
- ☐ وصف المستويات البلورية بواسطة أدلة ميلر.

تقديم

كما ذكرنا في الباب السابق، يمكن تصنيف المواد الصلبة إلى نوعين: مواد صلبة متبلورة كما هو الحال في المعادن وأغلب المركبات الكيميائية والسبائك ومواد صلبة غير متبلورة كالزجاج والشمع. كما أن بعض المواد السائلة والغازية تتحول إلى مواد متبلورة عند تجمدها مثل الثلج والغازات الخاملة.

تتركب المواد الصلبة من وحدات أساسية محددة هي الذرات أو المجموعات الذرية. تتوزع هذه الذرات أو هذه المجموعات الذرية في التركيب البنائي للمواد غير المتبلورة بشكل عشوائي، بينما تكون الذرات أو المجموعات الذرية في المواد المتبلورة موزعة بشكل منتظم. يشار إلى كل مجموعة من الذرات أو المجموعات الذرية المرتبة في المواد المتبلورة بالبلورة والتي يمكن أن توجد على شكل منفصل. تتميز البلورات بأن لكل منها شكل هندسي منتظم وأسطح متشابهة ومتوازية وملساء. يوجد العديد من أنواع التراكيب البلورية يعتمد كل منها على هندسة الترتيب وانتظام الذرات في كل البلورة وهذا يؤثر بشكل كبير في الخصائص الفيزيائية المختلفة للجسم الصلب.

سنتعرف في هذا الباب، بشكل مفصل، على أنواع الانتظام الذري في المواد المتبلورة كما سنتعرف على معنى التركيب البلوري وعلى الأنظمة البلورية المختلفة وعناصر التماثل في التركيب البلوري وبعض التعبيرات الرياضية التي تستخدم في وصف هذه التراكيب البلورية. هذا بالإضافة إلى دراسة تعريف وكيفية تحديد خلية فيجنر-زايترس الأولية ووصف المستويات البلورية بواسطة أدلة ميلر وتحديد مجموعات المستويات المهمة في فصيلة المكعبى.

1-2 الانتظام الممتد والانتظام المحدود LONG RANGE AND SHORT RANG ORDER

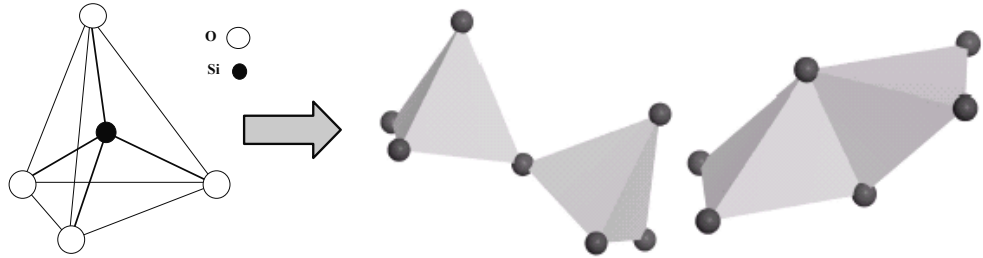
بشكل عام، تختلف المواد غير المتبلورة عن المواد المتبلورة في شكل انتظام

الذرات في المادة حيث يغيب الانتظام في النوع الأول (أي تتوزع الذرات بشكل

عشوائي)، بينما يوجد هذا الانتظام في النوع الثاني من المواد الصلبة. بالرغم أن هذا المفهوم صحيح إلى حد كبير إلا أنه يوجد في بعض المواد غير المتبلورة مزيج من العشوائية والانتظام للذرات. يوجد نوعان من الانتظام هما الانتظام من النوع المحدود (أي قصير المدى) والانتظام الممتد (أي طويل المدى). في الانتظام المحدود تكون الذرات أو المجموعات الذرية موجودة على هيئة مرتبة ومتكررة على المدى القصير، أما على المدى الطويل فإن التركيب البنائي يظهر توزيعاً غير منتظم ويغيب الانتظام الشامل وتسمى المادة الصلبة في هذه الحالة بمادة غير متبلورة (noncrystalline) أو أمورفية (amorphous)، ويسمى التركيب البنائي في مثل هذه المواد تركيباً ذا انتظاماً قصير المدى أو محدود.

على الجانب الآخر، إذا أبدت المادة الصلبة انتظاماً في توزيع الذرات أو المجموعات الذرية ويمتد هذا الانتظام إلى مدى طويل فإنه يقال أن تركيب المادة ذا انتظاماً ممتداً ويؤدي مثل هذا الانتظام إلى تكوين البلورات. يوجد الكثير من المواد الصلبة التي يمكن أن تتواجد على الحالة المتبلورة أو على الحالة غير المتبلورة ويعتمد ذلك على ظروف التحضير. المثال الجيد لمثل هذه المواد، والذي يمكن فيه عمل مقارنة بين الانتظام المحدود والانتظام الممتد هو رمل الصحراء المألوف لنا جميعاً. رمل الصحراء هو ثاني أكسيد السليكون، الذي بواسطته يمكن الحصول على أكثر من شكل للمادة الصلبة مثل الزجاج (وهو مادة غير متبلورة) أو الكوارتز (وهو مادة متبلورة).

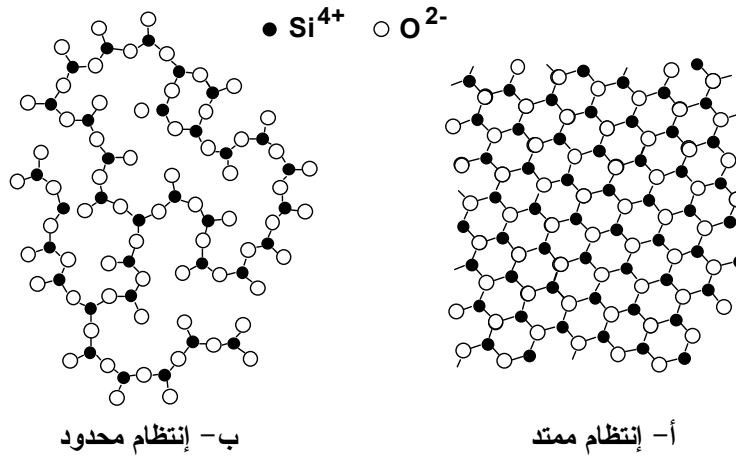
تتكون الوحدة البنائية لثاني أكسيد السليكون في الحالة الصلبة من ذرة سليكون رباعية التكافؤ ترتبط مع أربع ذرات أكسجين مكونة شكل هرمي يمثل وحدة التركيب البنائي للجسم الصلب. في هذه الوحدة البنائية تحتل ذرة السليكون قلب الهرم الثلاثي بينما تكون ذرات الأكسجين عند رؤوس الهرم، مكونة أربع روابط تساهمية مع ذرة السليكون. تتصل الوحدات البنائية بعضها مع بعض عند رؤوس الهرم أو الحواف فقط، كما هو موضح في الشكل 2-1.



الشكل 2-1 يتكون جزئ ثاني أكسيد السليكون من ذرة سليكون يحاط بها أربعة ذرات أكسجين مكونة هرم ثلاثي.

عند صهر ثاني أكسيد السيلكون وتبريده يتحول المصهور إلى مادة صلبة ذو تركيب بنائي يختلف باختلاف معدل التبريد، على النحو الآتي: 1- عند التبريد البطيء للمصهور تتكون مادة صلبة متبلورة وتعرف هذه المادة بالكوارتز، يكون لها تركيب بنائي منتظم وممتد على المدى الطويل، كما هو مبين في الشكل 2-2(أ). 2- عند التبريد المفاجئ للمصهور تتكون مادة صلبة غير متبلورة، تعرف هذه المادة بالزجاج، يكون لها تركيب بنائي عشوائي يتخلله انتظام محدود أي قصير المدى، كما هو موضح في الشكل 2-2(ب).

في ضوء ما سبق، يمكن تعريف الانتظام المحدود للذرات بأنه انتظام يكون موجوداً في المدى القصير ويغيب على المدى الطويل. يتواجد هذا النوع من الانتظام في المواد غير المتبلورة (الأمورفية). على الجانب الآخر، يكون الانتظام الممتد للذرات هو الترتيب الذي يتكرر على المدى الطويل ليشمل كل التركيب البنائي للمادة مكوناً ما يسمى بشبكة بلورية، ويتواجد هذا النوع من الانتظام في المواد المتبلورة.

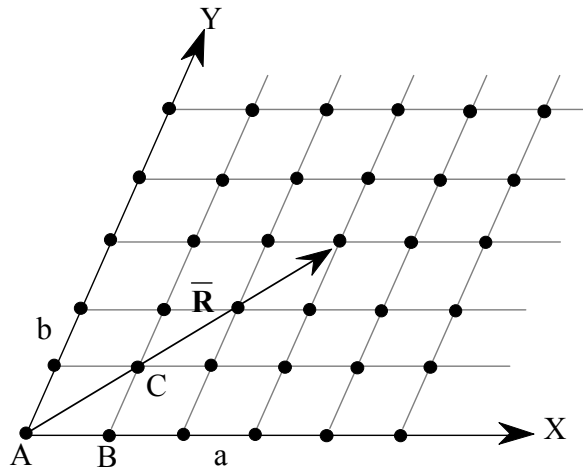


الشكل 2-2 التركيب البنائي للكوارتز والزجاج، حيث يظهر انتظاماً ممتداً أو انتظاماً محدوداً.

2-2 الحالة المتبلورة THE CRYSTALLINE STATE

بدأ الاهتمام الفعلي لدراسة البلورات عام 1912 على يد مجموعة من العلماء (لاو Lau، فريدريك Friedrich وكنبنج Knipping) والذين أكدوا إمكانية دراسة التركيب الداخلي للبلورات بواسطة تشتت الأشعة السينية. وبعد فترة وجيزة ظهر علم البلورات الذي يعرف بأنه العلم الذي يختص بدراسة التركيب الهندسي والخصائص الفيزيائية المختلفة للأجسام الصلبة المتبلورة وذلك بواسطة العديد من التقنيات على رأسها الأشعة السينية والأشعة الكهرومغناطية والنيوترونية وتقنيات أخرى.

يقال أن المادة الصلبة متبلورة عندما تكون فيها الذرات أو الجزيئات مرتبة بالشكل الذي يجعل أماكنها تتكرر بانتظام تام في نموذج ثلاثي الأبعاد طويل المدى (يسمى بالشبيكة)، بحيث تكون فيه كل ذرة أو جزيء أو مجموعة ذرات متواجدة في نقطة محددة وعلى بعد واتجاه محددين من جميع الذرات أو الجزيئات أو المجموعات الذرية الأخرى المحيطة به، كما يبين الشكل 2-3.



الشكل 2-3 تمثيل ثنائي البعد لتركيب صلب متبلور وفيه تظهر جميع الذرات مرتبة بشكل دوري.

في الشكل 2-3 يتضح المبدأ السابق، حيث تكون المسافة بين أي ذرتين متجاورتين على امتداد المحور X هي a وعبر المحور Y هي b وليس بالضرورة أن تكون المحاور متعامدة. تحافظ البلورة التامة على هذا الانتظام (بالتكرار) على مدى المحورين X و Y من $-\infty$ إلى $+\infty$. ينتج من هذا الانتظام أن تكون الذرات A و B و C متكافئة، ويمكن القول بأن البلورة تظهر للناظر كما هي تماماً عند النظر إليها من أي موضع من هذه المواضع الذرية. يمكن التعبير عن الفكرة نفسها بالقول بأنه يمكن تمثيل

البلورة بشبكة فراغية تظهر تماثل انتقالي في جميع الاتجاهات، بمعنى أنه إذا انتقلت البلورة بواسطة أي متجه (\bar{R} مثلا) فإن البلورة تبدو تماما كما كانت قبل الانتقال، كما هو واضح في الشكل.

لا يمكن تجهيز بلورة تامة التبلور (نموذجية) نظرا للعديد من الصعوبات التي تواجه ذلك، فمثلا، يعتبر سطح البلورة نوع من أنواع التشوه وذلك بسبب تعطل التكرار عند السطح، حيث ترى الذرات القريبة من السطح بيئة محيطة مختلفة عن الذرات الموجودة في عمق البلورة وبالتالي تسلك سلوكا مختلفا. المثال الثاني لذلك هو الاهتزاز الحراري للذرات حول مواضع اتزانها عند درجة حرارة أكبر من الصفر المطلق، حيث يسبب هذا الاهتزاز تشوها للبلورة (على هيئة تغير مواضع الذرات بسبب الاهتزاز) بدرجة تعتمد على درجة الحرارة. والمثال الثالث هو وجود الشوائب. لاحظ أن البلورة غالبا تحتوى على بعض الذرات الغريبة (الشوائب) حتى عند تحضيرها بواسطة أفضل وسائل النمو البلوري تبقى بعض الشوائب (بتركيز $\sim 10^{12} \text{ cm}^{-3}$) داخل البلورة وهذه الشوائب تجعل من الصعب تعيين التركيب البلوري.

2-3 تعريفات أساسية BASIC DEFINITIONS

لكي نتحدث بدقة عن التراكيب البلورية يجب أن ندخل بعض المفاهيم (التعريفات) الأساسية في هذا المجال والتي سوف تخدم الدراسة كنوع من المصطلحات اللغوية في علم البلورات. فيما يلي، نقدم هذه التعريفات بشئ من التفصيل.

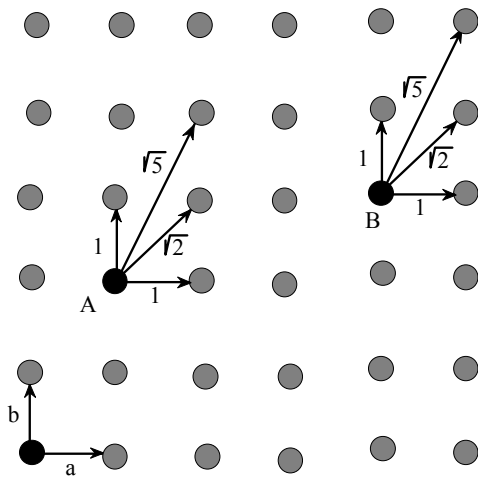
2-3-1 الشبكة الفراغية SPACE LATTICE

يكون التركيب الداخلي لكافة بلورات المواد المتبلورة عبارة عن توزيع فضائي للذرات أو الجزيئات أو تجمعاتها. فالذرة الواحدة أو الجزء الواحد أو التجمع الذري الواحد أو التجمع الجزيئي الواحد عند تكراره في الفضاء يكون طرازاً أو نموذجاً نطلق عليه التركيب البلوري. إن وحدة الطراز التي عند تكرارها تكون الطراز كله تسمى الأساس (أو القاعدة basis). يختلف شكل و تركيب الأساس من بلورة إلى بلورة أخرى. من الممكن للقاعدة أن تحتوى على ذرة واحدة كما في حالة بلورات المعادن مثل النحاس والذهب والفضة والغازات الخاملة. ومن الممكن أن يحتوى الأساس على عدد كبير من الذرات (قد تربو على الألف)، كما هو الحال في المواد الكيميائية والعضوية. على كل حال، يوجد الأساس في الفراغ عند نقاط محددة تسمى نقاط الشبكة الفراغية التي تتميز بخصائص تماثل تظهر فيما يلي. يوجد نوعين من شبكات النقاط الفراغية هما: شبكات برافيه (نسبة إلى العالم برافيه Bravais) و شبكات غير برافيه. يوصف التركيب البلوري للأجسام الصلبة في معظم الأحيان بشبكات برافيه.

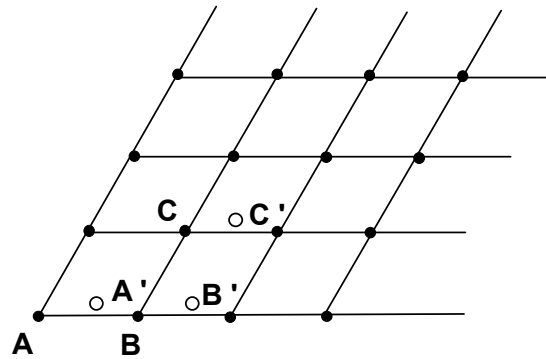
إذا ترتب في الفراغ عدد لانهائي من النقاط بحيث يكون لكل نقطة نفس الجيران فإنها تكون شبكة فراغية. في هذه الشبكة يكون لكل نقطة نفس عدد الجيران على نفس الأبعاد والاتجاهات. فمثلاً باعتبار ترتيب ثنائي الأبعاد من النقاط، كما هو موضح بالشكل 2-4، فإنه من الواضح أن النقطة A والنقطة B لهما نفس الجيران وهذا صحيح أيضاً

لكل النقاط الأخرى الموجود في هذا الترتيب ثنائي البعد وهذا يحقق التعريف السابق للشبكة الفراغية ولكن في بعدين. وبناء على ما سبق، يمكن تعريف الشبكة البرافية بأنها تركيب دوري لانهائي يتكون من عقد (نقاط فراغية) منفصلة موزعة في فضاء الشبكة بأسلوب منتظم. وبالتالي، في الشبكات البرافية تكون كل نقاط الشبكة متعادلة وبناء على كون كل الذرات المكونة للبلورة من نفس النوع. أما في الشبكة غير البرافية فتكون بعض نقاط الشبكة غير متعادلة، كما يتضح في الشكل 2-4.

في الشكل 2-4 نجد أن النقاط A و B و C تكون متكافئة فيما بينها وتكون شبكة برافية واحدة وبالمثل تكون النقاط A' و B' و C' متكافئة فيما بينها وتكون شبكة برافية أخرى. نلاحظ أن النقطتين A و A' غير متكافئة سواء كانتا عبارة عن ذرات مختلفة (مثل H و Cl مثلاً) أو كانتا من نفس نوع الذرات (ذرتين H مثلاً).



الشكل 2-5 شبكة برافية ثنائية البعد



الشكل 2-4 شبكة غير برافية ثنائية البعد.

يشار أحيان إلى الشبكة غير البرافية بالشبكة ذات الأساس. كما ذكرنا من قبل، يشير مصطلح "الأساس" إلى مجموعة الذرات التي توجد بالقرب من كل نقطة من نقاط الشبكة

البرافية. يمكن اعتبار أن الشبكة غير البرافية هي اتحاد شبكتين برافيتين أو أكثر لهما اتجاهات ثابتة بالنسبة إلى بعضهما بعض. يمثل الشكل 2-4 شبكة غير برافية مرسومة في بعدين، بينما يمثل الشكل 2-5 شبكة برافية مرسومة في بعدين، أيضا.

2-3-2 متجهات الأساس BASIS VECTORS

لتوضيح مفهوم متجهات الأساس، نفترض شبكة كالمبينة بالشكل 2-6. دعنا

نختار نقطة أصل الإحداثيات عند نقطة معينة في الشبكة ولتكن النقطة A. الآن يمكن

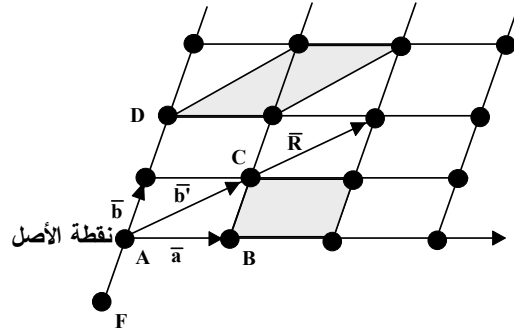
كتابة متجه الموضع لأي نقطة من نقاط الشبكة على الصورة:

$$\vec{R}_n = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} \quad 1-2$$

حيث \vec{a} و \vec{b} هما متجهين، كما هو مبين بالشكل و (n_1, n_2) هما زوج أعداد تعتمد

قيمتها على هندسة الشبكة النقطية. هكذا تكون إحداثيات النقطة B هي $(n_1, n_2) = (1, 0)$

والنقطة D هي $(n_1, n_2) = (0, 2)$ والنقطة F هي $(n_1, n_2) = (0, -1)$.



الشكل 2-6 المتجهين \vec{a} و \vec{b} هما متجهان أساس.

يكون المتجهين \vec{a} و \vec{b} (الواجب عدم كونهما على استقامة واحدة) مجموعة من

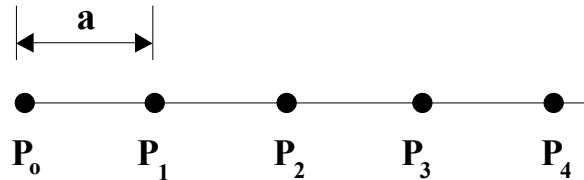
المتجهات تسمى متجهات الأساس في الشبكة، وبدلالتهما يمكن التعبير بشكل مناسب عن

مواقع كل نقطة من نقاط الشبكة باستخدام التعبير الرياضي كما في المعادلة 2-1.

ويقال عادة أن الشبكة لها تماثل انتقالي لكل الانتقالات الموصوفة بواسطة متجهات الشبكة \bar{R}_n . لا يكون اختيار متجهات الأساس السابق هو الاختيار الأوحى، ويمكن أخذ المتجهات \bar{a} و \bar{b}' بدلا من المتجهات \bar{a} و \bar{b} حيث $\bar{b}' = \bar{a} + \bar{b}$. من الواضح أن هذا الاختيار هو أحد الاختيارات الممكنة. عادة يكون الاختيار طبقا للصلاحية والأكثر مناسبة.

3-3-2 الشبكة البلورية CRYSTAL LATTICE

غالبا، يوصف التركيب البلوري بواسطة شبكة بلورية عبارة عن شبكة برافية تتمتع بخاصيتين أساسيتين هما: الانتظام اللانهائي للعقد (للقط) في الفراغ، والتماثل الانتقالي. وفيما يلى توضيح لهذا المفهوم. تتركب البلورة المثالية من ذرات مرتبة في شبكة ويمكن تحديد كل ذرة بثلاث متجهات انتقالية أساسية هي \bar{a} و \bar{b} و \bar{c} . فعلى سبيل المثال نفترض أن المطلوب هو تحريك النقطة p_0 في الشكل 7-2 على امتداد خط مستقيم بمسافة انتقالية a إلى المواضع p_1 و p_2 و p_3 الخ، فإنه يمكن تمثيل المسافة الانتقالية a بمتجه له اتجاه محدد وقيمة عددية تساوى a وهذه القيمة العددية تسمى فترة الانتقال. من الواضح أن متجه الانتقال \bar{a} يمكن استخدامه لتمييز انتقالات أخرى موازية مثل $2\bar{a}$ و $3\bar{a}$ و $n\bar{a}$ وهكذا.

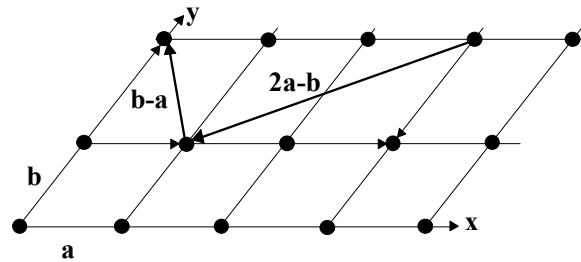


الشكل 7-2 انتقال في بعد واحد.

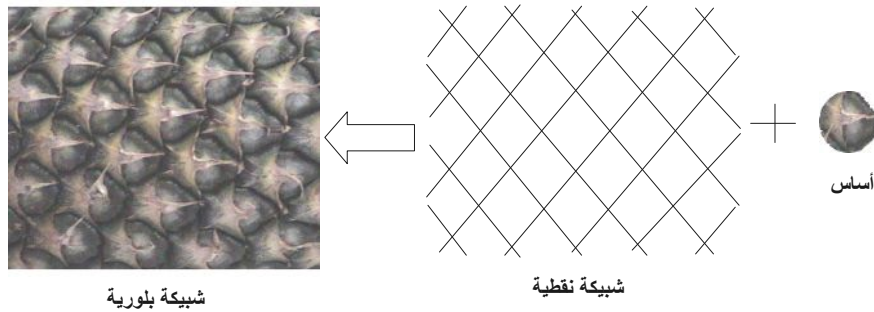
بنفس الأسلوب يمكن التأثير على النقطة p_0 بمتجهى انتقال \bar{a} و \bar{b} فنحصل على

الشبيكة المستوية (في بعدين)، كما هو موضح بالشكل 2-8، ويمكن تحديد موضع أي نقطة في الشبيكة بالمجموع الإتجاهي $\vec{T} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b}$ ، حيث n_1 و n_2 هي أعداد صحيحة تتضمن الصفر. وإذا كان التأثير على النقطة p_0 بثلاث متجهات انتقالية مختلفة مثل \vec{a} و \vec{b} و \vec{c} فإننا نحصل على شبيكة في الفراغ ويمكن تحديد موضع أي نقطة فيها بالمجموع الإتجاهي $\vec{T} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}$.

إذا استبدلنا كل ذرة في الشبيكة البلورية بنقطة فإن كل هذه النقاط الناتجة تسمى بالشبيكة النقطية. يمكن الحصول على التركيب البلوري وذلك بوضع نفس الأساس (القاعدة) من الذرات عند كل نقطة من نقاط الشبيكة وبذلك يمكن كتابة العلاقة بين الشبيكة النقطية والأساس والتركيب البلوري على النحو الآتي: شبيكة نقطية + أساس = شبيكة بلورية (تركيب بلوري). يمكن توضيح هذا المفهوم من خلال الشكل 2-9 والمثال التالي.



الشكل 2-8 انتقال في بعدين (في مستوى واحد).



الشكل 2-9 مفهوم العلاقة بين الشبيكة النقطية والأساس والتركيب البلوري

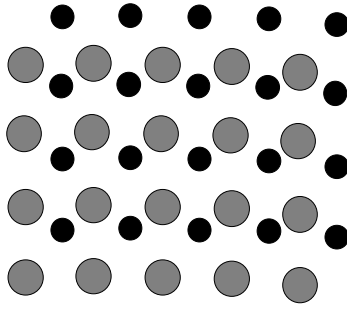
مثال 1-2

إذا كان الأساس عبارة عن أيونين مختلفين والشبكة النقطية المبينة بالشكل 10-2، عيّن الشبكة البلورية التي تمثل هذا النظام (التركيب البلوري)؟

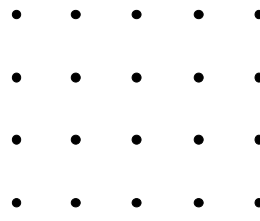
الحل

بتطبيق العلاقة السابقة التي تنص على " شبكة نقطية + الأساس = تركيب بلوري "

نحصل على التركيب البلوري كما هو موضح بالشكل 11-2.



الشكل 11-2 التركيب البلوري للشبكة الموصوفة.



الشبكة النقطية



الأساس

الشكل 10-2

4-3-2 خلية الوحدة UNIT CELL

تسمى مساحة متوازي الأضلاع الذي له جوانب عبارة عن متجهات الأساس \vec{a} و

\vec{b} (أو الشكل المجسم الذي نحصل عليه، في الأبعاد الثلاثة، بمتجهات الأساس: \vec{a} و \vec{b} و

\vec{c}) خلية الوحدة أو وحدة البناء البلوري وتكون هذه الوحدة، عادة، أصغر شكل هندسي

يمكن بتكراره الحصول على الشبكة البلورية. لا يكون اختيار خلية الوحدة لنفس الشبكة

الواحدة اختياراً وحيداً وذلك بسبب وجود أكثر من اختيار لمتجهات الأساس، كما ذكرنا

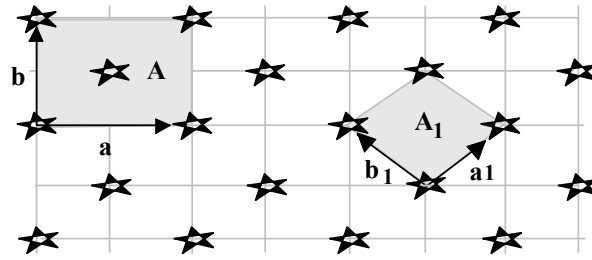
من قبل. بالرجوع إلى الشكل 2-6 نجد أن أي من المناطق المظلمة في الشكل تصلح

كخلية وحدة. ولذلك توجد بعض الملاحظات يجب أخذها في الاعتبار عند اختيار خلية الوحدة نلخصها كالآتي: 1- كل خلايا الوحدة لها نفس المساحة، أي أن مساحة خلية الوحدة هو مقدار فريد حتى لو لم يكن الشكل وحيداً. 2- إذا كنت مهتماً بعدد نقاط الشبكة في خلية الوحدة، فإن خلية الوحدة المتكونة في بعدين تحتوى على أربع نقاط عند أركان الشكل وتشارك كل نقطة في أربع خلايا مجاورة أي أن كل خلية وحدة تحتوى على نقطة واحدة. (وكذلك، فإن خلية الوحدة المتكونة في ثلاثة أبعاد تحتوى على ثماني نقاط عند رؤوس متوازي المستطيلات وكل نقطة تشارك في ثماني خلايا مجاورة أي أن كل خلية وحدة تحتوى على نقطة واحدة أيضاً).

2-3-5 الخلايا الأولية وغير الأولية PRIMITIVE AND NONPRIMITIVE CELLS

من الممكن أن تكون خلية الوحدة التي تمت مناقشتها من قبل خلية أولية أو غير أولية، حيث يكون من المفيد أحياناً اختيار خلية وحدة كبيرة تظهر بعض خصائص الشبكة (مثل التماثل) بشكل أوضح. في هذه الحالة، لا تكون خلية الوحدة هي الخلية الأولية. ولتوضيح ذلك نعتبر الشبكة البرافية المبينة في الشكل 2-12. تكون خلية الوحدة هي الخلية ذات متجهات الأساس \bar{a} و \bar{b} وتكون لها المساحة A . لاحظ أن هذه الخلية تحتوى على نقطة شبكة في المركز بالإضافة إلى النقاط عند الرؤوس (أي أن العدد الكلى للنقاط داخل الخلية لا يساوى واحد). وبالرغم انه بتكرار هذه الخلية يمكن الحصول على الشبكة البرافية (أي أنها خلية وحدة) إلا إنها خلية غير أولية. وعند اختيار

خلية أخرى ذات متجهات الأساس \vec{a}_1 و \vec{b}_1 ، مثلاً، نحصل على خلية وحدة أخرى تحتوى على أربع نقاط عند الرؤوس ولها المساحة A_1 . بتكرار هذه المساحة يمكن تغطية كل الشبكة البرافية. أيضاً، لاحظ أن هذه الخلية لا تحتوى على نقاط شبكية بداخلها، أي أنها تحتوى فقط على أربعة نقاط عند الأركان تشارك الخلايا المجاورة ويكون نصيب هذه الخلية هو نقطة واحدة فقط. تسمى هذه الخلية (A_1) بخلية أولية، بينما تسمى الخلية A بخلية غير أولية. وبناء على ما سبق، يمكن تعريف خلية الوحدة الأولية بأنها أصغر خلية وحدة يمكن بتكرارها تغطية الشبكة البرافية وتحتوى على عقدة واحدة (نقطة واحدة).



الشكل 2-12 الخلية A_1 هي خلية أولية، بينما A هي خلية غير أولية، بالرغم أن كل منهما تمثل خلية الوحدة.

تذكر أنه بالإمكان دائماً اختيار خلية أولية (تحقق التماثل الانتقالي وتنتمي لها عقدة ذرة أو مجموعة ذرات) واحدة ولها أصغر حجم يمكن اختياره. يحدث أحياناً أن يكون تماثل الخلية الأولية لا يماثل تماثل الشبكة الأم وفي هذه الحالة ربما نكون مجبرين على اختيار خلية وحدة أخرى (تحتوى على عقد بداخلها وليس عند الأركان) بحيث تحقق هذه الخلية تماثل متماثل مع الشبكة الأم. تكون الخلية في هذه الحالة غير أولية، وعلى كل حال عند اختيار خلية وحدة تعبر عن الشبكة يجب اخذ الملاحظات الآتية في الاعتبار:

- 1- تكون مساحة الخلية غير الأولية مضاعف صحيح لمساحة الخلية الأولية.
- 2- لا يجب رسم خطوط توصيل بين الخلايا غير الأولية والخلايا غير البرافية. يشير التعبير الأول إلى اختيار معين لمتجهات الأساس (ويكون أحيانا اختيارا عشوائياً)، بينما يشير التعبير الثاني (غير برافية) إلى الحقيقة الفيزيائية للمواقع غير المتكافئة لنقاط الشبكة.
- 3- يكون حجم الخلية الأولية في الأبعاد الثلاثة والمحددة بمتجهات الأساس \vec{a}_1 و \vec{b}_1 و

\vec{c}_1 هو

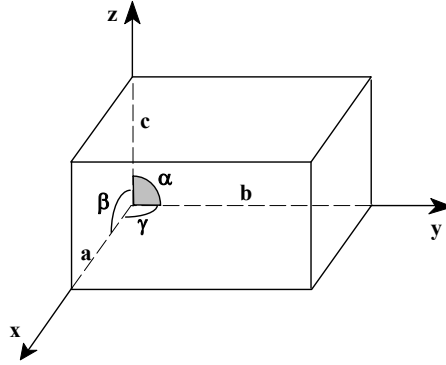
$$V = |\vec{a}_1 \times \vec{b}_1 \cdot \vec{c}_1| = |\vec{b}_1 \times \vec{c}_1 \cdot \vec{a}_1| = |\vec{c}_1 \times \vec{a}_1 \cdot \vec{b}_1| \quad 2-2$$

2-3-6 متغيرات الشبكة لوحدة الخلية LATTICE PARAMETERS OF A UNIT CELL

لكي تتحدد البلورة في الفراغ بشكل صحيح، لابد وأن تكون ثلاثة أوجه منها مسندة إلى مجموعة من المحاور الإحداثية تتقاطع عند أحد أركان البلورة أو عند مركزها، ويمكن اختيار اتجاهات وأطوال المحاور بحيث تتفق مع اتجاهات وأطوال أحرف الخلية a و b و c . تسمى a و b و c بالمحاور البلورية كما تسمى الزوايا بين هذه المحاور، α و β و γ ، بالزوايا بين الأوجه، كما هو موضح بالشكل 2-13.

تكون الزاوية α محصورة بين المحورين b و c وتكون الزاوية β محصورة بين المحورين a و c والزاوية γ محصورة بين المحورين a و b . تسمى المحاور a و b و c و الزوايا α و β و γ بمعاملات الشبكة لوحدة الخلية والتي يمكن بواسطتها معرفة شكل

الخلية الهندسي وحساب حجمها، كما سوف نبين لاحقاً.



الشكل 2-13 متغيرات الشبكة لوحدة الخلية.

4-2 الأنظمة البلورية السبعة THE SEVEN CRYSTAL SYSTEMS

يتميز الشكل الخارجي لبلورات المواد بأسطحها المستوية والملساء والتي تسمى أوجه البلورة. ويختلف مظهر بلورات المواد المختلفة باختلاف أشكال الأوجه أو باختلاف الزوايا بين هذه الأوجه وبالتالي باختلاف تماثلها. ويعكس المظهر الخارجي للبلورة طبيعة التركيب الداخلي أو وحدات البناء الداخلية التي تكون هذه البلورة. والآن سوف ندرس، بشئ من التفصيل، التركيب البنائي للأنواع المختلفة للشبكات الفراغية لبلورات المواد الصلبة.

تمكن العالم برافيه (Bravais) عام 1848 من إدخال مفهوم الشبكة إلى علم البلورات وذلك لتسهيل دراسة التركيب البلوري للمواد الصلبة. وقد تمكن برافيه من تصميم أربع عشرة شبكة فقط تصف التراكيب البلورية لجميع المواد الصلبة مصنفة في مجموعات رئيسية أو أنظمة. يأتي هذا العدد الصغير (14 شبكة) بسبب أن عدد حالات التماثل الانتقالي في الشبكة يكون محدوداً، فمثلاً يستحيل بناء شبكة ذات خلية وحدة لها

شكل خماسي منتظم. تأتي الاستحالة من أنه بالرغم من إمكانية رسم الشكل الخماسي المنتظم بسهولة إلا أنه لا يمكن تغطية مساحة معينة تماما بتكرار هذا الشكل الخماسي المنتظم. وبالتالي نجد أن متطلبات التماثل الانتقالي في بعدين اثنين (على سبيل المثال) تحدد عدد الشبكات الممكن بنائها إلى خمسة فقط هم: متوازي الأضلاع المائل، المربع القائم، السداسي، المستطيل البسيط والمستطيل المتمركز. في الأبعاد الثلاثة، يبلغ عدد الشبكات البرافية أربع عشرة شبكة فقط، بينما يبلغ عدد الشبكات غير البرافية 230 شبكة. في الأبعاد الثلاثة تكون كل شبكة برافية خلية وحدة عبارة عن متوازي مستطيلات له جوانب تكون عبارة عن متجهات الأساس \vec{a} و \vec{b} و \vec{c} وله الزوايا α و β و γ ، كما هو موصوف في الجدول 1-2.

تصنف الأربع عشرة شبكة البرافية إلى سبع أنظمة (مجموعات أو فصائل) هي : المكعبى، الرباعي القائم، المستطيل القائم، ثلاثي التماثل، أحادى الميل، ثلاثي الميل والسداسي. توجد أنواع مختلفة من الشبكات منها البسيط وغير البسيط.

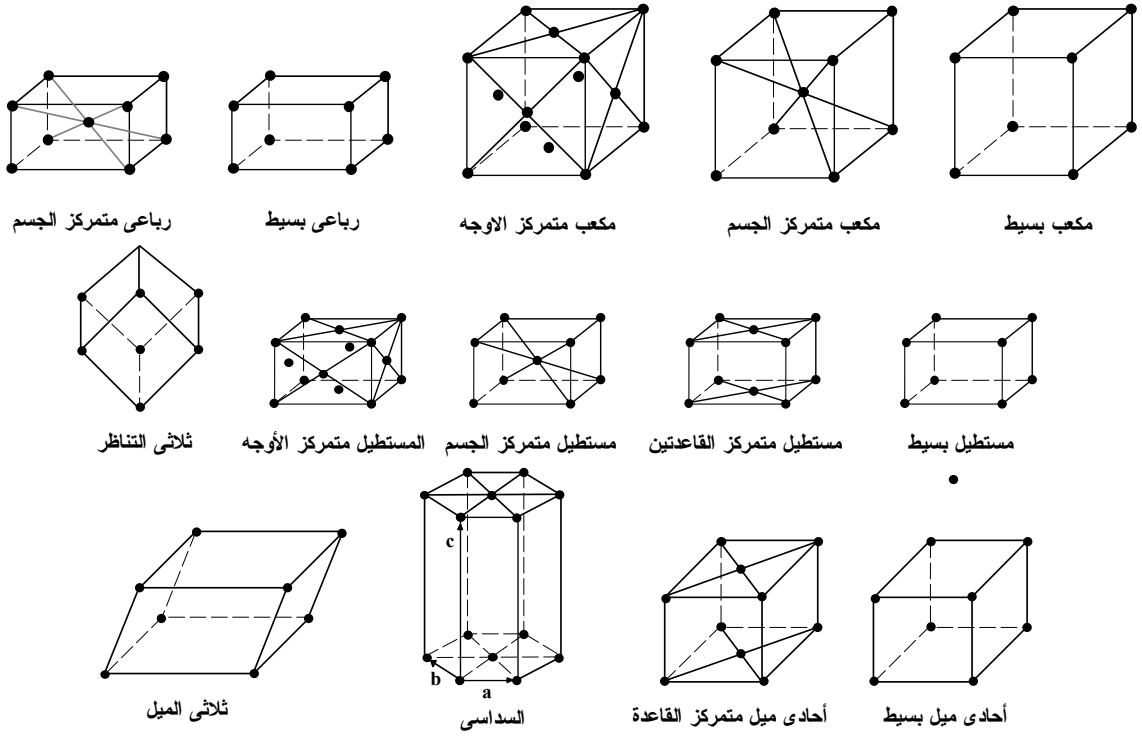
في الشبكة البسيطة (simple) تكون النقاط عند رؤوس الشكل فقط، وبذلك تمثل الخلية البسيطة خلية وحدة أولية. بينما في الشبكة المتمركزة الجسم (م. الجسم body centered) توجد نقطة إضافية عند مركز الجسم بينما في الشبكة المتمركزة الأوجه (م. الأوجه face centered) توجد نقطة في مركز كل وجه وفي الشبكة المتمركز القاعدتين توجد نقطة في مركز كل قاعدة، هذا بالإضافة إلى النقاط الموجودة عند الرؤوس في كل

الأنواع السابقة . تذكر انه في الشبكات غير البسيطة تكون خلية الوحدة غير أولية. يبين الجدول 1-2 والشكل 2-14 الوصف التفصيلي والخصائص الهندسية لكل نظام من الأنظمة السبعة.

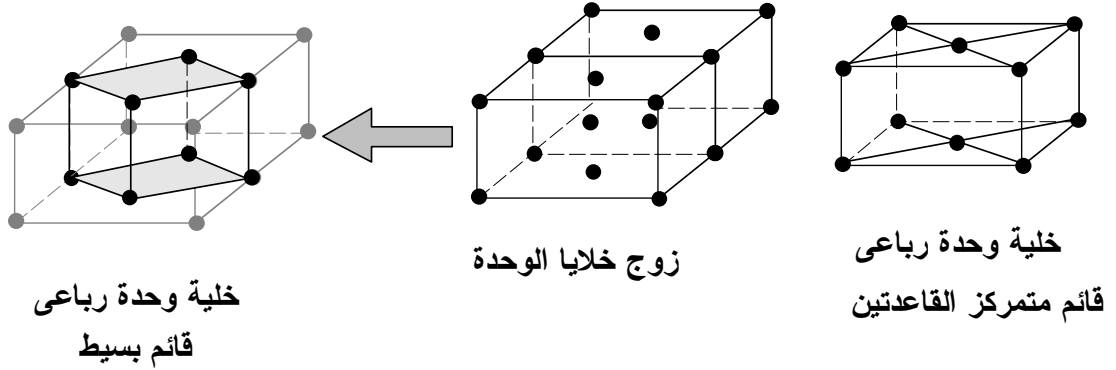
الجدول 1-2 الخصائص التركيبية لوحدة الخلية للأربعة عشر شبكة برافية.

الخصائص عناصر التماثل	الرمز	النوع	عدد الأنواع	الخصائص	الفصيلة
أربعة محاور دوران ثلاثية الرتبة	P I F	مكعبى البسيط، SC مكعبى م. الجسم، BCC مكعبى م. الأوجه، FCC	ثلاثة	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	فصيلة المكعبى Cubic
محور دوران ثلاثي الرتبة	P I	رباعي بسيط رباعي م. الجسم	نوعان	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	فصيلة الرباعي القائم Tetragonal
ثلاثة محاور دوران ثنائية الرتبة	P I F B	مستطيل قائم بسيط مستطيل قائم م. الجسم مستطيل قائم م. الأوجه مستطيل قائم م. القاعدتين	أربعة أنواع	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	فصيلة المستطيل القائم Orthorhombic
محور دوران ثلاثي الرتبة	-	خلية أولية	نوع واحد	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	فصيلة الثلاثي Trigonal
محور دوران ثنائي الرتبة	-	أحادي الميل البسيط أحادي الميل م. القاعدتين	نوعان	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$	فصيلة أحادي الميل Monoclinic
لا يوجد	-	ثلاثي الميل البسيط	نوع واحد	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	فصيلة ثلاثي الميل Triclinic
محور دوران ثلاثي الرتبة	-	السداسي البسيط	نوع واحد	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ & $\gamma = 120^\circ$	فصيلة السداسي Hexagonal

كما سوف نرى فيما بعد، يمكن تحويل بعض الإشكال إلى أشكال أخرى، فعلى سبيل المثال، يمكن تحويل الرباعي القائم المتمركز القاعدتين إلى رباعي قائم بسيط عند اعتبار خلية وحدة جديدة، كما هو مبين بالشكل 2-15، ويمكن معالجة بعض الحالات الأخرى بالمثل.



الشكل 2-14 أشكال برافيس الأربعة عشرة.



الشكل 2-15 تحويل الرباعي القائم المتمركز القاعدتين إلى رباعي قائم بسيط وذلك باختيار خلية وحدة جديدة.

5-2 خلية فيجنر-زايتس الأولية WIGNER SEITZ PRIMITIVE CELL

سبب دراستنا للخلايا غير الأولية من دون الخلايا الأولية هو تفضيلنا للتعامل مع

الخلايا التي لها تماثل يشابه تماثل الشبكة قيد الدراسة. فمثلا في حالة المكعبى المتمركز

الأوجه يتم التعامل مع خلية غير أولية وهى عبارة عن مكعب يحتوى على عقد في مراكز

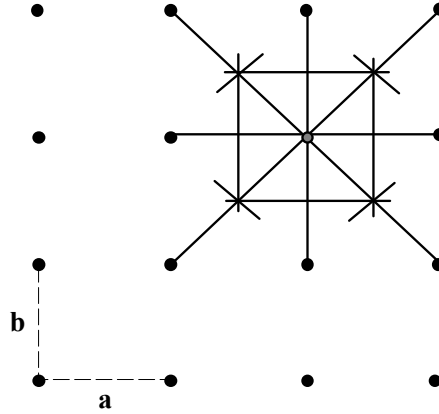
الأوجه وذلك بسبب تشابه التماثل مع شبكة المكعبى. على الجانب الآخر، تكون الخلية الأولية للشبكة المتمركزة الأوجه عبارة عن متوازي سطوح مائل لا يملك تماثل شبكية المكعبى. والسؤال الذي يطرح نفسه هو، أليس من الممكن اختيار خلية أولية بحيث يكون لها تماثل يشابه تماثل الشبكة التي هي جزء منه؟ الجواب: نعم يوجد مثل هذا الاختيار، والخلية الأولية التي نحقق ذلك تسمى خلية فيجنر-زاييتس.

أقترح العالم فيجنر-زاييتس طريقة بسيطة يمكن بواسطتها اختيار وحدة الخلية ويتم ذلك باتباع الخطوات الآتية :

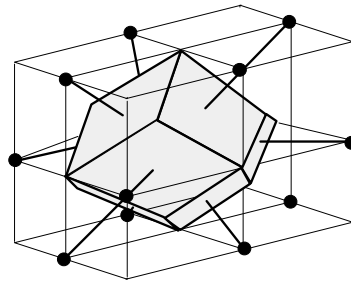
- 1- نرسم الشبكة النقطية التي تمثل الشبكة البرافية.
- 2- نعتبر نقطة معينة في الشبكة، ثم نرسم خطوطا تصل هذه النقطة بكل نقاط الشبكة المحيطة والأقرب إلى هذه النقطة، كما هو موضح بالشكل 2-16.
- 3- عند منتصف الخطوط المرسومة نرسم خطوط أو مستويات متعامدة.
- 4- تكون أصغر مساحة (في حالة البعدين) أو أصغر حجم (في حالة الأبعاد الثلاثة) ينتج بهذه الطريقة هو وحدة خلية فيجنر-زاييتس وهي خلية تحتوى على نقطة شبكية (عقدة) واحدة بداخلها. وقد وجد أن شكل خلية فيجنر-زاييتس هو دائما سداسي الشكل ماعدا في حالة الشبكة المستطيلة والمربعة تكون الخلية فيهما مربعة، كما يبين الشكل 2-16.

تبدو خلية فيجنر-زاييتس للشبكة المكعبة المتمركزة الجسم، BCC، على هيئة جسم

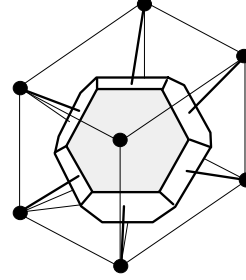
ثمانى الأوجه مشذب (مقطوع)، أي له ثمانى وجوه عبارة عن أشكال سداسية منتظمة وستة وجوه مربعة الشكل كما هو مبين بالشكل 17-2 (أ) ويكون كل وجه سداسي عمودياً على المستقيم الواصل من الرأس إلى الخلية المتمركزة.



الشكل 16-2 خلية فيجنر-زائتس في بعدين متعامدين و $a = b$.



ب- خلية فيجنر-زائتس للمكعب متمركز الأوجه FCC



أ- خلية فيجنر-زائتس للمكعب متمركز الجسم BCC

الشكل 17-2 خلية فيجنر-زائتس للمكعب المتمركز الجسم وللمكعب المتمركز الأوجه.

أما خلية فيجنر-زائتس للبلورة المتمركز الأوجه، FCC، فتكون على هيئة معيني اثني عشري (Rhombic dodecahedron)، أي له اثني عشر سطحاً على شكل معين، كما هو موضح بالشكل 17-2 (ب). في هذا الشكل لم تظهر الخلية الأولية للشبيكة، فالمكعب المرسوم المحيط بخلية فيجنر-زائتس ليس خلية أولية. تكون كل الأوجه الاثنى عشر متطابقة ويكون كل وجه عمودياً على المستقيم الواصل بين الذرة الموجودة وسط خلية

فيجنر-زاييتس والذرات الاثنى عشر الموجودة وسط أضلاع المكعب المرسوم.

6-2 عناصر التماثل في البلورات SYMMETRY ELEMENTS OF CRYSTALS

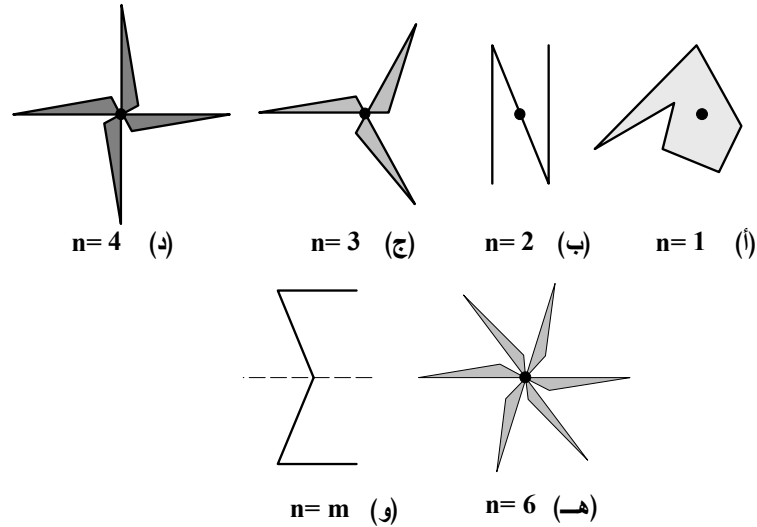
يأتى اختلاف بلورات المواد الصلبة من تباين شكل الشبكات البلورية لها. وينتج هذا التباين من اختلاف أبعاد وزوايا وحدات التركيب البلوري. ولكي يمكن تصنيف الشبكات البلورية يجب أخذ مبدأ التماثل في الاعتبار. والتماثل هو تحول الشيء بطريقة أو بأخرى لكي ينطبق على نفسه مرة أخرى. ويعتبر التماثل أهم الخصائص الهندسية التي تميز خلايا الوحدة للجسم الصلب المتبلور، حيث تتميز كل خلية بنوع واحد أو أكثر من أنواع التماثل الهندسي.

تنشأ عناصر التماثل الهندسي في الأجسام المتبلورة بسبب تكرار الوحدات البنائية بشكل منتظم وبالتالي يمكن وصف انتظام التوزيع البنائي للبلورة بدلالة عناصر تماثل توجد منها عناصر خارجية وأخرى داخلية. عناصر التماثل الخارجية ثلاث هي: مركز التماثل، محور التماثل، ومستوى التماثل بينما تكون عناصر التماثل الأخرى داخلية مثل الدوران والانقلاب والانعكاس والمستوى المنزلق. سوف نناقش كل من هذه العناصر بشئ من التفصيل فيما يلي.

6-2-1 محور التماثل AXIS OF SYMMETRY

يعرف محور التماثل بأنه محور تخيلي يمر بمركز البلورة أو الخلية، بحيث إذا دارت حوله الخلية بزواوية 360° فإنها تكرر نفسها (أي تحتل نفس الوضع في الفراغ)، من

حيث الشكل عددا من المرات. تتحدد رتبة التماثل للمحور بعدد المرات (n) التي تكرر فيها البلورة وضعها خلال دورة كاملة. فعلى سبيل المثال، إذا أدركنا أي جسم غير متمثل حول أي محور فإن الجسم سوف يعود إلى وضعه الأصلي (وضع مماثل) بعد 360° ، أي بعد دورة واحدة ويسمى محور التماثل، في هذه الحالة، محور تماثل من الرتبة الأولى ($n=1$). ويقال أن محور التماثل من الرتبة الثانية إذا تكرر وضع الجسم أو البلورة مرتين عند الدوران حوله دورة كاملة وهكذا، كما هو مبين بالشكل 2-18. تعرف رتبة التماثل بأنها عدد المرات التي يكرر الجسم أو البلورة نفسها عند دورانها حول المحور دورة كاملة، أي أن $n = \frac{2\pi}{\theta}$ ، حيث θ هي الزاوية التي يكرر الجسم نفسه عندها.

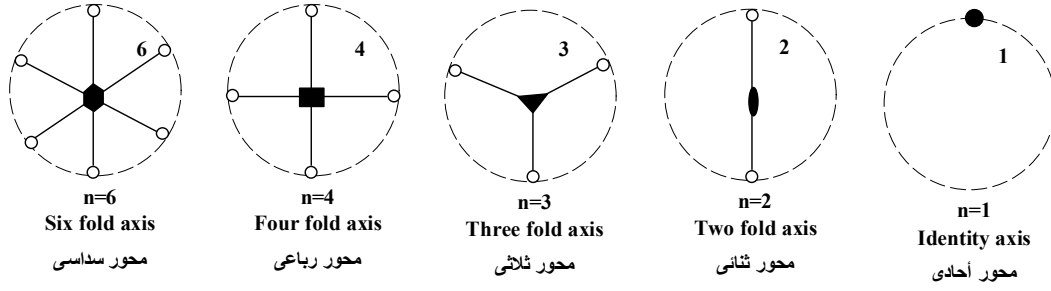


الشكل 2-18 تماثل الجسم حول محور.

وقد وجد أن رتبة التماثل، n، تأخذ فقط قيم عددية صحيحة (1، 2، 3، 4 و 6

فقط). لاحظ غياب الرقم 5. يبين الشكل 2-19 أنواع ورموز محاور التماثل ذات الرتب

المختلفة.



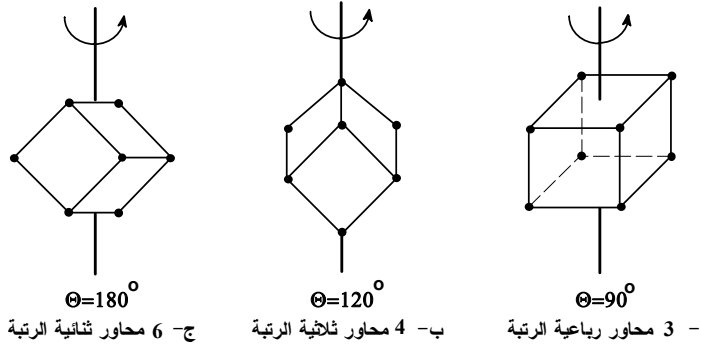
الشكل 2-19 أنواع ورموز محاور التماثل البلوري.

وفي ضوء ما سبق، يكون لفصيلة المكعب ثلاثة عشر محور تماثل، كما هو مبين

الشكل 2-20، وبياناتها كالآتي :

- عدد 3 محاور من الرتبة الرابعة يصل كل منها بين مراكز الأوجه المتقابلة (الجزء أ- من الشكل 2-20).

- عدد 4 محاور من الرتبة الثالثة يصل كل منها بين زاويتين مجسمتين متقابلتين (الجزء ب- من الشكل 2-20).



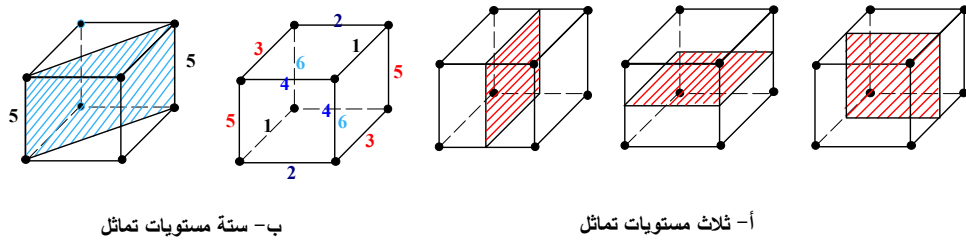
الشكل 2-20 محاور التماثل في فصيلة المكعب.

- عدد 6 محاور من الرتبة الثانية يصل كل منها بين النقطتين المنصفتين لحرفين متقابلين (الجزء ج- من الشكل 2-20).

2-6-2 مستوى التماثل PLANE OF SYMMETRY

يعرف مستوى التماثل بأنه المستوى الذي يقسم البلورة إلى نصفين متساويين

ومتشابهين بشرط أن يكون أحد النصفين صورة مرآة للنصف الآخر. ويلاحظ أن كل نقطة أو حرف أو وجه أو زاوية مجسمة على أحد جانبي مستوى التماثل يقابلها نقطة أو حرف أو وجه أو زاوية مجسمة على الجانب الآخر من مستوى التماثل. وفي ضوء ما سبق فإنه يكون لفصيلة المكعبى تسعة مستويات تماثل، كما هو مبين بالشكل 2-21، وبيانها كالآتي:



ب- ستة مستويات تماثل

أ- ثلاث مستويات تماثل

الشكل 2-21 مستويات التماثل في فصيلة المكعبى.

- عدد ثلاث مستويات تمر بمركز البلورة وتوازي أوجه المكعب، كما في الشكل 2-21(أ).

- عدد ستة مستويات تمر بمركز البلورة وكل مستوى منها يصل بين حرفين متقابلين، كما بالشكل 2-21(ب).

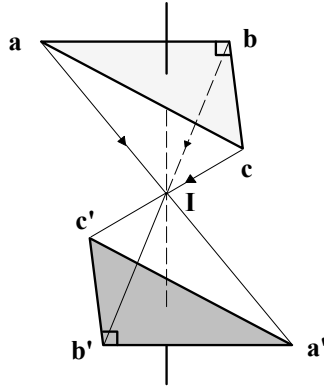
2-6-3 مركز التماثل CENTER OF SYMMETRY

مركز التماثل هو نقطة وهمية متوسطة في البلورة تتميز بأن أي وجهين أو حرفين أو زاويتين مجسمتين تتماثلان عبر هذه النقطة.

2-6-4 مركز الانقلاب CENTER OF INVERSION

يقال أن للبلورة مركز انقلاب إذا وجدت فيها نقطة تماثل انقلابي بشرط أن تظل

الخلية كما هي عند إجراء الانتقال الرياضي $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ عليها. يبين الشكل 2-22 أن المثلث abc ينطبق على نفسه بعملية انقلاب عبر مركز الانقلاب I فيتحول إلى المثلث $a'b'c'$. يقال في هذه الحالة أن المثلث متماثل تماثلاً انقلابياً عبر مركز التماثل I. تكون جميع الشبكات البرافية متماثلة الانقلاب ويمكن رؤية هذه الحقيقة بالرجوع إلى الشكل 2-22 أو بملاحظة أن لكل متجه انتقالي $\vec{R}_n = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}$ يوجد متجه معكوس $\vec{R}_n = -\vec{R}_n = -n_1\vec{a} - n_2\vec{b} - n_3\vec{c}$. كما يمكن أن يوجد مركز انقلاب للشبكة غير البرافية ويعتمد ذلك على تماثل الأساس.



الشكل 2-22

5-6-2 مستوى الانعكاس PLANE OF REFLECTION

مستوى الانعكاس في البلورة هو المستوى الذي يمكن أن يحدث (إجراء) عنده انعكاس للبلورة وتظل كما هي. لاحظ أن المستوى m ، في الشكل 2-18 (و) هو مستوى تماثل انعكاسي، أي أن الجسم ينطبق على نفسه بواسطة عملية انعكاس على هذا المستوى. ويمكن القول أن مستوى الانعكاس هو في الحقيقة مستوى تماثل. لاحظ أن ثلاثي الميل ليس له مستوى انعكاس، بينما يكون لأحادي الميل مستوى واحد في منتصف

المسافة بين القاعدتين وموازيا لهما ويكون للمكعب تسعة مستويات انعكاسية كما بينا من قبل.

2-6-6 محور الدوران AXIS OF ROTATION

يعرف محور الدوران بأنه المحور الذي إذا دارت حوله البلورة بزاوية ما تظل البلورة كما هي، تماما كما في حالة محور التماثل. أي أن كل محور تماثل هو محور دوراني.

2-6-7 مستوى الانزلاق SLIPPING PLANE

يوجد مستوى الانزلاق في البلورة عندما يتحدد مستوى الانعكاس بالانتقال الموازي لهذا المستوى بحيث يصل التركيب إلى تطابق ذاتي بواسطة الحركة والانعكاس عبر مستوى معين. ومما سبق يمكن القول بأن للمكعب 23 عنصر تماثل وبياناتها كالآتي :-

- عدد 13 محور تماثل: 3 محاور رباعية، 4 محاور ثلاثية و 6 محاور ثنائية.
- عدد 9 مستويات تماثل: 3 عمودية على الأوجه و 6 قطرية تصل بين الأحرف.
- مركز تماثل واحد.

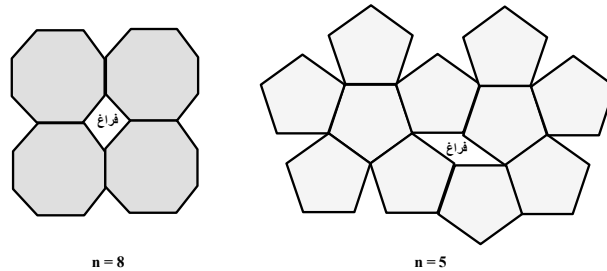
2-6-8 حول رتبة التماثل ABOUT SYMMETRY ORDER

في الشبكات البلورية لوحظ عدم وجود محاور تماثل (تماثل) ذات الرتبة 5، 7 أو 8... الخ. التماثل الخماسي ($n=5$)، مثلا، يمكن أن يكون موجودا للجزيئات أو لأشياء

أخرى خلاف الشبكات البلورية. يرجع ذلك إلى عدم إمكانية ملئ أي مستوى بلوري بخلايا أولية خماسية أو سباعية أو ثمانية الأضلاع من دون ترك فواصل فارغة فيما بينها أو من دون تراكمها بعضها على بعض، كما يتضح في الشكل 2-23. فلكي يغطي المستوى البلوري بمضلعات (خلايا أولية) عدد أضلاع أي منها n يجب أن تكون الزاوية المحصورة بين أي ضلعين عدد صحيح من 2π (أي تساوى $\frac{2\pi}{p}$ ، حيث p عدد صحيح). وبما أن زاوية المضلع تساوى $\frac{\pi(n-2)}{n}$ ، إذن $\frac{\pi(n-2)}{n} = \frac{2\pi}{p}$ ، وبالتالي نجد $p = \frac{2n}{n-2}$ وتكون p عدد صحيح عندما تكون $n = 3, 4, 6$ (أو عندما لا تساوى 5، 7، أو 8). وبناء على هذا فليست كل أنواع محاور التماثل موجودة في الشبكات.

يمكن إثبات أن رتبة التماثل n تأخذ القيم 1، 2، 3، 4 و 6 فقط وذلك باعتبار

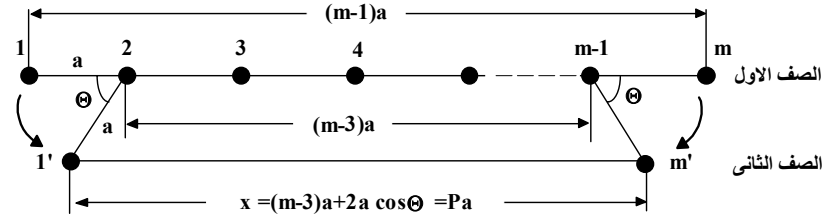
شبكة نقطية في بعدين كما هو موضح بالشكل 2-24.



الشكل 2-23

يتضح من الشكل أن الذرات تحتل مواضع النقاط الشبكية بحيث أن المسافة بين أي ذرتين هي a وبالتالي تكون المسافة بين الذرة رقم (1) والذرة رقم (m) في الصف الأول هي $a(m-1)$. فإذا كانت الزاوية θ هي زاوية الدوران المسموح به طبقاً لتماثل هذه الشبكة فهذا يعنى أن الذرة رقم (1) إذا دارت عكس عقارب الساعة حول الذرة رقم (2)

بزاوية θ فإنها تصبح في الصف الثاني عند موضع الذرة رقم $(1')$ ، كما يتضح في الشكل.



الشكل 2-24 شبكة نقطية في بعدين.

بالمثل، إذا دارت الذرة (m) مع عقارب الساعة حول الذرة رقم $(m-1)$ بنفس

الزاوية θ فإنها تصبح في الصف الثاني عند موضع الذرة رقم (m') . وبالتالي تكون

المسافة x بين الذرتين $(1')$ و (m') مساوية للمقدار Pa ، حيث P عدد صحيح. ومن

الشكل السابق نجد أن،

$$x = (m - 3)a + 2a \cos\Theta = Pa$$

$$\therefore \cos\Theta = \frac{3 + (P - m)}{2} ,$$

حيث $P < m$. وبما أن P عدد صحيح و m عدد صحيح أيضاً، إذن $(P-m)$ يكون عدد

صحيح. لا تتحقق المعادلة السابقة خلال دورة كاملة إلا في الحالات الآتية المبينة بالجدول

(2-2).

الجدول 2-2

رتبة الدوران n	θ	$\cos \theta$	$(P-m)$
1	0°	1	-1
6	$\pi/3=60^\circ$	$1/2$	-2
4	$\pi/2=90^\circ$	0	-3
3	$2\pi/3=120^\circ$	$-1/2$	-4
2	$\pi=180^\circ$	-1	-5

ويمكن تمييز الفصائل البلورية السبعة طبقاً لمحاور التماثل التي تخص كل منها

فقط كما يلي:

- 1- فصيلة المكعبى وتتميز بوجود أربعة محاور ثلاثية.
- 2- فصيلة الرباعي وتتميز بوجود محور ثلاثي واحد يميل بمقدار ثابت على المحاور البلورية.
- 3- فصيلة المستطيل القائم وتتميز بوجود ثلاث محاور ثنائية فقط.
- 4- فصيلة الثلاثي وتتميز بوجود محور رباعي واحد فقط.
- 5- فصيلة أحادى الميل وتتميز بوجود محور ثنائي واحد فقط ولا يوجد محور تماثل برتبة اكبر من ذلك.
- 6- فصيلة ثلاثي الميل وتتميز بعدم وجود أي محور تماثل.
- 7- فصيلة السداسي وتتميز بوجود محور سداسي واحد فقط.

7-2 أنظمة المستويات المهمة في فصيلة المكعبى

IMPORTANT PLANE SYSTEMS IN A CUBIC CRYSTALS

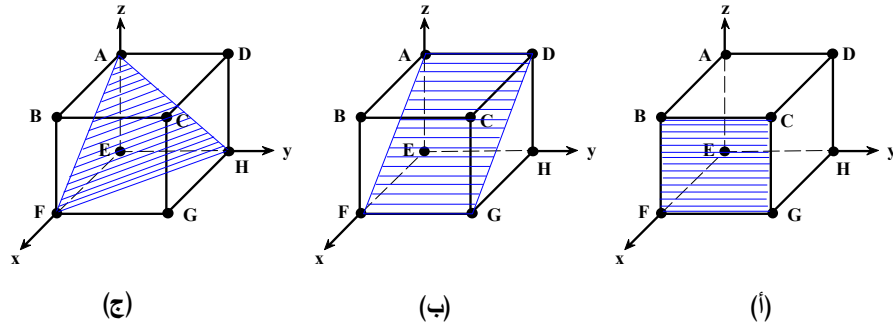
يوجد في فصيلة المكعبى ثلاث أنظمة من المستويات الذرية المهمة، حيث تتميز بأنها غنية جدا بالذرات وبالتالي يكون انعكاس الأشعة السينية (طبقا لقانون براج) على هذه المستويات أكثر كثافة لانعكاس الأشعة من غيرها من المستويات، كما سنبين فى باب لاحق. يتكون كل نظام من هذه الأنظمة من مجموعة من المستويات المتوازية تتفصل عن بعضها بمسافة ثابتة تعتمد على أبعاد البلورة وتختلف من مجموعة مستويات إلى مجموعة أخرى، كما هو مبين بالشكل 2-25. تتلخص خصائص مجموعات المستويات المهمة في

المكعب في الأتي:

(أ) - المجموعة الأولى: تتكون من أسطح المكعب (مثل المستوى ABCD على سبيل

المثال) والمستويات التي توازيها، كما هو موضح بالجزء (أ) من الشكل. تكون المسافة

بين هذه المستويات هي $d_1 = a$ ، حيث a هو طول ضلع المكعب.



الشكل 25-2 المستويات المهمة في فصيلة المكعبى

(ب) - المجموعة الثانية: هي مجموعة المستويات المتوازية التي تمر بمركز المكعب

وتصل بين حرفين متقابلين في المكعب، مثل AFGD كما هو موضح بالجزء (ب) من

الشكل. تميل هذه المستويات بزاوية 45° على المستويات المناظرة في المجموعة الأولى.

تكون المسافة بين هذه المستويات هي d_2 .

(ج) - المجموعة الثالثة: هي مستويات مثلثية متوازية مثل المستويات التي توازي

المستوى AFH المبين في الجزء (ج) من الشكل. المسافة بين هذه المستويات تساوى

d_3 .

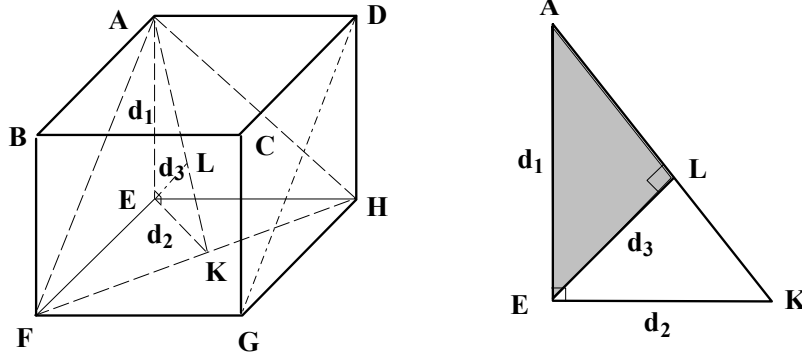
يمكن تعيين المسافات d_1 ، d_2 و d_3 ، بالرجوع إلى الشكل 26-2، على النحو

التالي : بما أن المسافة بين مستويات الأوجه مثل ABCD و EFGH هي d_1 فإن المسافة

بين المستويات المتوازية مثل AFGD والتي تميل بزاوية 45° على مستويات المجموعة الأولى هي d_2 ، حيث

$$d_2 = \frac{d_1}{\sqrt{2}}.$$

2-3



الشكل 2-26 إيجاد المسافات بين المستويات.

يمثل المثلث AFH مستويات المجموعة الثالثة حيث تكون المسافة بين مستويات هذه المجموعة المتوازية هي d_3 . يمكن إيجاد المسافة d_3 برسم المثلث AEK كما بالشكل السابق، حيث EK يكون عمودي على FH، و $EL = d_3$ يكون عمودي على AK.

من تشابه المثلثين ELK و AEK نجد أن

$$\frac{EL}{EK} = \frac{AE}{AK}$$

وبالتالي

$$\frac{d_3}{d_2} = \frac{d_1}{\sqrt{(d_1^2 + d_2^2)}}$$

أو

$$d_3 = \frac{d_1 d_2}{\sqrt{(d_1^2 + d_2^2)}}$$

$$\therefore d_2 = \frac{d_1}{\sqrt{2}}$$

مما سبق نحصل على

$$d_3 = \frac{d_1^2}{\sqrt{2} \cdot \sqrt{\left(d_1^2 + \frac{1}{2}d_1^2\right)}} = \frac{d_1}{\sqrt{3}} \quad 4-2$$

ويمكن كتابة النسب بين المسافات الثلاثة d_1 و d_2 و d_3 على النحو الآتي،

$$\frac{1}{d_1} : \frac{1}{d_2} : \frac{1}{d_3} = 1 : \sqrt{2} : \sqrt{3} \quad 5-2$$

وبنفس الطريقة السابقة، في حالة المكعب المتمركز الجسم، BCC، يمكن إثبات أن

$$\frac{1}{d_1} : \frac{1}{d_2} : \frac{1}{d_3} = 1 : \frac{1}{\sqrt{2}} : \sqrt{3} \quad 6-2$$

وفي حالة المكعب المتمركز الأوجه، FCC، يمكن إثبات أن

$$\frac{1}{d_1} : \frac{1}{d_2} : \frac{1}{d_3} = 1 : \sqrt{2} : \frac{\sqrt{3}}{2} \quad 7-2$$

وقد تمكن العالم براج بواسطة تجارب تشتت الأشعة السينية باستخدام بلورات

مختلفة من إثبات صحة العلاقات السابقة، وقد استخدمت هذه العلاقات للتعرف على شكل

الخلايا المكعبة وتحديد ما إذا كانت خلايا بسيطة أم متمركزة الجسم أو الأوجه.

8-2 أدلة ميلر MILLER'S INDICES

تختلف الظواهر الفيزيائية في المواد البلورية (وبالتالي الخصائص) تبعاً لاختلاف

الاتجاهات أو المستويات البلورية وذلك نظراً لعدم تجانس خواص البلورة في الأبعاد

الثلاثة. لذلك، فإنه من المهم عند وصف ظاهرة فيزيائية معينة أن نحدد الاتجاهات أو

المستويات البلورية التي تقاس فيها الظاهرة. وقد أمكن وصف المستويات البلورية

والاتجاهات بأدلة عددية تسمى أدلة ميلر (نسبة العالم الانجليزي ميلر ويشار إلى هذه

الأدلة أحياناً بالمعاملات أو القرائن). سنعرض فيما يلي طريقة تعيين أدلة ميلر وسنبين

كيف أنه بواسطة هذه الأدلة، يمكن رسم أو تمييز مستوى معين في البلورة عن مستوى آخر.

1-8-2 أدلة ميلر للمستويات البلورية MILLER'S INDICES FOR CRYSTAL PLANES

يمكن وصف المستويات البلورية بواسطة مجموعة من الأدلة العددية وضعها العالم الأنجليزى ميلر عام 1800. يمكن تعريف أدلة ميلر للمستوى بأنها مجموعة مكونة من ثلاثة أرقام تصف مكان واتجاه المستوى في البلورة. يمكن تعيين أدلة ميلر بإتباع الخطوات التالية وبالإشارة إلى الشكل 27-2 :-

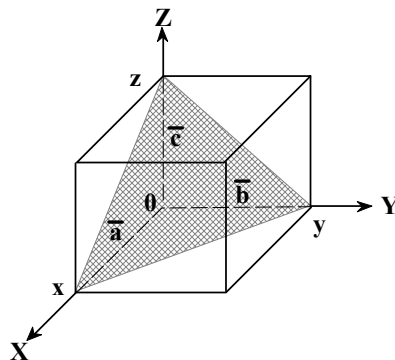
1- نفترض أن المحاور الكارتيزية تتطابق مع متجهات الأساس للبلورة (أحرف البلورة)

ويكون رأس البلورة هو بمثابة نقطة الأصل للمحاور، كما بالشكل.

2- نفترض أن نقاط تقاطع المستوى مع المحاور على امتداد متجهات الأساس $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$

هي x و y و z . تكون x عبارة عن مضاعف كسرى من a وتكون y عبارة عن

مضاعف كسرى من b وتكون z عبارة عن مضاعف كسرى من c .



الشكل 27-2

3- نكون مجموعة الأعداد الكسرية على النحو $(\frac{x}{a}, \frac{y}{b}, \frac{z}{c})$.

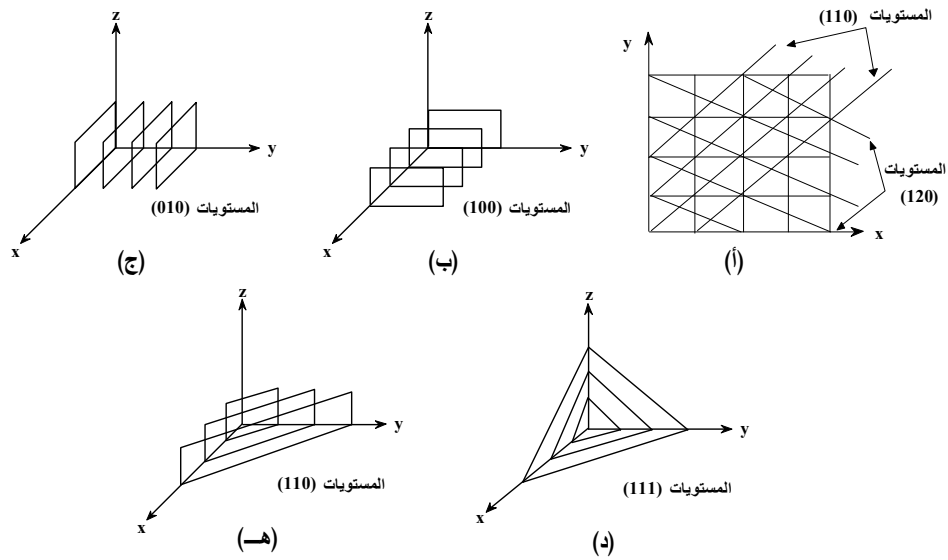
4- نأخذ مقلوب مجموعة الأعداد السابقة لنحصل على $(\frac{a}{x}, \frac{b}{y}, \frac{c}{z})$ ، ثم نختزل هذه

المجموعة إلى اصغر قيم للإعداد وذلك بالضرب في اصغر عامل مشترك للمقام.

5- تسمى المجموعة الأخيرة التي نحصل عليها بأدلة ميلر للمستوى وتكتب على الصورة

(hkl) . يبين الشكل 28-2 العديد من الأمثلة لتعيين أدلة ميلر للمستويات البلورية

الموضحة بالشكل.



الشكل 28-2 أمثلة لتعيين أدلة ميلر لمستويات بلورية.

عند وصف المستويات البلورية بواسطة أدلة ميلر يجب اخذ الملاحظات الآتية في

الاعتبار :

1- جميع الخواص تكون متساوية بين المستويات المتوازية ذات اتجاه معين ويكون لها

نفس أدلة ميلر.

2- لا تحدد أدلة ميلر مستوى معين فقط بل تصف أيضا مجموعة المستويات الموازية

له.

3- المستوى الموازي لأي إحداثي والذي له فاصل يساوي ∞ يكون له معامل ميلر على هذا المحور يساوي صفر.

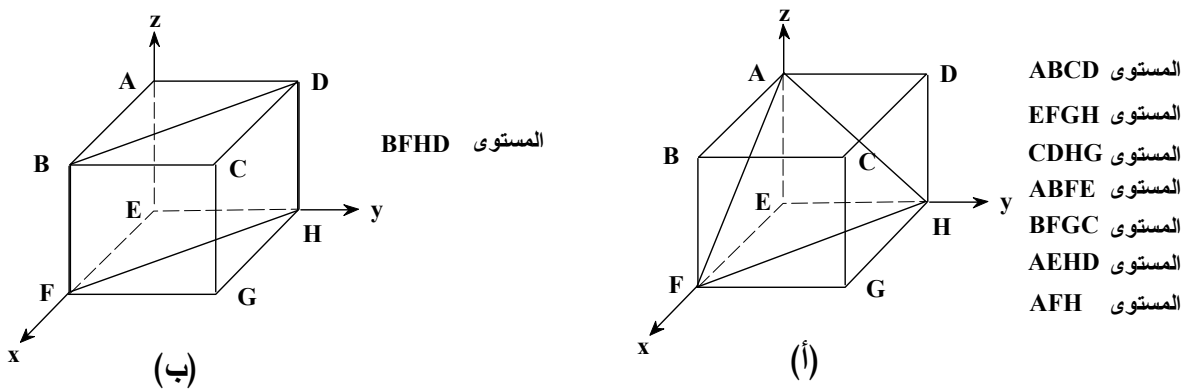
4- النسبة بين الأدلة هي العامل المهم وليس قيمة المعامل نفسه، فالمستوى (622) هو نفسه المستوى (311).

5- تقطع المستويات المتوازية والموازية لمستوى معين المحاور الثلاثة في مضاعفات صحيحة لتقاطع هذا المستوى، وبالتالي يكون لهذه المستويات نفس أدلة ميلر للمستوى الأول وتكتب على الصورة $\langle hkl \rangle$.

6- تدل الإشارة السالبة التي توضع أعلى المعامل على أن الأجزاء المقطوعة من المحاور تكون في الاتجاه السالب من نقطة الأصل.

مثال 2-2

عين أدلة ميلر للمستويات المبينة في الشكل 2-29.

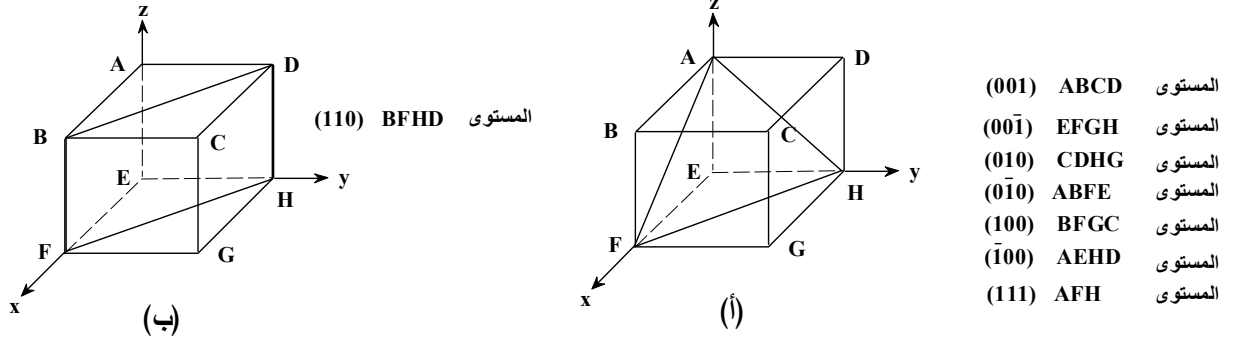


الشكل 2-29

الحل

بإتباع نفس الخطوات المذكورة في السابق يمكن تعيين أدلة ميلر على النحو المبين

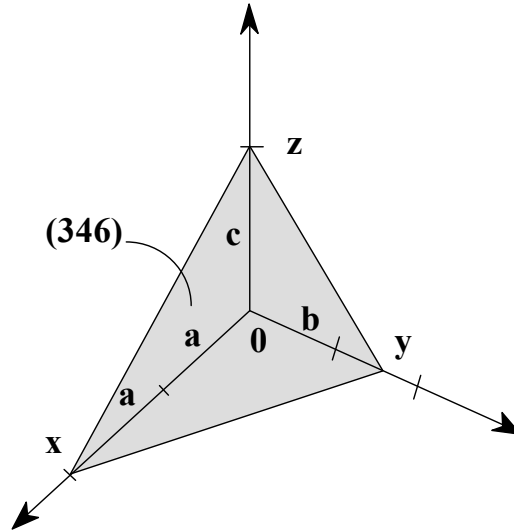
في الشكل 2-30.



الشكل 2-30

مثال 2-3

عين أدلة ميلر للمستوى المبين في الشكل 2-31.



الشكل 2-31

الحل

بالرجوع إلى الشكل 2-31 نجد أن $x = 2a$ و $y = \frac{3}{2}b$ و $z = c$. لتعين أدلة ميلر

(hkl) للمستوى المبين، نكون أولاً مجموعة الأعداد $\left(\frac{x}{a}, \frac{y}{b}, \frac{z}{c}\right) = \left(2, \frac{3}{2}, 1\right)$ ، ثم نعكسها

فنحصل على $\left(\frac{1}{2}, \frac{2}{3}, 1\right)$ ، وأخيراً نضربها في اصغر عامل مشترك للمقام (وهو 6) نحصل

على أدلة ميلر للمستوى على النحو $(hkl) = (346)$.

مثال 2-4

إذا كان مستوى يقطع المحاور الثلاثة عند القيم $\frac{a}{2}, \frac{b}{2}, \frac{3c}{4}$ ، أوجد أدلة ميلر لهذا

المستوى.

الحل

تكون النسب العددية هي $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}$ وتكون مقلوبات هذه النسب هي $2, 2, \frac{4}{3}$ أو (664)

وهي تكافئ (332)، وتكتب أدلة ميلر لهذا المستوى على الصورة (332).

مثال 2-5

إذا قطع مستوى ما في البلورة نصف وحده خلية في اتجاه محور الأساس a و ربع

وحده خلية في اتجاه محور الأساس b و ثلث وحده خلية في اتجاه محور الأساس c. أرسم

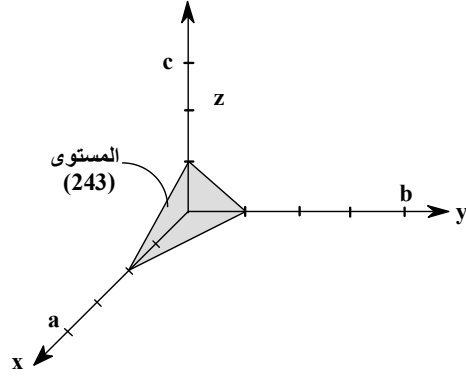
هذا المستوى ثم أوجد أدلة ميلر له.

الحل

تكون الأجزاء المقطوعة من المحاور الثلاثة هي $\frac{1}{2}a, \frac{1}{4}b, \frac{1}{3}c$ ، وبإتباع نفس

الخطوات المذكورة في المثال السابق، تكون الأدلة العددية هي 2, 4, 3 وبذلك تكون أدلة

ميلر هي (243). يبين الشكل 2-32 رسماً للمستوى المطلوب.



الشكل 2-32 رسم للمستوى (243).

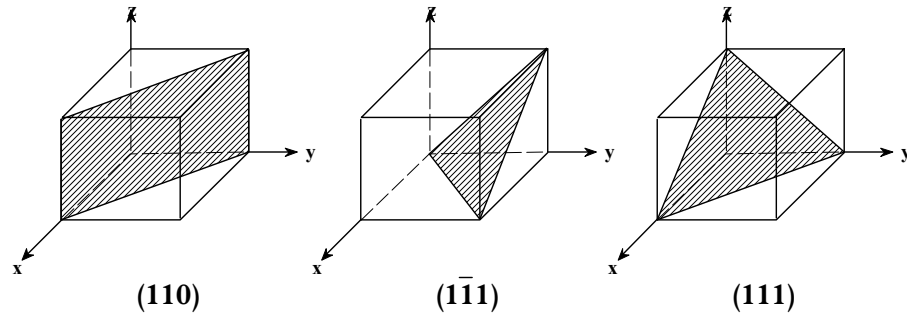
مثال 2-6

أرسم المستويات (110)، $(1\bar{1}1)$ ، (111)، $(2\bar{1}0)$ ، و (201) في خلية المكعب

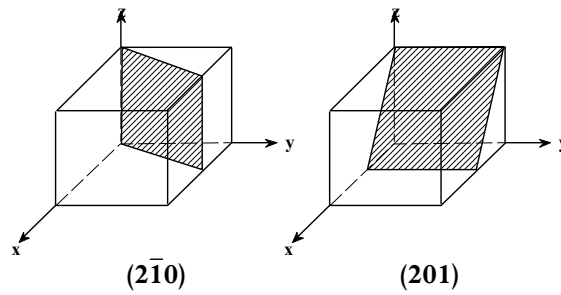
البسيط.

الحل

تكون المستويات المطلوبة كما هي مبينة في الشكل 2-33.



الشكل 2-33 رسم للمستويات المطلوبة في المثال 2-6.



تابع الشكل 2-33 رسم للمستويات المطلوبة في المثال 2-6.

مثال 7-2

وضعت بلورة احد الخامات من فصيلة المكعبي في مطياف الأشعة السينية فكانت فواصل (المسافات الفاصلة بين) أوجه البلورة a, b, c مقاسه بالانجستروم على النحو المبين بالجدول 3-2. أوجد أدلة ميلر لهذه الأوجه.

الجدول 3-2

الأوجه	a	b	c
1	0.287	1.0	0.251
2	-0.287	1.0	∞
3	∞	3.0	0.125
4	0.287	∞	∞
5	0.899	2.0	0.125
6	0.574	∞	0.125

الحل

نظرا لأن فواصل أوجه البلورة تكون مضاعفات أو قواسم للمستوى العشوائي (111) فإنه تكون الفواصل a, b, c للبلورة هي 0.287 و 1.0 و 0.251 على نحو الترتيب ويمكن، كالعادة، كتابة الفواصل a, b, c المسجلة في الجدول السابق على النحو التالي في الجدول 4-2.

الجدول 4-2

الأوجه	a	b	c
1	1	1	1
2	-1	1	∞
3	∞	3.0	$\frac{1}{2}$
4	1	∞	∞
5	3	2.0	$\frac{1}{2}$
6	2	∞	$\frac{1}{2}$

وتكون مقلوبات هذه الأرقام والتي تمثل أدلة ميلر على النحو التالي:

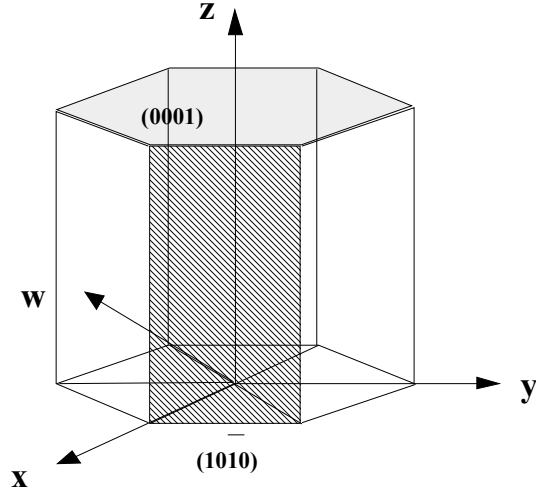
الأوجه	a	b	c	أدلة ميلر
1	1	1	1	(111)
2	-1	1	0	($\bar{1}$ 10)
3	0	1/3	2	(016)
4	1	0	0	(100)
5	1/3	1/2	2	(23 12)
6	1/2	0	2	(104)

2-8-2 أدلة 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 أنه 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 السفلي (القاعدة) هي $(000\bar{1})$ ، كما هو مبين بالشكل 2-34.

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 $(10\bar{1}0)$.



الشكل 2-34 أدلة ميلر لفصيلة السداسي.

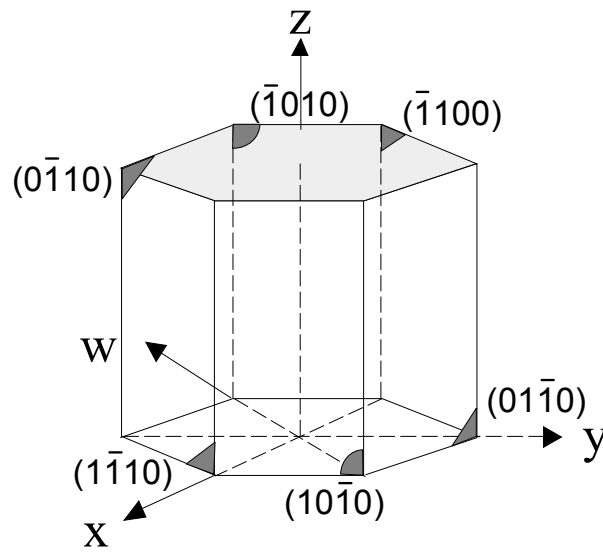
مثال 2-8

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 2-35.



الشكل 2-35

مثال 2-9

أثبت أنه عند استخدام أدلة ميلر لفصيلة السداسي (hkil) يكون $h + k + i = 0$.

الحل

بالرجوع إلى الشكل 2-36 يتضح أن، مساحة المثلث OAC + مساحة المثلث

OBC = مساحة المثلث OAB (باستخدام حساب المتجهات، حيث أن مساحة المثلث

المتكون من متجهين \vec{A} & \vec{B} بينها زاوية θ تساوى $\frac{1}{2}|\vec{A}||\vec{B}|\sin\theta$) فإننا

نحصل على،

$$\therefore \frac{1}{2}\left(-\frac{a}{i}\right)\left(\frac{a}{h}\right)\sin 60^\circ + \frac{1}{2}\left(-\frac{a}{i}\right)\left(\frac{a}{k}\right)\sin 60^\circ = \frac{1}{2}\left(\frac{a}{k}\right)\left(\frac{a}{h}\right)\sin 120^\circ.$$

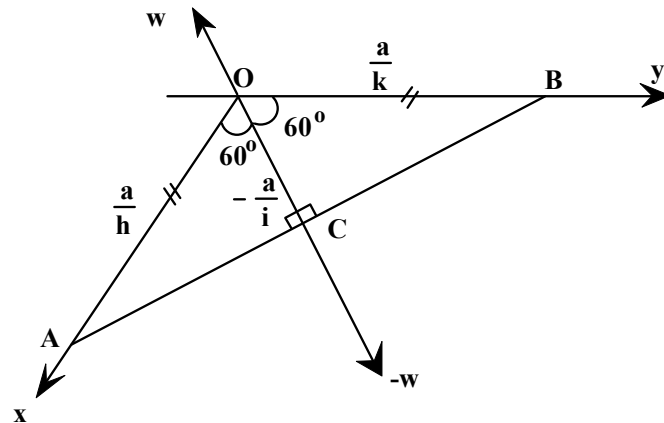
$$\therefore -\frac{1}{i}\left[\frac{1}{h} + \frac{1}{k}\right] = \frac{1}{hk}$$

$$\therefore h + k + i = 0$$

بالضرب في ihk نحصل على

ويمكن الحصول على نفس النتيجة عند تصور أن طول الضلع OC يساوى $-\frac{a}{i}$ لأنه على امتداد

المحور W في الاتجاه السالب.



الشكل 2-36

ملخص الباب

✕ يعرف الانتظام المحدود للذرات بأنه الانتظام قصير المدى والذي يغيب على المدى

الطويل.

✕ يعرف الانتظام الممتد للذرات بأنه الترتيب الذي يتكرر على المدى الطويل،

ويتواجد هذا النوع من الانتظام في المواد المتبلورة.

✕ يقال أن المادة الصلبة متبلورة عندما تكون فيها الذرات أو الجزيئات مرتبة بالشكل

الذي يجعل أماكنها تتكرر بانتظام تام في نموذج ثلاثي الأبعاد (يسمى بالشبيكة)

وعلى المدى الطويل.

✕ توجد الذرات أو المجموعات الذرية في المادة المتبلورة في الفراغ عند نقاط محددة

تسمى نقاط الشبيكة الفراغية التي تتميز بخصائص تماثل وتماثل معينة.

✕ يوجد نوعين من الشبيكات النقطية الفراغية هما: الشبيكات البرافية والشبيكات غير

البرافية.

✕ في الشبيكات البرافية تكون كل نقاط الشبيكة متعادلة أي تكون كل الذرات المكونة

للبلورة من نفس النوع ومتكافئة.

✕ أما في الشبيكة غير البرافية فتكون بعض نقاط الشبيكة غير متعادلة.

✕ متجهات الأساس في الشبكة هي مجموعة من المتجهات يمكن بدالاتها التعبير بشكل مناسب عن مواضع كل نقاط الشبكة باستخدام التعبير الرياضي.

✕ الشبكة البلورية عبارة عن شبكة برافية تتمتع بخاصيتين أساسيتين هما: الانتظام اللانهائي للعقد في الفراغ، ولها تماثل انتقالي للعقد ويمكن تعريف الشبكة البلورية بأنها شبكة نقطية + قاعدة.

✕ تكون خلية الوحدة، عادة، أصغر شكل هندسي يمكن بتكراره الحصول على الشبكة البلورية.

✕ تعرف خلية الوحدة الأولية بأنها أصغر خلية وحدة يمكن بتكرارها تغطية الشبكة البرافية وتحتوى على عقدة واحدة (نقطة واحدة).

✕ تسمى المحاور a و b و c و الزوايا α و β و γ بمتغيرات الشبكة لوحدة الخلية والتي يمكن بواسطتها معرفة شكل الخلية الهندسي وحساب حجمها.

✕ تمكن برافيس من تصميم أربع عشرة شبكة فقط تصف التراكيب البلورية للمواد مصنفة في سبع مجموعات رئيسية هي : المكعبى، الرباعي القائم، المستطيل القائم، ثلاثي التماثل، أحادى الميل، ثلاثي الميل و السداسي.

✕ التماثل هو تحول الشئ لكي ينطبق على نفسه مرة أخرى.

✗ في الشبيكات البلورية توجد ثلاث عناصر تماثل خارجية هي: مركز التماثل، محور التماثل و مستوى التماثل، وتوجد عناصر تماثل داخلية مثل الدوران والانقلاب والانعكاس والمستوى المنزلق.

✗ يعرف محور التماثل بأنه محور وهمي يمر بمركز البلورة أو الخلية، بحيث إذا دارت حوله البلورة دورة كاملة فإنها تكرر نفسها مرة أو أكثر.

✗ تتحدد رتبة التماثل للمحور بعدد المرات التي تكرر فيها البلورة وضعها خلال دورة كاملة.

✗ يعرف مستوى التماثل بأنه المستوى الذي يقسم البلورة على نصفين متساويين ومتشابهين بشرط أن يكون أحد النصفين صورة المرآة للنصف الآخر.

✗ مركز التماثل هو نقطة وهمية متوسطة في البلورة تتميز بأن أي وجهين أو حرفين أو زاويتين مجسمتين تتماثلان عبر هذه النقطة.

✗ مستوى الانعكاس في البلورة هو المستوى الذي يمكن أن يحدث عنده انعكاس للبلورة وتظل كما هي.

✗ يعرف محور الدوران بأنه المحور الذي إذا دارت حوله البلورة بزاوية ما تظل البلورة كما هي.

✗ يمكن إثبات أن رتبة التماثل n تأخذ القيم 1، 2، 3، 4 و 6 فقط.

✕ يوجد في فصيلة المكعبي ثلاث أنظمة من المستويات الذرية المهمة، حيث تتميز

بأنها غنية جدا بالذرات وبالتالي يكون انعكاس الأشعة السينية (طبقا لقانون براج)

على هذه المستويات أكثر كثافة لانعكاس الأشعة من غيرها من المستويات.

✕ يمكن وصف المستويات البلورية بواسطة أدلة ميلر للمستوى وهى عبارة عن

مجموعة مكونة من ثلاث أرقام تصف مكان واتجاه المستوى في البلورة.

أسئلة وتمارين

1- عرف كل من : الخلية الأولية، التماثل، خلية الوحدة، الشبكة، خلية فيجنر-زايتس و

أدلة ميلر؟

2- بين كيف يمكن للبلورة المكعبة المتمركزة الجسم أن تتجزأ إلى بلورتي مكعب بسيط

ثم بين أن البلورة المكعبة المتمركزة الأوجه يمكن أن تتجزأ إلى أربع بلورات فرعية

مكعبة بسيطة.

3- بفرض أن متجهات الأساس لخلية أولية للشبكة هي: $\vec{a} = \left(\frac{a}{2}\right)(\vec{i} + \vec{j})$ و $\vec{b} = \left(\frac{a}{2}\right)(\vec{j} + \vec{k})$

و $\vec{c} = \left(\frac{a}{2}\right)(\vec{k} + \vec{i})$ ، حيث \vec{i} و \vec{j} و \vec{k} هي متجهات الوحدة المعتادة على امتداد

المحاور الكارتيزية، فما نوع الشبكة البرافية؟

4- بين كيف لا تظهر الشبكة ثنائية البعد تماثل من الرتبة الخامسة.

5- أثبت حقيقة أن عدد الشبكات البرافية ثنائية البعد هو خمسة فقط: المائلة، المربعة،

السداسية، المستطيل البسيط والمستطيل المتمركز الجسم.

6- أثبت حقيقة أن الجسم الذي له مستويين تماثل انعكاسي يتقاطعان عند $\frac{\pi}{4}$ ، يظهر أيضا

محور تماثل من الرتبة الرابعة يقع حيث يتقاطع المستويين.

7- أثبت أن النسب بين المسافات الفاصلة بين مجموعات المستويات المهمة في حالة

المكعب المتمركز الجسم، BCC، هي على النحو $1 : \frac{1}{\sqrt{2}} : \sqrt{3} = \frac{1}{d_1} : \frac{1}{d_2} : \frac{1}{d_3}$.

8- ما هي الشبكة البرافية وما هي أدلة ميلر؟ بين أن المستوى (001) يكون عموديا

على المستوى (110) في بلورة المكعبى البسيط.

9- عين أدلة ميلر للمستويات المبينة بالشكل 2-37. (الحل: أ- (210)، ب- (110)، ج-

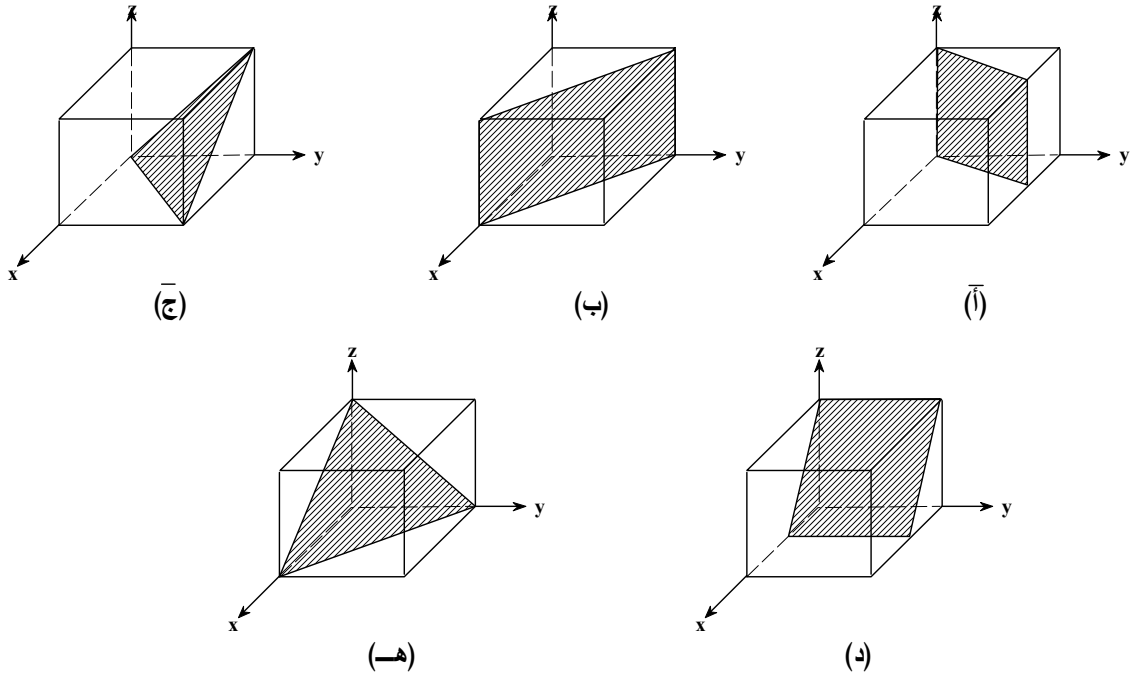
($\bar{1}\bar{1}0$)، د- (201)، هـ- (111)).

10- أثبت أن النسب بين المسافات الفاصلة بين مجموعات المستويات المهمة في حالة

المكعب المتمركز الأوجه، FCC، هي على النحو $\frac{1}{d_1} : \frac{1}{d_2} : \frac{1}{d_3} = 1 : \sqrt{2} : \frac{\sqrt{3}}{2}$.

11- ارسم خلية الوحدة لتركيب مكعبى بسيط وبين المستويات (111) الأربعة فيها.

12



الشكل 2-37

- عين أدلة ميلر لمجموعات المستويات المتوازية المبينة بالشكل 2-38. (الحل: أ-

($\bar{1}\bar{1}0$)، ب- (100)، ج- (112)).

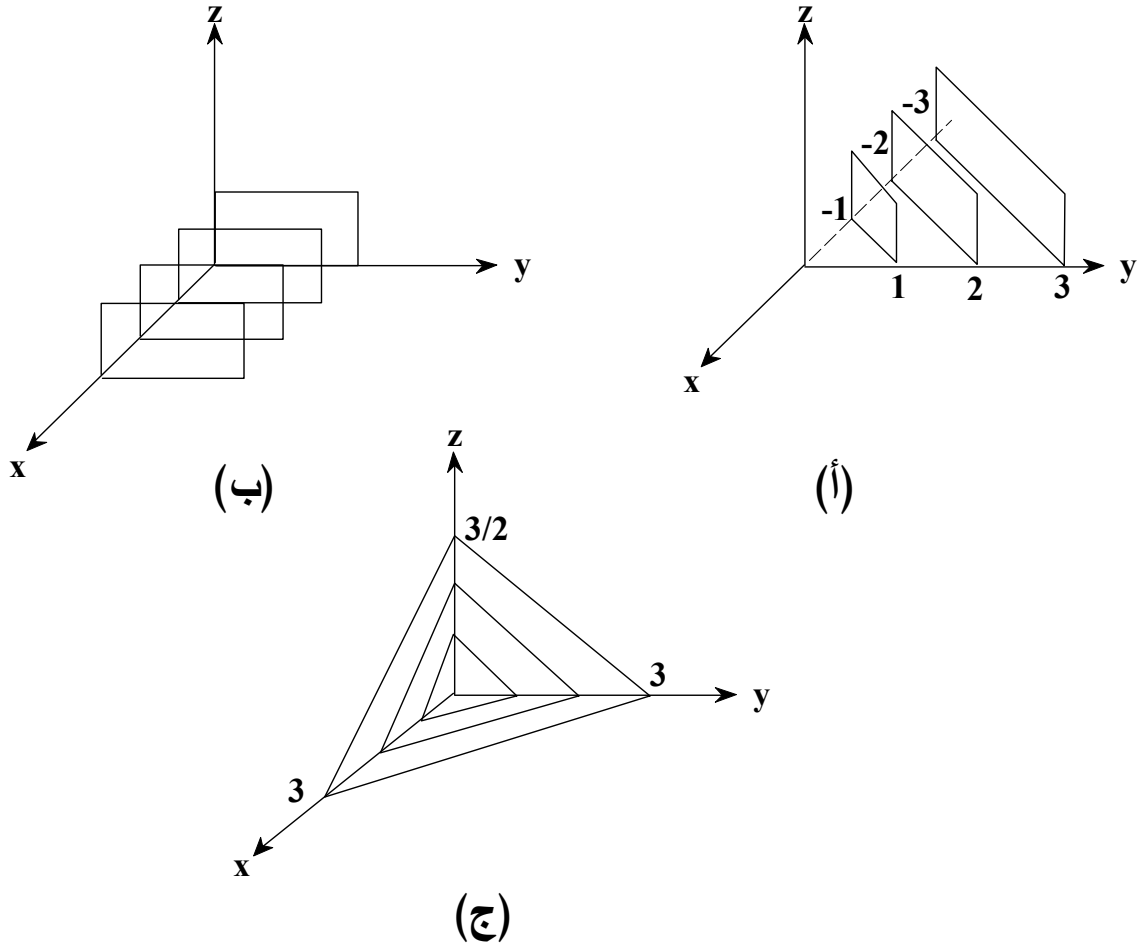
13- حدد نوع الفصيلة التي تنتمي لها الخلية التي لها:

أ- $a = 10.8 \text{ \AA}$ و $b = 9.47 \text{ \AA}$ و $c = 5.20 \text{ \AA}$ و $\alpha = 41^\circ$ و $\beta = 83^\circ$ و $\gamma = 93^\circ$.

ب- $a = b = 10.73 \text{ \AA}$ و $c = 14.3 \text{ \AA}$ و $\alpha = \beta = 90^\circ$ و $\gamma = 120^\circ$.

14- أثبت أن حجم الخلية الأولية تساوى ربع حجم خلية الوحدة للمكعبى المتمركز الأوجه وتساوى نصف خلية الوحدة للمكعبى المتمركز الجسم.

15- أرسم المستوى (111) لبلورة النحاس المتمركزة الأوجه ثم أحسب المسافة الفاصلة بين المستويات المتوازية مع هذا المستوى. (الجواب $d_{111} = 1.66 \text{ \AA}$).



الشكل 38

16- ارسم المستويات (110) و (111) في بلورة المكعب البسيط.

17- ما الخلية الأولية في بعدين؟ أرسم خلية الوحدة لتركيب مكعبي بسيط وبين

المستويات (111) الأربعة فيها وما عدد الذرات التي تنتمي لخلية الوحدة هذه.

18- عرف مصطلح "نصف القطر الذري" وبين كيف يمكن تعيينه بمعرفة أبعاد

(متغيرات) شبكة مكعبة.

19- عين نصف قطر أكبر ذرة يمكن أن توضع في فراغات بلورة الحديد المتمركزة

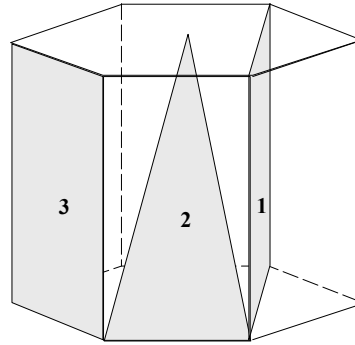
الجسم من دون رسم،

(أستعن بما يلزم من الخصائص الآتية للحديد، $a = 2.86 \text{ \AA}$ و الكتلة الذرية تساوى

55.84 جم/جزئ والكثافة 7.9 جم/سم³). (الجواب 0.3 أنجستروم).

20- عين أدلة ميلر للمستويات المظللة بالشكل 2-39. (الإجابة 1- $(12\bar{1}0)$ ، 2- $(10\bar{1}0)$ ،

3- $(\bar{1}\bar{1}10)$)



الشكل 2-39

الباب الثالث
خصائص البلورات

Crystals Properties



الباب الثالث

خصائص البلورات

Crystals Properties

المحتوى

- 1-3 الاتجاهات البلورية.
- 2-3 المسافة الفاصلة بين المستويات المتوازية.
- 3-3 العلاقة بين المسافة الفاصلة بين المستويات المتوازية وثابت الشبكة المكعبة.
- 4-3 النطاق ومحور النطاق
- 5-3 الزوايا بين النطاقات.
- 6-3 التركيب الذرى للبلورات.
- 7-3 العبوة المتراسة المكعبة والسداسية.
- 8-3 خصائص التركيب المكعبى المتمركز الأوجه والمتمركز الجسم.
- 9-3 التركيب البلوري لبعض البلورات البسيطة.
- 10-3 تعيين طاقة ترابط البلورة الأيونية.

الأهداف

بعد استكمال دراسة هذا الباب يكون الدارس قادراً على:-

- وصف الاتجاهات البلورية بواسطة أدلة ميلر.
- تعيين المسافة بين المستويات المتوازية بدلالة أبعاد الخلية.
- تعريف النطاق ومحور النطاق وحساب الزوايا بين النطاقات.
- حساب عدد الذرات في البلورة وتعيين نصف القطر الذرى.
- فهم معنى عدد التناسق للذرة وكيفية حسابه.
- معرفة خصائص التركيب المكعبى المتمركز الأوجه والمتمركز الجسم.
- شرح التركيب البلوري للعبوة المتراسة المكعبة والسداسية.
- شرح التركيب البلوري لبعض البلورات البسيطة وحساب كثافة الرص لها.
- استنتاج الصيغة الرياضية لطاقة الترابط فى البلورة الأيونية.

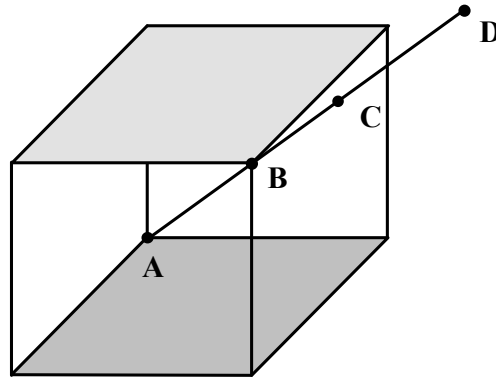
1-3 الاتجاهات البلورية CRYSTAL DIRECTIONS

نظرا لعدم تجانس الخواص الفيزيائية للبلورات في الاتجاهات البلورية المختلفة، فإنه من الواجب إيجاد طريقة لتعيين الاتجاهات في البلورة وتحديد مسميات لها. في الباب السابق، تم وصف المستويات البلورية بأدلة ميلر، وفي هذا الفصل سنعين أدلة ميلر للاتجاهات في البلورة.

يمكن تحديد الاتجاه في البلورة كما يلي. افترض أن خط مستقيم يمر عبر نقط الشبكة A و B و C، كما هو مبين بالشكل 1-3. لتحديد هذه النقط، نختار نقطة من نقط الشبكة ونعتبرها نقطة الأصل ولتكن النقطة A. ثم نختار متجه الشبكة الذي يصل النقطة A بأي نقطة على الخط ولتكن النقطة B، وهكذا. يمكن التعبير عن هذا المتجه بواسطة متجهات الأساس على الصورة،

$$\vec{R} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c} \quad 1-3$$

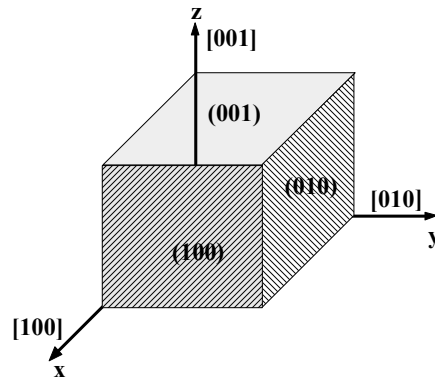
يتحدد الاتجاه، الآن، بمجموعة من الأعداد هي $[n_1, n_2, n_3]$. يجب حذف العامل المشترك بين هذه الأعداد إن وجد، بمعنى يجب أن تكون هذه المجموعة هي أصغر الأعداد التي لها نفس النسبة. وهكذا، يكون الاتجاه المبين في الشكل 1-3 ويرمز له بدلالة أدلة ميلر على النحو $[111]$.



الشكل 1-3 المتجه البلوري.

يلاحظ أن أدلة الاتجاه لاتجاه معين هي نفسها أدلة ميلر للمستوى العمودي على هذا الاتجاه، فمثلا الأدلة $[321]$ هي أدلة الاتجاه العمودي على المستوى (321) .

عندما يتوفر لخلية الوحدة بعض التماثل الدوراني، فربما يوجد العديد من الاتجاهات غير المتوازية والتي تكون متكافئة من وجهة نظر التماثل، وبالتالي نجد أن الاتجاهات $[100]$ و $[010]$ و $[001]$ في البلورة المكعبة متكافئة. يشار إلى جميع الاتجاهات المتكافئة مع الاتجاه $[n_1 n_2 n_3]$ بالرمز $\langle n_1 n_2 n_3 \rangle$ ذي الأقواس الزاوية وهكذا، فإن الرمز $\langle 100 \rangle$ في نظام المكعب يشير إلى الاتجاهات الستة التالية، $[100]$ ، $[010]$ ، $[001]$ ، $[0\bar{1}0]$ ، $[\bar{1}00]$ ، $[00\bar{1}]$. تدل الإشارة السالبة فوق العدد إلى القيمة السالبة للعدد، وبالمثل فإن الرمز $\langle 111 \rangle$ يشير إلى أقطار المكعب، الذي لا يكافئ الاتجاه $\langle 100 \rangle$ بالطبع. يبين الشكل 2-3 أدلة ميلر لثلاثة أوجه في المكعب وأدلة ميلر للاتجاهات العمودية عليها.



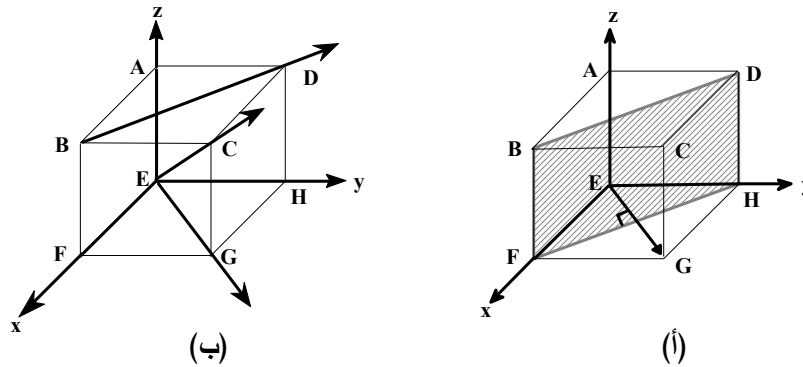
الشكل 2-3 الاتجاهات الأساسية في المكعب.

مثال 1-3

أرسم المستوى (110) والمتجه $[110]$ في المكعب البسيط.

الحل

من الشكل 3-3 (أ) يكون المستوى BFHD هو المستوى (110) حيث تكون تقاطعات هذا المستوى مع المحاور هي $\frac{1}{1}, \frac{1}{1}, 0$ أي $1, 1, \infty$. المتجه \vec{EG} هو المتجه العمودي على المستوى السابق وله الأدلة [110] ويكون مسقطه على محور x يساوي 1 وعلى المحور y هو 1 ومسقطه على محور z هو 0.



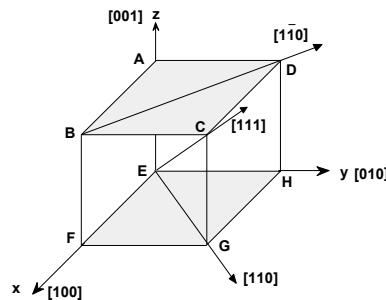
الشكل 3-3

مثال 2-3

عين أدلة ميلر للمتجهات المحددة في الشكل 3-3 (ب).

الحل

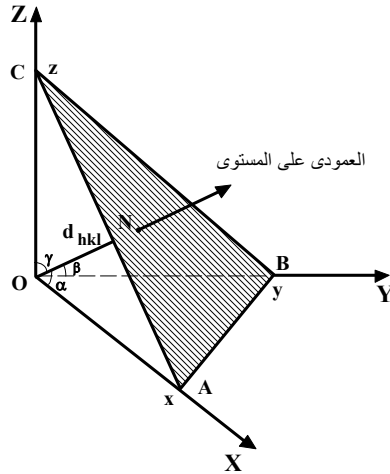
تكون أدلة ميلر للمتجهات المبينة بالشكل 3-3 (ب) كما هو مبين بالشكل 4-3.



الشكل 4-3

2-3 المسافة الفاصلة بين المستويات المتوازية

في تشتت الأشعة السينية بواسطة البلورة يحتاج المرء لمعرفة المسافة الفاصلة بين المستويات المتوازية (التي يكون لها نفس أدلة ميلر، (hkl)). دعنا نرمز لهذه المسافة بين المستوى (hkl) و نقطة الأصل بالرمز d_{hkl} . تعتمد المعادلة الحقيقية التي تعبر عن هذه المسافة على التركيب البلوري، حيث سنعتبر فيما يلي فقط الحالة التي تكون فيها المحاور متعامدة، بهدف التبسيط (وسوف ندرس حالة المكعب بالتفصيل في فصل لاحق). يمكننا حساب تلك المسافة وذلك بالرجوع إلى الشكل 3-5.



الشكل 3-5 إيجاد المسافة بين المستويات.

ينتمي المستوى المظلل إلى مجموعة المستويات $\langle hkl \rangle$. نتخيل مستوى آخر مواز للمستوى المظلل ويمر بنقطة الأصل. وهكذا فإن طول العمود ON المرسوم من نقطة الأصل على هذا المستوى يمثل المسافة d_{hkl} التي تفصل بين هذه المجموعة من المستويات المتوازية. نفترض أن هذا العمودي يصنع زوايا α و β و γ مع المحاور X و Y و Z وأن المستوى يقطع هذه المحاور في النقاط x و y و z ، على وجه الترتيب.

يتضح من الشكل 3-5 أن:

$$d_{hkl} = x \cos \alpha = y \cos \beta = z \cos \gamma. \quad 2-3$$

وحيث أنه طبقا لقانون جيب تمام الزاوية يكون

$$\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1. \quad 3-3$$

من المعادلتين السابقتين 2-3 و 3-3 وبعد التعويض عن جيب التمام للزوايا نحصل على

تعبير للمسافة d_{hkl} التي تفصل بين المستويات المتوازية $\langle hkl \rangle$ على الصورة الآتية،

$$\therefore d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{x^2} + \frac{1}{y^2} + \frac{1}{z^2}}} \quad 4-3$$

وحيث أن المسافات المقطوعة x و y و z ترتبط بأدلة ميلر h و k و l بالعلاقة،

$$h = n \frac{a}{x}, \quad k = n \frac{b}{y}, \quad l = n \frac{c}{z} \quad 5-3$$

حيث n هو عامل مشترك يستخدم لاختزال الأدلة إلى أصغر أعداد ممكنة و a و b و c هي

أبعاد الخلية. بالتعويض بهذه المعادلة في المعادلة 4-3 وبحذف x و y و z نحصل على

العلاقة،

$$\therefore d_{hkl} = \frac{n}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}}. \quad 6-3$$

ومن هذه المعادلة يمكن حساب المسافة بين المستويات بمعرفة أدلة ميلر وفواصل البلورة

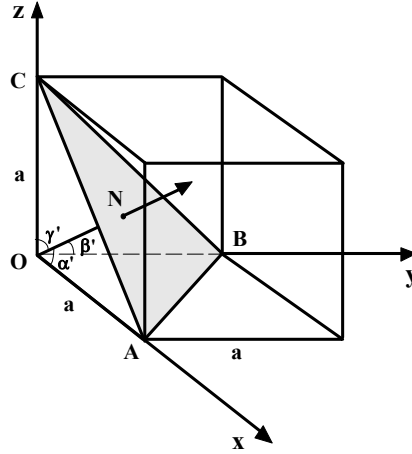
(أبعادها).

3-3 العلاقة بين المسافة الفاصلة بين المستويات المتوازية وثابت الشبكة المكعبة

لتعيين العلاقة بين المسافة الفاصلة بين المستويات المتوازية (d) وثابت الشبكة

للمكعب (a) نفرض أن المستوى المظلل في الشكل 3-6 ينتمي إلى مجموعة المستويات

$$\langle hkl \rangle$$



الشكل 3-6

يمثل العمود ON المرسوم من نقطة الأصل على هذا المستوى المسافة d التي

تفصل بين هذه المجموعة من المستويات المتوازية. نفترض أن هذا العمودي يصنع زوايا

α' و β' و γ' مع المحاور x و y و z على وجه الترتيب. وحيث أن مسافات تقاطع هذا

المستوى مع المحاور هي $OA = \frac{a}{h}$ و $OB = \frac{a}{k}$ و $OC = \frac{a}{l}$ وحيث أن $ON = d$ ، إذن يتضح

من الشكل 3-6 أن:

$$\cos \alpha' = \frac{d}{OA} = \frac{dh}{a}$$

$$\cos \beta' = \frac{d}{OB} = \frac{dk}{a}$$

$$\cos \gamma' = \frac{d}{OC} = \frac{dl}{a}$$

وحيث أنه طبقا لقانون جيب تمام الزاوية يكون

$$\cos^2 \alpha' + \cos^2 \beta' + \cos^2 \gamma' = 1$$

$$\therefore \left(\frac{dh}{a} \right)^2 + \left(\frac{dk}{a} \right)^2 + \left(\frac{dl}{a} \right)^2 = 1$$

$$\therefore \frac{d^2}{a^2}(h^2 + k^2 + l^2) = 1$$

أو

$$\therefore d^2 = \frac{a^2}{h^2 + k^2 + l^2}$$

$$\therefore d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad 7-3$$

وهكذا، نجد أن المسافة بين المستويات (111) في بلورة المكعب البسيط هي

$$d = \frac{a}{\sqrt{3}} \text{، حيث } a \text{ هو طول ضلع المكعب.}$$

مثال 3-3

إذا كان التركيب البلوري للرصاص هو FCC ونصف القطر الذري للرصاص هو

$$1.746 \text{ وحدة ذرية (au) . أوجد المسافة بين مجموعة المستويات } \langle 200 \rangle \text{ .}$$

الحل

كما سنبين لاحقاً، أن العلاقة بين نصف قطر الذرة وطول ضلع المكعب المتمركز

$$\text{الأوجه، FCC، } a = \frac{4r}{\sqrt{2}} \text{ فإنه في حالة بلورة الرصاص نحصل على،}$$

$$a = \frac{4r}{\sqrt{2}} = \frac{4 \times 1.746}{\sqrt{2}} = 4.93 \text{ au .}$$

وحيث أن لمجموعات المستويات $\langle 200 \rangle$ يكون لها قيم المعاملات $h = 2$ و $k = 0$ و $l = 0$ ،

فإن المسافة بين هذه المستويات تكون،

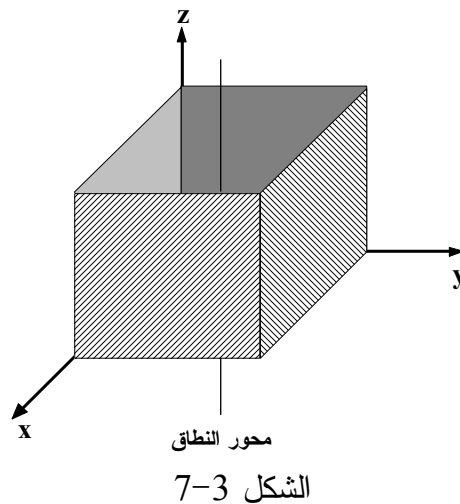
$$\therefore d_{200} = \frac{4.93 \text{ au}}{\sqrt{2^2 + 0^2 + 0^2}} = 2.456 \text{ au .}$$

ZONE AND ZONE AXIS

4-3 النطاق ومحور النطاق

تقع بعض أوجه البلورة غالبا في مجموعة ويقال أن هذه المجموعة من الأوجه موجودة في نطاق واحد والاتجاه الموازي لهذه المجموعة يسمى محور النطاق ويمر بمركز البلورة. فمثلا، المستويات الرأسية الأربعة في المكعب (جوانب المكعب) تقع في نطاق واحد (رأسي)، كما هو مبين بالشكل 3-7. وعندما يتلاقى مستويان يقعان في نطاق واحد ويكونان غير متوازيين فإن اتجاه تقاطعهما يكون موازيا لمحور النطاق $[uvw]$ ومن ثم يمكن تعيين اتجاه محور النطاق باستخدام قانون فايس (Weiss) الآتي ذكره.

تعرف العلاقة بين أدلة ميلر (uvw) للمستوى وأدلة اتجاه محور النطاق $[uvw]$ بقانون فايس. ينص قانون فايس على أنه إذا كان $[uvw]$ هو اتجاه محور النطاق وكانت (hkl) هي أدلة ميلر لمستوى في النطاق فإن $hu + kv + lw = 0$. يمكن استخدام هذا القانون لإيجاد أدلة الاتجاه لمتجه يقع في مستويين، كما يتبين في المثال التالي.



مثال 3-4

بفرض أن المتجه $[uvw]$ يقع في كل من المستوى $(h_1k_1l_1)$ والمستوى $(h_2k_2l_2)$

والمطلوب إيجاد أدلة هذا المتجه بدلالة أدلة ميلر للمستويين.

الحل

طبقا لقانون فايس وحيث أن المتجه $[uvw]$ يقع في المستوى $(h_1 k_1 l_1)$ فإن،

$$h_1 u + k_1 v + l_1 w = 0 \quad 8-3$$

وبالمثل، بما أن المتجه $[uvw]$ يقع في المستوى $(h_2 k_2 l_2)$ نحصل على

$$h_2 u + k_2 v + l_2 w = 0 \quad 9-3$$

بحل المعادلتين السابقتين يمكن الحصول على أدلة الاتجاه $[uvw]$.

من الواضح انه لا يمكن حل المعادلتين السابقتين بالطرق المعتادة نظرا لوجود

معادلتين فقط وثلاثة مجاهيل ورغم ذلك يمكن تعيين الحل بطريقة مبسطة وذلك بكتابة

أدلة ميلر للمستوى الأول مرتين في صف واحد وأدلة ميلر للمستوى الثاني مرتين في

صف ثاني وبإجراء عملية الضرب تبعا للأسهم الموضحة في المعادلة التالية ويمكن

إيجاد $[uvw]$.

$$\begin{array}{ccc} \begin{array}{c} h_1 | k_1 \\ h_2 | k_2 \end{array} & \begin{array}{c} l_1 \\ l_2 \end{array} & \begin{array}{c} h_1 | k_1 \\ h_2 | k_2 \end{array} \\ \hline (k_1 l_2 - k_2 l_1) & (h_2 l_1 - h_1 l_2) & (h_1 k_2 - h_2 k_1) \\ u & v & w \end{array}$$

10-3

لاحظ أن قيمة أدلة الاتجاه لا تعتمد على أي من المستويين كتب أولا فإن ذلك لا

يغير سوى إشارة أدلة الاتجاه من $[uvw]$ لتصبح $[\bar{u} \bar{v} \bar{w}]$ وهى نفسها أدلة تحقق (تصف)

الاتجاه ذاته.

يمكن باستخدام قانون فايس أيضا إيجاد أدلة ميلر لمستوى بمعلومية اتجاهين

لمحوري نطاق يجمعهما ذلك المستوى، كما يتضح من المثال التالي.

مثال 3-5

إذا كان لدينا اتجاهين لمحوري نطاقين لهما أدلة ميلر $[u_1 v_1 w_1]$ و $[u_2 v_2 w_2]$ ،
أوجد أدلة ميلر للمستوى الذي يجمعهما (hkl) .

الحل

نفرض أن أدلة ميلر للمستوى المذكور هي (hkl) .

طبقا لقانون فايس يكون

$$hu_1 + kv_1 + lw_1 = 0$$

$$hu_2 + kv_2 + lw_2 = 0$$

وبحل المعادلتين نحصل على أدلة ميلر للمستوى المذكور كما يلي:

$$\frac{\begin{array}{c|c} u_1 & v_1 \\ u_2 & v_2 \end{array} \begin{array}{c} \nearrow w_1 \\ \searrow w_2 \end{array}}{\begin{array}{c} (v_1 w_2 - v_2 w_1) \\ h \end{array}} \frac{\begin{array}{c|c} u_1 & w_1 \\ u_2 & w_2 \end{array} \begin{array}{c} \nearrow v_1 \\ \searrow v_2 \end{array}}{\begin{array}{c} (w_1 u_2 - w_2 u_1) \\ k \end{array}} \frac{\begin{array}{c|c} v_1 & w_1 \\ v_2 & w_2 \end{array} \begin{array}{c} \nearrow u_1 \\ \searrow u_2 \end{array}}{\begin{array}{c} (u_1 v_2 - u_2 v_1) \\ l \end{array}}$$

مثال 3-6

أوجد أدلة ميلر للوجه المشترك مع النطاقين $[134, 100]$ و $[010, 323]$.

الحل

نعين اتجاه محور النطاق الأول كما يلي:

$$[0 \ 4 \ \overline{3}]$$

وبالتالي تكون أدلة ميلر لاتجاه محور النطاق الأول هي $[04\bar{3}]$.

بالمثل، نعين اتجاه محور النطاق الثاني كما يأتي:

$$[3 \quad 0 \quad \overline{3}]$$

وبالتالي يكون اتجاه محور النطاق الثاني هو $[30\bar{3}]$. ثم نعين أدلة ميلر للوجه

المشترك مع النطاقين كما يلي:

$$[\overline{12} \overline{9} \overline{12}]$$

وعلى ذلك تكون أدلة ميلر للوجه المشترك مع النطاقيين هي $[12 \ 9 \ 12]$ وهذه الأدلة

تکافی [434].

مثال 3-7

إذا علمت أن أدلة الشكل السداسي هي (hkil). أوجد أدلة الوجه المشترك بين

النطاقين $[12\bar{3}3, 20\bar{2}1]$ و $[01\bar{1}0, 32\bar{5}3]$.

بإهمال المعامل i (مؤقتاً) في السداسي يمكن إيجاد اتجاه محور النطاق الأول كما

يلی:

$$\begin{array}{c|ccc|c} 1 & 2 & 3 & 1 & 2 & 3 \\ 2 & 0 & 1 & 2 & 0 & 1 \end{array} \quad \begin{array}{c} 3 \\ 1 \end{array}$$

$$[2 \ 5 \ \bar{4}]$$

وبالتالي تكون أدلة اتجاه محور النطاق الأول هي $[25\bar{4}]$.

وبنفس الطريقة يمكن إيجاد اتجاه محور النطاق الثاني كما يلي:

$$\begin{array}{c|ccc|c} 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 3 & 2 & 3 & 3 & 2 & 3 \end{array} \quad \begin{array}{c} 0 \\ 3 \end{array}$$

$$[3 \ 0 \ \bar{3}]$$

وبالتالي تكون أدلة اتجاه محور النطاق الثاني هي $[30\bar{3}]$.

ثم نعين الأدلة hkl للوجه المشترك بين الاتجاهين كالآتي:

$$\begin{array}{c|ccc|c} 2 & 5 & \bar{4} & 2 & 5 & \bar{4} \\ 3 & 0 & \bar{3} & 3 & 0 & \bar{3} \end{array} \quad \begin{array}{c} \bar{4} \\ \bar{3} \end{array}$$

$$[\bar{15} \ \bar{6} \ \bar{15}]$$

فتكون الأدلة hkl للوجه المشترك في حالة السداسي هي $\bar{15}\bar{6}\bar{15}$ التي هي $\bar{5}25$ أو

ولإيجاد المعامل i ، الذي أجلناه في بداية الحل، نعلم أنه في حالة السداسي يكون

$h + k + i = 0$ وبالتالي فإن $i = -(h + k) = -(5 + 2)$ ويكون $i = -7$. وعلى ذلك تكون أدلة ميلر

للوجه المشترك بين النطاقيين المذكورين في هذا المثال هي $(5\bar{2}7)$.

5-3 الزوايا بين النطاقات ANGLES BETWEEN ZONES

يمكن إيجاد الزاوية θ بين الاتجاهين $[u_1 v_1 w_1]$ ، $[u_2 v_2 w_2]$ بواسطة العلاقة

الآتية،

$$\cos \theta = \frac{u_1 u_2 + v_1 v_2 + w_1 w_2}{\sqrt{u_1^2 + v_1^2 + w_1^2} \sqrt{u_2^2 + v_2^2 + w_2^2}} \quad 11-3$$

وحيث أن أدلة الاتجاه للعمودي على المستوى الذي له الأدلة العددية (hkl) تكون

$[hkl]$ ، فإنه يمكن إيجاد الزاوية بين المستويين $(u_1 v_1 w_1)$ و $(u_2 v_2 w_2)$ بالعلاقة السابقة.

مثال 8-3

في وحدة خلية المكعبى البسيط SC، أوجد الزاوية بين العمودين على الوجهين

الذين لهما أدلة ميلر للوجهين هي (100) و (010) .

الحل

باستخدام المعادلة 11-3 نحصل على

$$\begin{aligned} \cos \theta &= \frac{1 \times 0 + 0 \times 1 + 0 \times 0}{(1^2 + 0^2 + 0^2)^{\frac{1}{2}} (0^2 + 1^2 + 0^2)^{\frac{1}{2}}} = 0 \\ \therefore \theta &= \cos^{-1} 0 = 90^\circ \end{aligned}$$

6-3 التركيب الذري للبلورات ATOMIC STRUCTURE OF CRYSTALS

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

1-6-3 عدد الذرات في وحدة الخلية

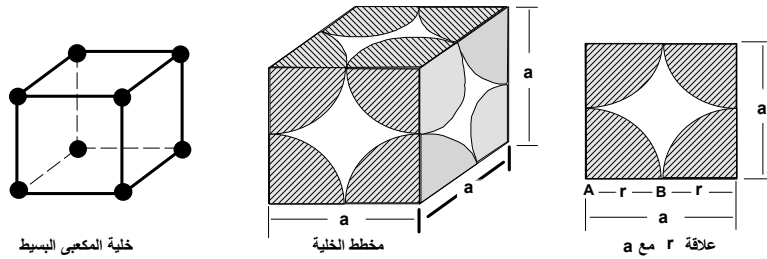
لتعيين عدد الذرات في وحدة الخلية يجب معرفة الشكل الهندسي للخلية ونصف القطر الذري لها. يعرف نصف القطر الذري على أنه نصف المسافة بين أقرب ذرتين متجاورتين في بلورة عنصر نقي مع مراعاة أن أقرب ذرتين متجاورتين يجب أن تلامس كل منهما الأخرى، كما سنبين لاحقا.

تأتي أهمية دراسة شبكات المكعبى بوجه عام والمتمركز الجسم والأوجه بوجه خاص لأن أغلب عناصر الجدول الدوري تتبلور مكونة شبكة بلورية مكعبة، ولهذا سنولى هذه الفصيلة مزيدا من الاهتمام في هذا الفصل.

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 8-3 كالآتي. طبقا للتعريف، تكون المسافة AB هي نصف القطر الذرى، ومن الشكل يتضح أن $r = \frac{a}{2}$ ، حيث a هو طول ضلع الخلية المكعبة.



الشكل 8-3 شكل الذرات في خلية المكعبى البسيط

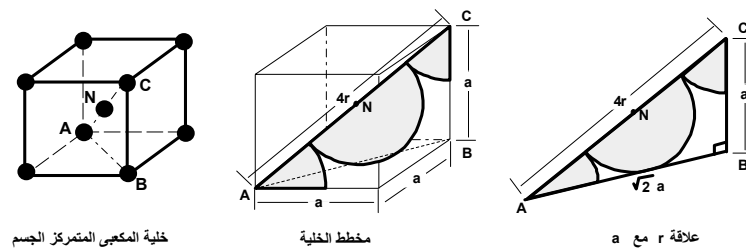
BODY CANTERED CUBIC, BCC

ب- المكعبى المتمركز الجسم

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 الشكل 9-3. يتضح من الشكل أن الذرتين C و N هما أقرب الجيران كل منهما للآخر. ومن هندسة

الشكل نجد أن $r = \frac{CN}{2}$ وحيث أن

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



الشكل 9-3 شكل الذرات في خلية المكعبى المتمركز الجسم

ويكون نصف القطر الذري هو

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

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

أو

FACE CENTERED CUBIC, FCC

ج- المكعبى المتمركز الأوجه

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 3-10 يمكن تعيين العلاقة بين نصف القطر الذري و أبعاد الخلية كما

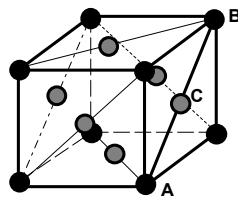
يلى: يتضح أن الذرتين A و C هما أقرب الجيران كل منهما للآخر وبالتالي يكون نصف

القطر الذري هو

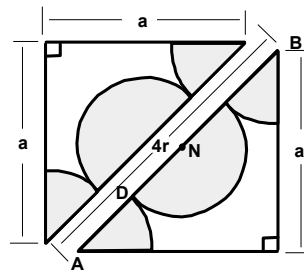
$$r = AD = \frac{AC}{2} = \frac{AB}{4}$$

$$\therefore AB = \sqrt{2} a$$

$$\therefore r = \frac{\sqrt{2} a}{4} \quad \& \quad a = \frac{4r}{\sqrt{2}}$$



خلية المكعبى المتمركز الوجه



علاقة r مع a

الشكل 3-10 شكل الذرات في المكعبى المتمركز الأوجه

من الشكل 3-10 يتضح أنّ القطر AB يساوي أربعة أمثال نصف القطر الذري.

من الدراسة السابقة (في الباب السابق)، نلاحظ أن الخلايا الأولية لشبكات

المكعبى المتمركزة الأوجه والمتمركزة الجسم ليس لها تماثل (تتناظر) المكعب أو أن

تماثلها أقل من تماثل المكعب. وطالما أن تماثل المكعب هو نفس تماثل الشبكة المكعبة

سواء كانت متمركزة الأوجه أو الجسم فإنه عادة يتم التعامل مع خلايا الوحدة غير الأولية

لأنها مكعبة الشكل. في الجدول 3-1 نوجز بعض الخصائص المهمة للشبكة المكعبة.

الجدول 3-1 بعض خصائص الشبكة 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	$\frac{\sqrt{3}}{2} a = 0.86 a$	$\frac{a}{\sqrt{2}} = 0.7a$

مثال 3-9

إذا كان الوزن الجزيئ للحديد هو ($W = 55.85$) وكثافته هي 7.86 جم/سم³ أوجد

طول ضلع الخلية إذا كان الحديد يتواجد في صورة مكعبى متمركز الجسم. (عدد

أفوجادرو $N = 6.02 \times 10^{23}$ /gm/mole).

الحل

يكون عدد ذرات الحديد لوحدة الخلية هو $n = 8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$ ومن العلاقة

$$\rho = \frac{WA}{N a^3}, \text{ حيث } \rho \text{ هو الكثافة و } W \text{ هو الوزن الجزيئي و } n \text{ هو عدد الذرات لوحدة الخلية}$$

و a هو طول ضلع الخلية نحصل على،

$$a^3 \times 7.86 = \frac{2 \times 55.85 W}{6.02 \times 10^{23}}$$

$$a = 2.87 \times 10^{-8} \text{ cm} = 2.87 \text{ \AA}$$

مثال 3-10

أحسب طول ضلع خلية الوحدة لكل من :

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

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

أنجستروم.

الحل

(أ) في حالة الفضة يكون

$$a = \frac{4r}{\sqrt{2}} = \frac{4 \times 1.441}{\sqrt{2}} = 3.078 \text{ \AA}$$

(ب) في حالة النحاس يكون

$$a = \frac{4r}{\sqrt{2}} = \frac{4 \times 1.276}{\sqrt{2}} = 3.08 \text{ \AA}$$

3-6-2 الكثافة الذرية لمستويات البلورة ATOMIC DENSITY OF CRYSTAL PLANES

لدراسة الخصائص الميكانيكية (وخاصة السلوك اللدن) لبلورات المعادن، يجب معرفة كثافة الذرات الواقعة على المستويات البلورية المختلفة وذلك لتحديد إمكانية انزلاق المستويات على بعضها بعض من عدمه. تعرف الكثافة الذرية للمستوى البلوري بأنها عدد الذرات لوحدة المساحات في مستوى بلوري معين. يمكن توضيح كيفية حساب الكثافة الذرية للمستوى بواسطة الأمثلة الآتية:

مثال 3-11

في بلورة الرصاص، أحسب الكثافة الذرية للمستويات: أ- (100) ، ب- (111) و ج- (110)، إذا علمت أن الرصاص يتبلور على شكل مكعبي متركز الأوجه وله $a = 4.93 \text{ \AA}$.

الحل

(أ) في 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

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

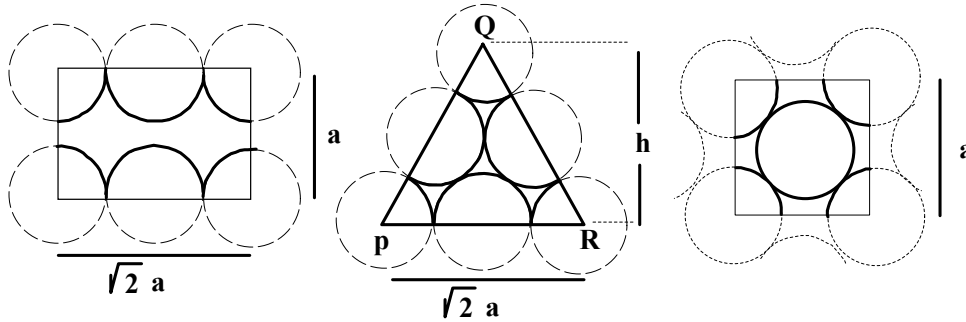
(ب) في المستوى (111) يكون توزيع الذرات كما هو مبين بالشكل 3-11 (ب). يحتوى هذا

المستوى على ذرتين اثنتين $\left(2 = 3 \times \frac{1}{6} + 3 \times \frac{1}{2}\right)$ لكل مثلث PRQ، ارتفاعه $h = \sqrt{2} a \cos 30^\circ$

وطول قاعدته تساوى $\sqrt{2} a$ وبالتالي تكون مساحته تساوى $\frac{1}{2} \times \sqrt{2} a \times \sqrt{2} a \times \cos 30^\circ = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2$

و تكون الكثافة الذرية لهذا المستوى تساوى

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



ج- المستوى (110)

ب- المستوى (111)

أ- المستوى (100)

الشكل 3-11 توزيع الذرات في المستويات المطلوبة.

(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 هي

$$\rho_{(110)} = \frac{2 \text{ atoms}}{\sqrt{2} a^2 \text{ mm}^2} = \frac{2 \text{ atoms}}{\sqrt{2} (4.93 \times 10^{-7})^2 \text{ mm}^2} .$$

$$= 5.82 \times 10^{12} \text{ atoms/mm}^2$$

3-6-3 عدد التناسق للذرة ATOMIC COORDINATION NUMBER

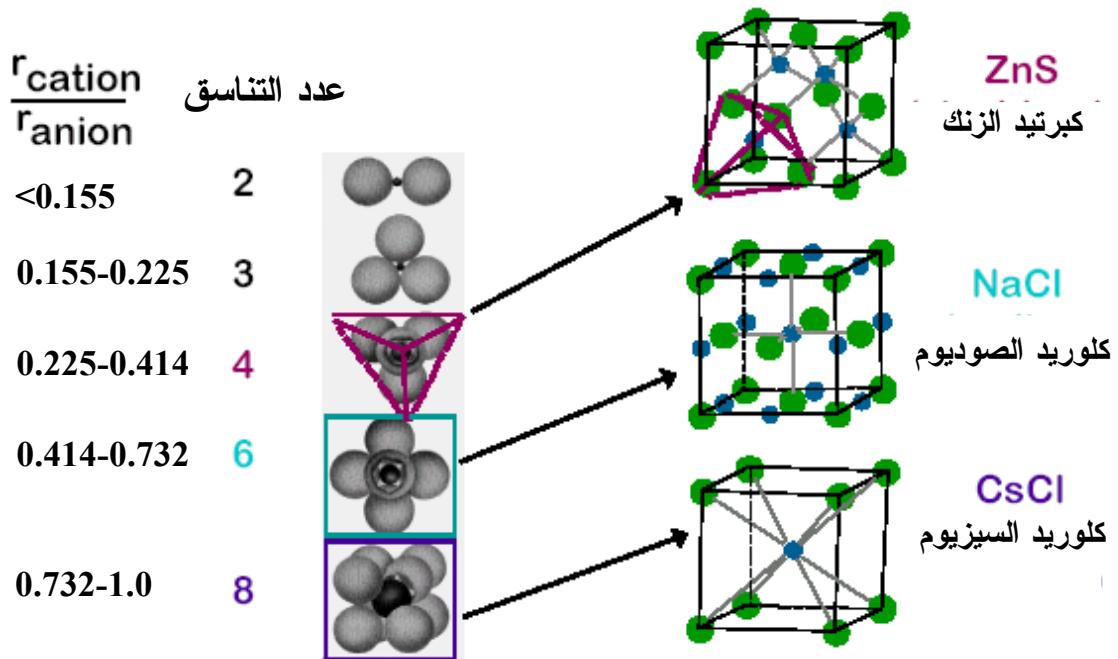
يمثل عدد التناسق لعقدة فى الشبكة (الذرة) مدى قدرة تراص الذرات فى الشبكة

البلورية ويعرف بأنه عدد أقرب العقد فى الشبكة بالنسبة لعقدة معينة، أي أنه عدد أقرب

العقد المجاورة لتلك العقدة. وحيث أن العقد فى الشبكة البرافية متماثلة من ناحية التوزيع

الفضائي مع ما يحيط بكل عقدة من بقية العقد فإن عدد التناسق يكون هو نفسه لكل عقد شبكة معينة أو يكون خاصية من خصائص تلك الشبكة. في المكعب البسيط نجد أن عدد التناسق هو ستة، كما يتبين في الشكل 3-12. كذلك، يكون عدد التناسق في المكعب المتمركز الجسم هو 8 ، بينما يكون 12 في المكعب المتمركز الأوجه.

نعلم أن المركبات الأيونية تتركب من ايونات مختلفة حيث يرتبط كل كاتيون مع أنيون وهكذا. يتكرر هذا الشكل من الارتباط وتتكون بلورات هذه المواد. لذلك فإن للمركبات الأيونية عدنان للتناسق، يكون العدد الأول عدد التناسق للكاتيونات ويكون الثاني عدد التناسق للأنيونات. وبشكل عام، يزداد عدد التناسق في المركبات الأيونية مع زيادة النسبة بين نصف قطر الكاتيون ونصف قطر الأنيون $\left(\frac{r_{cation}}{r_{anion}}\right)$ ، بمعنى كم من الأنيونات يمكنك ترتيبها حول الكاتيون. يبين الشكل 3-12 المفهوم السابق وبعض أمثلة التركيب.



الشكل 3-12 بعض الأمثلة على العدد التناسق

مثال 3-12

بناء على نصف القطر الأيوني المسجل في الجدول التالي، ما التركيب البلوري

الذي تتوقعه لأكسيد الحديد، FeO؟

نصف القطر الأيوني للأنيونات $a_{anion}(nm)$		نصف القطر الأيوني للكاتيونات $r_{cation}(nm)$	
0.140	O^{2-}	0.053	Al^{3+}
0.181	Cl^{-}	0.077	Fe^{2+}
0.133	F^{-}	0.069	Fe^{3+}
--	---	0.100	Ca^{2+}

الحل

بالتعويض عن أنصاف الأقطار وتعيين النسبة نجد

$$\frac{r_{cation}}{r_{anion}} = \frac{r_{Fe}}{r_O} = \frac{0.077}{0.140} = 0.55$$

بناء على النسب المعطاة في الشكل 3-12 يكون العدد التناسقي = 6 ويكون

التركيب البلوري مماثل لتركيب بلورة كلوريد الصوديوم، أي مكعبي متمركز الوجه.

مثال 3-13

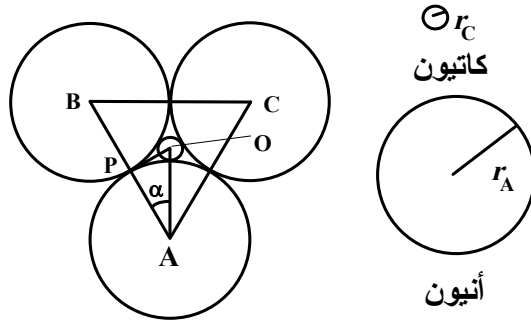
اثبت أن أقل نسبة بين نصف قطر الكاتيون ونصف قطر الأنيون للعدد التناسقي

3 هي 0.155.

الحل

بفرض أن نصف قطر الكاتيون هو r_c و نصف قطر الأنيون هو r_a كما يبين

الشكل 3-13



الشكل 3-13

$$\therefore \overline{AP} = r_A \text{ \& } \overline{AO} = r_A + r_C$$

$$\therefore \frac{\overline{AP}}{\overline{AO}} = \frac{r_A}{r_A + r_C} = \cos \alpha = \cos 30^\circ = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

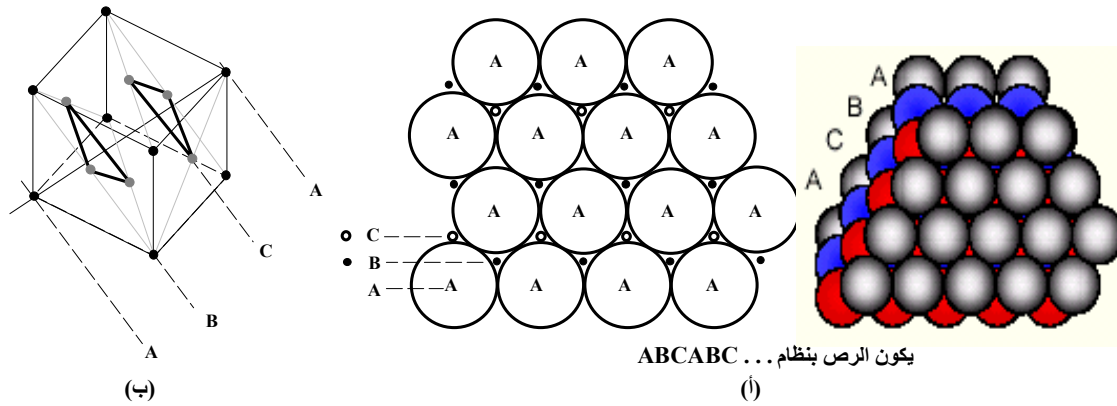
$$\therefore \frac{r_C}{r_A} = \frac{1 - \frac{\sqrt{3}}{2}}{\frac{\sqrt{3}}{2}} = 0.155$$

7-3 العبوة المتراسة المكعبة والسداسية CUBIC AND HEXAGONAL CLOSE-PACKED

لدراسة التركيب البلوري للمواد يتم استبدال الذرات أو المجموعات الذرية بنقط فراغية أو عقد ليتكون هيكل نظري يعتبر بمثابة الشبكة البرافية. الفرق بين هذه الشبكة النظرية والتركيب البلوري الحقيقي هو أن الذرات لا تمثل نقط منفصلة ولكنها تكون مرتبة بالشكل الذي يملأ فراغ البلورة كما إنها تكون قريبة بعضها من بعض بحيث تبدو كأنها متلامسة. سندرس الآن نموذجاً نظرياً للتركيب البلوري وسنفترض أن الذرات كرات مصمتة غير قابلة للانضغاط.

عند تعبئة كرات متشابهة (لها نصف القطر r) في وعاء كبير، فإن مراكز هذه

الكرات تكون بمثابة نقط فراغية وتكون شبكة، ولكي يكون الرص جيدا يجب أن يكون الفراغ المتروك (الحجم الخالي) بين الكرات أقل ما يمكن، نرتب في البداية مجموعة من الكرات لتكون طبقة متراسة 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:



الشكل 3-14

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 الجسمي للمكعب (الاتجاه (111))، كما هو مبين بالشكل 3-14(ب). تسمى هذه الخلية المكعبة بالعبوة المكعبة المتلاصقة الرص.

تعرف كثافة الرص (Packing Density, PD) بأنها النسبة بين الحجم المشغول

بالذرات إلى حجم الخلية. في المكعبى المتمركز الأوجه تحتوى الخلية على أربع ذرات

$(4 = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2})$ 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،

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

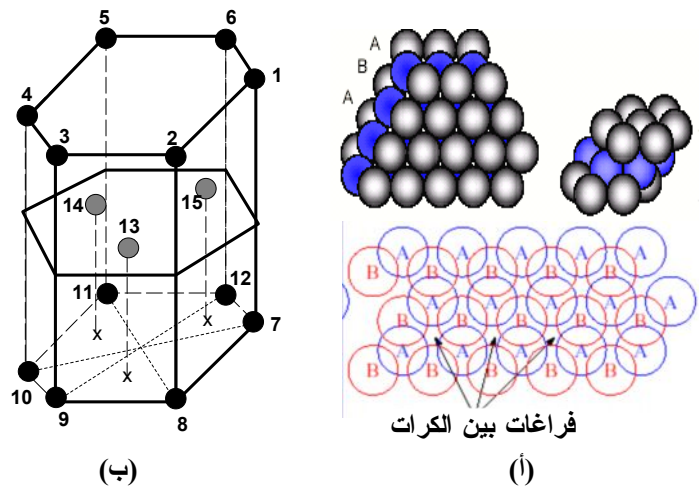
الثاني: أن تشغل كرات الطبقة الثالثة (C) مكانا يقع تماما فوق كرات الطبقة A،

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، كما هو مبين

بالشكل 3-15 (ب).



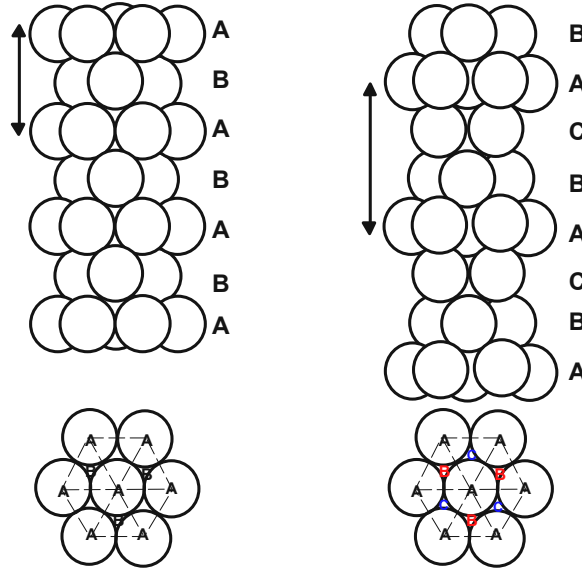
الشكل 3-15

تسمى هذه الخلية المتكونة بهذه الصورة بالعبوة السداسية المتلاصقة الرص.

تحتوى هذه العبوة على أربع ذرات $(4 = 12 \times \frac{1}{12} + 3 \times 1)$ وتكون كثافة الرص لهذه الخلية

هي نفسها كما في الحالة الأولى وتساوى 74 % تقريبا. يبين الشكل 3-16 مقارنة بين

تركيب المكعب المتراصق الرص والسداسي المتراصق الرص.



الشكل 3-16 مقارنة بين تركيب المكعب المتراصق الرص والسداسي المتراصق الرص.

ولاستنتاج الخلية الأولية في السداسي نتبع الأسلوب التالي: من نموذج رص

الكرات نجد العلاقة بين ارتفاع الخلية السداسية، c ، (المسافة بين أقرب طبقتين متشابهتين)

وطول ضلع القاعدة، a ، تكون على النحو،

$$c = \left(\frac{8}{3}\right)^{\frac{1}{2}} a = 1.633 a \quad 12-3$$

نلاحظ أن الخلية السداسية تمثل ثلاث خلايا وحدة غير أولية كل منهم عبارة عن

الجزء المظلل بالشكل 3-17(أ). تكون خلية الوحدة التي تم اختيارها متشابهة مع الشبكة

السداسية، من ناحية التناظر. بالرجوع إلى الشكل، نجد أن شبكة التركيب السداسية لا

تمثل شبكة برافية لسبيين: أولهما، لأنها تختلف عن بعضها من ناحية التوزيع الفضائي

لما يحيط بكل عقدة من بقية العقد. والسبب الثاني، لأنه لا يمكن ضبط المتجه الانتقالي الأصلي (الذي يمثل شبكة السداسي) بالشكل $\vec{R} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}$ الذي يمكنه أن يعين كل عقد الشبكة. ولكن يمكن أن نعبر عن شبكة السداسي كشبكة برافية باختيار قاعدة (أساس) جديدة بحيث تتكون كل قاعدة من عقدتين. لتحقيق ذلك، نأخذ المتجهات \vec{a} و \vec{b} و \vec{c} كمتجهات أساسية بحيث تكون الزاوية بين \vec{a} و \vec{b} تساوى 120° وأطوالها هي a و b و c على وجه الترتيب، بحيث $a = b \neq c$ والمتجه \vec{c} عمودي على المتجهين الآخرين، كما هو موضح بالشكل 3-17(ب). وبناء على الافتراض السابق فإن القاعدة تتكون من العقدتين (000) و $\left(\frac{2}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{3}\right)$. نجد الشبكة المتكونة بواسطة هذه القواعد العقدية تكون شبكة سداسي برافية وهي عبارة عن شبكة خليتها الأولية سداسي بسيط، كما هو موضح بالشكل 3-17(ب).

يمكن تحليل المتجهات الأساسية \vec{a} و \vec{b} و \vec{c} بدلالة الإحداثيات الكارتيزية الموضحة بالشكل 3-17(أ). ويمكن الحصول على متجهات الأساس الجديدة التي تصف الخلية الأولية كالآتي،

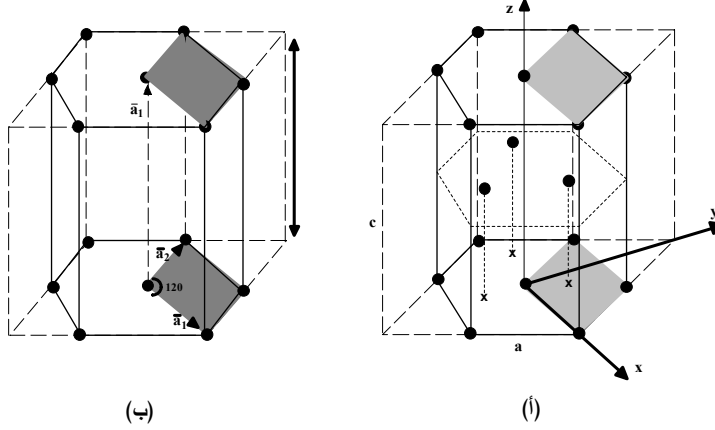
$$\vec{a}_1 = a\vec{i}, \quad \vec{a}_2 = \frac{\sqrt{3}a}{2}\vec{j} - \frac{a}{2}\vec{i}, \quad \vec{a}_3 = c\vec{k} \quad 13-3$$

ومن المعادلة 3-13 فإن حجم الخلية الأولية يساوي

$$v = |\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)| = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c = \sqrt{2} a^3 \quad 14-3$$

أن الأسلوبين الذين أتبعنا في الرص في هذه الدراسة ليس الأسلوبين الوحيديين للتعبة، بل توجد أساليب أخرى ينتج عن احدهم شبكة مكعبة بسيطة ذات كثافة تعبئة

كثافة رص) تساوى 0.52 أو شبكة مكعبة متمركزة الجسم ذات كثافة تعبئة 0.68 وهذا يفسر كثافة الرص للمكعب المتمركز الأوجه الكبيرة (0.74).



الشكل 3-16

مثال 3-14

أحسب كثافة الرص في حالة المكعبى البسيط.

الحل

بما أن عدد الذرات لوحدة الخلية في المكعبى البسيط يساوى ذرة واحدة وحجم

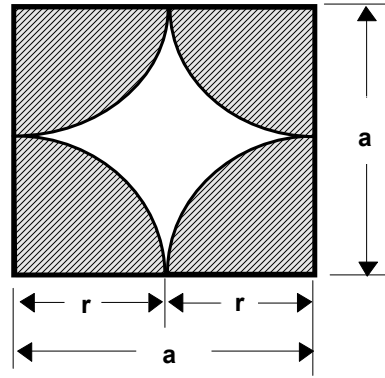
الذرة هو $\frac{4}{3}\pi r^3$ ، حيث r هو نصف القطر الذرى ويساوى $\frac{a}{2}$ ، كما هو مبين بالشكل 3-

18. فإن حجم الذرة يكون،

$$v = \frac{4}{3}\pi \left(\frac{a}{2}\right)^3 = \frac{\pi a^3}{6}$$

وحيث أن حجم وحدة الخلية المكعبة هو $V = a^3$ فإن كثافة الرص، PD، تكون

$$PD = \frac{v}{V} = \frac{\pi a^3}{6a^3} = \frac{\pi}{6} = 0.52 = 52\%$$



الشكل 3-18

8-3 خصائص التركيب المكعبى المتمركز الأوجه والمتمركز الجسم

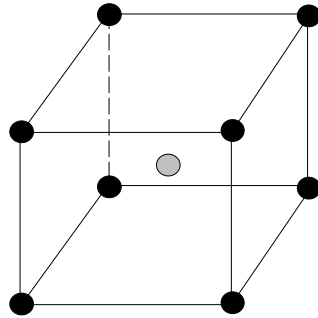
CHARACTERISTIC OF FCC AND BCC STRUCTURE

تتبلور معظم العناصر الكيميائية على هيئة شبكات غير معقدة فيوجد حوالي 20

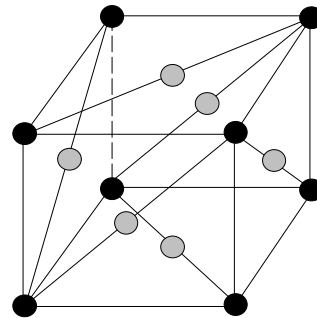
عنصرا على شكل المكعبى المتمركز الأوجه (fcc). تحتوى وحدة الخلية في المكعبى

المتمركز الأوجه على 4 ذرات: ذرة واحدة مشاركة في الرؤوس الستة و 3 ذرات مشاركة

في الأوجه الستة، كما هو مبين بالشكل 3-19 (أ).



(ب)



(أ)

الشكل 3-19 شكل البناء :- (أ) FCC، (ب) BCC.

كما يتبلور حوالي 14 عنصر على شكل شبكة مكعبى متمركز الجسم (bcc).

تحتوى وحدة الخلية على ذرتين اثنتين: ذرة تشارك الرؤوس الستة وذرة في مركز

المكعب، كما هو مبين في الشكل 3-19 (ب). الجدول 3-2 يبين طول ضلع الخلية

المكعبة لبعض هذه العناصر.

الجدول 2-3 طول ضلع الخلية المكعبة (بالانجستروم) لبعض العناصر

عناصر تتبلور على شكل BCC				عناصر تتبلور على شكل FCC			
a	العنصر	a	العنصر	a	العنصر	a	العنصر
3.31	Ta	2.88	Cr	5.30	Ag	5.26	Ar
3.02	V	3.15	Mo	3.52	Ni	4.05	Al
3.16	W	2.87	Fe	4.95	Pb	5.58	Ca
5.02	Ba	3.30	Nb	3.92	Pt	3.61	Cu

9-3 التركيب البلوري لبعض البلورات البسيطة

STRUCTURE OF SOME SIMPLE CRYSTALS

يتبلور حوالي 28 من العناصر على شكل بناء العبوة السداسية المتراسة، hcp.

يبين الجدول 3-3 خصائص بعض هذه العناصر.

الجدول 3-3 أبعاد الخلية (بالانجستروم) ذات البناء hcp لبعض العناصر.

c	a	العنصر	c	a	العنصر
6.07	3.75	La	3.58	2.29	Be
5.21	3.21	Mg	5.62	2.98	Cd
5.27	3.31	Sc	4.07	2.51	a-Co
5.69	3.60	Tb	5.59	3.56	Er
5.73	3.65	Y	5.78	3.64	Gd
4.95	2.66	Zn	5.83	3.57	He
5.15	2.23	Zr	5.62	3.58	Mo

(أ) تركيب بلورة كلوريد الصوديوم NaCl

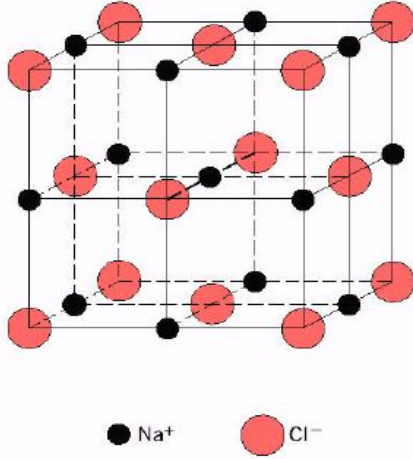
يتبلور كلوريد الصوديوم (ملح الطعام) على شكل شبكة مكعبية وفيها تتبادل

أيونات الصوديوم والكلور الأماكن على امتداد الاتجاهات الأساسية، كما هو مبين بالشكل

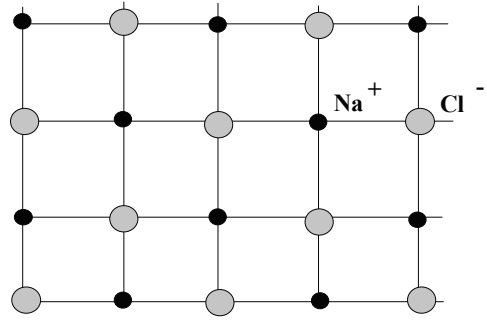
20-3(أ). يبين الشكل 20-3(ب) خلية الوحدة في الأبعاد الثلاثة. نلاحظ أن الخلية تكون

من النوع المتمركز الأوجه وتكون مواضع أيونات الصوديوم الأربعة هي 000 و $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$

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 $0\frac{1}{2}0$ (تشير الأعداد إلى الإحداثيات بدلالة كسور ضلع المكعب).



ب- بلورتين متمركزتين الأوجه متداخلتين



أ- البلورة مرسومة في بعدين

الشكل 3-20 تركيب بلورة كلوريد الصوديوم.

يمكن القول بأن بلورة كلوريد الصوديوم هي شبكة غير برافية تتكون من

شبيكتين جزئيتين متداخلتين من النوع fcc. تتكون الشبكة الأولى من أيونات الصوديوم

وتتكون الشبكة الأخرى من أيونات الكلور وتزاح احد الشبيكات عن الأخرى بمقدار $\frac{a}{2}$.

ينطبق نفس التركيب السابق على العديد من البلورات الأيونية. يبين الجدول 3-4 أبعاد

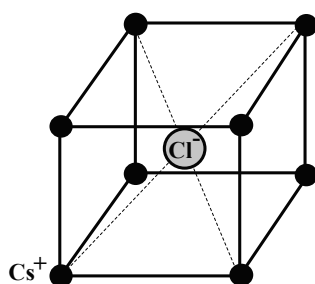
بلورات بعض المركبات التي تتبلور على صورة كلوريد الصوديوم.

الجدول 3-4 أبعاد بلورات بعض المركبات التي تتبلور على صورة كلوريد الصوديوم (بالانجستروم).

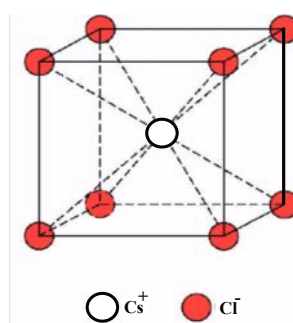
المركب	a	المركب	a
AgCl	5.55	LiF	4.02
MgS	5.20	NaCl	5.64
CaSe	5.91	KF	6.35
BaS	6.39	RbF	5.64
MgO	4.21	NaF	4.62

(ب) تركيب بلورة كلوريد السيزيوم CsCl

يتبلور كلوريد السيزيوم على شكل مكعبي وفيها تتبادل أيونات الكلور مواضعها على خطوط مستقيمة على امتداد أقطار المكعب الأربعة، كما هو مبين بالشكل 3-21(أ). هكذا تكون وحدة الخلية على هيئة مكعبي متمركز الجسم، كما هو مبين بالشكل 3-21(ب).



ب- خلية الوحدة



أ- بلورة كلوريد السيزيوم

الشكل 3-21 بلورة كلوريد السيزيوم.

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

يبين الجدول 3-5 أبعاد بلورة بعض المركبات التي تتبلور على صورة كلوريد السيزيوم.

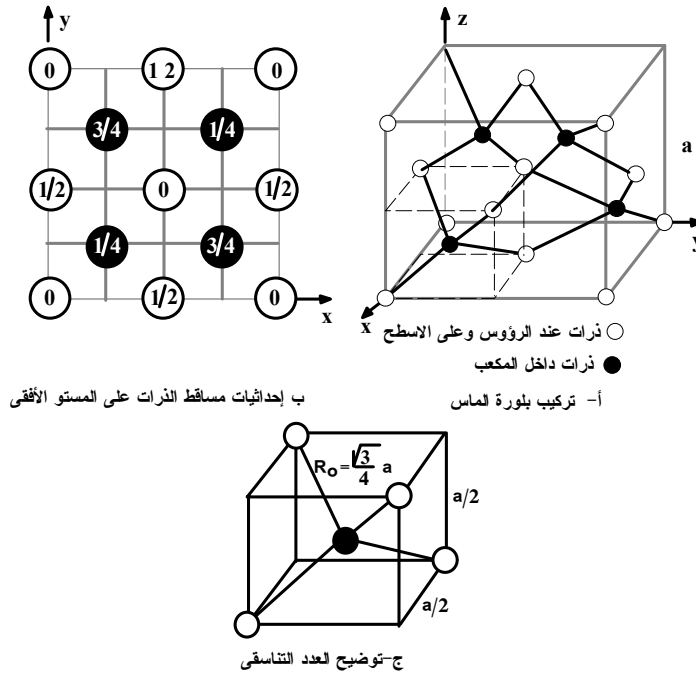
الجدول 3-5 أبعاد بلورات بعض المركبات التي تتبلور على صورة كلوريد السيزيوم (بالانجستروم).

المركب	a	المركب	a
CsCl	4.12	TlCl	3.83
CsBr	4.29	TlBr	3.97
CsI	4.57	TlI	4.20

(ج) تركيب بلورة الماس DIAMOND CRYSTAL STRUCTURE

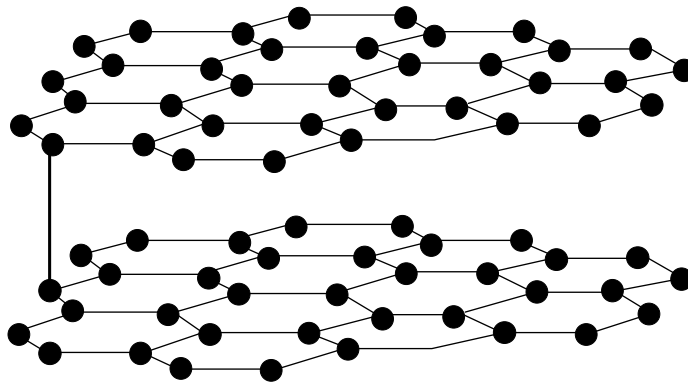
الماس هو كربون متبلور بسبب الضغط ودرجة الحرارة المرتفعين لفترات زمنية كبيرة. تكون شبكة الماس على هيئة معكبي وهي شبكة ليست برافية، كما يبين الشكل 22-3(أ). تحتوى الخلية الأولية على 8 ذرات، كما هو مبين في الشكل 22-3(ب)، وفيها يتكون الأساس من ذرتين من الكربون مصاحبتين لكل عقدة (نقطة) عند الإحداثيات : 000 و $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$. ويمكن تصور شبكة الماس المكعبة على أنها تتكون من شبكيتين (fcc) متماثلتين ومتداخلتين. تتكون الشبكة الأولى من الذرات المظلمة في الشكل (ب) وتتكون الشبكة الثانية من الذرات غير المظلمة. تكون هاتين الشبكيتين مزاحتان عن بعضهما باتجاه ربع القطر الجسمي للشبكة المكعبة بمقدار ربع قطر المكعب. تكون كل ذرة محاطة بأربع ذرات في الجوار على مسافات متساوية وواقعة على رؤوس شكل رباعي السطوح منتظم، كما يبين الشكل 22-3(ج). وحيث أن التوزيع الفضائي للذرات التي تحيط ذرة معينة يختلف من ذرة إلى أخرى لذلك نقول أن الشبكة ليست برافية، كما ذكرنا

من قبل.



الشكل 3-22 تركيب بلورة الماس.

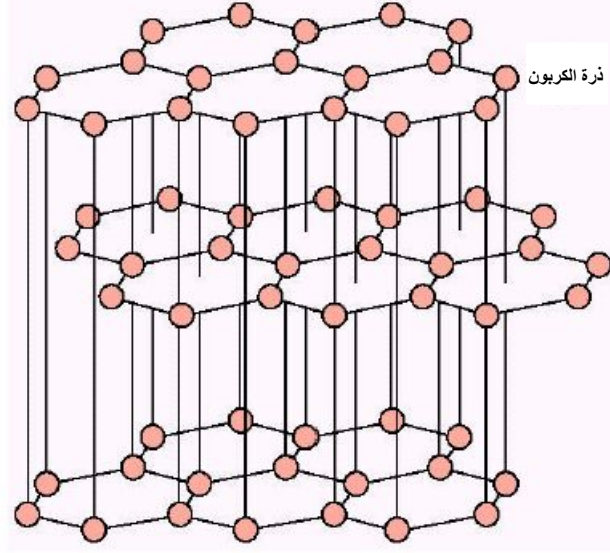
بالرغم أن عدد التناسق لذرة الكربون هو 4، كما يتضح من التركيب البلوري للماس، إلا أن الخلية الأولية للماس لا تنتمي إلى مجموعات التعبئة (الرص) المتراسة لأن كثافة الرص لها تساوى 0.34 فقط وهذه قيمة منخفضة. ورغم ذلك تظهر بلورة الماس خصائص ميكانيكية جيدة حيث تظهر مقاومة عالية للخدش ويرجع ذلك إلى دقة انتظام البلورة من ناحية وإلى قوة الروابط التساهمية بين ذرات الكربون من ناحية أخرى.



الشكل 3-23 تركيب الجرافيت (سداسي بسيط).

يمكن أن تتبلور ذرات الكربون أيضا (كما في حالة الماس) لتعطى بلورة جرافيت

(سداسي بسيط)، كما هو مبين بالشكل 3-23.



الشكل 3-24 شبكة الجرافيت في الأبعاد الثلاثة.

تكون الشبكة البلورية للجرافيت غير برفافية وتتكون من شبكتي سداسي بسيط

متداخلتين، كما هو مبين بالشكل 3-24. تختلف الخواص الفيزيائية لكل من الجرافيت

والماس اختلافاً كبيراً فالماس صلب جداً وشفاف وكثافته تساوى 3.5 جم/سم³ ويعتبر

عازلاً جيداً للكهرباء. على الجانب الآخر، يكون الجرافيت: لين جداً وأسود وكثافته

تساوى 2.1 جم/سم³ وموصل جيد للكهرباء. وبذلك نلاحظ أن اختلاف التركيب البلوري

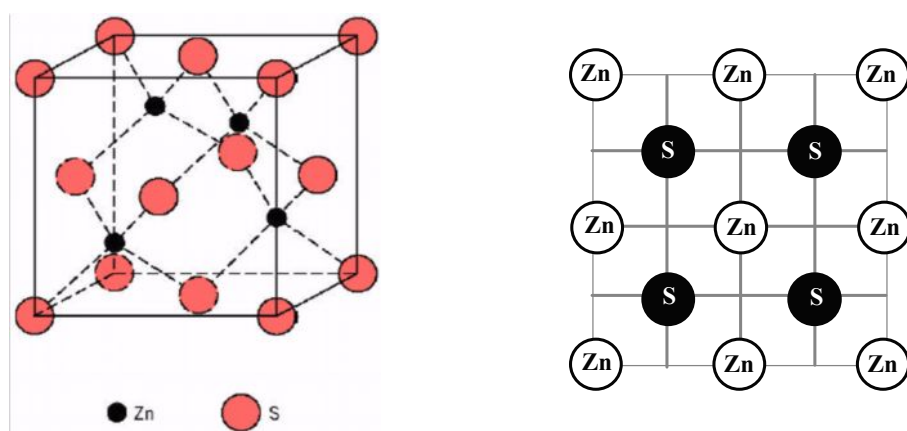
يعطى خواص فيزيائية متباينة وتسمى هذه خاصية تعدد الأشكال (polymorphism).

(د) تركيب بلورة كبريتيد الزنك ZNS

يشبه تركيب بلورة كبريتيد الزنك تركيب بلورة الماس، التي سبق شرحه، مع

فارق وحيد وهو أن الذرتين اللتين تكونان الأساس هما ذرتان مختلفتان. هنا يكون الأساس

مكون من ذرة زنك وذرة كبريت. تحتوي كل خلية وحدة على أربعة جزيئات من كبريتيد الزنك (ZnS) و توجد ذرة الزنك أو الكبريت في مركز شكل رباعي متكون من ذرات النوع المخالف، كما هو مبين بالشكل 3-25. تتبلور كثيرا من المواد شبه الموصلة على صورة بلورة كبريتيد الزنك. يبين الجدول 3-6 أبعاد بلورات بعض المركبات التي تتبلور على صورة ZnS.



ب- التركيب في الأبعاد الثلاثة

أ- التركيب مرسوم في بعدين

الشكل 3-25 تركيب بلورة كبريتيد الزنك.

الجدول 3-6 أبعاد بلورة بعض المركبات التي تتبلور على صورة ZnS (بالانجستروم).

المركب	a	المركب	a
CuCl	5.41	CdS	5.82
AgI	6.47	HgSe	6.08
BeSe	5.07	AlSb	5.62
ZnS	5.41	GaAs	5.65
ZnTe	6.09	SiC	4.35

يتضمن الشكل 3-26 جدول التركيب البلوري للعديد من العناصر الفلزية على

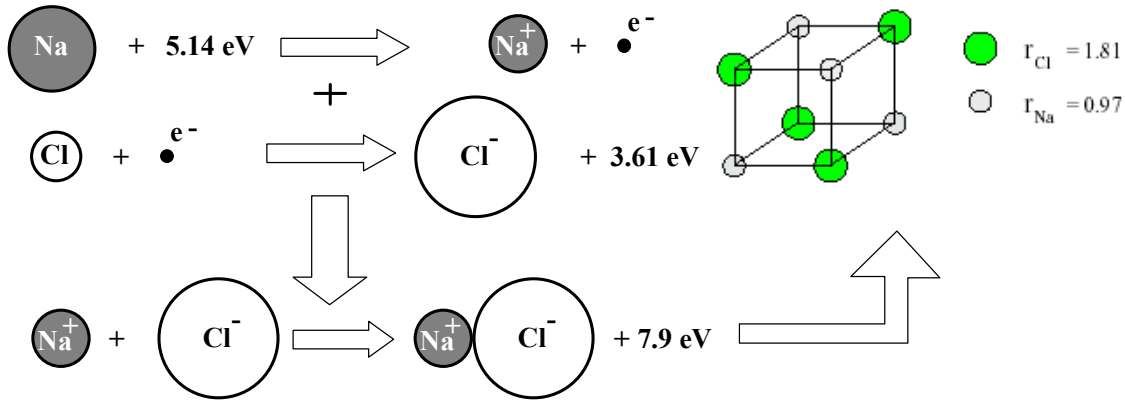
غرار الجدول الدوري للعناصر مما يسهل الكشف عن التركيب البلوري للفلزات.

الشكل 3-26 جدول التركيب البلوري للفلزات.

ABOUT THE BINDING ENERGY OF THE IONIC CRYSTAL

الصوديوم طبقاً للمعادلة، $E_B = \frac{a_o}{r_{Na} + r_{Cl}} \frac{e^2}{a_o}$ هي 5.19 eV. نلاحظ أن هذه القيمة لا تتفق مع

القيمة المقاسة عملياً 6.4 eV . يرجع سبب هذا الاختلاف الى عدم الدقة في قيم أنصاف أقطار الأيونات التي استخدمت في الحسابات وكذلك الى التبسيط المفرط في المعالجة الرياضية.



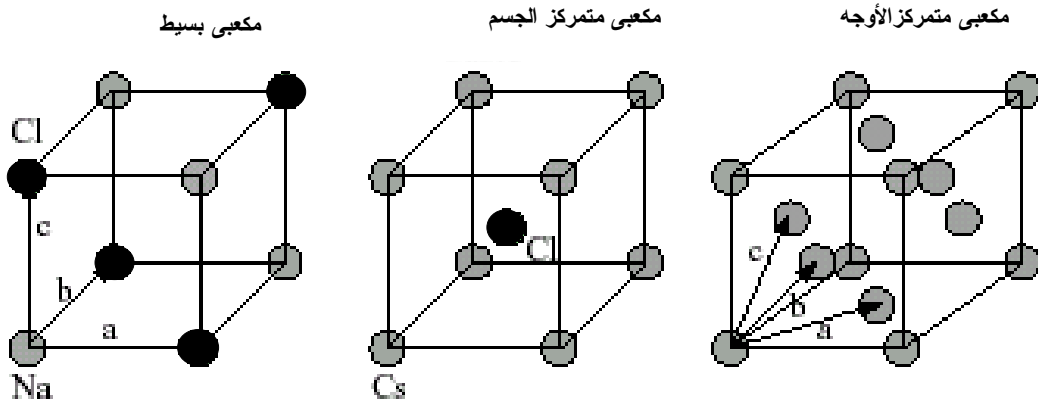
الشكل 3-27 تكون الطاقة لكل جزئ في بلورة كلوريد الصوديوم
 $(7.9 - 5.1 + 3.6) \text{ eV} = 6.4 \text{ eV}$ أقل من طاقة الذرات المتعادلة المنفصلة. تكون طاقة التماسك بالنسبة للأيونات المنفصلة 7.9 eV لكل وحدة جزئ. كل القيم المعطاة في الشكل هي قيم عملية.

على كل حال، تكون هذه الحسابات، في كثير من الأحوال، تكون كافية لتعيين طاقة الترابط. ومن الواضح أن المواد الصلبة الأيونية تكون عازلة كهربياً، حيث أن كمية الطاقة اللازمة لكي يتحرك الإلكترون بحرية تكون كبيرة جداً، $\sim 10 \text{ eV}$.

تتعين طاقة الترابط بشكل التركيب البلوري للبلورات الأيونية، أي بواسطة مسافات الاتزان بين الشحنات. ففي الأنظمة التي تكون فيها أنصاف أقطار الأيونات متقاربة (مثل كلوريد السيزيوم، CsCl ، $r_{\text{Cs}} \approx 1.60 \text{ \AA}$ ، $r_{\text{Cl}} \approx 1.81 \text{ \AA}$) يكون التركيب المكعبى المتمركز الجسم (bcc) هو المفضل في الرص، أنظر الشكل 3-28. على الجانب الآخر، في الأنظمة ذات أنصاف الأقطار المختلفة مثل NaCl ، يكون التركيب المكعبى

البسيط هو المفضل وذلك بسبب أن ذرات الكلور ذات حجم أكبر وتحتاج إلى متسع من المكان. فإذا اقتربت قلوب الذرات (قلب الذرة هو عبارة عن النواة والالكترونات عدا الموجودة في المدارات الخارجية منها) بعضها من بعض لمسافة أقل من أنصاف الأقطار يحدث تداخل بين المدارات الخارجية وتكون حينئذ رابطة تساهمية تتضمن كل من قوى تجاذب وتنافر.

يبين الشكل 3-28 الاحتمالات الممكنة لشكل بلورة الملح. في حالتي المكعبى البسيط والمكعبى المتمركز الجسم تكون أقرب جيران لذرة ما عبارة عن ذرات من النوع المخالف لها ويكون تكوين هذه الشبكات الأيونية مشجعة للتعبئة. على كل حال، نجد أنه من المستحيل تكوين شبكة مكعبية متمركزة الأوجه باستخدام كميات متساوية من كل عنصر.



الشكل 3-28

عند تعيين طاقة الترابط يجب أخذ جميع القوى بين الشحنات فى الاعتبار. تكون طاقة الترابط الكلية للتركيب الأيوني على صورة مجموع ماديلونج (وهو عبارة عن قوى التجاذب الكولومى الناشئة بين الشحنات المختلفة + قوى التنافر الناشئة بين أنوية الذرات المتشابهة وبين الكترونات كل ذرة مع

الكترونات الذرة الأخرى).

تعتبر عملية حساب طاقة التنافر المشاركة في الطاقة الكلية عملية معقدة للغاية وتحتاج إلى ميكانيكا الكم، بينما، يمكن حساب طاقة التجاذب الكولومى بسهولة. للتسهيل، يمكن وضع صورة طاقة التنافر على صورة أسية. وباعتبار بلورة كلوريد الصوديوم (fcc)، يكون لكل أيون ستة جيران مخالفة و 12 جار من نفس النوع، كما هو مبين بالشكل 3-29. كما يمكن تقريب طاقة الوضع الكلية بين أيونين متجاورين i و j باستخدام معادلة مى (Mie). فى هذه الحالة تكتب طاقة الوضع الكلية (طاقة الترابط) على الصورة،

$$\phi_{ij} = \pm \frac{e^2}{r_{ij}} + \frac{B}{r_{ij}^n}, \quad 15-3$$

حيث يصف الحد الأول في هذه المعادلة الفعل الكولومى حيث تدل الإشارة نوع الفعل بين الشحنات المتشابهة والشحنات المختلفة. بينما يصف الحد الثاني في هذه المعادلة، بشكل تقريبي، التنافر الناشئ عن تداخل السحابات الالكترونية ويحتوى على المتغيرين n و B . (يمكن تقريب الحد الثاني ووضعه على الصورة الأسية $Be^{(-r_{ij}/\rho)}$ ، حيث ρ كثافة الشحنة الحجمية). وبفرض أن المسافة الفاصلة بين أقرب جيران هي a فإن المسافة بين أي أيونين تكون $r_{ij} = ap_{ij}$ وبالتالي يمكن كتابة طاقة الوضع الكلية على الصورة،

$$\phi = N\phi_i = N \left[-\frac{e^2}{a} \sum_{i \neq j} \frac{\pm 1}{p_{ij}} + \frac{B}{a^n} \sum_{i \neq j} \frac{1}{p_{ij}^n} \right], \quad 16-3$$

حيث N هو عدد أزواج الأيونات في البلورة. يعرف المقدار $A = \sum_{i \neq j} \frac{\pm 1}{p_{ij}}$ بثابت

ماديلونج (Madelung) وتعتمد قيمته على نوع الشبكة فقط (وليس على حجمها، فعلى

سبيل المثال، يكون $A_{NaCl} = 1.748$ و $A_{CsCl} = 1.763$). ونظرا للمدى القصير للوضع $1/p_n$ ،

فإن الحد الثاني في المعادلة السابقة يمكن تقريبه بمجموع أقرب جار.

مثال 3-15

إذا علمت أن طاقة الوضع بين ذرات جزئ ثنائي تتغير طبقا للعلاقة $\phi(r) = -\frac{b}{r^6} + \frac{a}{r^{12}}$ ،

حيث r هي المسافة بين الذرتين و a ، b ثوابت، عين قيمة r عند طاقة الوضع الصفرية،

وقيمة r عند أقل طاقة وضع والقوة بين الذرتين ومقدار الطاقة اللازمة لتحلل الجزئ.

الحل

$$\phi(r) = -\frac{b}{r^6} + \frac{a}{r^{12}} = 0 \quad \text{عند طاقة الوضع الصفرية نجد أن}$$

وبالتالي تكون قيمة r عند طاقة الوضع الصفرية هي

$$r_{\phi=0} = \sqrt[6]{a/b}$$

وتكون طاقة الوضع أقل ما يمكن عندما تساوى المشتقة الصفر وبالتالي نحصل

على،

$$\frac{\partial \phi(r)}{\partial r} = \frac{6b}{r_o^7} - \frac{12a}{r_o^{13}} = 0 \quad \& \quad \therefore r_o = \sqrt[6]{\frac{2a}{b}}$$

$$F = -\frac{\partial \phi(r)}{\partial r} = -\frac{6b}{r^7} + \frac{12a}{r^{13}} \quad \text{تعرف القوة بين الذرتين على النحو التالي}$$

يتضح من هذه المعادلة أن القوة تساوى صفراً عند مسافة تساوى ما لانهاية.

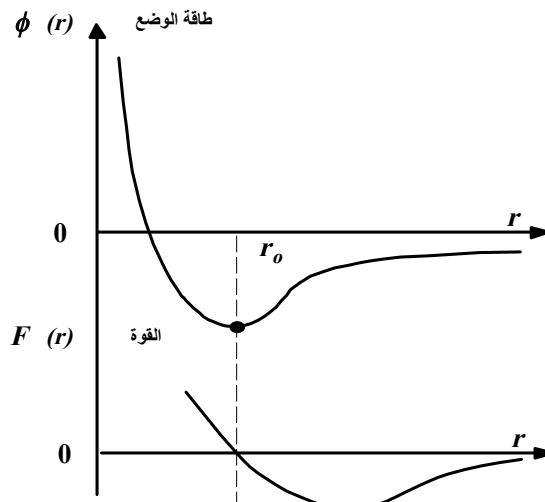
يبين الشكل 29-3 اعتماد كل من دالة طاقة الوضع والقوة بين الذرتين على المسافة بينهما. من الشكل السابق يتضح أن القوة تكون موجبة عندما تكون المسافة بين الذرات أقل من $\sqrt[6]{\frac{2a}{b}}$ وتتنافر الذرتين، والعكس صحيح.

تعرف طاقة تحلل الجزيء بأنها الشغل المبذول لفصل مكونات الجزيء إلى مسافة ما لانهاية. وبالتالي يمكن كتابة طاقة التحلل على صورة الفرق بين طاقة الوضع عند ما لانهاية وعند النهاية الصغرى (بالتعويض عن $r = (2a/b)^{1/6}$ في معادلة الطاقة)، أي على الصورة،

$$E_D = \phi_{\infty} - \phi_{\min} = 0 - \left(\frac{a}{4a^2/b^2} - \frac{b}{2a/b} \right) = \frac{b^2}{4a},$$

حيث يبدأ تحلل الجزيء عندما تصل طاقة حركة الذرات في قاع البئر الجهدى إلى

قيمة أكبر من E_D .



الشكل 29-3

ملخص الباب

✕ يمكن تحديد الاتجاه في البلورة بواسطة أدلة ميلر على النحو $[n_1, n_2, n_3]$ وتكون

أدلة الاتجاه لاتجاه ما في البلورة هي نفسها أدلة ميلر للمستوى العمودي على هذا الاتجاه.

✕ يشار إلى جميع الاتجاهات المتكافئة مع الاتجاه $[n_1 n_2 n_3]$ بالرمز $\langle n_1 n_2 n_3 \rangle$.

✕ تكون المسافة بين المستويات التي لها أدلة ميلر $\langle hkl \rangle$ في البلورة التي لها

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}} \text{ فواصل } a \text{ و } b \text{ و } c \text{ هي}$$

✕ تعرف العلاقة بين أدلة ميلر (uvw) للمستوى وأدلة اتجاه محور النطاق $[uvw]$ بقانون فايس.

✕ تعين الزاوية θ بين الاتجاهين $[u_1 v_1 w_1]$ ، $[u_2 v_2 w_2]$ بواسطة العلاقة

$$\cos \theta = \frac{u_1 u_2 + v_1 v_2 + w_1 w_2}{\sqrt{u_1^2 + v_1^2 + w_1^2} \sqrt{u_2^2 + v_2^2 + w_2^2}}$$

✕ لتعيين عدد الذرات في وحدة الخلية يجب معرفة الشكل الهندسي للخلية ونصف القطر الذري.

✕ يعرف نصف القطر الذري على أنه نصف المسافة بين أقرب ذرتين

متجاورتين في بلورة عنصر نقي مع مراعاة أن أقرب ذرتين متجاورتين يجب

أن تلامس كل منهما الأخرى.

✖ تعرف الكثافة الذرية للمستوى البلوري بأنها عدد الذرات لوحدة المساحات في مستوى بلوري معين.

✖ يعرف العدد التناسقي بأنه عدد أقرب العقد في الشبكة بالنسبة لعقدة معينة، أي أنه عدد أقرب العقد المجاورة لتلك العقدة.

✖ في المركبات الأيونية يزداد العدد التناسقي مع زيادة نسبة نصف قطر الكاتيون إلى نصف قطر الأنيون $\left(\frac{r_{cation}}{r_{anion}}\right)$.

✖ تعرف كثافة الرص بأنها النسبة بين الحجم المشغول بالذرات إلى حجم الخلية.

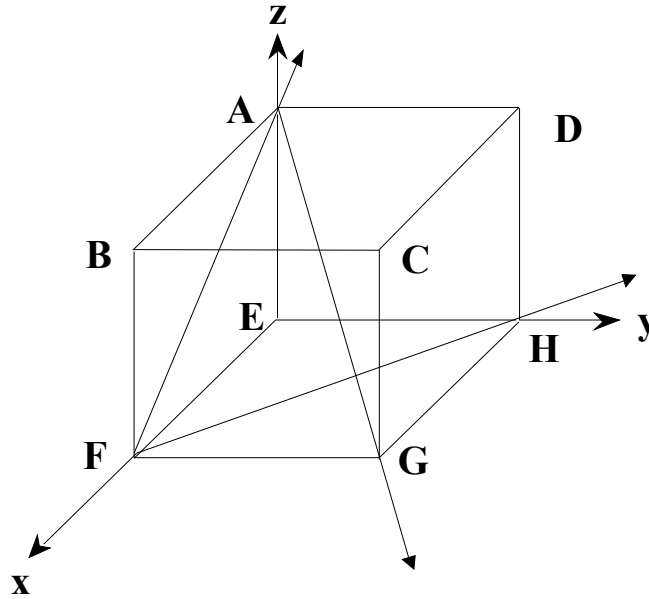
✖ يمكن تصور شبكة الماس المكعبة على أنها تتكون من شبكيتين (fcc) متماثلتين ومتداخلتين.

✖ يشبه تركيب بلورة كبريتيد الزنك تركيب بلورة الماس مع فارق وحيد وهو أن الذرتين اللتين تكونان القاعدة (الأساس) تكونان مختلفتين.

أسئلة وتمارين

1. أي من المتجهات الآتية تقع على المستوى (110) :- $[001]$ ، $[110]$ ، $[112]$ ، $[988]$ ، $[2\bar{1}1]$.
2. أرسم المستويات والمتجهات التالية في وحدة الخلية المكعبة :- $[434]$ ، $[122]$ ، $(\bar{1}12)$ و $[\bar{1}\bar{1}2]$.
3. أوجد البعد بين المستويات المتوازية الآتية في بلورة الحديد ذات الخلية المكعبة التي لها $a = 0.2886 \text{ nm}$:- (111) و (212) و (423) و (201) .
4. إذا كان $a = b = c = 8 \text{ \AA}$ ، أوجد المسافة الفاصلة d بين المستويات المتوازية ذات معاملات ميلر (123) .
5. أحسب المسافة الفاصلة لنفس المستويات في المسألة السابقة لبلورة لها خلية وحدة ذات $a = b = 7 \text{ \AA}$ و $c = 9 \text{ \AA}$.
6. إذا كان طول خلية الوحدة للألومونيوم هو 4.04 أنجستروم، وكانت الخلية مكعبة الشكل فما قيمة كل من :- d_{220} ، d_{111} و d_{200} . (1.43 ، 2.33 و 2.02 أنجستروم ، على وجه الترتيب) .
7. عين أدلة ميلر للمتجهات المبينة بالشكل 3-30 .
8. إذا علمت أن كلوريد الصوديوم يتبلور على صورة مكعبي متمركز الوجه، وأن وزنه الجزي هو 58.2 وكثافته 2180 كيلوجرام/المتر المكعب. أوجد المسافة بين أقرب ذرتين

متجاورتين. (2.815 أنجستروم)



الشكل 3-30

9. تتكون الشبكة المتمركزة الأوجه من ذرات كرية نصف قطرها R. أحسب الكثافة

الذرية للمستويات : (أ) (110) و (ب) (100) و (ج) (111).

10. عين أدلة ميلر للذرات المتمركزة في أوجه المكعب.

11. برهن على أن الاتجاه [hkl] في البلورة المكعبة يكون دائما عموديا على المستوى

(hkl) الذي يملك نفس أدلة ميلر.

12. أثبت أن كثافة الرص النسبية في حالة المكعب المتمركز الجسم تساوي $\frac{\sqrt{3}\pi}{8}$.

13. أثبت أن كثافة الرص النسبية في حالة المكعب المتمركز الأوجه تساوي $\frac{\sqrt{2}\pi}{6}$.

ثم قارن بين كثافة الرص في المكعب المتمركز الأوجه والمكعب المتمركز

الجسم.

14. تعرف كثافة الرص بأنها النسبة بين الحجم الذي تحتله الذرات في الخلية إلى

الحجم الكلي للخلية. أثبت أن أعلى قيم لكثافة الرص هي على النحو التالي : 0.52

للمكعب البسيط ، 0.68 للمكعب المتمركز الجسم و 0.74 للمكعب المتمركز الأوجه.

افترض أن الذرات عبارة عن كرات متماثلة ومتمركزة حول نقاط المكعب.

15. إذا علمت أن للنحاس تركيب بلوري مكعبي متمركز الأوجه وأن نصف القطر

الذري هو 1.278 أنجستروم، أوجد كثافة النحاس إذا علمت أن الوزن الذري للنحاس

يساوي 63.54. (الجواب 8.98 جم/سم³).

16. إذا كان التركيب البلوري للفضة هو شبكة مكعبي متمركز الأوجه وأن طول

المكعب هو 4.07 أنجستروم وأن الكتلة الذرية للفضة هي 107.88 و.ك.ذ. أحسب

كثافة الفضة.

17. أحسب الكثافة الذرية للمستويات: - أ-(100)، ب- (110) و ج-(111) في بلورة

النحاس إذا علمت أن البلورة مكعب متمركز الأوجه ونصف القطر الذري هو 1.27

أنجستروم.

18. ما المقصود بالمصطلحات الآتية:

(ب) رقم التناسق

(أ) خلية الوحدة

(د) الكثافة الذرية للمستوى البلوري

(ج) كثافة الرص

(هـ) الشبكة البرافية (و) التماثل

(ز) نصف القطر الذرى.

19. أحسب الكثافة الذرية للمستوى (222) أو (111) في بلورة الحديد المكعبة المتمركزة

الأوجه ثم أحسب المسافة الفاصلة بين المستويين السابقين. (الجواب 2.10×10^{13}

ذرة/م²، $d_{111} = 2.05 \text{ \AA}$).

20. يكون التركيب البلوري لكلوريد الصوديوم مكعبي وفيه تتبادل أيونات الكلور

المواضع مع أيونات الصوديوم. فإذا علمت أن كثافة كلوريد الصوديوم هي 2.156

جم/سم³ وأن عدد أفوجادرو $= 6.025 \times 10^{23}$ ذرة/مول، أوجد المسافة الفاصلة بين

أقرب أيونين متجاورين. (الجواب 2×10^{-10} متر).

21. إذا كان تركيب الماس يمكن النظر إليه كشبيكتين مكعبية متمركزة الأوجه

متداخلتين وأن طول ضلع المكعب هو 3.56 أنجستروم. بين أن الكثافة الذرية

للماس هي 1.77×10^{23} سم⁻³، ومن هذه النتيجة أحسب كثافة الماس وقارنها مع

كثافة الماس المعروفة (3.5 جم/سم³) علماً بأن الكتلة الذرية للماس تساوى 12.2

و.ك. ذ. (الجواب 3.54 جم/سم³).

الباب الرابع
العيوب التركيبية فى البلورات

**Structural Defects in
Crystals**



الباب الرابع العيوب التركيبية في البلورات Structural Defects in Crystals

المحتوى

- 1-4 مقدمة
- 2-4 العيوب النقطية.
- 3-4 العيوب النقطية في البلورات الأيونية.
- 4-4 أنواع أخرى من العيوب النقطية.
- 5-4 العيوب الخطية.
- 6-4 العيوب المستوية.
- 7-4 تعيين تركيز وطاقة التنشيط لتكوين الفراغ.
- 8-4 تعيين طاقة تكوين الفراغ عمليا

الأهداف

بعد استكمال دراسة هذا الباب يجب أن يكون الدارس قادراً على:-

- وصف الأنواع المختلفة للعيوب التركيبية النقطية منها والخطية.
 - معرفة أنواع وكيفية تكوين الإخلاعات في الشبكة البلورية.
 - التمييز بين الإخلاع اللولبي وإخلاع الحافة وخصائص كل منهما.
 - تعريف كل من متجه ودائرة بيرجر للإخلاعات المختلفة.
 - معرفة الأنواع المختلفة من العيوب المستوية.
 - المقارنة بين الأسطح الحرة وحدود الحبيبة والحدود الطورية.
 - فهم منشأ عيوب التعب (الرص).
 - استنتاج الصيغة النظرية لتركيز و الفراغات نظريا وكيفية تعيين طاقة التنشيط عمليات.
-

1-4 مقدمة

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 كثيراً 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 طبقاً لمنشئها، فمثلاً وكما ذكرنا من قبل، يعتبر سطح البلورة نوعاً من أنواع التشوه وذلك بسبب تعطل التكرار والدورية عند السطح، حيث ترى الذرات القريبة من السطح بيئة محيطية مختلفة عما تراه الذرات الموجودة في عمق البلورة وبالتالي تسلك سلوكاً مختلفاً. وكذلك، يسبب الاهتزاز الحراري للذرات، حول مواضع اتزانها عند درجة حرارة أكبر من الصفر المطلق، تشوهاً للبلورة بدرجة تعتمد على درجة الحرارة. كما يؤدي وجود ذرات غريبة في التركيب البلوري إلى خلق عيوباً تسمى بالشوائب. وبالرغم من تقنيات التحضير المتقدمة إلا أنه غالباً ما تحتوي البلورة المحضرة على بعض الذرات الغريبة وحتى عند تحضيرها بواسطة أفضل وسائل النمو البلوري فإنه تبقى بعض الشوائب (بتركيز $10^{12} \text{ cm}^{-3} \sim$)

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 المدهش 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 التألق الضوئي (photo-luminescence) بهذه الشوائب.

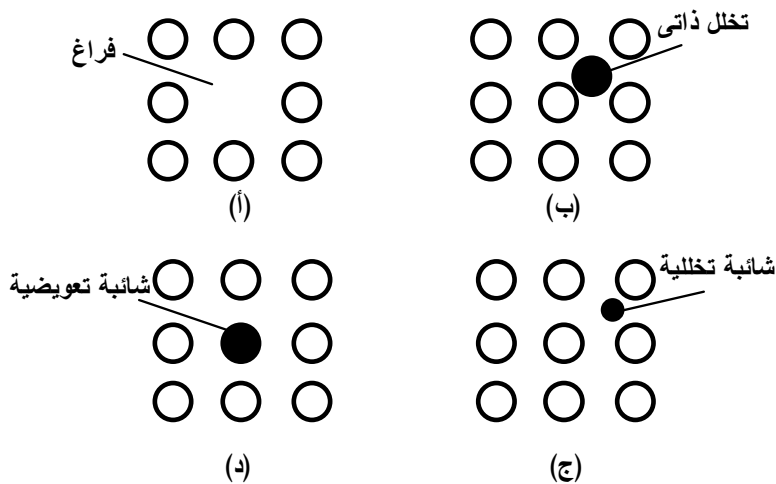
تنقسم العيوب البلورية على عدة أقسام: 1- عيوب ساكنة، وهي العيوب الدائمة نتيجة تشوه التركيب البلوري، 2- عيوب مؤقتة يمكن التخلص منها بالمعالجة المناسبة و 3- عيوب الإثارة وتحدث نتيجة وجود مؤثر خارجي مثل المجال الكهربائي، المجال المغناطيسي أو خلافه وتزول هذه العيوب بزوال المؤثر. كما يمكن أيضا تصنيف العيوب

البلورية طبقاً 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 الإنخلاعات (dislocations). 3- عيوب مستوية وتترك فيها ذرات مستوى بلوري كامل. سنتعرض في هذا الباب بالتفصيل لدراسة الأنواع المختلفة من هذه العيوب البلورية وتأثيرها على خصائص البلورة الفيزيائية.

4-2 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 متأصلة في المادة، بمعنى أنها تنشأ أثناء نمو البلورة ومن دون أي تدخل خارجي هما الفراغ (vacancy) والذرة المتخللة (interstitial)، كما هو مبين بالشكل 4-1. ينشأ الفراغ عندما تغيب الذرة عن مكانها في الترتيب الدوري للشبكة البلورية، كما هو مبين بالشكل 4-1(أ). 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 interstitial)، كما هو مبين بالشكل 4-1(ب) أو كانت ذرة غريبة وتسمى الشائبة. في

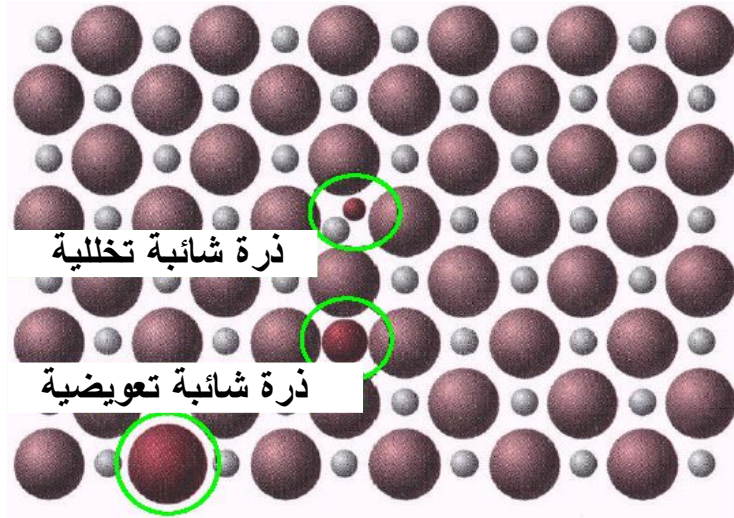
الحالة الأخيرة، تحتل الذرة الشائبة مكانا بين الذرات الأصلية (بين المستويات البلورية)، ويسمى العيب النقطي في هذه الحالة بالشائبة المتخللة (interstitial impurity)، كما هو مبين بالشكل 1-4(ج). غالبا ما تكون مثل هذه الشوائب عبارة عن ذرات ذات حجم أصغر من الذرات الأم ويمكنها من شغل مكان بين المستويات الذرية للبلورة من دون إخلال ملحوظ في أبعاد البلورة، كما في حالة الهيدروجين في بلورة الكربون. عندما تحل الذرة الغريبة محل ذرة أصلية في الترتيب البلوري يسمى العيب، في هذه الحالة، بشائبة تعويضية (substitutional)، كما هو مبين بالشكل 1-4(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 1-4 أنواع مختلفة من العيوب النقطية في بلورة أساسية.

الشكل 2-4 يلخص ويجمع بين أنواع العيوب الناشئة عن وجود ذرات الشوائب

في التركيب البلوري بقصد المقارنة.

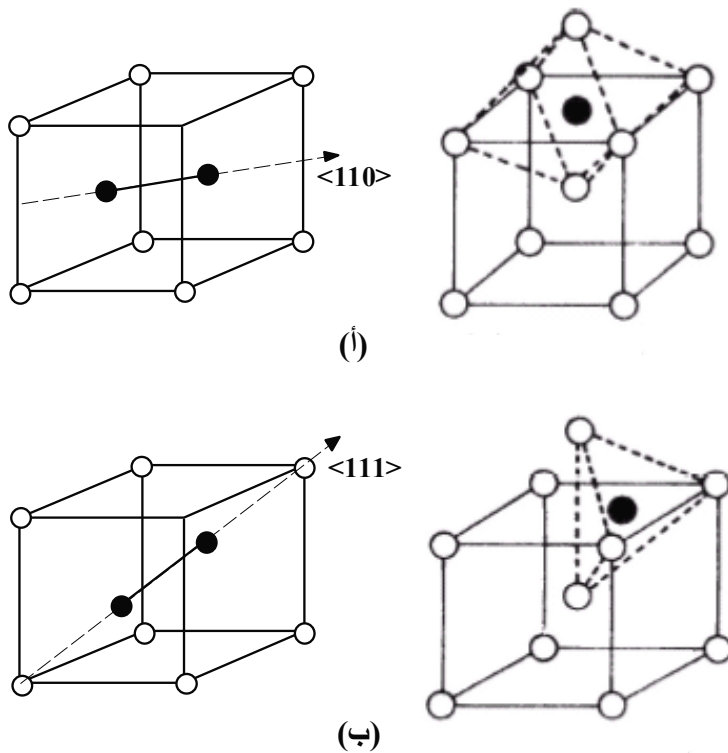


الشكل 4-2 مقارنة العيوب النقطية الناتجة عن الشوائب.

بالإضافة إلى تطابقها مع الذرات المضيفة (الأم) فإن الشوائب التخليلية والذرات التخليلية الذاتية تختلف في الطريقة التي تكمن بها في الشبكة. يبين الشكل 4-3، بلورة متمركزة الجسم، على سبيل المثال، تحتوى على ذرة متخللة. لكي تحتل الذرة المتخللة ذاتيا هذا المكان فإنها تزيج الذرة المضيفة عن مكانها الطبيعي في البلورة مكونة معها ما يسمى بزوج من الذرات على شكل الدمبل (dumbbell-shaped pair) (الدمبل هو كرتان حديديتان بينهما قضيب معدني)، كما هو مبين في يسار الشكل 4-3. يتعين كل من اتجاه الدمبل المتكون والمسافة بين الذرتين بواسطة الحالة التي معها تكون طاقة وضع الشبكة نهائية 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)). يوفر أحد 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 اعتماداً أساسياً وبشكل حساس.



الشكل 3-4 الشوائب المتخللة في بلورة متمركزة الجسم.

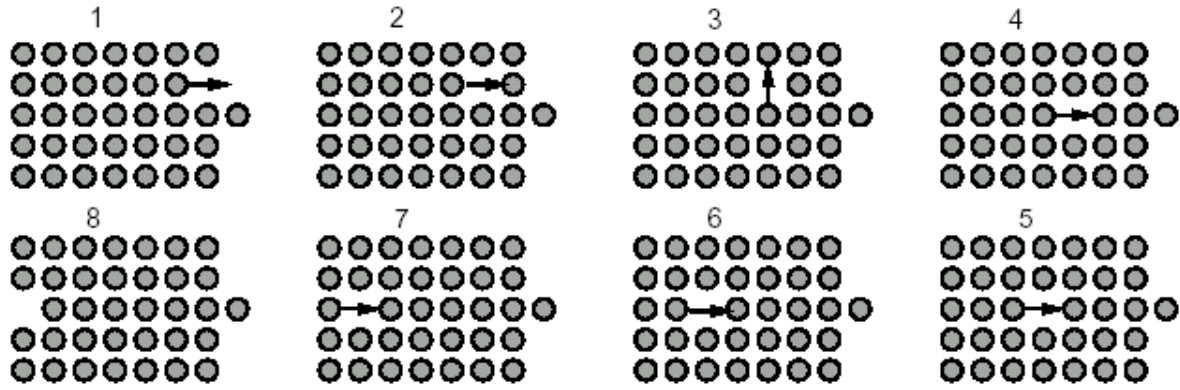
3-4 العيوب النقطية في البلورات الأيونية POINT DEFECTS IN IONIC CRYSTALS

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 كاتيون الذرة المتخللة ذاتيا.

يكون تركيز الفراغات في المواد النقية صغيرا جدا (حوالي فراغ لكل 10^8 ذرة) ويزداد هذا التركيز بارتفاع درجة الحرارة (حوالي فراغ لكل 10^3 ذرة بالقرب من درجة الانصهار). تعتبر الفراغات مهمة لأنها تحكم معدل الانتشار (أو الإحلال) 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 4-4 ديناميكية حركة الفراغ داخل بلورة جسم صلب ذو عبوة متراسة (لتبسيط المفهوم، يمكن تشبيه حركة الفراغ بحركة فراغ في جراج سيارات مزدحم).

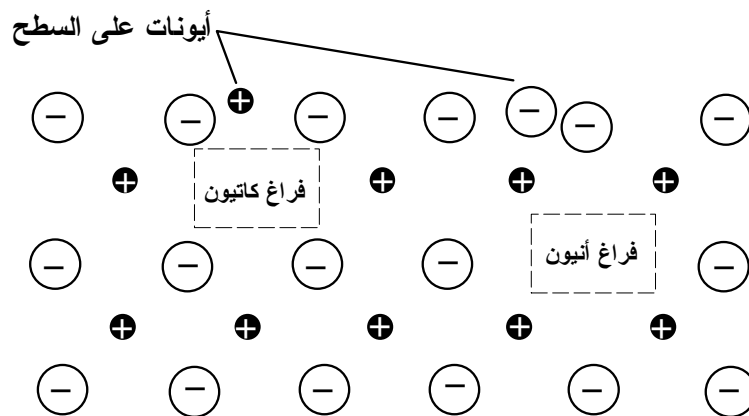
يوجد نوعان من العيوب الفراغية في البلورات الأيونية هما عيب شوتكي (Schottky defect) وعيب فرنكل (Frenkel defect). فيما يلي سندرس بشئ من التفصيل كل نوع من هذه العيوب وذلك بقصد ترسيخ المفهوم وتسهيل المقارنة بينهما.



الشكل 4-4 ديناميكية حركة الفراغ داخل بلورة جسم صلب ذو عبوة مترابطة.

1-3-4 فراغات شوتكى SCHOTTKY VACANCIES

يتكون فراغ شوتكى في المركبات الكيميائية ذات النظام البلوري الأيوني والذي يتطلب فيه اتزان الشحنة بين الأيونات المتجاورة. ينشأ فراغ شوتكى عندما تترك الذرة مكانها وتنتقل بخطوات متتابعة حتى تستقر في النهاية على سطح البلورة تاركة خلفها مكان شاغرا، كما هو موضح في الشكل 4-5، وكنتيجة لذلك يتكون زوج من فراغات الأيونات إحداها سالبة الشحنة والآخر موجب الشحنة للحفاظ على هذا الاتزان الكهربائي.



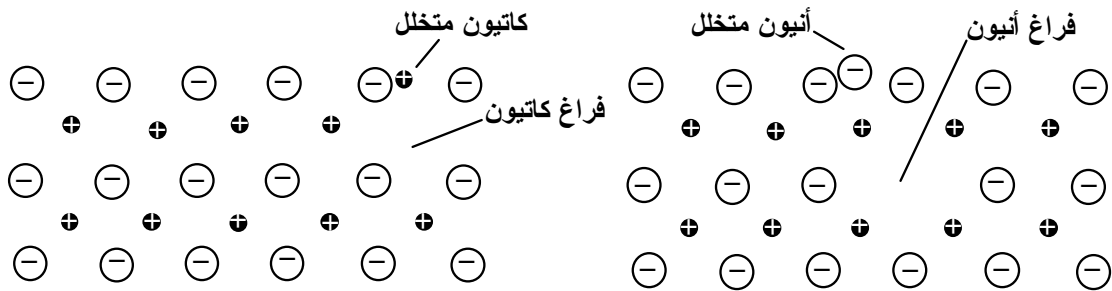
الشكل 4-5 أنواع فراغات شوتكى.

ونظرا لمخالفة شحنة الفراغ المتكون لشحنة الايون الذي ترك مكانه وتحركه إلى

السطح فإن ذلك يكافئ زوج من الايونات المختلفة الشحنة ولذلك يسمى عيب شوتكى، أحيانا، بعيب الزوج الأيوني. يلعب هذا النوع من العيوب دورا كبيرا في تغير بعض الخصائص الفيزيائية للمادة وخاصة سرعة انتشار (diffusion) الذرات داخل البلورة.

2-3-4 فراغات فرنكل FRENKEL VACANCIES

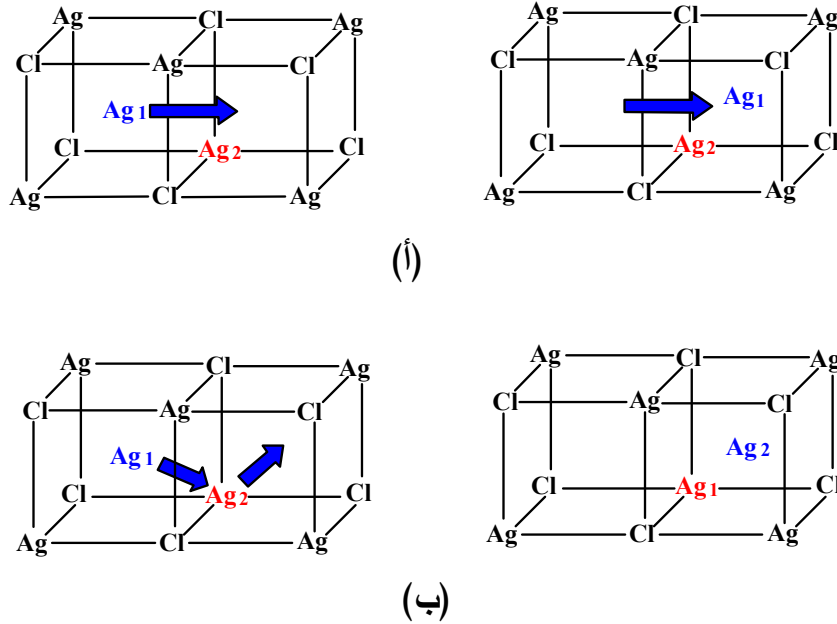
تنشأ عيوب فرنكل في المركبات الكيميائية ذات الرابطة الأيونية ويوجد نوعان من هذه العيوب تحدث في نفس الوقت: النوع الأول هو أن تترك الذرة مكانها الطبيعي في الترتيب الدوري وتتحشر بين الذرات الأخرى، أي تستقر بين المستويات الذرية مكونة ذرة تخليلية. بينما يكون النوع الثاني عبارة عن الفراغ الناتج عن ترك الذرة لمكانها في الترتيب. يحمل الفراغ المتكون دائما شحنة مشابهة للشحنات المحيطة به، كما هو مبين في الشكل 4-6. يسمى عيب فرنكل، أحيانا، بعيب الأيون المزاح.



الشكل 4-6 أنواع فراغات فرنكل.

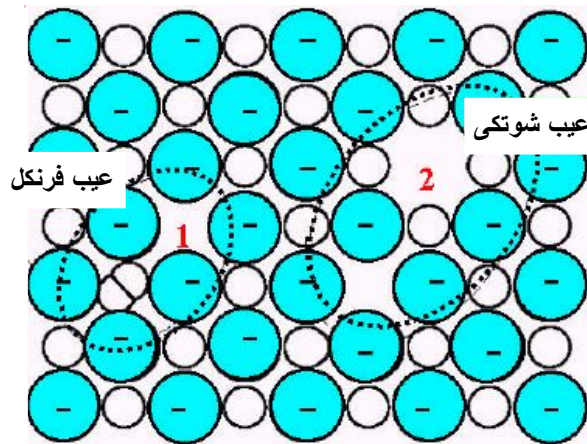
من الممكن أن يتحد الفراغ مع الذرة المتخللة ويختفي العيبان معا، كما إنه من الممكن أن يتحد فراغين لتكوين فراغ ثنائي (divacancy) وتكون حركته أسهل من الفراغ المفرد، كما يمكن أن يتجمع عدد كبير من الفراغات معا وينشأ عن ذلك فجوة. تتحرك

عيوب فرنكل في البلورة الأيونية بأحد طريقتين: بالقفز المباشر للذرة المتخللة، كما هو مبين بالشكل 7-4 (أ)، أو بميكانيكية التخلل، كما هو مبين في الشكل 7-4 (ب).



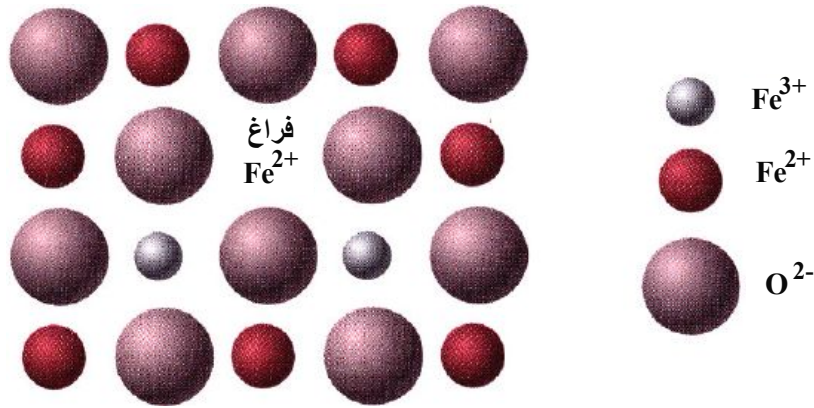
الشكل 7-4 حركة عيوب فرنكل في بلورة كلوريد الفضة

عادة تتكون الفراغات بالقرب من الأسطح الحرة (free surfaces) وبالقرب من حدود الحبيبات (grain boundaries) وأيضاً بالقرب من الإنخلاعات. يمكن المقارنة بين عيوب شوتكى وعيوب فرنكل بالرجوع إلى الشكل 8-4.



الشكل 8-4 مقارنة بين عيوب شوتكى وفرنكل.

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). تحتوي 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 أيونات الحديد ذو تكافؤ +2 إلى حديد ذو تكافؤ +3، فإن ذلك يتطلب وجود فراغ للمحافظة على تعادل الشحنة، وبذلك يتغير التركيب الكيميائي، كما يتضح في الشكل 4-9.



الشكل 4-9 تكون الفراغ في بلورة أكسيد الحديدوز.

4-4 أنواع أخرى من العيوب النقطية OTHER TYPES OF POINT DEFECTS

بالإضافة إلى الأنواع السابقة توجد أنواع أخرى من العيوب النقطية، حيث تترك ذرة أصلية مكانها في الترتيب المنتظم وتتحشر 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.

5-4 العيوب الخطية LINE DEFECTS

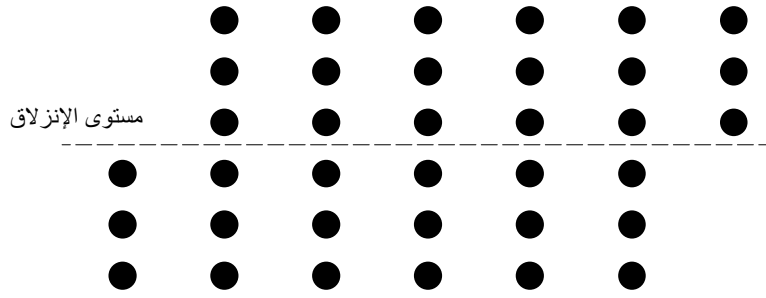
يعتبر الإنخلاع أكثر العيوب الخطية شيوعا. والانخلاع هو عبارة عن خط منتظم من الذرات التي غابت عن مكانها (misplaced atoms) في الشبكة البلورية. غالبا، يمتد هذا الخط مسافة كبيرة نسبيا داخل الشبكة. يمكن تقسيم الإنخلاعات إلى إنخلاعات الحافة و الإنخلاعات اللولبي. سنشرح هذه الأنواع بشئ من التفصيل في الفصل التالي.

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 كثيرا 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 اختلافا كبيرا 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 معتمدة 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 تشوها من الممكن أن يكون هذا التشوه مرنا أو غير مرن. 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 4-10 عملية انزلاق للمستويات البلورية بمقدار خطوة مقدارها ذرة واحدة.

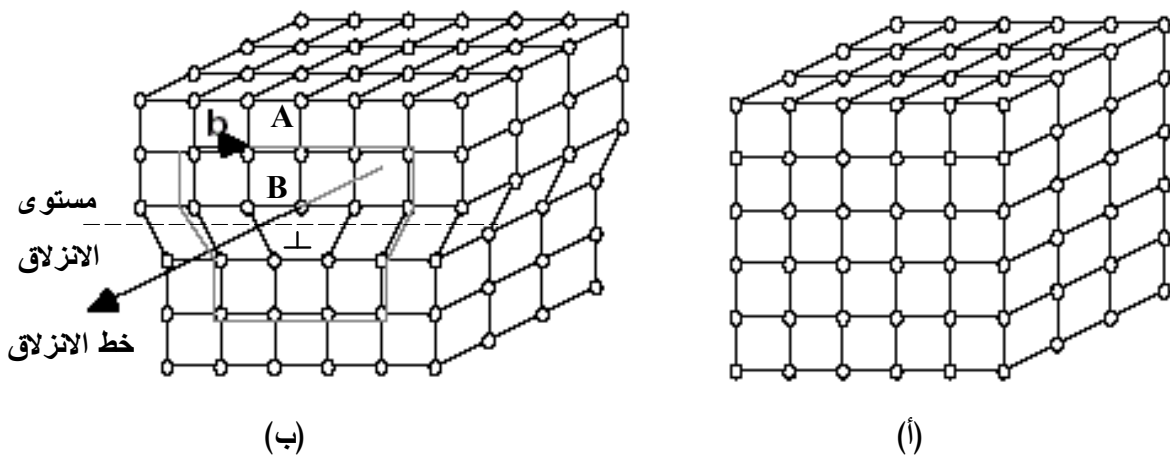


الشكل 10-4 عملية انزلاق للمستويات البلورية بمقدار ذرة واحدة.

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

1-5-4 إنخلاع الحافة EDGE DISLOCATION

يجمع الشكل 11-4 رسم تخطيطي لبلورة غير مشوهه بمعنى لا تحتوي على عيوب (الجزء أ)) وبلورة مشوهة يوجد بداخلها إنخلاع حافة (الجزء ب) من الشكل) بقصد توضيح المفهوم وتسهيل المقارنة.



الشكل 11-4 إنخلاع الحافة داخل الشبكة البلورية.

يمكن تفسير إنخلاع الحافة على أساس أن هناك جزء من مستوى زائد محشور

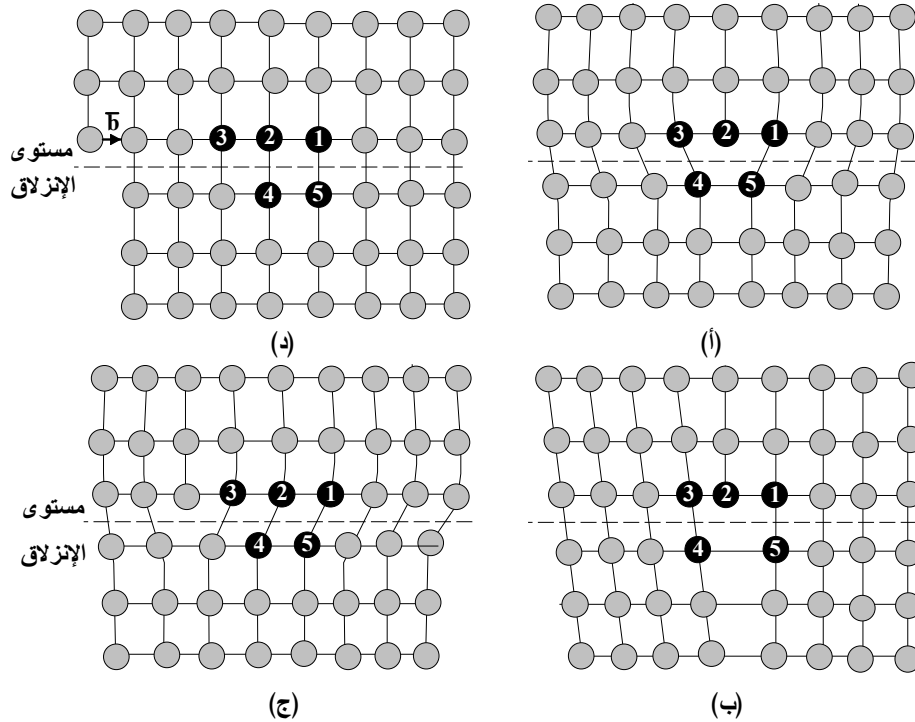
داخل البلورة (الجزء AB في الشكل 4-11ب)). ينتج عن هذا الجزء تولد إجهاد ضغط على بعض مناطق الجوار وإجهاد شد على المناطق الأخرى وهذا يؤدي إلى زيادة طاقة الوضع على امتداد خط الإنخلاع. يلاحظ أن جزء البلورة الذي يوجد فيه جزء المستوى الزائد يحدث له ضغط، أي تكون ذراته مضغوطة بعضها مع بعض ، بينما يحدث للجزء السفلي تمدد بسبب غياب جزء من المستوى. يرمز لإنخلاع الحافة بالرمز \perp .

ينزلق الإنخلاع على المستويات الواقع 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 بيرجر (Burger vector) أو متجه الانزلاق (slip vector). 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 وتحدد 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) أو خطوتين ($2a$) أو 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 4-12 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) إلى (د). يسمى إنخلاع الحافة أحيانا بالإنخلاع الطرفي.



الشكل 4-12 سياق حركة إنخلاع حافة عند التأثير عليه بإجهاد قص بمقدار خطوة واحدة b .

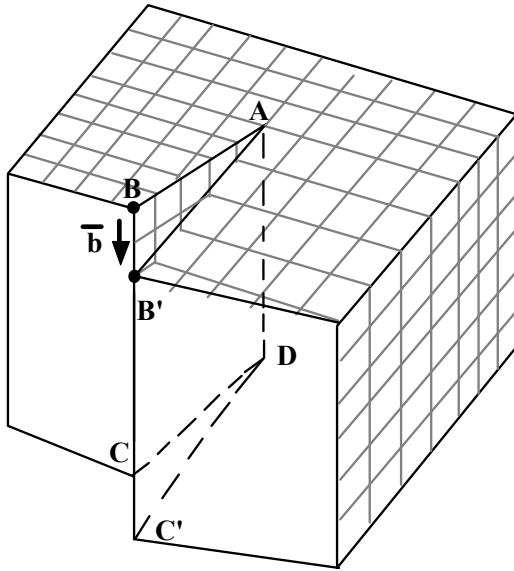
2-5-4 الإنخلاع اللولبي SCREW DISLOCATION

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 4-13 (أ). بالإضافة إلى ما سبق، تكون الطاقة الناتجة من هذا الإنخلاع أكبر منها في حالة الإنخلاع الطرفي.

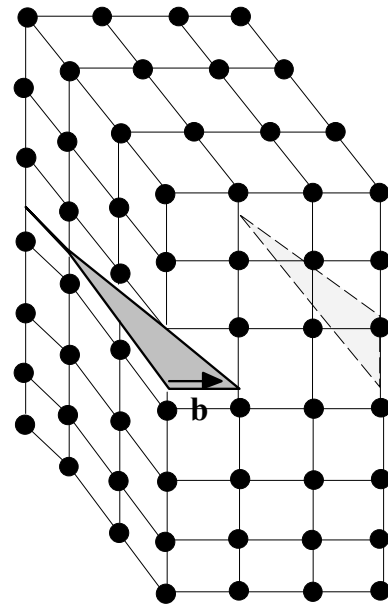
بالرجوع إلى الشكل 4-13 (ب)، وحتى يمكن تخيل الإنخلاع اللولبي، نعتبر أنه

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 موازياً لمتجه الخطوة.



ب- حركة الانخلاع اللولبي أثناء نمو البلورة



أ- انخلاع لولبي

الشكل 4-13 الإنخلاع اللولبي.

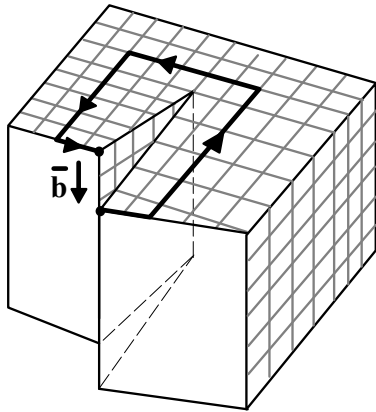
تتكون الإنخلاعات، بشكل عام، في الشبكة البلورية أثناء تجمد مصهور المادة وتكون النظام البلوري. فعندما يحدث اختلال بسيط في اتجاه نمو صفوف الذرات المجاورة نجد أن جزء زائد من الصفوف أو جزء ناقص يفرض نفسه داخل البلورة ويكون إنخلاعاً.

BURGERS VECTOR AND CIRCUIT

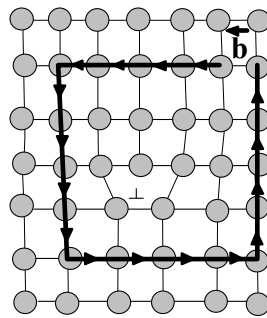
3-5-4 متجه ودائرة بيرجر

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.

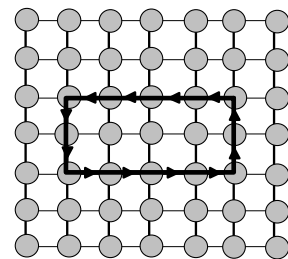
كما هو موضح في الشكل 4-14 في البلورة المثالية فإن دائرة بيرجر تغلق نفسها ولا يتواجد متجه بيرجر. أما في حالة البلورة غير المثالية والتي يوجد بها عيوب فإن دائرة بيرجر تكون مفتوحة ويكون متجه بيرجر هو المتجه الذي يغلق الدائرة. يكون متجه بيرجر عموديا على خط إنخلاع الحافة ويقع في مستوى الانزلاق وتكون قيمته محددة وتتوقف على طبيعة دورية الشبكة البلورية وتعتمد أيضا على ميكانيكية الانزلاق. تكون قيمة متجه بيرجر لوحدة الإنخلاع مساوية لثابت الخلية.



دائرة بيرجر في شبكة تحتوي على انخلاع لولبي



دائرة بيرجر في شبكة تحتوي على انخلاع حافة



دائرة بيرجر في شبكة مثالية

الشكل 4-14 خصائص دائرة ومتجه بيرجر في شبكة بلورية.

يلخص الشكل 4-14 خصائص دائرة ومتجه بيرجر في شبكات بلورية مثالية (تامة) وأخريات تحتوى على إنخلاعات.

6-4 العيوب المستوية PLANER DEFECTS

العيوب المستوية هي العيوب الواقعة بين سطحين، (Interfacial). يمكن 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 الذرى 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 الحبيبة (grain boundaries).
- 4- الأسطح بين الأطوار المختلفة للمادة وتسمى حدود الطور (phase boundaries)، حيث يوجد، بشكل عام، تغير في التركيب الكيميائي والترتيب الذرى عبر السطح بين الأطوار.

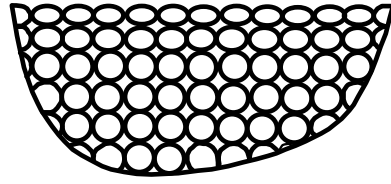
5- العيوب الناتجة عن أخطاء التعبئة (الرص).

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.

1-6-4 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 15-4.



الشكل 15-4 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

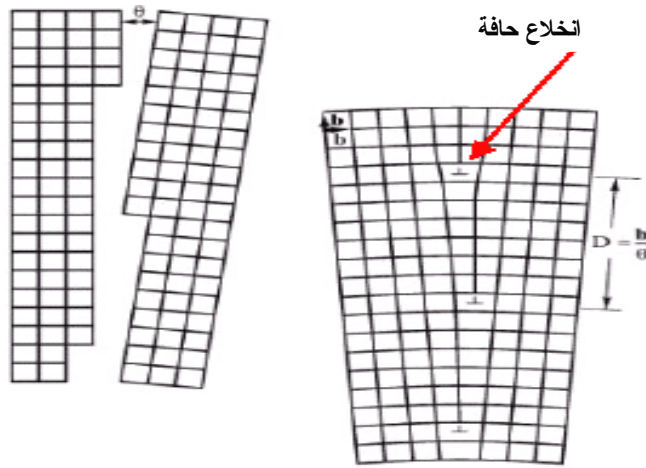
روابط الذرات المكسورة والموجودة على هذه الأسطح. وهذا يعنى أن للذرات عدد كبير من أقرب الجيران في مستوى السطح. تتراوح قيم طاقة السطح في المواد الصلبة من 10 جول/م² إلى 1 جول/م². بشكل عام، يمكن القول أنه كلما كانت الروابط قوية في البلورة فإن طاقة السطح تكون أعلى.

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 الأكسيجين 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 تعطى إمتزاز مختلف على السطح.

2-6-4 حدود الحبيبة GRAIN BOUNDARIES

الحبيبة هي تجمع بلوري بحيث تكون جميع وحدات خلايا الحبيبة الواحدة منتظمة في نسق إتجاهى خاص بها ولها حدود خارجية (سطح) تفصلها عن الحبيبات المجاورة وهكذا فإن حدود الحبيبة تفصل بين مناطق ذات توجيه بلوري مختلف. أبسط شكل لحدود

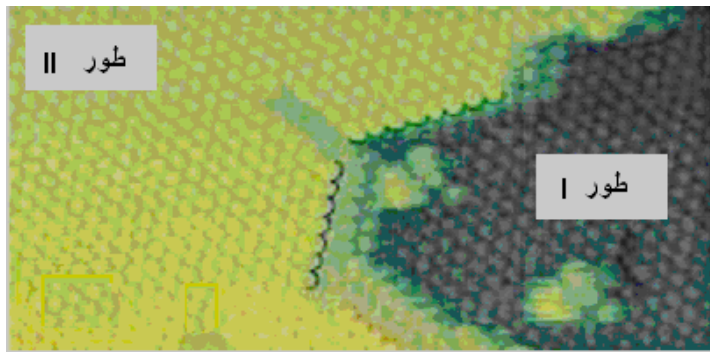
الحبيبة يكون عبارة عن سطح بيني يتكون من صفوف متوازية من إنخلاعات حافة. يسمى هذا النوع الخاص من الحدود بالحد المائل وذلك لأن عدم التوجيه يكون في شكل ميل صغير على محور موازى للإنخلاعات، كما يوضح الشكل 4-16. يكون التركيب الناتج مكافئ لإنخلاعات حافة مفصولة بمسافة تساوى $\frac{b}{\theta}$ ، حيث b هو طول متجه بيرجر و θ هي زاوية ميل الإنخلاعات. يشار إلى الحد المائل بحد الزاوية المنخفضة عندما تكون زاوية عدم التوجيه أقل من 10° .



الشكل 4-16 تركيب حد حبيبة مبسط يسمى بالحد المائل لأنه يتكون عندما تميل حبيبتين متبلورتين على بعضهما بعضا بزاوية مقدارها بضع درجات.

عندما يكون لحد الحبيبة 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 الحبيبة منطقة لها إتساع يساوى ثخانة مقدارها بضع ذرات، حيث يوجد انتقال (تغير) في الدورية الذرية بين البلورات أو الحبيبات المتجاورة

لحدود الحبيبة 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 الحبيبة 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 4-17.

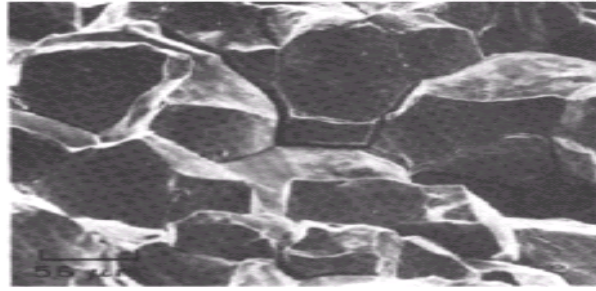


الشكل 4-17 سطح مكون بين طورين.

3-6-4 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 أمورية (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 4-18 صورة لسطح كسر فولاذ لا

يصدأ مأخوذة بواسطة ميكروسكوب الكتروني ماسح يظهر وجود أطوار عديدة.



الشكل 4-18

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 وطور آخر يتماسك مع بلورات كربيد السليكون التي تتميز بصلابتها العالية. وعموماً، 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 بـ سطح 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.

يؤدى مفهوم أن المادة تتركب من أطوار متصلة وأطوار متقطعة إلى تصنيف بسيط لمختلف أنواع المواد المركبة. يقدم الجدول 1-4 بعض الأمثلة مصنفة طبقاً للتركيب البنائى (مواد متبلورة أو مواد غير متبلورة) وطبيعة كل طور.

جدول 1-4 تصنيف المواد المركبة (المتعددة الأطوار)

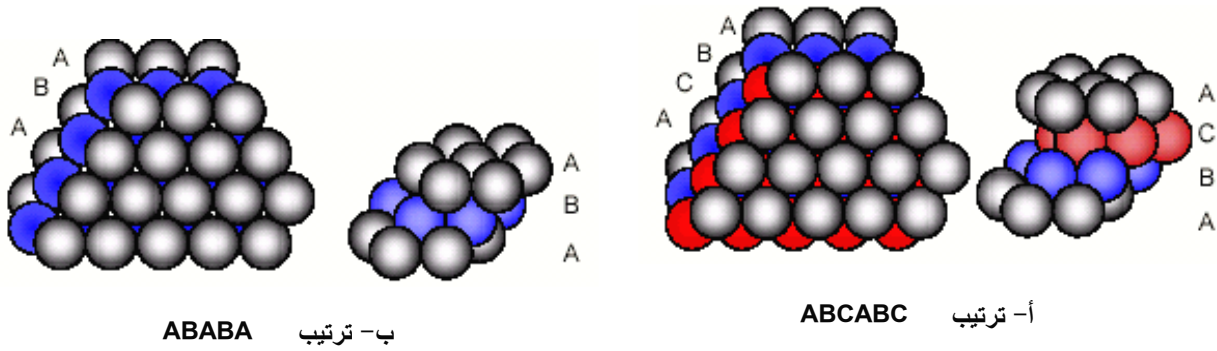
طور متصل	طور (أطوار) متقطعة	أمثلة
متبلور	متبلور	كل الأنظمة المعدنية مثل الحديد الزهر ، الصلب، سبيكة اللحام، معظم الصخور الطبيعية مثل الجرانيت والرخام.
متبلور	غير متبلور	مواد ليس لها أهمية تطبيقية.
غير متبلور	متبلور	معظم المواد السيراميكية الصناعية، مثل قرميد البناء، البور سليك العازل كهربيا، البوليمرات المتماسكة جزئيا، بعض المركبات المتبلورة-البوليمرية.
غير متبلور	غير متبلور	الألياف الزجاجية، الزفت (الإسفلت)، الخشب، الأسمنت المتميع.

4-6-4 عيوب الرص (التعبئة) PACKING DEFECTS

بفرض 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 أو الرص على الهيئة ABAB، كما هو موضح بالشكل 4-19.

عندما ينتج ترتيب ABAB مثلاً بدلاً من الترتيب ABCABC فإننا نقول أنه حدث

خطأ في الرص.



الشكل 4-19 رسم توضيحي لرص مستويات من الذرات في بلورة مكعبة متمركزة الأوجه.

عندما ينتج ترتيب ABABC مثلاً بدلاً من الترتيب ABCABC فإننا نقول أنه حدث خطأ في الرص.

4-7 تعيين تركيز وطاقة التنشيط لتكوين الفراغ

DETERMINATION OF VACANCIES CONCENTRATION AND THE ACTIVATION ENERGY

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 تماماً مثل ما يحدث لسائل في حالة اتزان ديناميكي مع بخاره. سوف نعتبر فيما يلي تكون عيب شوتكى. من القانون الثاني للديناميكا الحرارية نجد أن إجمالي الطاقة الحرة للنظام (طاقة هولمولتز)، يكون على الصورة،

$$F = H - TS, \quad 1-4$$

حيث F هي الطاقة الحرة للنظام قيد الدراسة، H هو المحتوى الحراري (الانتالبي

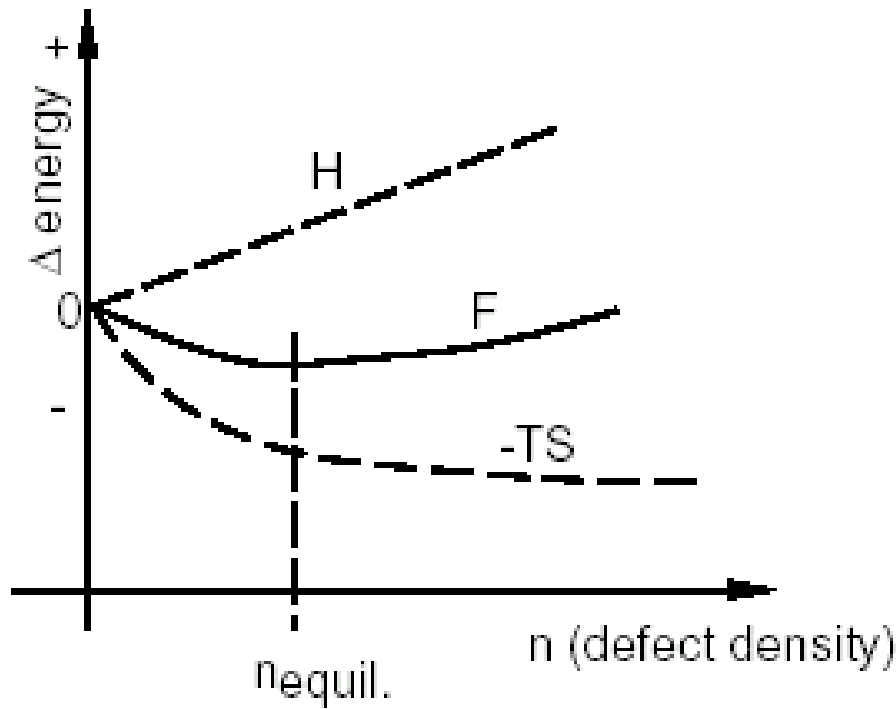
(enthalpy) و S هو الأنتروبيا أو الفوضى (entropy) و T هي درجة الحرارة المطلقة.

إذا حدث التفاعل عند درجة الحرارة T ، يحدث تغير في قيمة F مقداره ΔF طبقاً للتغير في ΔH ويكون التغير المحتمل في الأنتروبيا هو $T\Delta S$. هذه هي الحالة التي تصف تكون العيوب في الجسم الصلب التام. طبقاً لتوزيع الطاقة (ماكسويل-بولتزمان) فإنه يعتقد أن عدداً 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 خطياً مع عدد العيوب المتكونة).

يؤدي الانحراف عن الكمال بتوليد العيوب النقطية إلى زيادة العشوائية أو الفوضى (ΔS موجبة). يكون مقدار الفوضى المتولدة (ΔS) كبيراً جداً 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. وبناءً على ذلك فإن الحد $T\Delta S$ يتناقص بسرعة عند البداية ثم يميل إلى الثبات. يبين الشكل 4-20 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. وتُخبرنا النهاية الصغرى للطاقة الحرة F أن التحول من الكمال إلى التركيب ذي العيوب (أي في اتجاه الفوضى) عند الاتزان يحدث تلقائياً، أي بشكل طبيعي. تعتبر عملية تكون الفراغات الذرية في

المواد الصلبة غير واضحة وما زالت ميكانيكية التكوين هدفا للأبحاث المكثفة.



الشكل 4-20 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 $\Delta H_d/kT$ ، وحيث 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،

$$\frac{N!}{(N - n_d)! n_d!}$$

تدل انتروبيا النظام على احتمال الحصول أي توزيع من التوزيعات السابقة، بمعنى

أن ΔS تمثل الفوضى (الانتروبيا) فى النظام نتيجة تكون فراغ واحد (عيب) وبالتالي يكون الاحتمال هو

$$p = k \ln \left(\frac{N!}{(N - n_d)! n_d!} \right) \quad 2-4$$

وإذا كان تركيز الفراغات فى الشبكة هو $c = \frac{n_d}{N}$ وباستخدام تقريب ستيرلنج (الملحق 3

فى آخر الكتاب) $\ln (N!) = N \ln (N) - N$ نحصل من المعادلة 2-4 على

$$p = N [c \ln c - (1 - c) \ln (1 - c)]$$

وتكون الزيادة فى الانتروبيا الذاتية نتيجة إدخال عدد n_d هي ΔS وبالتالي يكون التغير

الكلى فى الانتروبيا بإدخال هذا العدد من الفراغات هو

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

وحيث أن الطاقة الحرة تعطى بالعلاقة $(F = H - TS)$ فإن التغير فى الطاقة الحرة يساوى

الطاقة الحرة للفراغات المتكونة ويكون على الصورة،

$$n_d \Delta H_d = T [n_d \Delta S - Nk (c \ln c - (1 - c) \ln (1 - c))]$$

بمفاضلة المقدار السابق بالنسبة لعدد الفراغات n_d ومساواة الناتج بالصفر نحصل على

حالة الاتزان الديناميكي الحرارى كالأتي،

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

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

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

$$\therefore c = e^{\frac{\Delta S}{k}} e^{-\left(\frac{\Delta H_d}{kT}\right)} \quad 3-4$$

ويمكن كتابة عدد الفراغات على الصورة التالية

$$n_d = N e^{-\Delta H_d / kT} \quad 4-4$$

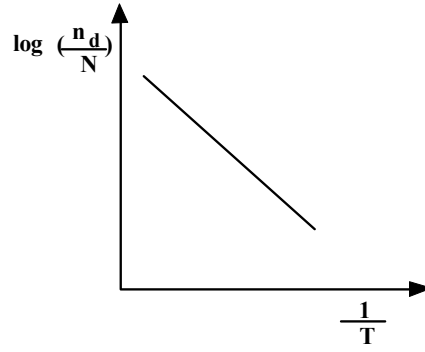
حيث n_d هو عدد الفراغات أو العيوب (عند الاتزان عند T)، و N هو العدد الكلي للمواقع الذرية لكل مول، و ΔH_d هي الطاقة اللازمة لتكون العيب (الفراغ) و T هي درجة الحرارة المطلقة.

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 أن $N = 10^{29} \text{ atom/m}^3$ يكون عدد الفراغات $n_d = 10^{12} \text{ vacancy/m}^3$ عند $T = 300^\circ \text{K}$ بينما يكون عدد الفراغات $n_d = 10^{22} \text{ vacancy/m}^3$ عند $T = 900 \text{ K}$.

طبقاً للمعادلة السابقة يمكن رسم العلاقة بين $\log\left(\frac{n_d}{N}\right)$ و $\left(\frac{1}{T}\right)$ ، كما هو مبين

بالشكل 4-21، ونحصل على خط مستقيم ميله يساوى $-\frac{\Delta H_d}{k}$ وبذلك، يمكن حساب طاقة

التشيط لتكوين الفراغ ، ΔH_d .



الشكل 4-21 اعتماد عدد الفراغات على درجة الحرارة.

8-4 تعيين 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 فى عينة من المادة الصلبة المتبلورة يؤدي إلى تغير فى إحدى الخصائص الفيزيائية للعينة وبقياس التغير فى الخاصية الفيزيائية يمكن الحصول على كثافة الفراغات فى العينة. فعلى سبيل المثال، بسبب وجود الفراغات زيادة فى حجم العينة ومن ثم يمكن قياس التغير فى الحجم ومعرفة كثافة الفراغات فى العينة. كذلك، يؤدي وجود الفراغات إلى تغير المقاومة النوعية الكهربائية وقد وجد أن،

$$\Delta\rho = Ae^{-\Delta H_d / kT} \quad 5-4$$

حيث A ثابت. فى 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 فى كل حالة يمكن تحديد كيفية تغير عدد الفراغات مع درجة الحرارة ومن ثم حساب طاقة التنشيط

لتكوين الفراغات.

مثال 1-4

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) هو n_d يعطى بالعلاقة

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

حيث n_d هو عدد العيوب (عند الاتزان عند T)، و N هو العدد الكلى 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

$$\begin{aligned} \left(\frac{n_d(500^{\circ}\text{C})}{n_d(900^{\circ}\text{C})} \right) &= 2 \times 10^{-3} = \frac{Ne^{-\Delta H_d / k(500+273)}}{Ne^{-\Delta H_d / k(900+273)}} \\ &= \frac{e^{-\Delta H_d / k(500+273)}}{e^{-\Delta H_d / k(900+273)}} = \frac{e^{-\Delta H_d / k(773)}}{e^{-\Delta H_d / k(1173)}} \end{aligned}$$

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

بأخذ لوغاريتم الطرفين في المعادلة السابقة نحصل على

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

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

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

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

$$= 19440.63 \times 10^{-23} = 1.944 \times 10^{-19} \text{ Joule}$$

$$\therefore \Delta H_d = 1.944 \times 10^{-19} \text{ (Joule)} \times 6.242 \times 10^{18} = 1.21 \text{ eV}$$

مثال 2-4

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،

$$n_d = N e^{-\Delta H_d / kT} ,$$

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.

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

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

بالتعويض عن طاقة التنشيط وثابت

بولتزمان ($k = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$) في المعادلة السابقة نحصل على،

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

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

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

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

$$= (1058 - 273)^\circ \text{C} = 785^\circ \text{C}$$

مثال 3-4

نظرياً، تمّ 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

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

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 ($k=1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$) نحصل

على

$$c = \frac{n_d}{N} = e^{-0.64102 \times 10^{-18} / 1.38 \times 10^{-23} \times 1350} = 1.18 \times 10^{-5} \quad \text{فراغ/سم}^3$$

ملخص الباب

- يوجد نوعين من العيوب النقطية تكون متأصلة في المادة، هما الفراغ والذرة المتخللة.
- تحتل الذرة المتخللة مكان بين الذرات الأصلية، وإذا كانت هذه الذرة أصلية يسمى العيب في هذه الحالة تخلل ذاتي و إذا كانت الذرة غريبة فإنها تسمى شائبة، وعندما تحتل الذرة مكانا بين الذرات الأصلية فإنها تكون عيباً نقطياً وتسمى بالشائبة المتخللة.
- تكون ذرات الشوائب المتخللة عبارة عن ذرات ذات حجم صغير يمكنها من شغل مكان بين المستويات الذرية للبلورة حيث أن الفراغ بين المستويات يكون صغيراً.
- عندما تحل الذرة الغريبة محل ذرة أصلية في الترتيب البلوري يسمى العيب، في هذه الحالة، بشائبة تعويضية.
- يكون تركيز الفراغات في المواد النقية صغيراً جداً ويزداد التركيز بارتفاع درجة الحرارة.
- يوجد نوعان من العيوب الفراغية في البلورات الأيونية هما عيب شوتكى وعيب فرنكل.
- ينشأ عيب شوتكى عندما تترك الذرة مكانها وتنتقل إلى سطح البلورة تاركة خلفها مكاناً شاغراً، ويتكون زوج من فراغات الأيونات إحداهما سالب الشحنة والآخر موجب الشحنة.

- يوجد نوعان من عيوب فرنكل تحدث فى نفس الوقت هما: عيب الأيون المزاح وزوج الفراغ الأيوني.
- الإنخلاع هو عبارة عن خط منتظم من الذرات التى تركت مكانها ويمتد هذا الخط مسافة كبيرة داخل الشبكة.
- يمكن تقسيم الإنخلاع على نوعين رئيسيين هما: إنخلاع الحافة و الإنخلاع اللولبي.
- يكون إنخلاع الحافة عبارة عن جزء من مستوى زائد أو محشور بين المستويات داخل البلورة.
- الإنخلاع اللولبي هو عبارة عن إزاحة للذرات أثناء حركتها على امتداد خط الإنخلاع ويكون متجه الانزلاق موازيا لخط الإنخلاع.
- يمكن وصف الإنخلاع بواسطة منحنى مغلق يحيط بخط الإنخلاع يسمى دائرة بيرجر.
- يختلف ترتيب الذرات على السطح الحر عن الذرات الموجودة فى عمق البناء وذلك لاختلاف البيئة المحيطة.
- تفصل حدود الحبيبة بين المناطق ذات التوجيه البلوري المختلف.
- لحدود الحبيبة طاقة سطح بيني بسبب الاضطراب الذي يحدث فى الدورية الذرية للمنطقة المجاورة للحد.
- تكون طبيعة السطح البيني الذي يفصل بين الأطوار المختلفة شبيهة إلى حد كبير بسطح الحبيبة.

- عند درجات الحرارة المنخفضة يكون تركيز الفراغات في البلورة صغيراً ويزداد بسرعة مع زيادة درجة الحرارة (علاقة أسية).
 - توجد العديد من الطرق العملية لتعيين عدد الفراغات وكلها مبنية على تغير بعض الخصائص الفيزيائية مع تكون العيوب (الفراغات).
-

أسئلة وتمارين

1. عرف عيوب فرنكل وماذا تعتقد، هل تتكون عيوب فرنكل فى بلورة KCl أم فى بلورة AgI ولماذا.
2. أذكر أربعة أنواع من العيوب المختلفة التى يمكن أن تتكون فى بلورات المواد الصلبة، وما هي العلامات التى تدل على الوجود الفعلي لهذه العيوب.
3. أثبت أن عدد عيوب فرنكل n الموجودة داخل بلورة متزنة حرارية هو $n = n_0 e^{-E/kT}$ ، حيث n_0 هو تركيز الذرات و k هو ثابت بولتزمان و T درجة الحرارة المطلقة و E هي طاقة التنشيط لتكوين فراغ فرنكل.
4. إذا كانت الطاقة اللازمة لتكوين فراغ فى الألومنيوم هي 0.72 eV ، أحسب عدد الفراغات الموجودة عند درجة حرارة الغرفة 25°C وعند 550°C .
5. فى مادة معينة وجد أن عدد الفراغات الموجود هو فراغ واحد لكل 10^{11} ذرة عند درجة حرارة 750°C ، وفراغ واحد لكل 10^{10} ذرة عند 850°C . عند أي درجة حرارة يمكن أن يوجد فراغ لكل 10^8 .
6. إذا كانت الطاقة اللازمة لتكوين فراغ فى مادة معينة هي $\Delta H_d = 1.05 \text{ eV}$ ، أحسب كثافة الفراغات (n/cm^3) المتكونة عند 500°C .
7. عرف ثلاثة أنواع من العيوب البلورية فى المواد الصلبة واقترح لكل نوع من هذه

العيوب خاصية من خصائص المواد التي يمكن أن تتحسن بوجود العيب وأخرى التي يمكن أن تسوء معها في وجود العيب.

8. وضح بالرسم تكوين وخصائص عيوب شوتكى فى :- (1) معدن عبوة متراسة، (2) بلورة أيونية و (3) مادة شبه موصلة.

9. إذا كان الشغل اللازم لتحضير واحد مول من الفراغات فى النحاس (Cu) 20000 سعر، عين تركيز الفراغات المتكونة (فراغ/سم³) عند 1350 K.

10. إذا كانت طاقة تنشيط تكوّن عيب شوتكى فى النحاس هي 0.89 eV، أحسب التغير فى الكثافة نتيجة تكوّن عيب شوتكى خلال تسخين النحاس من 300 K إلى 1200 K.

11. وجد عملياً أن التغير فى الكثافة هو % 6.45 - ، حاول أن تحسب أي فرق بين القيم المعينة عملياً والمتوقعة نظرياً.

12. بفرض أن طاقة التنشيط التى تكون فراغ فى النحاس هي 1.2 eV، عين النسبة المئوية للتغير فى الحجم الذي يحدث عندما يتم تسخين البلورة إلى نقطة الانصهار. (اعتبر فقط التمدد نتيجة "امتصاص" الفراغات).

13. إذا وجدت أن نسبة كثافة الفراغات (n/cm³) عند 500 K و 800 K تساوى 10⁻³، فما قيمة طاقة تكون فراغ (ΔH_d) بوحدات الإلكترون فولت لكل فراغ.

14. عند 800 °C وجد فى بلورة ما تكون فراغ لكل 10¹⁰ ذرة. أحسب طاقة تكوين

الفراغ فى هذه المادة إذا كان عدد الفراغات فى هذه المادة عند 900°C هو فراغ واحد لكل 3×10^9 ذرة.

15. فى مادة معينة إذا كانت قيمة تركيز الفراغات عند الاتزان الحرارى الديناميكي عند 300°C هي $3 \times 10^{17} \text{ atom/cm}^3$ ، احسب طاقة تكوين الفراغ فى هذا المعدن بوحدة الإلكترون فولت لكل فراغ.

16. إذا كانت الطاقة اللازمة لتكوين فراغ فى النيكل هي 1.12 eV ، عين عدد ذرات النيكل المسكونة لكل فراغ متكون عند الاتزان عند 820°C .

17. إذا كانت الطاقة اللازمة لتكوين فراغ فى الكروم هي 1.08 eV ، فما عدد ذرات الكروم المتكونة لكل فراغ واحد عند الاتزان عند 950°C .

الباب الخامس

حيود الأشعة السينية في البلورات

X-Rays Diffraction in Crystals



الباب الخامس

حيود الأشعة السينية في البلورات

X-Ray Diffraction in Crystals

المحتوى

- 1-5 مقدمة.
- 2-5 الأشعة المستخدمة لدراسة التركيب البلوري.
- 3-5 توليد وخصائص الأشعة السينية.
- 4-5 تشتت الأشعة السينية بواسطة الذرة.
- 5-5 تشتت الأشعة السينية بواسطة البلورة.
- 6-5 الشبكة الإنقلابية.
- 7-5 استخدام الأشعة السينية في تحليل التركيب البنائي للمادة الصلبة.
- 8-5 الطرق المعملية لحيود الأشعة السينية.

الأهداف

بعد استكمال دراسة هذا الباب يجب أن يكون الدارس قادراً على:-

- ✗ معرفة كيفية توليد ومنشأ الأشعة السينية.
- ✗ الإلمام بخصائص وأنواع الأشعة المختلفة المستخدمة لدراسة التركيب البلوري والمقارنة بين طيف الأشعة السينية الأبيض والطيف الخطي.
- ✗ دراسة تشتت الأشعة السينية بواسطة الذرة وبواسطة البلورة.
- ✗ تعريف واستنتاج خلية الوحدة البنائية للشبكة الإنقلابية (خلية بريليون الاولى).
- ✗ استنتاج قانون براغ لحيود الأشعة السينية في البلورات.
- ✗ معرفة قواعد الاختيار لقمم الحيود في الأنظمة البلورية المكعبية.
- ✗ فهم ومقارنة الطرق العملية المختلفة لحيود الأشعة السينية في المادة الصلبة مثل طريقة لاوى، طريقة المسحوق و طريقة مطياف الحيود.

1-5 مقدمة

من الدراسة السابقة للشبكات البلورية يتبين أن أبرز صفة للبلورة هي تمتعها بالتماثل الانتقالي، وهذا يستوجب أن تكون جميع الخصائص البلورية دورية تكرر نفسها وفق الاتجاهات البلورية المختلفة المحددة بمتجه في الشبكة البلورية. سنناقش في هذا الباب دورية الشبكة البلورية وكيفية تعيين التركيب البلوري. يتعين التركيب البلوري بدراسة نموذج حيود حزمة الأشعة بواسطة البلورة. يحدث حيود الأشعة فقط في اتجاهات محددة تماماً مثلما يحدث للضوء بواسطة محزوز الحيود. بقياس اتجاهات الحيود وشدة الأشعة المشتتة المقابلة يمكن الحصول على معلومات إضافية تفيد في دراسة التركيب البلوري المسبب لهذا الحيود.

تستخدم ثلاثة أنواع من حزم الأشعة في تجارب الحيود هي: الأشعة السينية، وحزم النيوترونات وحزم الإلكترونات. تكون المعالجة الرياضية للأنواع الثلاثة متشابهة تقريباً ولذلك سوف نفحص بالتفصيل حالة الأشعة السينية فقط. بعد مناقشة مختصرة لتوليد وخصائص الأشعة السينية، سنقدم استنتاجاً مختصراً لقانون براغ لتشتت الأشعة بواسطة المستويات البلورية. سنناقش أيضاً تشتت الأشعة بواسطة الذرة وبواسطة البلورة. في هذا السياق سوف نناقش الشبكة الإنقلابية ومختلف الطرق العملية لدراسة التركيب البلوري. كما سوف نلقى الضوء على حيود النيوترونات والإلكترونات وإظهار خصائص كل منهما. وأخيراً، سوف ندرس الأسس النظرية لتعيين التركيب البنائي للسائل ودالة التوزيع

الزواي التي تتعين بواسطة ما يسمى بمعامل تركيب البناء.

2-5 الأشعة المستخدمة لدراسة التركيب البلوري

USED RAYS IN STUDYING CRYSTAL STRUCTURE

لكي تكون الأشعة مناسبة لدراسة التركيب البلوري للمادة في الحالة الصلبة يجب أن يكون الطول الموجي للأشعة مساويا تقريبا للمسافة بين الذرات. وحيث أن المسافة بين ذرات المادة الصلبة تكون في حدود 10^{-8} cm فإن الأشعة التي بواسطتها يمكن الحصول على معلومات مهمة عن التركيب البنائي للمادة يجب أن يكون لها طول موجي في المرتبة نفسها (10^{-8} cm). عند سقوط بعض أنواع الإشعاعات على المادة الصلبة فإنها تنتشت بواسطة المستويات الذرية للمادة وتحيد عن مسارها وتتداخل معا مكونة نموذج حيود (Diffraction pattern) يحمل في طياته معلومات عن التركيب البنائي للمادة. يمكن استخراج هذه المعلومات والحصول على تفاصيل التركيب البنائي للمادة المتبلورة عن طريق تحليل نماذج الحيود الجيدة للأشعة داخل هذه المادة.

يمكن استخدام العديد من أنواع الفوتونات في تجارب الحيود لدراسة التركيب البنائي للمادة المتبلورة منها: الأشعة السينية، النيوترونات والإلكترونات. بالرغم من أن هذه الأنواع تختلف فيما بينها في الطاقة (وبالتالي في الطول الموجي)، إلا أن المعالجة الرياضية للأنواع الثلاثة تكون متشابهة تقريبا.

تعتمد زوايا حيود الفوتونات في المادة، بصورة أساسية، على كل من التركيب

البنائى للمادة المسببة للحيود و الطول الموجى للفوتونات المستخدمة. تتعين طاقة فوتون الأشعة السينية طبقا لطولها الموجي من العلاقة:

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} , \quad 1-5$$

حيث h ثابت بلانك (6.62×10^{-27} erg.sec)، ν تردد الموجة و c هي سرعة الضوء (3×10^8 m.sec⁻¹). ومن هذه العلاقة يمكن كتابة الطول الموجي للأشعة السينية على الصورة،

$$\lambda \left(\text{\AA} \right) = \frac{12.4}{E \text{ (keV)}} . \quad 2-5$$

يتضح من هذه العلاقة أن طاقة فوتون الأشعة التي تكون في حدود 10-50 كيلو إلكترون فولت يعطى طول موجي في حدود 0.4-1.2 أنجستروم. يبين الشكل 1-5 موقع الأشعة السينية في طيف الموجات الكهرومغناطيسية. فى هذا الطيف بسبب غياب القيم الدقيقة للحدود العلوية والسفلية لمناطق الموجات الكهرومغناطيسية المختلفة فإن الحدود بين المناطق تكون اختيارية.

تصلح أشعة النيوترونات المعجلة في دراسة التركيب البنائى لبعض أنواع المواد الصلبة وذلك بسبب عزمها المغناطيسي، الأمر الذي يجعلها تتفاعل بشدة مع الكتلونات الذرات التي تكون المادة.

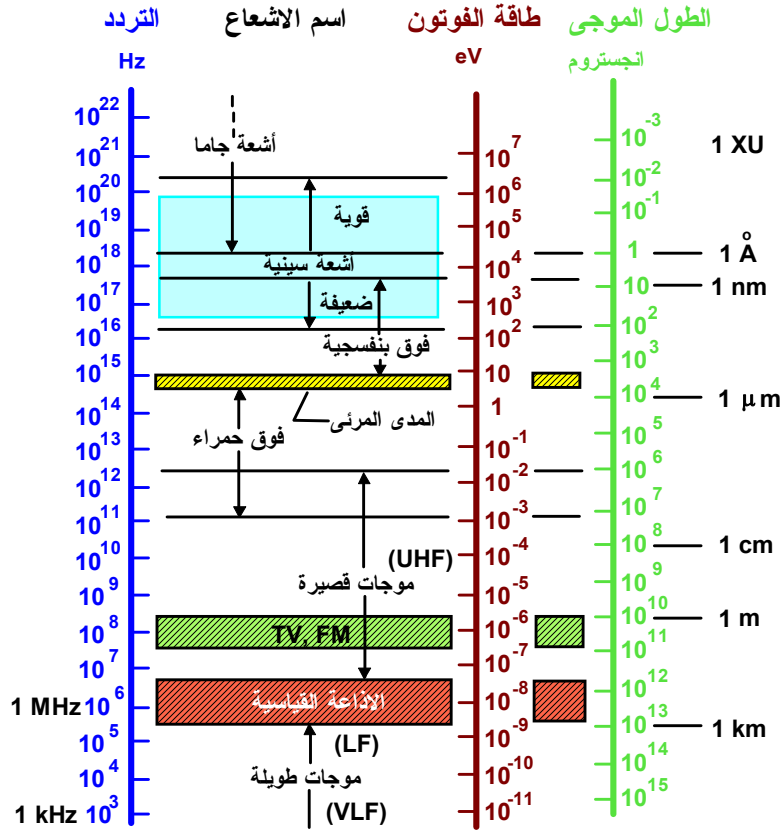
ترتبط طاقة النيوترون المتحرك بسرعة كبيرة بطول موجات دى برولى المصاحبة

له طبقا للعلاقة،

$$E = \frac{h^2}{2M_n \lambda^2}$$

3-5

حيث M_n كتلة النيوترون ($1.675 \times 10^{-24} \text{ gm}$)



الشكل 1-5 طيف الموجات الكهرومغناطيسية.

وبالتعويض عن كتلة النيوترون وثابت بلانك في هذه المعادلة يمكن الحصول على الطول

الموجي في الصورة،

$$\lambda (\text{Å}) = \frac{0.28}{[E (\text{eV})]^{\frac{1}{2}}}$$

4-5

يكون الطول الموجي للنيوترون ذو الطاقة 0.08 eV في حدود 1 Å ويطلق على

مثل هذه النيوترونات أسم النيوترونات الحرارية.

تصلح الالكترونات المعجلة للاستخدام في تجارب الحيود وذلك بسبب شحنتها

الكهربية، الأمر الذي يجعلها تتفاعل بشدة مع ذرات المادة. وأيضاً، بسبب شحنتها تكون مسافة الاختراق للإلكترونات أقل منها في حالة الأشعة السينية ولذلك تستخدم الأشعة الإلكترونية في دراسة التركيب البلوري لأغشية رقيقة من المواد أو دراسة أسطح البلورات السميكة.

ترتبط طاقة الإلكترونات المتحركة بسرعة كبيرة بطول موجات دي برولي المصاحبة لها طبقاً للعلاقة،

$$E = \frac{h^2}{2m\lambda^2} \quad 5-5$$

حيث m هي كتلة الإلكترون ($9.11 \times 10^{-34} \text{ gm}$). يمكن كتابة طول الموجي المصاحب للإلكترون على الصورة،

$$\lambda (\text{\AA}) = \frac{12}{[E (\text{eV})]^{\frac{1}{2}}} \quad 6-5$$

5-3 توليد وخصائص الأشعة السينية

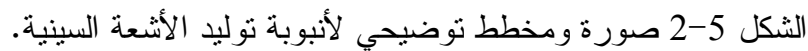
GENERATION AND PROPERTIES OF X-RAYS

5-3-1 توليد الأشعة السينية

تم اكتشاف الأشعة السينية في صيف 1895 بواسطة العالم الألماني رونتجين (Roentgen). كان رونتجين مهتماً بتوليد أشعة المهبط وبالصدفة لاحظ حدوث انبعاث وميض (أشعة) من شاشة فلورسنتية (fluorescent) موضوعة على بعد عند حدوث تفريغ كهربائي في أنبوبة أشعة المهبط. منذ تلك اللحظة كرس رونتجين كل طاقته لدراسة

خصائص هذه الأشعة المجهولة التي تسبب هذا الأثر وسماها الأشعة السينية (بمعنى الأشعة المجهولة). وقد قوبل هذا الاكتشاف بكثير من الاهتمام في الاوساط العلمية وما لبث وأن أستخدم في التصوير في المجال الطبي. تمخضت الخمس عشرة سنة اللاحقة فقط عن معلومات قليلة عن طبيعة هذه الأشعة الموجية حين استطاع العالم ماكس فون لاوى (Max Von Laue) عام 1912 الجزم بذلك عمليا. كما استطاع كنيبنج و فريدريك (Knipping - Friedrich) بعد عدة محاولات إجراء تجربة ناجحة لتشتت الأشعة السينية على بلورة كبريتات النحاس وقد لوحظ وجود بقع منتشرة حول البقعة المركزية مكان سقوط الأشعة على اللوح نتيجة تشتت الإشعاع بواسطة المستويات الذرية للبلورة. وقد توصلوا بشكل قاطع إلى استنتاج أن الإشعاع يتكون من موجات وأن البلورة تتركب من ذرات مرتبة في شبكة فضائية.

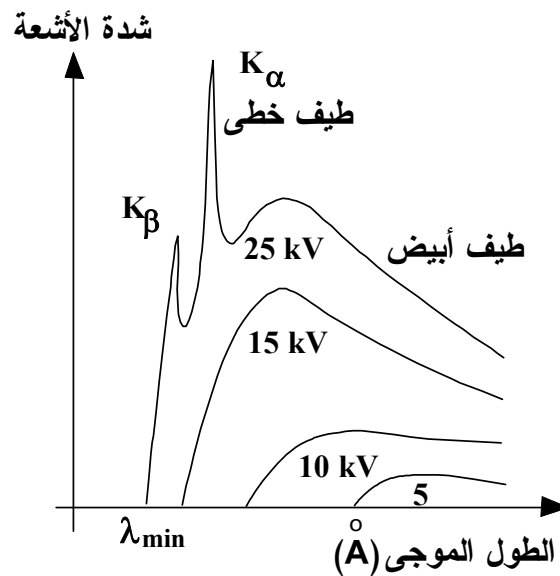
يمكن توليد الأشعة السينية بواسطة جهاز عبارة عن أنبوبة مفرغة تحتوى على مصعد (هدف) ومهبط، كما هو مبين بالشكل 5-2. عند تسخين المهبط بواسطة فتيلة تنبعث منه إلكترونات يتم تعجيلها نحو المصعد بواسطة فرق الجهد العالي المطبق بين المصعد و المهبط. تصطدم الإلكترونات المعجلة بالمصعد وتولد أشعة سينية تنبعث منه لتخرج من فتحة جانبية (نافذة) عبارة عن غشاء رقيق من معدن. وحيث أن معظم طاقة الإلكترونات المعجلة تفقد عند الاصطدام بالمصعد على شكل طاقة حرارية (99 % طاقة حرارية و 1 % لتوليد أشعة) يجب أن يصنع المصعد من معدن له درجة انصهار عالية



232

بين المصدر والمهبط.

يشار إلى الطيف المتصل بالطيف الأبيض (أو طيف الفرملة) ويكون منشأه كآلاتي. تفقد الإلكترونات المعجلة طاقتها عند اصطدامها مع ذرات مادة الهدف الأمر الذي معه تثار الإلكترونات وتنتقل إلى مستويات طاقة أعلى. على الجانب الآخر، عند مرور الإلكترون بالقرب من نواة ذرة الهدف فإنه يعاني من تأثير جذب مجال النواة له والذي يؤدي إلى تخفيض سرعته (فرملته) وفقد طاقة حركته بالتدريج وبشكل مستمر. تنبعث هذه الطاقة المفقودة في شكل فوتونات أشعة سينية تحتوي على جميع الأطوال الموجية في مدى معين.



الشكل 3-5 اعتماد طيف الأشعة السينية لهدف من المولبديوم (Mo) على فرق الجهد المطبق بين المهبط والهدف.

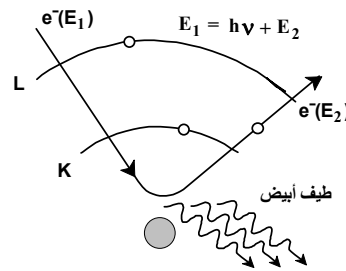
يبدأ مدى الأطوال الموجية للأشعة المنبعثة بالفوتونات الأكثر طاقة (λ_{\min}) وهي الفوتونات الناتجة عن الإلكترونات المعجلة التي فقدت طاقتها بالكامل عند النواة، أما

الإلكترونات التي فقدت جزء من طاقتها فإنها تؤدي إلى توليد فوتونات ذات أطوال موجية أطول (فوتونات ذات طاقات أقل). تتناسب λ_{\min} تناسب عكسي مع فرق الجهد المعجل المطبق على طرفي الأنبوبة، كما هو مبين في الشكل 5-3.

بفرض أن طاقة الإلكترون المعجل (قبل التصادم) هي E_1 وطاقة الإلكترون بعد التصادم هي E_2 فإن طاقة الفوتون المنبعث $h\nu$ تعطى بالعلاقة،

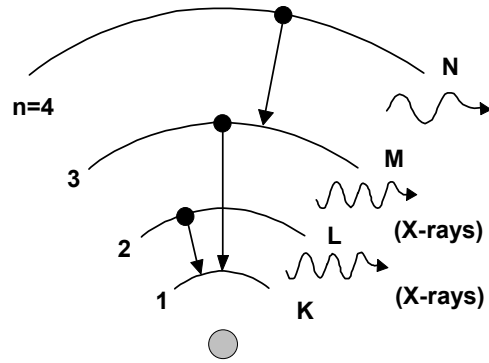
$$E_1 = h\nu + E_2 \quad 7-5$$

حيث ν تردد الفوتون. يكون تردد الفوتون أكبر ما يمكن (الطول الموجي أقل ما يمكن، λ_{\min}) عندما تكون $E_2 = 0$. يوضح الشكل 5-4 هذا المفهوم.



الشكل 5-4 منشأ الطيف الأبيض.

أما بخصوص الطيف الخطي فقد كان العالم كوسيل (W. Kossel) أول من اقترح تفسيراً لمنشئه طبقاً لنظرية بوهر للمستويات الإلكترونية عام 1920. تفترض هذه النظرية أن الإلكترونات تترتب في مدارات (K, L, M, N طبقاً للعدد الكمي الرئيسي $n = 1, 2, 3, 4, \dots$). تتنبأ هذه النظرية بأن فروق الطاقة بين المدارات المتتالية تتزايد مع تناقص العدد n وأن انتقال الإلكترون من المدار $n = 2$ إلى المدار $n = 1$ يصاحبه انطلاق إشعاع قوى (فوتون ذات طول موجي قصير)، كما هو مبين بالشكل 5-5.



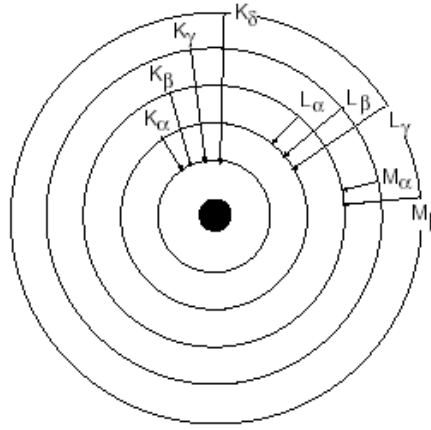
الشكل 5-5 أشعة سينية متولدة بواسطة انتقالات الإلكترونات بين المدارات الداخلية.

تولد الانتقالات بين المدارات الخارجية (على سبيل المثال من $n = 5$ إلى $n = 4$) إشعاعاً ذي طاقة صغيرة (أو ذي طول موجي طويل). وطبقاً لمعادلة ريديبيرج (Rydberg) فإن طاقة الفوتون الناتج عن انتقال إلكترون من مستوى ابتدائي (n_i) إلى مستوى نهائي (n_f) تكون.

$$\Delta E = \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) RZ^2, \quad 8-5$$

حيث R هو ثابت ريديبيرج و Z هو العدد الذري (عدد الإلكترونات في الذرة). من المعادلة السابقة يتضح أن فرق الطاقة المصاحب لانتقالات الإلكترون تتزايد بشدة مع العدد الذري وأن الطول الموجي للأشعة المنبعثة يزاح من 10^{-7} m إلى 10^{-10} m مع زيادة العدد الذري و يعرف هذا المدى الآن بمدى الأشعة السينية. تتكون فوتونات الأشعة السينية من مجموعات الأطياف المميزة والتي تسمى طبقاً للمدار النهائي والمدار الابتدائي للانتقال الإلكتروني، كما هو ملخص بالشكل 5-6. يتضح من الشكل السابق أن الأشعة المنبعثة من الذرة تعكس التركيب البنائي الدقيق لذرات مادة الهدف وقد تم استخدام هذا المفهوم في التحليل الكيميائي الكمي للكشف عن المادة المصنوع منها الهدف (المصدر)

وذلك من خلال تقنية الميكروسكوب الإلكتروني الماسح (SEM).



الشكل 5-6 الانتقالات الإلكترونية التي تولد أطيف أشعة سينية خطية.

4-5 تشتت الأشعة السينية من ذرة X-RAY'S SCATTERING FROM AN ATOM

يمكن تقسيم عملية تشتت الأشعة على مرحلتين: (1) تشتت الأشعة بواسطة ذرات منفصلة، و (2) حيود بواسطة التداخل المتبادل بين الأشعة المشتتة. وحيث أن المرحلتين متميزتين بعضهما عن بعض، فمن الملائم معالجة كل منهما بشكل منفصل.

لفهم ما يحدث، دعنا نتساءل لماذا تشتت الذرة الأشعة السينية؟ حسناً، كما نعلم تحاط أي ذرة بالإلكترونات التي تخضع للتسريع تحت تأثير عمل المجال الكهربائي المرتبط بالشعاع. وبما أن الشحنة المعجلة تبعث إشعاعاً، فإن الإلكترونات الذرية تبعث إشعاعاً أيضاً. في الحقيقة، تمتص الإلكترونات طاقة من الشعاع وتسبب تشتته في جميع الاتجاهات. وحيث أن الإلكترونات تشكل سحابة شحنة حول النواة، فإننا يجب أن نأخذ في الاعتبار فروق الطور بين الأشعة المشتتة من المناطق المختلفة للسحابة الإلكترونية عند اخذ التشتت من الذرة ككل في الاعتبار. فيما يلي، سوف نبين كيف يتم ذلك. افترض

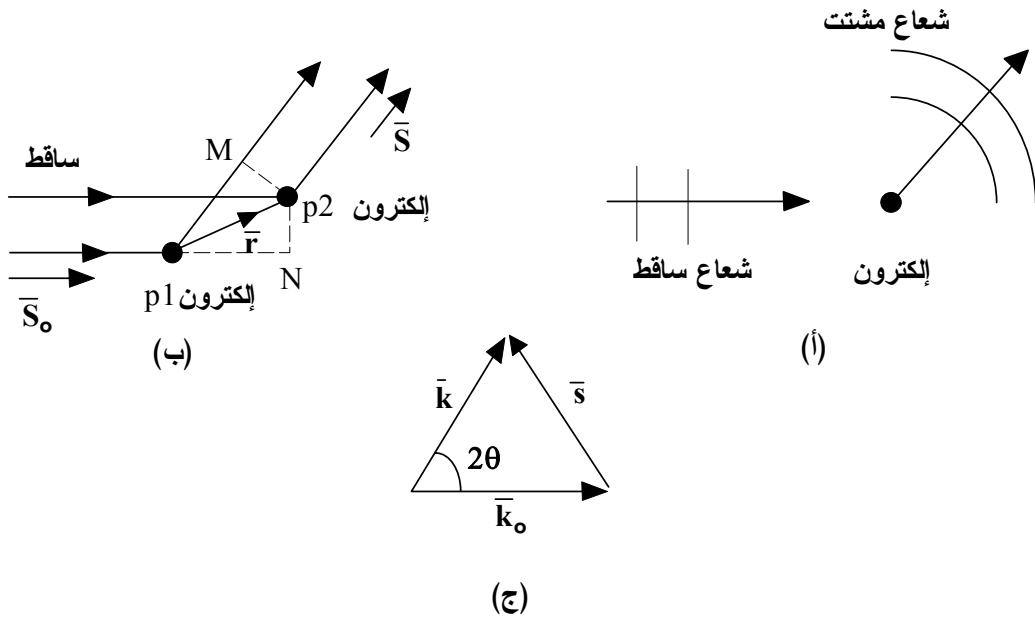
إلكترون منفرد، كما هو مبين بالشكل 5-7. يسقط على الإلكترون مجال موجة مستوية يعطى بالعلاقة،

$$u = A e^{i(\vec{k}_0 \cdot \vec{r} - \omega t)}, \quad 9-5$$

حيث A سعة الموجة، \vec{k}_0 متجه الموجة ($k_0 = 2\pi/\lambda$)، و ω التردد الزاوي. يكون المجال المشتت عبارة عن موجة كروية خارجة تمثل بالمعادلة الآتية:

$$u' = f_e \frac{A}{D} e^{i(kD - \omega t)}, \quad 10-5$$

حيث f_e هو متغير يعرف بطول التشتت للإلكترون، D المسافة النصف قطرية من الإلكترون حتى النقطة التي عندها يتم حساب المجال. الكمية k هي العدد الموجي للموجة المشتتة ويكون لها نفس القيمة مثل k_0 . لاحظ أن سعة الموجة المشتتة تتناقص مع المسافة $(1/D)$.



الشكل 5-7 تشتت من: (أ) إلكترون منفرد، (ب) إلكترونين اثنين و (ج) متجه التشتت s .

افترض الآن أن الحزمة الساقطة تؤثر على إلكترونين اثنين، كما هو موضح بالشكل 5-7(ب). في هذه الحالة، يثبت كلا الإلكترونين موجات كروية ويكون المجال المشتت الملاحظ عند نقطة بعيدة عبارة عن مجموع المجالات الجزئية، حيث يجب أخذ فرق الطور في الاعتبار. وهكذا فإن

$$u' = f_e \frac{A}{D} [e^{ikD} + e^{i(kD+\delta)}] \quad 11-5$$

حيث δ مقدار تأخير الموجة المشتتة بواسطة الإلكترون رقم 1 عن الموجة المشتتة بواسطة الإلكترون رقم 2 (تم حذف عامل الزمن بغرض الإيجاز، ولكنه موجود ضمناً، كما تم اعتبار أن المسافة D إلى نقطة المجال كبيرة وإلا فإن المقام D لا يكون واحداً بالنسبة للإلكترونين). يسهل هذا الشرط الحسابات كما يوضح لماذا يوضع الكاشف (Detector) عادة على مسافة كبيرة من البلورة). بالرجوع للشكل 5-7، يمكن كتابة

$$\delta = \frac{2\pi}{\lambda} (\overline{P_1N} - \overline{P_1M}) = (\bar{\mathbf{r}} \cdot \bar{\mathbf{S}} - \bar{\mathbf{r}} \cdot \bar{\mathbf{S}}_0)k$$

حيث $\bar{\mathbf{r}}$ متجه نصف القطر للإلكترون 2 نسبة إلى الإلكترون 1 و $\bar{\mathbf{S}}_0$ و $\bar{\mathbf{S}}$ هما متجهات الوحدة لاتجاهات السقوط والتشتت على نحو الترتيب. يمكن وضع δ من الآن فصاعداً على الصورة،

$$\delta = \bar{\mathbf{s}} \cdot \bar{\mathbf{r}}, \quad 12-5$$

حيث يعرف متجه التشتت على النحو التالي،

$$\bar{\mathbf{s}} = k(\bar{\mathbf{S}} - \bar{\mathbf{S}}_0) = \bar{\mathbf{k}} - \bar{\mathbf{k}}_0. \quad 13-5$$

كما يتبين من الشكل 5-7(ج)، يمكن كتابة مقدار متجه التشتت على الصورة،

$$s = 2k \sin \theta ,$$

14-5

حيث θ نصف زاوية التشتت. بالتعويض عن δ من المعادلة 12-5 في 11-5 نجد

$$u' = f_e \frac{A}{D} e^{ikD} [1 + e^{i\bar{s} \cdot \bar{r}}]$$

15-5

في استنتاجنا هذا، اخترنا نقطة اصل المحاور عند الإلكترون 1. ويمكننا الآن اختيار نقطة أصل أكثر ملائمة عند أي نقطة اختيارية، وبهذا الأسلوب نعالج كلا الإلكترونين على قدم وساق وبالتالي، يكون التعبير الرياضي للمجال المشتت الناتج على الصورة،

$$u' = f_e \frac{A}{D} e^{ikD} [e^{i\bar{s} \cdot \bar{r}_1} + e^{i\bar{s} \cdot \bar{r}_2}] ,$$

16-5

حيث \bar{r}_1 و \bar{r}_2 متجهات الموضع للإلكترونين بالنسبة إلى نقطة الأصل الجديدة. المعادلة 15-5 عبارة عن حالة خاصة من المعادلة 16-5، حيث $\bar{r}_1 = 0$ ، بمعنى أن نقطة الأصل كانت مختارة عند الإلكترون 1، كما تم توضيحه من قبل. يمكن تعميم المعادلة 16-5 لأي عدد من الأجسام المشتتة (الالكترونات) على النحو التالي،

$$u' = f_e \frac{A}{D} e^{ikD} \sum_l e^{i\bar{s} \cdot \bar{r}_l} ,$$

17-5

حيث \bar{r}_l هو متجه الموضع للإلكترون رقم l ، ويتم إجراء المجموع على جميع الالكترونات. وبالمثل، كما في حالة الإلكترون المنفرد، المعادلة 10-5، يمكن الحصول على طول التشتت للنظام ككل بالمجموع التالي،

$$f = f_e \sum_l e^{i\bar{s} \cdot \bar{r}_l} .$$

18-5

تفيد المعادلة السابقة أن الطول الكلى للتشتت عبارة عن مجموع أطوال التشتت الفردية مع اخذ الأطوار في الاعتبار كما ينبغي. تتناسب شدة الحزمة المشتتة مع مربع مقدار المجال ولهذا،

$$I \sim |f|^2 = f_e^2 \left| \sum e^{i\vec{s} \cdot \vec{r}_l} \right|^2 \quad 19-5$$

المعادلتين 18-5 و 19-5 التي حصلنا عليهما تمثلان تساؤلات مهمة في معالجة عمليات التشتت والحيود ومع ذلك سوف نستخدمهما هذه المرة وفي الصفحات التالية مرة أخرى.

يمكننا أن نشير باختصار إلى سمة مهمة من سمات التشتت وهي خاصية الترابط المصاحبة لعملية التشتت. تعنى هذه الخاصية أن الأجسام المشتتة تحافظ على علاقات طوريه محددة فيما بينها، وبناءاً على ذلك، يمكننا التحدث عن التداخل بين الأشعة الجزئية. على الجانب الآخر، إذا تذبذبت الأجسام المشتتة بشكل عشوائي، أو غير مترابط، فإن الأشعة الجزئية لا تتداخل، وستكون شدة الأشعة عند الكاشف عبارة عن مجموع الأشعة الجزئية، أي أن

$$I \sim N f_e^2, \quad 20-5$$

حيث N عدد الأجسام المشتتة. لاحظ الفرق الملحوظ بين هذه النتيجة وبين التشتت المترابط في المعادلة 19-5. من الجدير بالذكر أن طول تشتت الإلكترون معروف جيداً، ويمكن إيجاده في أي كتاب كهرومغناطيسية وعلى كل حال تكتب قيمة طول تشتت الإلكترون على الصورة،

$$f_e = \left[(1 + \cos^2 2\theta) / 2 \right]^{1/2} r_e,$$

حيث r_e تسمى نصف قطر الإلكترون التقليدي وله قيمة في حدود 10^{-15} m.

يمكننا الآن تطبيق هذه النتائج على حالة ذرة منفردة. عند محاولة تطبيق المعادلة 18-5 (حيث يظهر المجموع على الإلكترونات) نلاحظ انه ليس للإلكترونات مواضع محددة بل على هيئة سحابة شحنة متصلة تنتشر على امتداد حجم الذرة. ولذلك يجب تحويل المجموع المنفرد إلى التكامل المقابل، وهذا يؤدي إلى

$$f_e \sum_l e^{i\vec{s} \cdot \vec{r}_l} \Rightarrow f_e \int \rho(\vec{r}) e^{i\vec{s} \cdot \vec{r}} d^3 r, \quad 21-5$$

حيث $\rho(\vec{r})$ هي كثافة السحابة (بوحدة عدد الإلكترونات لوحدة الحجم)، ويكون التكامل على مجمل الحجم الذري. يعرف عامل التشتت الذري، f_a ، بأنه عبارة عن التكامل الموجود في المعادلة السابقة، أي أن

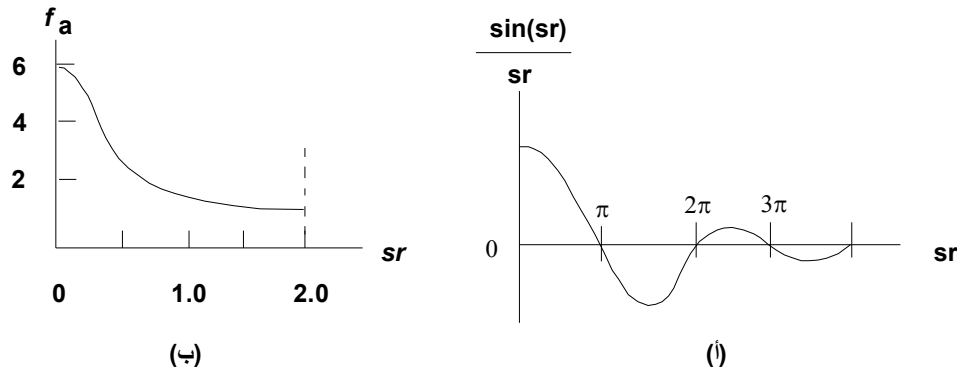
$$f_a = \int d^3 r \rho(\vec{r}) e^{i\vec{s} \cdot \vec{r}}, \quad 22-5$$

(لاحظ أن f_a كمية ليس لها أبعاد). يمكن تبسيط التكامل السابق وذلك باعتبار $\rho(\vec{r})$ متماثلة كرويا حول النواة، لأنه حينئذ يمكن إجراء التكامل على الجزء الزاوي من عنصر الحجم. ويكون التعبير الناتج هو

$$f_a = \int_0^R 4\pi r^2 \rho(\vec{r}) \frac{\sin sr}{sr} dr, \quad 23-5$$

حيث R نصف قطر الذرة (وتوضع النواة عند المركز). كما يتبين من المعادلة 23-5 فإن عامل التشتت f_a يعتمد على زاوية التشتت (تذكر أن $s = 2k \sin(\theta)$)، ويأتي هذا من وجود

عامل التذبذب $(\sin(sr))/sr$ في الكمية المطلوب تكاملها. يتناسب الطول الموجي للتذبذب عكسياً مع s ، كما يبين الشكل 5-8 (أ) ويزداد بسرعة التذبذب، بمعنى كلما كان الطول الموجي أقصر فإن f_a يتناقص، نتيجة التداخل بين حزم الأشعة المشتتة بواسطة المناطق المختلفة من سحابة الشحنة. وحيث أن $s = 2k \sin \theta$ ، المعادلة 5-14، نجد أن s تزداد بزيادة زاوية التشتت 2θ ، ويؤدي هذا إلى تقليل عامل التشتت f_a .



الشكل 5-8 (أ) عامل التذبذب $\sin(sr)/sr$. (ب) عامل التشتت الذري لذرة.

لكي نتابع تقدير f_a ، فإنه من الضروري معرفة كثافة الإلكترون $\rho(\bar{r})$ في الذرة قيد الدراسة. يبين الشكل 5-8 (ب) عامل التشتت الذري لذرة الكربون كدالة في زاوية التشتت. يوجد اتجاه واحد خاص يمكن تقدير f_a له في الحال يسمى الاتجاه الأمامي. في هذه الحالة، $\theta = 0$ و $s = 0$ ، وبالتالي يختزل عامل التذبذب $\sin(sr)/sr$ إلى الواحد الصحيح عندما تؤول sr إلى الصفر. و تصبح المعادلة 5-23 على الصورة،

$$f_a = \int_0^R 4\pi r^2 \rho(r) dr .$$

وببساطة، فإن التكامل يساوي العدد الكلي للإلكترونات في الذرة، أي العدد الذري

Z ، ويمكننا كتابة المعادلة السابقة على الصورة،

$$f_a(\theta = 0) = Z .$$

24-5

وهكذا بالنسبة للكربون نجد أن $f_a(\theta = 0) = 6$ وهذا يتفق مع الشكل 5-8 (ب). مازال المعنى الفيزيائي للمعادلة 24-5 غير واضح تماماً: عند النظر في الاتجاه الأمامي تكون كل الأشعة الجزئية في نفس الطور وبالتالي يحدث تداخل بناء.

5-5 تشتت الأشعة السينية بواسطة بلورة X-RAYS SCATTERING FROM A CRYSTAL

بالطبع، هدفنا في هذا الباب هو فحص التشتت من البلورة لذا سنكمل تطبيق المعادلة 5-18 في هذه الحالة. بالمثل كما في الحالة الذرية، يعرف عامل التشتت البلوري، f_{cr} ، على النحو

$$f_{cr} = \sum_l e^{i\vec{s} \cdot \vec{r}_l} ,$$

25-5

حيث يمتد المجموع في هذه المعادلة ليشمل كل الإلكترونات الموجودة في البلورة. للاستفادة من عامل التشتت الذري الذي نوقش من قبل، سوف نجزي المجموع (5-25) إلى قسمين. أولاً نقوم بإجراء المجموع على كل الإلكترونات الموجودة في الذرة المنفردة، ثم نجرى الجمع على كل الذرات الموجودة في الشبكة. يعادل هذا المجموع المزدوج المجموع على كل الإلكترونات الموجودة في البلورة، كما هو مطلوب في المعادلة 5-25. وحيث أن المجموع الأول من المجاميع السابقة يعبر عن عامل التشتت الذري، فإنه يمكن كتابة المعادلة 5-25 على النحو

$$f_{cr} = \sum_l e^{i\vec{s} \cdot \vec{R}_l} ,$$

26-5

حيث \bar{R}_l هو موضع الذرة رقم l .

من الملائم الآن، إعادة كتابة المعادلة 5-26 كحاصل ضرب عاملين اثنين: احدهما يشمل المجموع على خلية الوحدة والآخر يشمل المجموع على كل خلايا الوحدة في البلورة. وهكذا يتم تعريف عامل البناء الهندسي F على النحو

$$F = \sum_j f_{a_j} e^{i\bar{s} \cdot \bar{\delta}_j}, \quad 27-5$$

حيث يكون المجموع على كل الذرات الموجودة في خلية الوحدة ويكون $\bar{\delta}_j$ هو الموضع النسبي للذرة j . بالمثل، يمكن تعريف عامل التركيب البنائي للشبيكة S على النحو،

$$S = \sum_l e^{i\bar{s} \cdot \bar{R}_l^{(C)}}, \quad 28-5$$

حيث يمتد المجموع على كل خلايا الوحدة في البلورة والمتجه $\bar{R}_l^{(C)}$ يمثل موضع الخلية رقم l في البلورة. وللتعبير عن f_{cr} بدلالة F و S نعود إلى المعادلة 5-26 ونكتب

$$\bar{R}_l = \bar{R}_l^{(c)} + \bar{\delta}_j \quad \text{ثم نستخدم المعادلتين 5-27 و 5-28. تكون النتيجة}$$

$$f_{cr} = FS. \quad 29-5$$

لاحظ أن عامل الشبيكة S يعتمد فقط على النظام البلوري الضمني، بينما يعتمد F على الشكل الهندسي بالإضافة إلى محتويات خلية الوحدة. في الحالة الخاصة، حيث تحتوي خلية الوحدة على ذرة واحدة يصبح العامل F مساويا للعامل f_a . في الحقيقة، نجد تحليل العوامل f_{cr} المبينة في المعادلة 5-29 يستحق بعض التأكيد: لقد قمنا باستخلاص الخصائص البنائية للشبيكة، المتضمنة في S ، تماما من الخصائص الذرية المتضمنة في

F . وتم اللجوء إلى تبسيط كبير في المعالجة، ويمكننا الآن معالجة هذين العاملين بشكل مستقل. وحيث أن العامل F يتضمن المجموع على بضع عوامل ذرية فقط، فإنه يمكن بسهولة تقديره بدلالة العوامل الذرية، كما رأينا في المناقشة في الفصل السابق. لذلك، سوف لا نغير هذه المهمة البسيطة اهتمامنا الآن، بل سنركز على تقدير عامل التركيب البنائي الشبيكة S .

5-5-1 عامل التركيب البنائي للشبيكة THE LATTICE STRUCTURE FACTOR

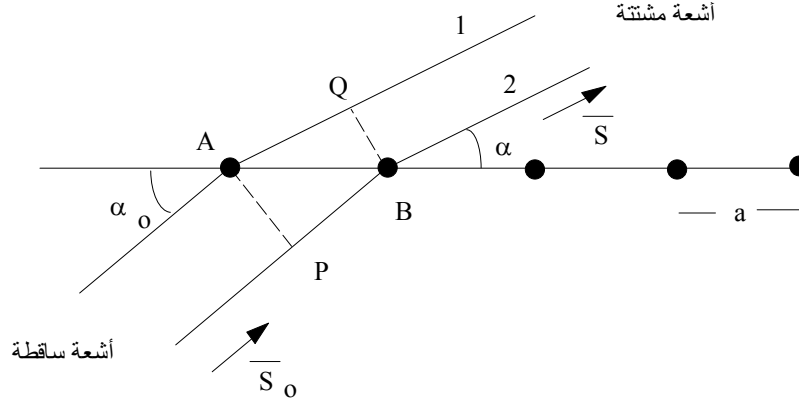
في مناقشة تشتت الأشعة السينية، يعتبر عامل التركيب البنائي للشبيكة، S ، والمعروف بالمعادلة 5-28، ذو أهمية حيوية. سنفحص الآن اعتماد هذا العامل على عامل التشتت، s ، وسنعين قيم s التي عندها لا يغيب S من المجموعة المنفصلة والتي تتعلّق بقانون براغ.

سنبدأ الفحص بأبسط الحالات الممكنة وهي تشتت حزمة من الأشعة بواسطة شبيكة في بعد واحد تتكون من ذرة واحدة، كما هو موضح في الشكل 5-9. بفرض أننا نرمز لمتجه الأساس بالرمز \bar{a} ، فإنه يمكن كتابة عامل التركيب البنائي على الصورة

$$S = \sum_{l=1}^N e^{i\bar{s} \cdot l\bar{a}}, \quad 30-5$$

حيث وضعنا $\bar{R}_l^{(C)} = l\bar{a}$ و N هو العدد الكلي للذرات. المتسلسلة في المعادلة 5-30 هي متوالية هندسية وتكون النسبة المشتركة لها $e^{i\bar{s} \cdot \bar{a}}$ ويمكن تقديرها بسهولة، حيث تكون النتيجة هي،

$$S = \frac{\sin \left[\left(\frac{1}{2} \right) N \bar{s} \cdot \bar{a} \right]}{\sin \left[\left(\frac{1}{2} \right) \bar{s} \cdot \bar{a} \right]} \quad 31-5$$



الشكل 5-9 تشتت من شبكة أحادية البعد.

نود الآن أن نرى كيف تعتمد هذه الدالة على متجه التشتت \bar{s} . كما نرى من

المعادلة 31-5 s هي نسبة الدالتين المتذبذبتين اللتين لهما فترة مشتركة $\bar{s} \cdot \bar{a} = 2\pi$ ، لكن،

بسبب أن N أكبر بكثير من الوحدة في أي حالة عملية، فإن بسط الكسر يتذبذب بسرعة

أكثر بكثير من تذبذب مقام الكسر. على أية حال، لاحظ انه للقيمة المعينة $\bar{s} \cdot \bar{a} = 0$ ، يختفي

كل من بسط ومقام الكسر في آن واحد، لكن القيمة المحددة لـ S^2 تكون مساوية للعدد N

وتكون عدد كبير جداً. بالمثل فإن قيمة S^2 عند $\bar{s} \cdot \bar{a} = 2\pi$ تكون مساوية N^2 ، وذلك طبقاً

لدورية S^2 المذكورة من قبل. تم رسم الدالة S^2 مع $\bar{s} \cdot \bar{a}$ في المدى $0 < \bar{s} \cdot \bar{a} \leq 2\pi$ في

الشكل 5-10(أ). توجد لهذه الدالة قيمة عظمى أولية عند $\bar{s} \cdot \bar{a} = 0$ وأخرى عند $\bar{s} \cdot \bar{a} = 2\pi$

مفصولة بقمم ثانوية متداخلة تنتج من التذبذب السريع لبسط الكسر الموجود في المعادلة

31-5. يمكن إهمال القمم الثانوية لصغر سعتها واعتبار الدالة S^2 غير منتهية بالقرب من

القمم الرئيسية. أضف إلى ذلك، انه يمكن توضيح أن اتساع كل قمة رئيسية يتناقص

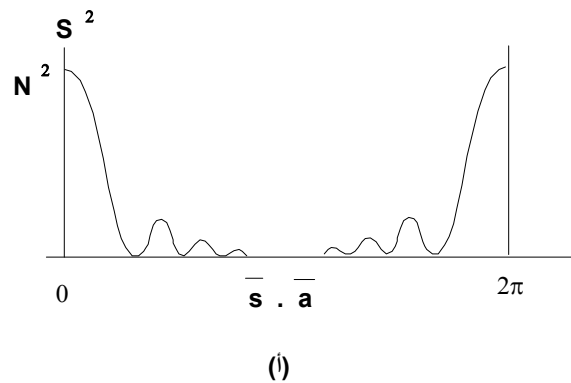
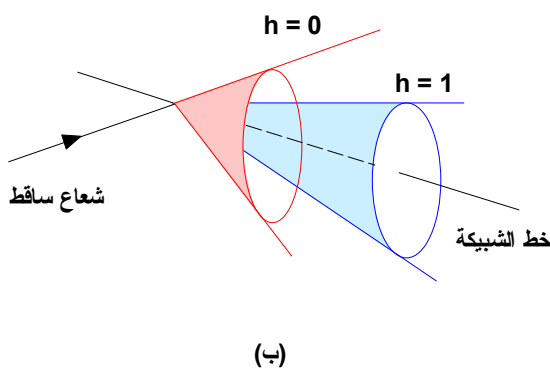
بسرعة مع زيادة N ، ويتلاشى الانتساع عندما تؤول N إلى مالا نهية. ولهذا، تكون S^2 غير منتهية فقط عند القيم المعطاة بالتحديد من $\bar{s} \cdot \bar{a} = 0, 2\pi$. ولكن بسبب أن S^2 دورية (زمنها الدوري 2π)، فإنها تكون محددة عند كل القيم

$$\bar{s} \cdot \bar{a} = 2\pi h, \quad 32-5$$

حيث h هو أي عدد صحيح. عند هذه القيم فإن S^2 تساوى N^2 ، وبالتالي فإن $S=N$. تعين المعادلة 32-5 كل الاتجاهات التي لا تكون فيها قيم S صفرية، وبالتالي الاتجاهات التي يحدث فيها التشتت. ويظهر من هذه المعادلة المعنى الفيزيائي بشكل مباشر. بالرجوع إلى تعريف المتجه \bar{s} ، والإشارة إلى الشكل 5-9، نحصل على

$$\bar{s} \cdot \bar{a} = \frac{2\pi}{\lambda} (\bar{\mathbf{S}} - \bar{\mathbf{S}}_0) \cdot \bar{\mathbf{a}} = \frac{2\pi}{\lambda} (\overline{AQ} - \overline{PB}),$$

وهذا هو فرق الطور بين الأشعة المتتالية المشتتة. هكذا، فإن المعادلة 32-5 هي شرط التداخل البناء، بمعنى أن عامل تشتت الشبكة يبقى في هذه الاتجاهات.



الشكل 5-10 (أ) قم التشتت (ب) مخرائط التشتت للترتبة الاولى ($h=0$) والثانية ($h=1$).

في الحقيقة، لا يعين الشرط السابق (المعادلة 32-5) اتجاه واحد لقيمة h المعطاة،

ولكن يعين عدد لانهائي من الاتجاهات مكونة مخروطا يقع محوره على امتداد خط

الشبيكة. لكي نرى ذلك، يمكننا كتابة المعادلة 5-32 على الصورة

$$\frac{2\pi a}{\lambda}(\cos \alpha - \cos \alpha_0) = 2\pi h, \quad 33-5$$

حيث α_0 الزاوية بين الحزمة الساقطة وخط الشبيكة و α الزاوية بين الحزمة الساقطة والحزمة المشتتة المقابلة. وهكذا عند قيم h و α_0 المعطاة فإن الحزمة تشتتت على امتداد كل الاتجاهات التي لها α تحقق المعادلة 5-33. تكون هذه الاتجاهات مخروطاً يقع محوره على امتداد الشبيكة وزاوية رأسه تساوي 2α . الحالة $h=0$ هي حالة خاصة، حيث أن المخروط في هذه الحالة يتضمن اتجاه التشتت الأمامي. يبين الشكل 5-10 (ب) مخاريط التشتت المقابلة لعدة قيم من h .

حتى الآن، في معالجتنا لعامل التركيب البنائي للشبيكة، حصرنا أنفسنا في حالة الشبيكة أحادية البعد. فيما يلي، سنمتد بالمعالجة إلى حالة حقيقية لشبيكة ثلاثية الأبعاد. بالرجوع إلى المعادلة 5-28 والتعويض عن متجه الشبيكة بالصورة،

$$\bar{R}(C) = l_1 \bar{a} + l_2 \bar{b} + l_3 \bar{c},$$

حيث \bar{a} و \bar{b} و \bar{c} متجهات الأساس، نجد أن طول متجه التركيب البنائي هو

$$S = \sum_{l_1, l_2, l_3} e^{i\bar{s} \cdot (l_1 \bar{a} + l_2 \bar{b} + l_3 \bar{c})}, \quad 5-34$$

حيث يمتد المجموع الثلاثي على كل خلايا الوحدة في الشبيكة. يمكننا فصل هذا المجموع إلى ثلاثة مجاميع جزئية على النحو

$$S = \left(\sum_{l_1} e^{i\bar{s} \cdot l_1 \bar{a}} \right) \left(\sum_{l_2} e^{i\bar{s} \cdot l_2 \bar{b}} \right) \left(\sum_{l_3} e^{i\bar{s} \cdot l_3 \bar{c}} \right) \quad 35-5$$

وبهذه الطريقة نحلل S إلى حاصل ضرب عوامل أحادية البعد وهذا يمكننا من استخدام النتائج التي طورناها سابقا. والشرط اللازم الآن للتداخل البناء هو أنه يجب أن يكون كل عامل من العوامل الثلاثة محددا بشكل منفصل وهذا يعنى أن \bar{s} يجب أن يحقق المعادلات الثلاثة الآتية في آن واحد:

$$\bar{s} \cdot \bar{a} = h2\pi \quad \& \quad \bar{s} \cdot \bar{b} = k2\pi \quad \& \quad \bar{s} \cdot \bar{c} = l2\pi, \quad 36-5$$

حيث h و k و l هي أي مجموعة من الإعداد الصحيحة. وعلى غرار المعادلة 5-32 نعيد كتابة هذه المعادلة بدلالة الزوايا التي يصنعها المتجه \bar{s} مع متجهات الأساس نحصل على

$$\begin{aligned} a(\cos \alpha - \cos \alpha_0) &= h\lambda \\ a(\cos \beta - \cos \beta_0) &= k\lambda \\ a(\cos \gamma - \cos \gamma_0) &= l\lambda \end{aligned} \quad 37-5$$

حيث α_0 و β_0 و γ_0 هي الزوايا التي يصنعها الشعاع الساقط مع متجهات الأساس و α و β و γ هي الزوايا المقابلة التي يصنعها الشعاع المشتت مع متجهات الأساس. تعرف المعادلات 5-36 و 5-37 بمعادلات لاوى (Laue) وهو أول فيزيائي قام باستنتاجها.

والتساؤل الذي يفرض نفسه هو كيف يمكن تعيين قيم متجه التشتت \bar{s} الذي يحقق شروط الحيود في المعادلة 5-37. سنبين في الفصل القادم أن هذه القيم تكون مجموعة محددة طبقا لقانون براغ.

RECIPROCAL LATTICE

5-6 الشبكة الانقلابية

بفرض إننا ننظر إلى البلورة بطريقة مباشرة لنبحث عن ترتيب الذرات فيها فإننا نحصل على مسحا للبنية البلورية الفعلية وهذا المسح يختلف عما نحصل عليه من الأشعة السينية المشتتة. في حالة الأشعة السينية المشتتة نستقبل الأشعة بعد حيودها عبر البلورة وتكون الصورة التي نحصل عليها في هذه الحالة عبارة عن مسحا لما يسمى بالشبكة الانقلابية وخصائصها. تسمى الشبكة الانقلابية مرافق الشبكة الفعلية في فضاء فورييه (Fourier space) الذي هو عبارة عن فضاء الزخم أو الاندفاع (momentum space).

ترتبط الشبكة الانقلابية بالشبكة الحقيقية ارتباطا وثيقا وتتحدد الشبكة الانقلابية تماما بتحديد متجهات الأساس لها والتي تعتمد على متجهات الأساس للشبكة البلورية الحقيقية. بفرض أنه لدينا شبكة حقيقية لها متجهات أساس \bar{a} و \bar{b} و \bar{c} فإنه يمكن تعريف متجهات الأساس للشبكة الانقلابية المرافقة \bar{a}^* و \bar{b}^* و \bar{c}^* طبقا للعلاقات الآتية:

$$\bar{c}^* = \frac{2\pi(\bar{a} \times \bar{b})}{\bar{a} \cdot (\bar{b} \times \bar{c})} \quad \& \quad \bar{b}^* = \frac{2\pi(\bar{c} \times \bar{a})}{\bar{a} \cdot (\bar{b} \times \bar{c})} \quad \& \quad \bar{a}^* = \frac{2\pi(\bar{b} \times \bar{c})}{\bar{a} \cdot (\bar{b} \times \bar{c})} \quad 38-5$$

حيث يمثل المقدار $\bar{a} \cdot (\bar{b} \times \bar{c})$ حجم خلية الوحدة. يمكننا الآن استخدام هذه المتجهات الجديدة $(\bar{a}^*, \bar{b}^*, \bar{c}^*)$ كمتجهات أساس للشبكة الجديدة (الانقلابية) ويمكن كتابة متجه الانتقال لها على الصورة.

$$\bar{G}_n = n_1 \bar{a}^* + n_2 \bar{b}^* + n_3 \bar{c}^* \quad 39-5$$

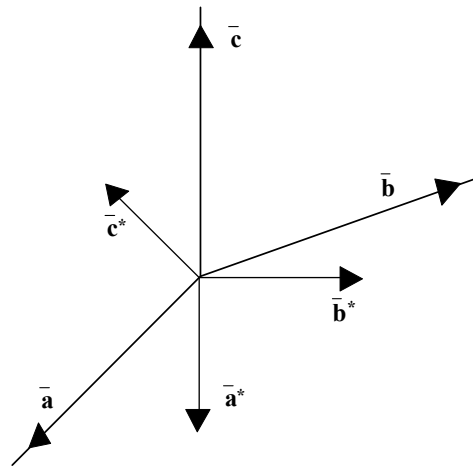
حيث n_1 و n_2 و n_3 مجموعة من الأعداد الصحيحة. تعرف الشبكة السابقة

(المعرفة المعادلات 38-5 و 39-5) بالشبكة الانقلابية وتسمى المتجهات \bar{a}^* و \bar{b}^* و \bar{c}^* بمتجهات الأساس الانقلابية. لاحظ في هذه المعالجة يجب أن تكون خلية الوحدة خلية أولية.

يبين الشكل 11-5 العلاقة بين متجهات الأساس الانقلابية ومتجهات الأساس الحقيقية. يكون المتجه \bar{a}^* عموديا على المستوى الذي يحتوى على المتجهات \bar{b} و \bar{c} . وبالمثل يكون المتجه \bar{b}^* عموديا على المستوى الذي يحتوى على المتجهات \bar{a} و \bar{c} . ويكون المتجه \bar{c}^* عموديا على المستوى الذي يحتوى على المتجهات \bar{a} و \bar{b} . أي انه إذا كونت المتجهات \bar{a} و \bar{b} و \bar{c} مجموعة متعامدة فإن المتجهات \bar{a}^* و \bar{b}^* و \bar{c}^* تكون مجموعة متعامدة أخرى أيضا بحيث يكون المتجه \bar{a}^* موازيا للمتجه \bar{a} و المتجه \bar{b}^* موازيا للمتجه \bar{b} وهكذا. ومن ذلك نستنتج الخواص التالية:

$$\begin{aligned}\bar{a}^* \cdot \bar{a} &= 2\pi, & \bar{a}^* \cdot \bar{b} &= \bar{a}^* \cdot \bar{c} = 0 \\ \bar{b}^* \cdot \bar{b} &= 2\pi, & \bar{b}^* \cdot \bar{a} &= \bar{b}^* \cdot \bar{c} = 0 \\ \bar{c}^* \cdot \bar{c} &= 2\pi, & \bar{c}^* \cdot \bar{a} &= \bar{c}^* \cdot \bar{b} = 0\end{aligned}$$

40-5



الشكل 11-5 متجهات الأساس للشبكة الانقلابية

يمكن إثبات صحة المعادلة 5-40 بسهولة باستخدام المعادلة 5-38. لاحظ أن

أبعاد الشبكة الحقيقية هي أبعاد طول، بينما تكون في الشبكة الإنقلابية مقلوب المسافة.

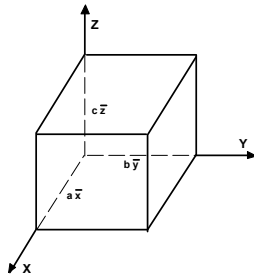
5-6-1 خلية بريليون الأولى

تعرف خلية بريليون الأولى على أنها الخلية الموجودة في الفضاء الانقلابي والتي

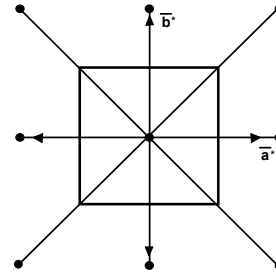
تقابل خلية فيجنر-زايتس في الفضاء الحقيقي، ويمكن تعريفها أيضا بأنها الخلية التي يكون

لها أقل حجم والمحتوية بين المستويات العمودية والمنصفة لمتجهات الخلية في الشبكة

الإنقلابية، كما هو موضح بالشكل 5-12.



الشكل 5-13



الشكل 5-12 خلية بريليون الأولى في شبكة انقلابية ثنائية البعد.

5-6-2 خلية بريليون الأولى للمكعب البسيط

لاستنتاج خلية بريليون الأولى للمكعب البسيط نكتب متجهات الانتقال الأولية

للمكعب البسيط في الفضاء الحقيقي المبين في الشكل 5-13 على الصورة،

$$\bar{a}' = a\bar{x}, \quad \bar{b}' = b\bar{y}, \quad \bar{c}' = c\bar{z}$$

حيث \bar{x} و \bar{y} و \bar{z} هي متجهات الوحدة في الاتجاهات الثلاثة المتعامدة ويكون حجم الخلية

في الفضاء الحقيقي هو

$$V_c = \bar{\mathbf{a}} \cdot \bar{\mathbf{b}} \times \bar{\mathbf{c}} = a\bar{x} \cdot a\bar{y} \times a\bar{z} = a\bar{x} \cdot a^2 \bar{x} = a^3$$

وكذلك تكون متجهات الانتقال الاولى في الشبكة الانقلابية هي:

$$\bar{\mathbf{a}}^* = \frac{2\pi}{V_c} \bar{\mathbf{b}}' \times \bar{\mathbf{c}}' = \frac{2\pi}{a^3} a\bar{y} \times a\bar{z} = \frac{2\pi}{a^3} a^2 \bar{x} = \frac{2\pi}{a} \bar{x}.$$

وكذلك نحصل على

$$\bar{\mathbf{b}}^* = \frac{2\pi}{a} \bar{y} \quad \& \quad \bar{\mathbf{c}}^* = \frac{2\pi}{a} \bar{z}.$$

وبذلك تكون الخلية الانقلابية هي نفسها على شكل مكعب بسيط له ثابت خلية $\frac{2\pi}{a}$ وتكون

حدود منطقة بريليون الاولى هي المستويات العمودية في منتصف الاتجاهات الستة

للسبكة الانقلابية $\pm \bar{\mathbf{a}}^* = \pm \frac{\pi}{a} \bar{x}$ و $\pm \bar{\mathbf{b}}^* = \pm \frac{\pi}{a} \bar{y}$ و $\pm \bar{\mathbf{c}}^* = \pm \frac{\pi}{a} \bar{z}$ وهذه المستويات الستة

تحدد المكعب الذي يكون طوله $\frac{2\pi}{a}$ ويكون حجمه $\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$ ويكون هذا المكعب هو خلية

بريليون الاولى للمكعب البسيط. وبنفس الطريقة يمكن الحصول على $\bar{\mathbf{b}}^*$ و $\bar{\mathbf{c}}^*$.

يبين الجدول 1-5 العلاقات بين الفضاء الحقيقي والفضاء الانقلابي لبعض الأنظمة

البلورية المختلفة. المتغير V للنظام ثلاثي الميل يحتاج إلى حسابات معقدة هندسيا وذلك

بسبب غياب الزوايا القائمة في البلورة وتم استنتاجه بواسطة جينكنز و سنيدر (Jenkins

and Snyder) على الصورة الآتية،

$$V^* = \frac{1}{V} = a^* b^* c^* \left(1 - \cos^2 \alpha^* - \cos^2 \beta^* - \cos^2 \gamma^* + 2 \cos \alpha^* \cos \beta^* \cos \gamma^*\right)^{1/2}.$$

الجدول 1-5 العلاقات بين الفضاء الحقيقي و الفضاء الانقلابي لبعض الأنظمة البلورية المختلفة.

النظام	a^*	b^*	c^*
المكعبى	$a^* = \frac{1}{a}$	$b^* = \frac{1}{b}$	$c^* = \frac{1}{c}$
السداسي	$a^* = \frac{1}{a \sin \gamma}$	$b^* = \frac{1}{b \sin \gamma}$	$c^* = \frac{1}{c}$
أحادي الميل	$a^* = \frac{1}{a \sin \beta}$	$b^* = \frac{1}{b}$	$c^* = \frac{1}{c \sin \beta}$
ثلاثي الميل	$a^* = \frac{bc \sin \alpha}{V}$	$b^* = \frac{ac \sin \beta}{V}$	$c^* = \frac{ab \sin \gamma}{V}$

مثال 1-5

عين الخلية الإنقلابية للمكعبى المتمركز الجسم؟

الحل

لاستنتاج خلية بريليون الاولى للمكعبى المتمركز الجسم نكتب متجهات الانتقال

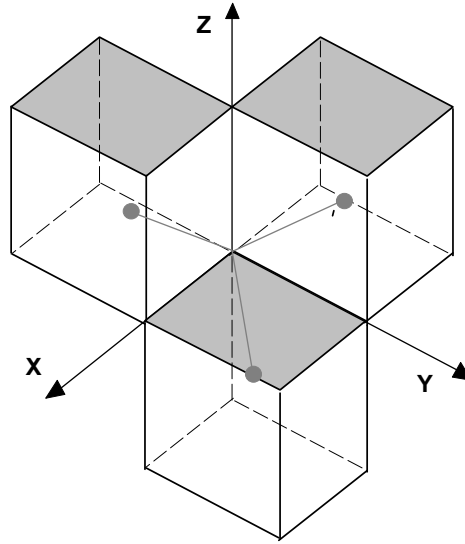
الاولية لهذا المكعب في الفضاء الحقيقي المبين في الشكل 5-14 على الصورة،

$$\bar{a}' = \frac{1}{2}a(\bar{x} + \bar{y} - \bar{z}) \quad \& \quad \bar{b}' = \frac{1}{2}a(\bar{y} + \bar{z} - \bar{x}) \quad \& \quad \bar{c}' = \frac{1}{2}a(\bar{x} + \bar{z} - \bar{y}),$$

حيث a طول خلية الوحدة و \bar{x}' و \bar{y}' و \bar{z}' هي وحدة المتجه في الاتجاهات الثلاثة

المتعامدة ويكون حجم الخلية في الفضاء الحقيقي هو

$$V_c = \bar{a}' \cdot \bar{b}' \times \bar{c}' = \frac{a}{2} \cdot \frac{a}{2} \cdot \frac{a}{2} \begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{vmatrix} = \frac{a^3}{8} \times 4 = \frac{a^3}{2}$$



الشكل 5-14 تعيين الخلية الإنقلابية للمكعبى المتمركز الجسم.

وكذلك فإن متجهات الانتقال الاولى في الشبكة الإنقلابية تكون على الصورة:

$$\bar{\mathbf{a}}^* = \frac{2\pi}{V_c} \bar{\mathbf{b}}' \times \bar{\mathbf{c}}' = \frac{2\pi}{a^3/2} \cdot \frac{a^2}{4} \begin{vmatrix} \bar{x} & \bar{y} & \bar{z} \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{vmatrix} = \frac{2\pi}{a^3/2} \cdot \frac{a^2}{4} (2\bar{x} + 2\bar{y}) = \frac{2\pi}{a} (\bar{x} + \bar{y}).$$

وبالمثل نجد أن،

$$\bar{\mathbf{b}}^* = \frac{2\pi}{V_c} \bar{\mathbf{c}}' \times \bar{\mathbf{a}}' = \frac{2\pi}{a} (\bar{y} + \bar{z}) \quad \& \quad \bar{\mathbf{c}}^* = \frac{2\pi}{V_c} \bar{\mathbf{a}}' \times \bar{\mathbf{b}}' = \frac{2\pi}{a} (\bar{x} + \bar{z}).$$

وتكون $\bar{\mathbf{a}}^*$ و $\bar{\mathbf{b}}^*$ و $\bar{\mathbf{c}}^*$ هي المتجهات الاولى في الشبكة الإنقلابية للمكعبى متمركز الجسم

في الشبكة الحقيقية ويكون حجم الخلية الاولى في الفضاء الانقلابي هو حجم خلية

بريليون ويساوى $\bar{\mathbf{b}}^* \times \bar{\mathbf{c}}^* \cdot \bar{\mathbf{a}}^*$ أي أن

$$\begin{aligned} V_{BZ} &= \frac{2\pi}{a} (\bar{x} + \bar{y}) \cdot \frac{2\pi}{a} (\bar{y} + \bar{z}) \cdot \frac{2\pi}{a} (\bar{x} + \bar{z}) \\ &= \left(\frac{2\pi}{a} \right)^3 \begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \left(\frac{2\pi}{a} \right)^3 (2) \end{aligned}$$

$$\therefore V_{BZ} = 16 \frac{\pi^3}{a^3}$$

ويكون المتجه العام للانتقال، \bar{G} ، في الشبكة الإنقلابية هو

$$\bar{G}_n = h\bar{a}^* + k\bar{b}^* + l\bar{c}^*$$

حيث h و k و l تكون أعداد صحيحة. ولإيجاد خلية بريليون الاولى فإننا نأخذ كل

الاتجاهات الممكنة ونقيم المستوى العمودي عند منتصف المتجهات $(\pm\bar{x} \pm \bar{y})$ $\pm\frac{1}{2}\bar{a}^* = \frac{\pi}{a}$ و

$\pm\frac{1}{2}\bar{b}^* = \frac{\pi}{a}(\pm\bar{y} \pm \bar{z})$ و $\pm\frac{1}{2}\bar{c}^* = \frac{\pi}{a}(\pm\bar{x} \pm \bar{z})$ وبذلك يكون لدينا 12 متجه (أي 12 مستوى)

تحيط بنقطة شبكة واحدة وتكون محددة لخلية بريليون الاولى التي تحتوى على ذرة

واحدة.

مثال 5-2

عين الخلية الإنقلابية للمكعبى المتمركز الواجهه؟

الحل

لإستنتاج خلية بريليون الاولى للمكعبى المتمركز الواجه نشير إلى الشكل 5-15

ومنه يمكن كتابة متجهات الانتقال الاولى لهذا المكعب في الفضاء الحقيقي على الصورة،

$$\bar{a}' = \frac{1}{2}a(\bar{x} + \bar{y}) \text{ \& } \bar{b}' = \frac{1}{2}a(\bar{y} + \bar{z}) \text{ \& } \bar{c}' = \frac{1}{2}a(\bar{z} + \bar{x}),$$

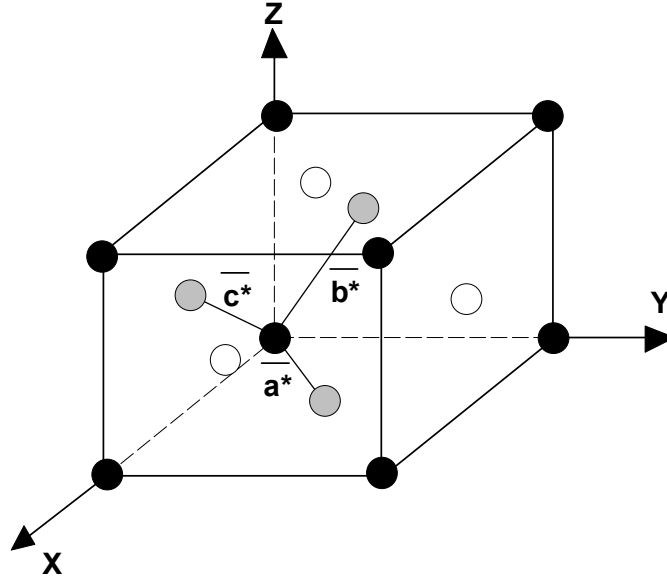
حيث a طول خلية الوحدة و \bar{x}' و \bar{y}' و \bar{z}' هي وحدة المتجه في الاتجاهات الثلاثة المتعامدة

ويكون حجم الخلية في الفضاء الحقيقي هو

$$V_c = \bar{a}' \cdot \bar{b}' \times \bar{c}' = \frac{a}{2}(\bar{x} + \bar{y}) = \frac{a^2}{4}(\bar{y} + \bar{z}) \times (\bar{z} + \bar{x})$$

$$V_c = \bar{\mathbf{a}}' \cdot \bar{\mathbf{b}}' \times \bar{\mathbf{c}}' = \frac{a}{2} (\bar{\mathbf{x}} + \bar{\mathbf{y}}) = \frac{a^2}{4} (\bar{\mathbf{y}} + \bar{\mathbf{z}}) \times (\bar{\mathbf{z}} + \bar{\mathbf{x}})$$

$$= \frac{a}{2} \cdot \frac{a}{2} \cdot \frac{a}{2} \begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \frac{a^3}{8} \times 2 = \frac{a^3}{4}$$



الشكل 5-15 تعيين خلية بريليون الاولى للمكعبى المتمركز الواجه.

وتكون متجهات الانتقال الاولى في الشبكة الانقلابية على الصورة:

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{a}}^* &= \frac{2\pi}{V_c} \bar{\mathbf{b}}' \times \bar{\mathbf{c}}' \\ &= \frac{2\pi}{a^3/4} \begin{vmatrix} \bar{\mathbf{x}} & \bar{\mathbf{y}} & \bar{\mathbf{z}} \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix} \cdot \frac{a^2}{4} \\ &= \frac{2\pi}{a} (\bar{\mathbf{x}} + \bar{\mathbf{y}} - \bar{\mathbf{z}}) \end{aligned}$$

وبالمثل نجد أن،

$$\bar{\mathbf{b}}^* = \frac{2\pi}{a} (-\bar{\mathbf{x}} + \bar{\mathbf{y}} + \bar{\mathbf{z}}) \quad \& \quad \bar{\mathbf{c}}^* = \frac{2\pi}{a} (\bar{\mathbf{x}} - \bar{\mathbf{y}} + \bar{\mathbf{z}}),$$

وتكون $\bar{\mathbf{a}}^*$ و $\bar{\mathbf{b}}^*$ و $\bar{\mathbf{c}}^*$ هي المتجهات الاولى في الشبكة الانقلابية للمكعبى متمركز الواجه

في الشبكة الحقيقية ويكون حجم الخلية الاولى في الفضاء الانقلابي هو حجم خلية

بريليون ويساوى $\overline{\mathbf{a}^*} \cdot \overline{\mathbf{b}^*} \times \overline{\mathbf{c}^*}$ ، أي أن ،

$$V_{BZ} = \overline{\mathbf{a}^*} \cdot \overline{\mathbf{b}^*} \times \overline{\mathbf{c}^*} = 4 \cdot \left(\frac{2\pi}{a} \right)^3 = \frac{32\pi^3}{a^3}.$$

5-7 استخدام الأشعة السينية في تحليل التركيب البنائي للمادة الصلبة

USING OF X-RAYS FOR STRUCTURAL ANALYSIS OF SOLIDS

بُنيت فكرة الاستخدامات العديدة للأشعة السينية في تحليل الترتيب البنائي الذري للحالة الصلبة على حقيقة أنه يحدث للفوتونات المستخدمة حيود عند تفاعلها مع الأنظمة (مراكز الحيود) التي تكون مرتبة بشكل منتظم ومتكرر وبينها مسافات تساوى الطول الموجي للأشعة المستخدمة والتي تكون في حدود 10^{-10} m ، تماما كما تكون الأطوال الموجية للأشعة السينية.

5-7-1 الحيود وقانون براغ DIFFRACTION AND BRAGG'S LAW

يتعين التركيب البنائي للمادة المتبلورة عادة بواسطة إحدى التقنيات المختلفة لحيود الأشعة السينية. كما يمكن الحصول على معلومات إضافية عن التركيب، أيضا، بواسطة حيود أنواع أخرى من الإشعاعات مثل الأشعة الإلكترونية والأشعة النيوترونية. في جميع الحالات، يجب أن تكون الأطوال الموجية للإشعاع المستخدم في المدى من 0.1 إلى 10 أنجستروم لأنه يجب أن تكون أقل مسافة بين الذرات والتي يمكن للإشعاع أن يعطى معلومات عنها تكون مساوية للطول الموجي للإشعاع وفي الحالة الصلبة يكون متوسط المسافة بين ذرتين متجاورتين في الصلب في حدود 10^{-10} m (1 أنجستروم). ونظرا لعدم

وجود طريقة ملائمة لتركيز الأشعة السينية بواسطة العدسات ولا يمكننا تكبير الصور، لذلك فإننا لا نحاول النظر مباشرة للذرات ومشاهدتها. هذا بالإضافة إلى تأثيرات تداخل الأشعة السينية عندما تشتت بواسطة الذرات التي تشكل البلورة والتي يجب أن تؤخذ في الاعتبار. يمكن تشبيه ذلك بدراسة تركيب محزوز الحيود الضوئي عن طريق فحص نماذج التداخل الناتج عند سقوط ضوء مرئي على المحزوز. (تتراوح المسافة بين خطوط المحزوز من 0.5 إلى 1 ميكرومتر ويكون الطول الموجي للضوء المرئي في حدود 0.4 - 0.8 ميكرومتر.) في المحزوز الضوئي تعمل الخطوط كمراكز تشتت، في حين تقوم الذرات (أو بالأحرى الإلكترونات) في البلورة بتشتيت الإشعاع.

كان العالم براغ (Bragg) أول من وضع شروط هندسية يجب أن تتحقق لكي يحدث الحيود في البلورة. لقد أعتبر براغ شعاع أحادي اللون (ذو طول موجي وحيد) من الأشعة السينية المتوائمة (موجات لها صدر مشترك) يسقط على البلورة، كما هو موضح بالشكل 5-16. علاوة على ذلك، لقد افترض أنه يمكن تمثيل الذرات التي تكون مراكز التشتت الفعلية بمجموعة من المستويات المتوازية يعمل كل منها كمرآة (تعكس الأشعة السينية). ترتبط المسافة الفاصلة بين هذه المستويات في النظام المكعبى، d_{hkl} ، مع ثابت الشبكة، a ، بالعلاقة المعروفة الآتية،

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad 38-5$$

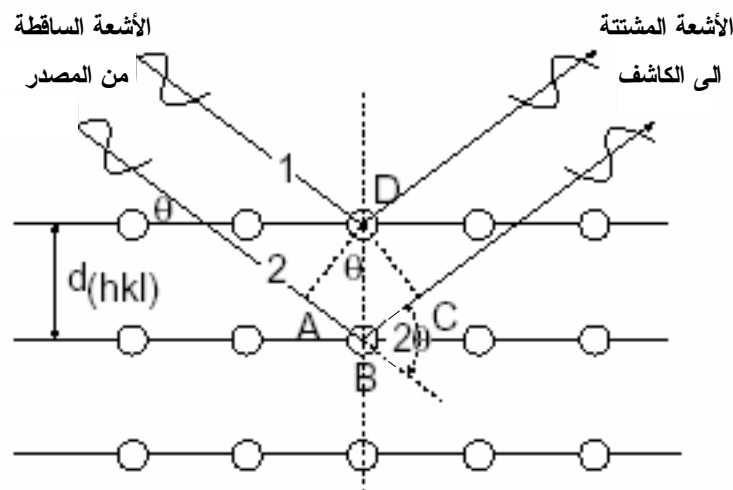
تتداخل الأشعة المشتتة مكونة نماذج يمكن منها استخلاص المعلومات. بالنسبة

للتداخل البناء للأشعة السينية المشتتة (والتي يظهر على شكل قمة للتشتت) يجب أن تكون الأشعة مشتتة بواسطة مستويات متعاقبة وفي طور واحد (مرة أخرى، يجب أن تشترك في صدر الموجة) بعد تركها سطح البلورة، بمعنى يجب أن تكون الأشعة الساقطة والمشتتة في الطور نفسه. كما يتضح من الشكل 5-16 يوجد فرق في المسار بين الأشعة المختلفة. ولتحقيق شرط التداخل البناء يجب أن يساوى فرق المسار بين الشعاعين 1 و 2، $\overline{AB} + \overline{BC}$ ، عبارة عن مضاعف صحيح للطول الموجي للأشعة الساقطة. يمكن التعبير عن هذا الشرط بالعلاقة الآتية،

$$\overline{AB} + \overline{BC} = n\lambda \quad , \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad 39-5$$

وحيث أن $\overline{AB} = \overline{BC}$ ، و $\sin \theta = \frac{\overline{AB}}{d_{hkl}}$ وبالتعويض في المعادلة السابقة نحصل على،

$$n\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta \quad 40-5$$



الشكل 5-16 قانون براغ، بافتراض أن المستويات الذرية تعمل كمستويات عاكسة.

تعرف العلاقة السابقة بقانون براغ وتصف الوضع الزاوي للشعاع بدلالة λ و d_{hkl} .

في معظم الحالات نهتم فقط بالترتبة الاولى للتشتت ($n=1$)، وبالتالي يمكن كتابة قانون براغ على الصورة الآتية،

$$\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta . \quad 41-5$$

(نستطيع وضع $n=1$ لأنه يمكن إغناء قمة التشتت المقابلة للرتب 2 و 3 و ... إلى التشتت الناتج عن مضاعفات أدلة ميلر، أي من المستويات $\langle nh \ nk \ nl \rangle$ ، بمعنى، من إحدى المستويات المتوازية ذات المسافة الفاصلة d_{hkl}).

بفرض أن الشكل 5-16 يمثل مخطط لمطياف الحيود (كما سوف نرى فيما بعد)، فإنه عندما يسقط شعاع مُسَدَّد (مجمع ومتوازي، collimated) من الأشعة السينية على مجموعة المستويات $\langle 100 \rangle$ ويصنع زاوية 2θ مع اتجاه الكاشف الذي يسجل شدة الأشعة المشتتة. بالنسبة للشعاع الساقط غير المباشر (العرضي) والذي له زاوية θ صغيرة فإن الكاشف سوف لا يحس به وسوف يسجل إشعاع الخلفية فقط (ذو شدة ضعيفة). عند زيادة الزاوية θ إلى قيمة يتحقق عندها قانون براغ (أي التي عندها $n\lambda = 2d \sin(\theta)$) فإن الكاشف سوف يسجل شدة إشعاع عالية (قمة تشتت). يجب ملاحظة أن زاوية التشتت θ تزداد مع تناقص المسافة الفاصلة بين المستويات المتوازية $\langle d_{hkl} \rangle$.

5-7-2 قواعد الاختيار لنظم الحيود في الأنظمة المكعبة

الغرض من تجربة الحيود هذه هو الحصول على معلومات كمية عن حجم (ثابت الشبيكة a) و شكل (SC, BCC, FCC) خلية الوحدة المميز. تعتمد شدة قمم الحيود على

علاقات الطور بين الإشعاع المشتت بواسطة كل الذرات الموجودة في خلية الوحدة. يحدث في كثير من الأحيان تلاشي (غياب) لإحدى القمم المتوقعة بواسطة قانون براغ، ويرجع ذلك إلى أن قانون براغ لا يعالج (لا يتعامل مع) أماكن الذرات ولكن حجم وشكل خلية الوحدة ككل. على سبيل المثال، نعتبر شدة قمة الحيود للمستوى (100) في بلورة لها خلية وحدة مكعب متمركز الجسم (BCC). تبين علاقات الطور أن الأشعة السينية المشتتة عند الأوجه العلوية والسفلية لخلية الوحدة (المستويات (100)) تتداخل تداخل بناء ولكن مع وجود زاوية فرق طور 180° مع الأشعة المشتتة بواسطة الذرة الموجودة عند مركز خلية الوحدة ولهذا تكون الشدة المحصلة صفراً. يسجل الجدول 2-5 القواعد التي تحكم وجود قمة حيود معينة في الشبكة البرافية المكعبة (SC, BCC, FCC).

جدول 2-5 قواعد الاختيار لقمم الحيود في الأنظمة المكعبة.

الشبكة البرافية	الانعكاسات الموجودة	الانعكاسات الغائبة
مكعب بسيط	كل الأدلة	لا شيء
مكعب متمركز الجسم	$(h+k+l) = \text{زوجي}$	$(h+k+l) = \text{فردى}$
مكعب متمركز الأوجه	الأدلة h, k, l تكون غير مختلطة (الكل زوجي أو الكل فردى)	الأدلة h, k, l تكون مختلطة

تكون القواعد المذكورة في الجدول السابق صادقة بشكل دقيق في خلايا الوحدة

التي تحتل يكون فيها الأساس عبارة عن ذرة واحدة. (في خلايا الوحدة التي تحتل فيها أكثر من ذرة واحدة كل نقطة من نقط الشبكة ربما تكون ذراتها مرتبة في مواضع بالشكل الذي معه تلغى الانعكاسات.

على سبيل المثال، للماس شبكة براهية مكعبة متمركزة الوجة، FCC، وفيها تحتل ذرتين كل نقطة من نقط الشبكة الفراغية. تكون لكل الانعكاسات الموجودة في الماس أدلة غير مخلوطة، ولكن تغيب الانعكاسات من (200) ومن (222) ومن (420). تبين هذه الحقيقة أن لكل الانعكاسات الموجودة أدلة غير مخلوطة أن الشبكة البراهية مكعبية متمركز الوجة، وأن الانعكاسات الغائبة تعطى معلومات إضافية عن الترتيب المضبوط للذرة.

تعين تجربة الحيود الافتراضية (لمادة معروف أن تركيبها مكعب بسيط مثلاً) ثابت الشبكة، a ، بواسطة حيود الأشعة السينية. ونظرياً، يمكن حل هذه المسألة بوضع العينة في المطياف، وتدويرها إلى كل المواضع الممكنة بالنسبة لحزمة الأشعة السينية الساقطة وتسجيل كل قيم شدة الأشعة المشتتة كدالة في الزاوية 2θ . مما سبق، نعرف أن أصغر قيمة ملحوظة للزاوية θ تقابل الحيود من المستوى (100) وبالتالي يكون $d_{100} = a$. يمكننا الآن استخدام معادلة براغ لحساب ثابت الشبكة، a ، كما يلي،

$$\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta = 2a \sin \theta$$

$$\therefore a = \frac{\lambda}{2 \sin \theta}.$$

في هذه المسألة تم افتراض شرطين للتبسيط هما: (1) علمنا بأن النظام مكعبي

بسيط (SC) و (2) إمكانية جلب كل المستويات الموجودة (بواسطة الدوران) لتحقيق شروط الحيود. مما سبق تتضح ضرورة الالتزام بقواعد الاختيار المذكورة في الجدول أعلاه.

5-8 الطرق المعملية لحيود الأشعة السينية

EXPERIMENTAL APPROACHES OF X-RAYS DIFFRACTION

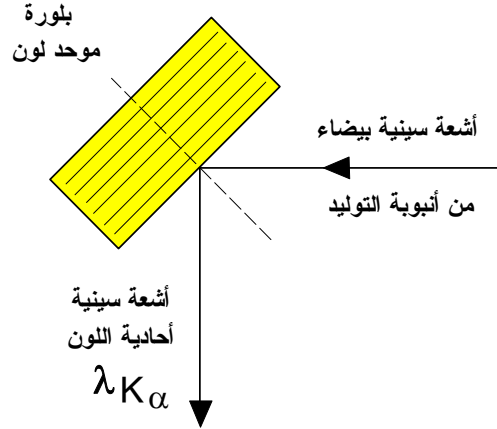
سنهتم في هذا الفصل باستخدام تقنية حيود الأشعة السينية لغرض: (أ) التعرف على أنظمة بلورية (مكعبة)، (ب) تعيين ثابت الشبكة، a ، و (ج) التعرف على مستويات معينة أو الاتجاهات المهمة في البلورة. يمكن مطابقة مختلف الطرق الممكنة، من حيث المبدأ، من خلال اختبار قانون براغ. يمكن تحقيق شرط براغ لقيم معينة للمسافة d_{hkl} بضبط احد المتغيران التجريبيان: (1) الطول الموجي المستخدم للأشعة السينية الساقطة، λ ، أو (2) اتجاه المستويات البلورية بالنسبة للأشعة الساقطة، θ . بناء على ما سبق يوجد مبدئين يمكن معهما تحقيق حيود الأشعة السينية في الحالة الصلبة معملياً: المبدأ الاول هو ثبوت زاوية سقوط الأشعة، θ ، وتغير الطول الموجي للأشعة، λ ، والمبدأ الثاني هو ثبوت الطول الموجي للأشعة، λ ، وتغير زاوية سقوط الأشعة، θ . تبني نظرية عمل جميع الطرق المعملية على أحد المبدئين السابق ذكرهما وفيما يلي سنناقش هذه الطرق بشئ من التفصيل.

من الخصائص الضرورية للأشعة السينية المستخدمة، في كثير من تجارب الحيود،

هو أن يجب أن تكون أحادية اللون. توجد طريقتان أساسيتان للحصول على حزمة أشعة سينية أحادية اللون من حزمة ببيضاء (متصلة) هما: طريقة الامتصاص وطريقة الانعكاس. في طريقة الامتصاص تمرر الحزمة البيضاء خلال رقيقة معدنية تسمى المرشح (filter). يكون للمرشح المقدرة على امتصاص جميع الأطوال الموجية للأشعة السينية ماعدا طول موجي معين، λ_0 . في الحقيقة يكون معامل امتصاص مادة المرشح للطول الموجي λ_0 صغيرا جدا مقارنة مع امتصاص باقي الأطوال الموجية.

يتم اختيار نوع المرشح طبقا لنوع مادة هدف أنبوبة التوليد والطول الموجي المراد استخدامه. فعلى سبيل المثال لا الحصر، يستخدم مرشح نيكل للعمل مع أنبوبة ذات هدف مصنوع من النحاس وتكون الأشعة السينية التي نحصل عليها، في هذه الحالة، أحادية اللون وذات طول موجي مقداره 1.542 \AA .

للحصول على أشعة أحادية اللون بطريقة الانعكاس يتم استخدام بلورة تسمى محدد اللون (monochromator)، كما هو مبين في الشكل 5-17. جاءت التسمية من الفعل الذي يقوم به المحدد (أو موحد لون) والذي يكون عبارة عن بلورة معينة تعمل فرز للإشعاعات (تماما كما في حالة المنشور الضوئي) بمعنى أنها تعكس الأشعة ذات الأطوال الموجية المختلفة بزوايا مختلفة وعندئذ يتم اختيار الطول الموجي المناسب باختيار زاوية انعكاس معينة. من أمثلة محددات الأشعة السينية بلورة الكوارتز.



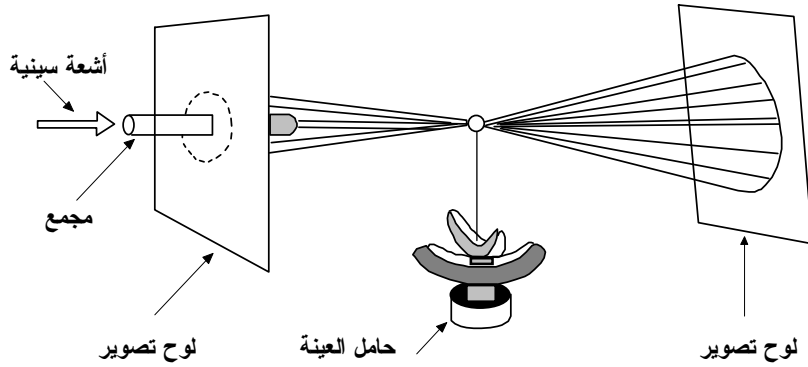
الشكل 5-17 الحصول على أشعة أحادية اللون من الأشعة البيضاء.

5-8-1 طريقة لاوى LAUE METHOD

تُستخدم طريقة لاوى في تحديد تناظر واتجاه البلورات الأحادية المعروفة التركيب (بلورات صغيرة تزيد أبعادها عن 1mm) وذلك بتحليل نموذج حيود الأشعة السينية الناتج. تبنى فكرة عمل هذه الطريقة على مبدأ ثبوت زاوية سقوط الأشعة السينية، θ ، وتغير الطول الموجي، λ ، لتحقيق قانون براغ المعروف. يتم ذلك عن طريق سقوط شعاع أبيض من الأشعة السينية على بلورة أحادية ساكنة (وبالتالي تكون θ ثابتة لجميع مستويات البلورة)، كما هو موضح بالشكل 5-18. يتم تثبيت البلورة بحيث يكون لها توجيه ثابت بالنسبة لحزمة الأشعة الساقطة ويتم وضع لوح تصوير (فيلم) أمام البلورة بشكل عمودي على الأشعة الساقطة ولوح تصوير آخر خلفها. يكون اللوح الأمامي مثقوباً من المنتصف لمرور الأشعة الساقطة.

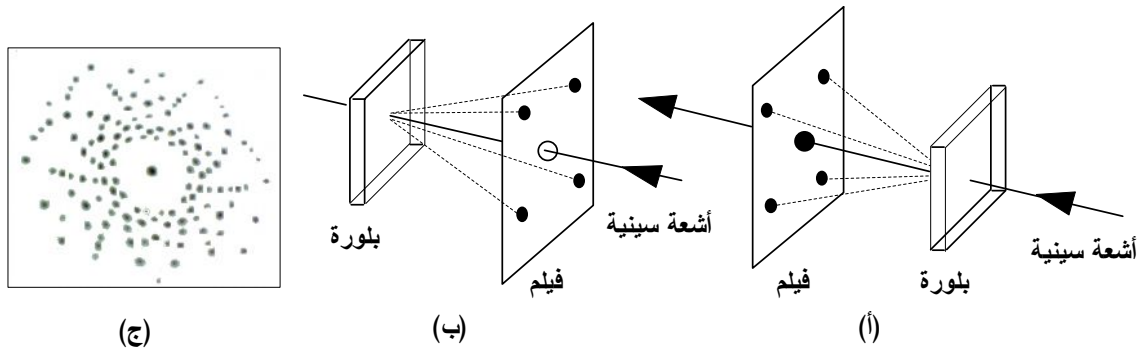
كما نعلم، يتضمن الشعاع الأبيض من الأشعة السينية كل من الطيف الخطي والطيف المتصل المتولد بواسطة الأنبوبة (وبذلك فإن البلورة تتعرض لمدى معين متصل

من قيم الأطوال الموجية). تقوم كل مجموعة من المستويات المتوازية بعكس (إحادة) فوتونات الأشعة السينية ذات طول موجي معين والتي تحقق قانون براغ لزاوية سقوط ثابتة.



الشكل 5-18 الترتيب التجريبي لحيود الأشعة السينية طبقا لطريقة لاوى.

يمكن تسجيل حيود الأشعة بطريقة ملائمة بواسطة كاميرا بولارويد (Polaroid camera)، أو بواسطة أي جهاز تصوير إلكتروني. يمكن تحليل نماذج حيود الأشعة المشتتة النافذة أو الأشعة المشتتة المرتدة بالانعكاس من البلورة والتي يتم الحصول عليها على ألواح التصوير، كما هو مبين في الشكل 5-19 الجزئين (أ) و (ب) على وجه الترتيب.



الشكل 5-19 حيود لاوى في (أ) نمط الأشعة النافذة، (ب) نمط الأشعة المرتدة بالانعكاس و (ج) نموذج تداخل أشعة نافذة.

تغطي حزمة الأشعة الساقطة مجالا مستمرا (متصلاً) كبيراً من الأطوال الموجية، لذلك فإن كل مجموعة مستويات بلورية متوازية (d_{hkl}) تنتخب من الحزمة الساقطة طول موجي يحقق قانون براغ وتعكسه بزاوية θ_{hkl} . ونتيجة انعكاسات كل مجاميع المستويات المتوازية يظهر نموذج الحيود والذي يكون على هيئة بقع (تلطخات) على لوح التصوير موزعة بصورة تظهر توجه البلورة، كما هو مبين بالشكل 5-19 (ج). فلو كان للبلورة المدروسة محور تناظر من الدرجة السادسة وموجه بحيث يوازي هذا المحور اتجاه الأشعة الساقطة فإن صورة التشتت يكون لها محور تناظر من الدرجة السادسة أيضاً وعمودي على مستواها، كما يبين الشكل (ج).

تترتب البقع في نموذج حيود الأشعة النافذة (الشكل (ج)) على شكل قطوع ناقصة مارة بالبقعة المركزية. ينتج كل قطع ناقص عن التشتت الناتج من مستويات منطقة واحدة محورها $[uvw]$ وأدلة ميلر لها تحقق المعادلة $hu + kv + lw = 0$. أما البقع في نموذج حيود الأشعة المرتدة بالانعكاس فتتكون من قطوع زائدة لا تمر بالبقعة المركزية. يتم تحليل وتعيين أدلة ميلر المقابلة لبقع الحيود باستخدام مخطط يسمى بناء أيوالد (Euwald).

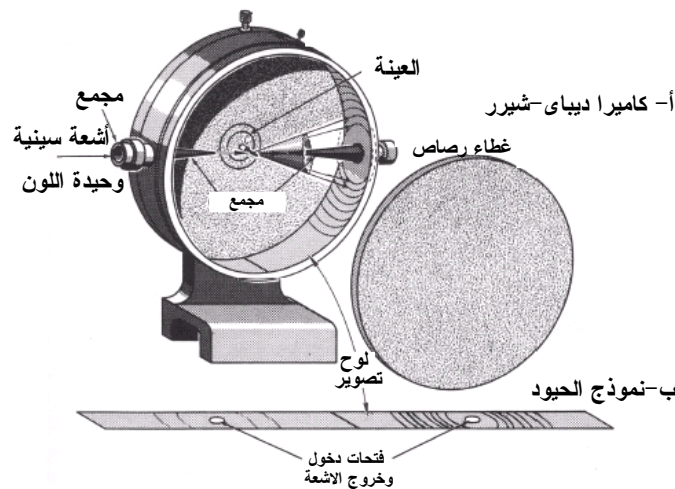
غالبا يفضل استخدام هذه التقنية في نمط الأشعة المرتدة بالانعكاس. لاحظ أنه يمكن بواسطة هذه الطريقة تعيين قيم θ المقابلة لكل انعكاس ولا يمكن تعيين قيم λ المقابلة وذلك بسبب تراكم الانعكاسات من الرتب المختلفة من مجموعة معينة من المستويات البلورية. ولهذا، لا يمكن استخدام هذه التقنية لتعيين ثابت الشبكة، مثلاً. بالرغم مما سبق

فإن لهذه الطريقة فائدة كبيرة في تحديد تناظر واتجاه البلورات المعروفة التركيب والتعرف على مستويات أو اتجاهات بلورية معينة، كما تستخدم أحيانا في تحديد التشوهات والعيوب التي تنشأ عند المعالجة الحرارية أو الميكانيكية للبلورات.

2-8-5 طريقة المسحوق POWDER METHOD

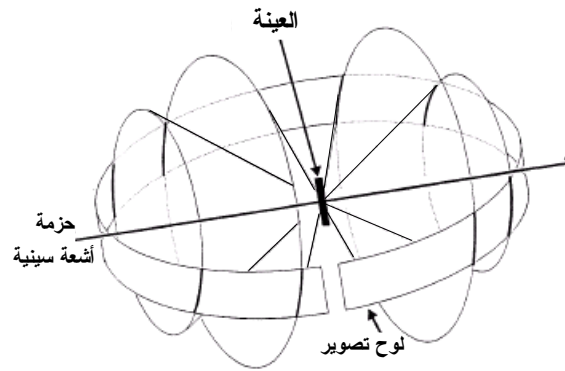
تسمى هذه الطريقة أيضا بطريقة ديبي-شيرر (Deby-Scherrer) وهما أول من صنعا آلة تصوير للحيود وتحمل نفس الاسم. يعتمد أسلوب العمل في هذه الطريقة على استخدام ضوء أحادي اللون (الطول الموجي ثابت) وزاوية سقوط متغيرة.

يتم طحن العينة لتتحول إلى مسحوق ناعم (بلورات صغيرة) وتعبأ في كبسولة رفيعة (أنبوبة شعرية من مادة ليس لها تأثير على الحيود ولا يتجاوز قطرها 1 مم). توضع الكبسولة رأسيا في مركز كاميرا ديبي-شيرر التي تحتوى على لوح تصوير بداخلها ويتم تعريض البلورة لأشعة سينية أحادية اللون، كما هو مبين بالشكل 5-20.



الشكل 5-20 الترتيب المعملّي لطريقة المسحوق ومخطط يوضح الكاميرا ونموذج الحيود.

ولما كان المسحوق يحتوى على بلورات صغيرة موجهة عشوائيا، لذلك تكون كل مستويات الحيود متاحة ويتكون عدد كبير من الأشكال المخروطية من الأشعة المشتتة يكون لكل منها نصف زاوية المخروط 2θ ، أو ضعف زاوية براغ لحيود الأشعة على مستويات بلورية معينة. والسبب في ظهور الأشكال المخروطية من الأشعة المشتتة هو أن المستويات موضوع البحث (الموجودة خلال وفرة من الحبيبات ذات التوجيه العشوائي) تبعث على أن يكون التشتت في أي اتجاه حول الشعاع الساقط متاح ما دام الشعاع الساقط يكون زاوية براغ مناسبة مع هذه المستويات، وهكذا يوجد تماثل دوراني للأشعة المشتتة حول اتجاه الشعاع الساقط، كما هو مبين بالشكل 5-21. تكون زوايا براغ صغيرة للمستويات ذات المسافات البينية الكبيرة وعند العكس فالعكس صحيح.



الشكل 5-21 منشأ حلقات حيود ديبياي.

بعد إجراء الحيود لزمن كافٍ يظهر لوح التصوير بعد تظهيره (تحميضه) نموذج حيود كالمبين في الشكل 5-22. يقابل كل قمة حيود (كل خط أسود) على لوح التصوير تداخل بناء عند مستويات لها مسافة بينية d_{hkl} . الآن، تكمن المشكلة في تعيين أدلة ميلر (hkl) لخطوط الحيود.

من قانون براغ نجد أن،

$$\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta$$

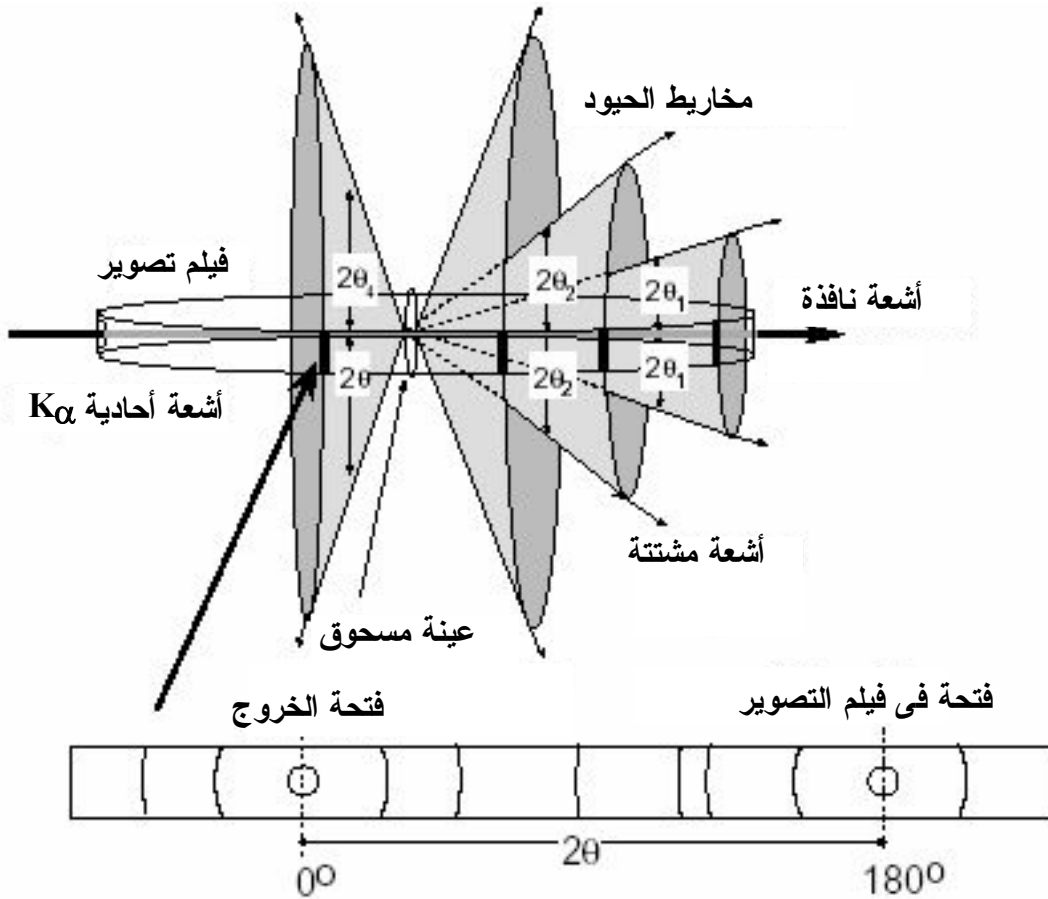
و

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

$$\lambda^2 = 4d_{hkl}^2 \sin^2 \theta \quad ; \quad d_{hkl}^2 = \frac{a^2}{(h^2 + k^2 + l^2)}$$

بالتعويض وإعادة الترتيب نحصل على

$$\frac{\sin^2 \theta}{(h^2 + k^2 + l^2)} = \frac{\lambda^2}{4a^2} = \text{const.}$$



الشكل 5-22 مخطط توضيحي لمخاريط الأشعة المشتتة عند زوايا مختلفة (الشكل العلوي) ونموذج الحيود على لوح التصوير (الشكل السفلي).

وطبقا لذلك، نجد أن هذه العلاقة تتحقق لكل الخطوط (قيم θ) الموجودة، أي أن،

$$\frac{\sin^2 \theta_1}{(h^2 + k^2 + l^2)_1} = \frac{\sin^2 \theta_2}{(h^2 + k^2 + l^2)_2} = \frac{\sin^2 \theta_3}{(h^2 + k^2 + l^2)_3} = \text{const.} \quad 42-5$$

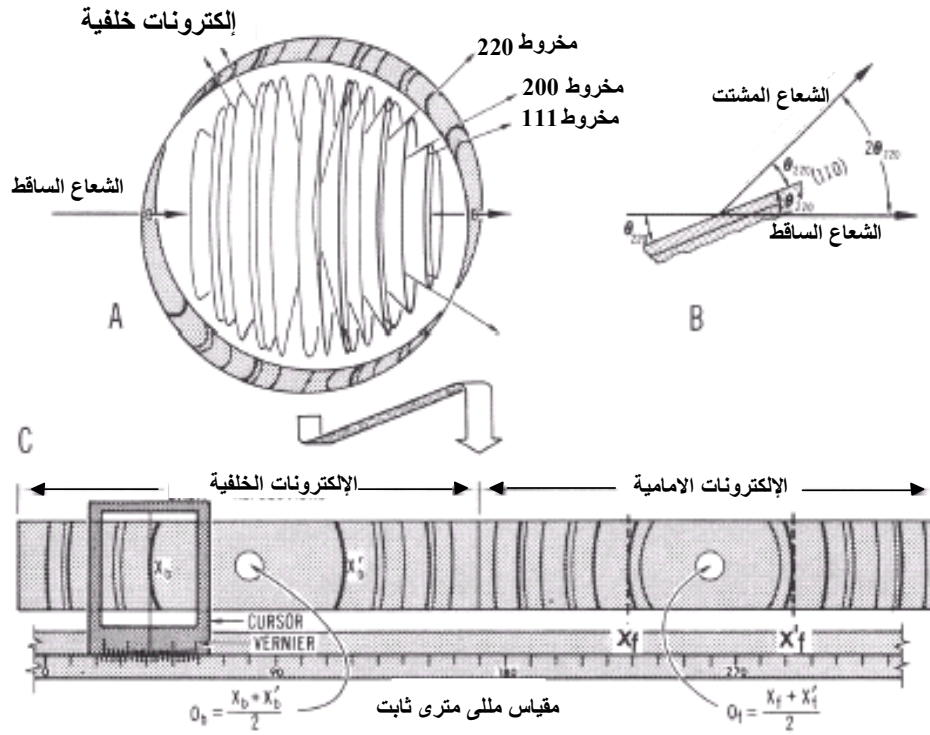
وبما أن المجموع $(h^2 + k^2 + l^2)$ يكون دائما عدد صحيح والمقدار $\frac{\lambda^2}{4a^2}$ عبارة عن مقدار ثابت فإن مشكلة تعيين أدلة ميلر لنموذج حيود النظام المكعبى تكمن في تحديد مجموعة الأعداد $(h^2 + k^2 + l^2)$ التي تعطى خارج القسمة مقدار ثابت عند التعويض في المعادلة السابقة لكل قيم θ الموجودة. (لاحظ أنه تستحيل أعداد معينة مثل 7، 15، 23، الخ لأنه لا يمكن أن تتكون بجمع مربعات الأعداد الثلاثة).

الآن، سنجرى عملية تحديد الأدلة بسياق الخطوة-خطوة كما يلي:

1- تعيين قيم θ للخطوط التي تم الحصول عليها من هندسة لوح التصوير، حيث يقاس قطر كل قوسين متقابلين (جزئي حلقة واحدة) على لوح التصوير، R ، وقطر الكاميرا الداخلي، D ، وتكون الزاوية هي $\theta = \frac{180}{\pi} \frac{R}{2D}$. تكون علاقة الزاوية θ علاقة خطية في المسافة بين فتحة خروج الأشعة ($2\theta = 0^\circ$) وفتحة الدخول ($2\theta = 180^\circ$)، كما هو مبين الشكل 5-23.

2- نرسم للقيم المتصاعدة لزوايا الخطوط المتتالية بالأدلة θ_1 و θ_2 و θ_3 وهكذا ونعين قيم $\sin 2\theta$ لكل منها. إذا كان النظام مكعب بسيط فإننا نعلم أن جميع المستويات الموجودة سوف تؤدي إلى حدوث حيود وتكون خطوط متتالية (مع زيادة θ) تنتج من

التشتت على المستويات ذات المسافات البينية المتناقصة: (100)، (110)، (111)،
(200)، (211)، و (220) الخ.



الشكل 5-23

من المعادلة 5-12 ندرك أن

$$\frac{\sin^2 \theta_1}{1} = \frac{\sin^2 \theta_2}{2} = \frac{\sin^2 \theta_3}{3} = \frac{\sin^2 \theta_4}{4} = \frac{\sin^2 \theta_5}{5} = \text{const.}$$

إذا كان النظام مكعب متمركز الجسم، فإننا نعلم من قواعد الاختيار أن المستويات

التي سوف تعكس هي فقط التي لها $(h^2 + k^2 + l^2) = \text{عدد زوجي}$. وهكذا فإن العلاقة السابقة

تصبح :

$$\frac{\sin^2 \theta_1}{2} = \frac{\sin^2 \theta_2}{4} = \frac{\sin^2 \theta_3}{6} = \frac{\sin^2 \theta_4}{8} = \dots = \text{const.}$$

(يمكن التمييز بين المكعب البسيط و المكعب المتمركز الجسم من خلال الحقيقة التي تؤكد أنه لا يمكن الحصول على العدد 7 من مجموع مربعات ثلاثة أرقام ، بل يمكن الحصول على العدد 14 من المستويات (321)).

بالنسبة للنظام المكعبي المتمركز الواجهة، تبين قواعد الاختيار وجود انعكاس فقط من المستويات التي لها أدلة (hkl) غير مخلوطة وبالتالي نحصل على:

$$\frac{\sin^2 \theta_1}{3} = \frac{\sin^2 \theta_2}{4} = \frac{\sin^2 \theta_3}{8} = \text{const.}$$

3- بعد الاختيار المناسب يمكن تعيين المقدار الثابت: $\frac{\sin^2 \theta}{(h^2 + k^2 + l^2)} = \text{const.}$ ويمكن

التعرف على الشبكة البرافية. وبمعلومية الطول الموجي للأشعة السينية الساقطة يمكن تعيين ثابت خلية الوحدة كالآتي،

$$\begin{aligned} \frac{\sin^2 \theta}{(h^2 + k^2 + l^2)} &= \text{const.} = \frac{\lambda^2}{4a^2} \\ a^2 &= \frac{\lambda^2}{4 \sin^2 \theta} (h^2 + k^2 + l^2) \\ \therefore a &= \frac{\lambda}{2 \sin \theta} \sqrt{(h^2 + k^2 + l^2)}. \end{aligned}$$

مثال 3-5

في تجربة ديبي-شرر إذا كان الطول الموجي للأشعة المستخدمة هو $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$ والمسحوق البلوري المستخدم من النوع المتمركز الجسم وله ثابت شبكة يساوي $a = 3.5 \text{ \AA}$ ، عين أدلة ميلر للانعكاس (hkl) المقابلة لأكبر زاوية براغ θ_{\max} .

الحل

نستخدم معادلة براغ،

$$\frac{4a^2 \sin^2 \theta}{\lambda^2} = h^2 + k^2 + l^2 = N$$

$$20.6611 \sin^2 \theta = N$$

حيث N عدد صحيح و $\sin^2 \theta < 1$ إذن نجد $N \leq 20$ وبالتالي فإن أعلى قيمة للعدد N هي

20 وتقابل الأدلة (420) وتكون أكبر زاوية براغية هي $\theta_{\max} = \theta_{420}$ ونعين قيمتها كالآتي،

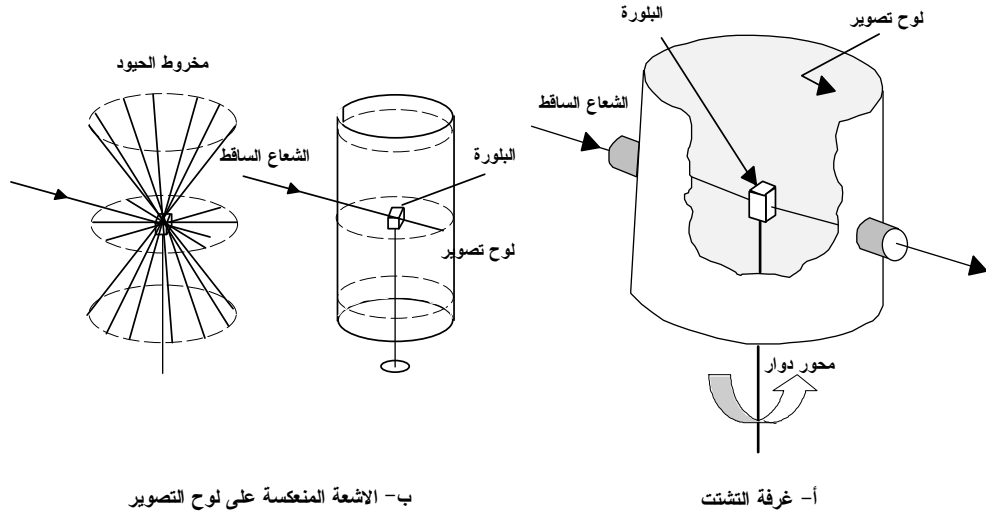
$$\sin^2 \theta_{420} = 0.968$$

$$\therefore \sin \theta_{420} = \sqrt{0.9838}$$

$$\therefore \theta_{420} \cong 80^\circ .$$

3-8-5 طريقة البلورة الدوارة ROTATING CRYSTAL METHOD

تستخدم في هذه الطريقة بلورة صغيرة (أبعادها في حدود 1 mm) أحادية على محور رأسي عمودي على حزمة أشعة سينية أحادية اللون (λ) ويدور حول نفسه بسرعة زاوية ω . توضع البلورة بحيث يكون احد محاورها (وليكن a) موازيا لمحور الدوران. يثبت على السطح الداخلي لغرفة التشتت الاسطوانية لوح تصوير ليستقبل الأشعة المشتتة، كما هو مبين بالشكل 24-5 (أ). عند سقوط الأشعة السينية على البلورة تنعكس من المستويات المتوازية مكونة مخاريط حيود أعلى وأسفل خط الاستواء، كما هو مبين بالشكل 24-5 (ب) ومكونة نموذج حيود على لوح التصوير عبارة عن بقع، كما هو مبين في الشكل 25-5 (أ).



الشكل 5-24 (أ) غرفة التشتت و (ب) الأشعة المنعكسة على لوح التصوير.

عند تغيير زاوية السقوط q مع الدوران فإن الأشعة تنعكس على كل مجاميع المستويات البلورية المتوازية والتي تصنع فرق في مسار الأشعة مساويا للمقدار $(a \sin \theta)$. لاحظ هنا أن λ ثابتة وكل من θ و d_{hkl} متغيرة، حيث توجد d_{hkl} لكل زاوية انعكاس. عموماً، تنعكس كل المستويات الموازية لمحور الدوران (والتي تشكل منطقة) الأشعة على لوح التصوير الاسطواني في مستوى الاستواء الاوسط، أما المستويات العاكسة الأخرى فإنها تعطى انعكاسات في مستويات تقع تحت أو فوق مستوى الاستواء، كما يبين الجزء (أ) من الشكل 5-25. بفرض أن الزاوية بين الشعاع الساقط والمستوى العاكس هي $\frac{\theta}{2}$ فإن الشعاع المنعكس والذي يعطى بقعة ما على لوح التصوير يصنع زاوية مع اتجاه الأشعة الساقطة زاوية ϕ ، حيث $\phi = 90 - \theta$ ، كما يتضح من هندسة الشكل 5-25. تنتج الانعكاسات عند خط الطبقة الاولى من المستويات $\{1kl\}$ ، حيث $a \cos \theta_1 = \lambda$ ، بفرض $n = 1$. تنتج الانعكاسات عند خط الطبقة الثانية من المستويات $\{2kl\}$ ، حيث

وهكذا. إذا كان بعد الطبقة الاولى عن خط الاستواء هو h وكان نصف

قطر الغرفة هو r فإن $\tan \theta = \frac{h}{r}$. وحيث أن $a \sin \theta = n\lambda$ ، فإنه يمكن الحصول على

الفصل a من العلاقة $a = \frac{n\lambda}{\sin \theta} = \frac{n\lambda}{\sin(\tan^{-1}(h/r))}$. وبقياس بعد خط الطبقة الاولى من

البقع عن خط الاستواء على لوح التصوير وكان البعد هو h_1 فان طول وحدة الخلية a

يكون $a = \frac{\lambda}{\sin(\tan^{-1}(h/r))}$ ، حيث λ الطول الموجي للأشعة. وبتغير محور الدوران

ليكون موازيا للمحور b مرة وموازيا للمحور c مرة أخرى يمكن بنفس الطريقة تعيين

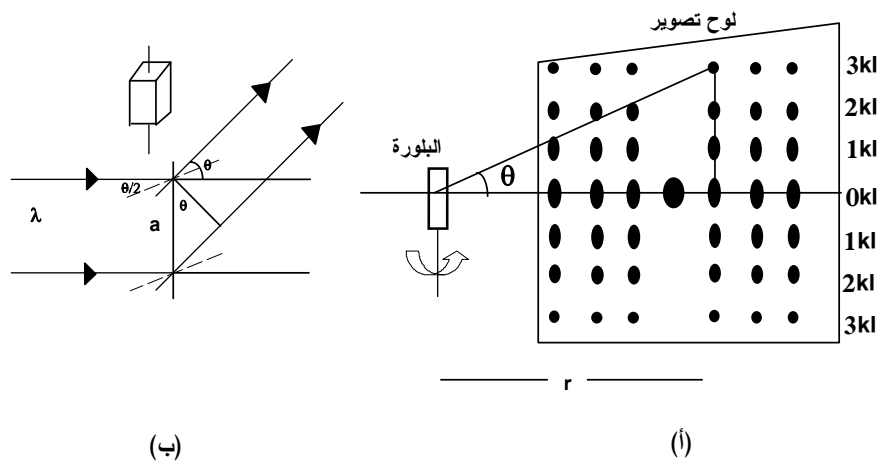
أطوال وحدة الخلية b و c . بقياس شدة إضاءة كل بقعة وتحديد المستوى البلوري (hkl)

الذي حدث منه الانعكاس (طبقا لقانون براغ)، فإنه يمكن حساب التركيب البلوري.

أجريت بعض التعديلات على هذه الطريقة لتقليل احتمال تطابق النقط الناتجة عن

الانعكاس من أكثر من مستوى بلوري وذلك بجعل البلورة تتذبذب حول المحور الرأسي

في حدود بضع درجات وبذلك يقل عدد مستويات الانعكاس.



الشكل 5-25 نموذج الحيود في تجربة لاوى وهندسة انعكاس الأشعة.

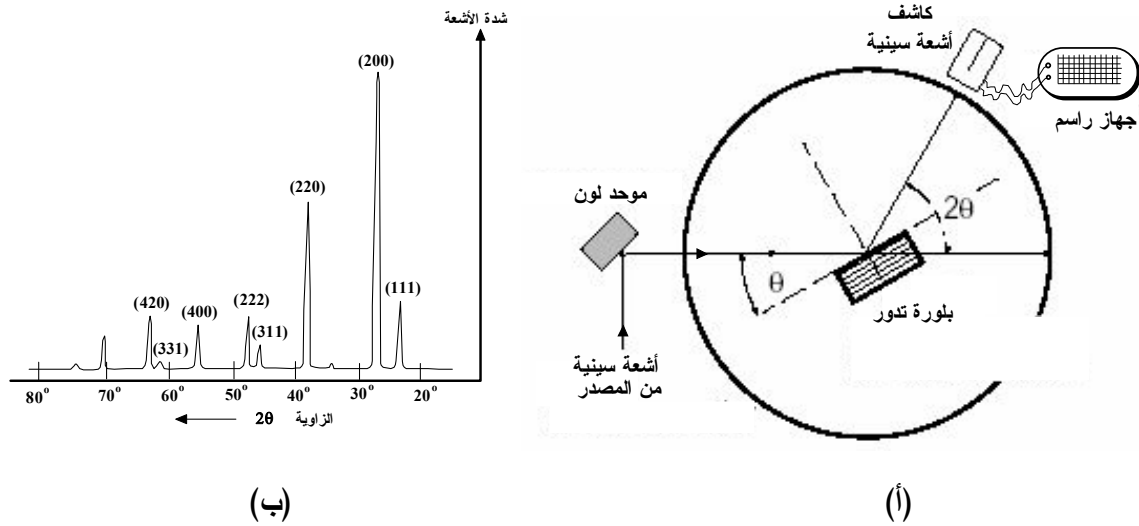
5-8-4 طريقة مطياف الحيود DIFFRACTMETER METHOD

تعتبر طريقة مطياف الحيود طريقة حديثة ومتطورة حيث يتم تسجيل طيف الحيود بواسطة عدادات الكترونية وجهاز راسم بدلا من ألواح التصوير. تبنى فكرة عمل هذه الطريقة على مبدأ استخدام طول موجي، λ ، ثابت وتغيير زاوية سقوط الأشعة، θ ، وعلى ذلك يكون المتطلب الأساسي في هذه الطريقة هو إمكانية توفر أشعة سينية أحادية اللون ذات طول موجي معلوم. يمكن الحصول على أشعة سينية أحادية اللون بطريقة ملائمة باستخدام بلورة تعمل كمرشح. مرة أخرى، يتم الحصول على فعل الترشيح بوضع البلورة في مسار الأشعة السينية البيضاء (التي تحتوى على العديد من الأطوال الموجية) المنبعثة من أنبوبة التوليد بزاوية سقوط معينة تسمح بتحقيق قانون براغ عند أكبر شدة إشعاع (K_{α}) منبعثة من البلورة. يستخدم شرط طول موجي ثابت وزاوية متغيرة في أكثر من تقنية منها دوران العينة باستخدام مطياف الحيود وطريقة المسحوق.

يبين الشكل 5-26 (أ) الترتيب المعملّي لطريقة مطياف الحيود. توضع العينة (على شكل بلورة أو مسحوق معبأ) في مركز منضدة دوارة ويجب مراعاة أن تكون المسافة بين الموحد والعينة وبين الكاشف والعينة متساويتان.

يتم تعريض العينة لإشعاع أحادي اللون من الأشعة السينية المنعكسة من الموحد. يتم تدوير العينة بسرعة ثابتة حول محورها بينما يدور الكاشف حول مركز العينة بسرعة مضاعفة وذلك للمحافظة على نفس شروط الضبط وتركيز الأشعة الساقطة على الكاشف.

يقوم جهاز الراسم برسم طيف التشتت (شدة الأشعة-زاوية براغ). تمثل كل قمة تشتت انعكاس برافى وتمثل المساحة تحت كل قمة شدة التشتت المتكاملة. يبين الشكل 26(ب) طيف التشتت لبلورة بروميد البوتاسيوم.



الشكل 5-26 (أ) مخطط توضيحي لمطياف حيود الأشعة السينية، (ب) طيف تشتت لبلورة بروميد البوتاسيوم.

عند استخدام عينة على شكل كبسولة من مسحوق المادة، فإن شدة التشتت المتكاملة تعتمد على العديد من العوامل مثل التشتت الذرى ودرجة الحرارة و نوع البناء وحدوث الاستقطاب وغيرها.

مثال 4-5

عند دراسة عينة من مسحوق النيكل بواسطة مطياف الأشعة السينية تم تعريض العينة للإشعاع $C_{K\alpha}$ الذي له طول موجي 2.29 \AA . لوحظ ثلاث قمم فقط هي (111) و (200) و (220). اشرح لماذا لم تظهر الانعكاسات من المستويات ذات أدلة ميلر أعلى،

مع العلم أن ثابت الشبكة للنikel هو $a = 3.53 \text{ \AA}$.

الحل

بلورة النikel من النوع المتمركز الاوجه، ولهذا فإن المستوى التالي في ترتيب

الانعكاس هو (311). سنستخدم الآن قانون براغ $\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta$ لتعيين زاوية الانعكاس

من المستوى (311).

$$d_{311} = \frac{a}{\sqrt{3^2 + 1^2 + 1^2}} = \frac{3.53}{\sqrt{11}} = 1.06 \text{ \AA}$$

$$\therefore \lambda = 2d_{hkl} \sin \theta$$

$$\therefore \theta = \sin^{-1} \left(\frac{\lambda}{2d_{hkl}} \right) = \sin^{-1} \left(\frac{2.29}{2 \times 1.06} \right) = \sin^{-1}(1.08) = \text{undefined}.$$

كما يظهر من الحسابات أن θ الناتجة غير محددة، وهكذا، فإن الطريقة الوحيدة

لقياس الانعكاس من المستويات ذات أدلة ميلر أعلى من (220) هي أن نغير نوع مادة

الهدف في أنبوبة التوليد إلى مادة عنصر أكثر ثقلاً من أجل تقليل الطول الموجي

للإشعاع. بهذه الطريقة، يمكن تحقيق قانون براغ.

أمثلة عامة

مثال 5-5

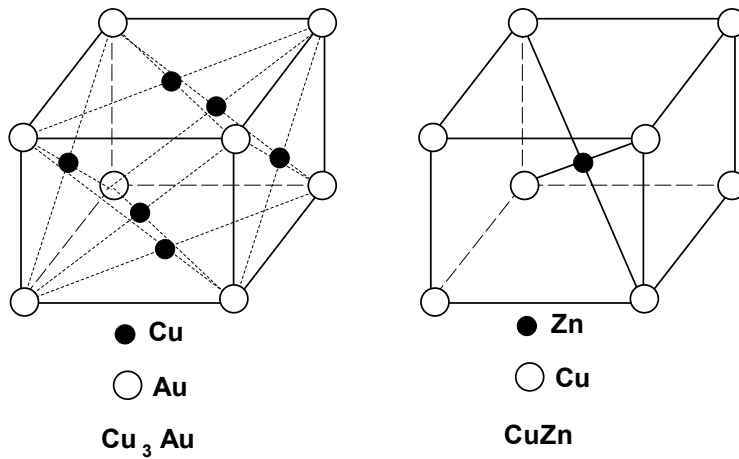
1- للمركبين CuZn و Cu₃Au وحدة تركيب بلوري مكعبة في الحالة الطبيعية،

كما هو موضح بالشكل 5-27. أحسب نوع الشبكة وعامل التركيب البنائي لكلا

المركبين.

الحل

بفرض أن متجه التركيب البنائي للشبيكة هو $\bar{\mathbf{R}}^{(C)} = h\bar{\mathbf{a}} + k\bar{\mathbf{b}} + l\bar{\mathbf{c}}$ وحيث أن للمركب CuZn وحدة التركيب البلوري عبارة عن مكعب بسيط حيث تتكون القاعدة من ذرتين تحتل الإحداثيات Cu(000) و $\text{Zn}\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)$ بالنسبة للمحاور الأساسية التي تنطبق على أحرف المكعب $\bar{\mathbf{a}}_1 = a\bar{\mathbf{a}}$ ، $\bar{\mathbf{a}}_2 = a\bar{\mathbf{b}}$ و $\bar{\mathbf{a}}_3 = a\bar{\mathbf{c}}$.



الشكل 5-27 وحدة التركيب البلوري

يمكن كتابة عامل التركيب البنائي للقاعدة على النحو

$$S_R = \sum_{j=1}^2 s_j e^{i(\bar{\mathbf{r}}_j \cdot \bar{\mathbf{R}})}$$

حيث s_j عامل التشتت الذري و $\bar{\mathbf{r}}_j$ المتجه الذي يصف تركيب القاعدة (أي موقع الذرة الموجودة في القاعدة بالنسبة إلى ذرات القاعدة الأخرى) ونحصل على عامل التشتت للبلورة على النحو،

$$S = \sum_{j=1}^2 s_j e^{i2\pi(hu_j + kv_j + lw_j)} = s_{Cu} + s_{Zn} e^{i\pi(h+k+l)}$$

ومن هذه المعادلة يمكن أن نميز حالتين:

$$S_{hkl} = s_{Cu} - s_{Zn} \quad , \quad \text{حيث} \quad h + k + l = \text{عدد فردي و}$$

$$S_{hkl} = s_{Cu} + s_{Zn} \quad , \quad \text{حيث} \quad h + k + l = \text{عدد زوجي}$$

بالنسبة للمركب Cu_3Au فإن وحدة التركيب البلوري عبارة عن مكعب بسيط حيث

تتكون القاعدة من أربعة ذرات تحل الإحداثيات $\text{Cu}\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}0\right)$ و $\text{Cu}\left(\frac{1}{2}0\frac{1}{2}\right)$

و $\text{Au}(000)$ $\text{Cu}\left(0\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)$ بالنسبة للمحاور الأساسية التي تنطبق على أحرف المكعب. يمكن

كتابة عامل التركيب البنائي على النحو

$$S_{hkl} = s_{Au} + s_{Cu} \left(e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(h+l)} + e^{i\pi(k+l)} \right)$$

ومن هذه المعادلة يمكن أن نميز حالتين:

$$S_{hkl} = s_{Au} - s_{Cu} - 1 \quad , \quad \text{حيث} \quad h + k + l = \text{مختلطة و}$$

$$S_{hkl} = s_{Au} + 3s_{Cu} - 2 \quad , \quad \text{حيث} \quad h + k + l = \text{غير مختلطة (ارجع إلى الجدول 5-2).}$$

مثال 5-6

أحسب عامل البناء التركيبي لمعدن الزنك؟

الحل

التركيب البلوري للزنك Zn سداسي ذو عبوة متراسة (hcp) وشبيكة سداسية

بسيطة لها قاعدة تتكون من ذرتين في المواقع (000) و $\left(\frac{1}{3}\frac{2}{3}\frac{1}{2}\right)$ نسبة إلى المحاور

الأساسية للتركيب السداسي. من تعريف عامل البناء نجد

$$S_{hkl} = s \left(1 + e^{i2\pi \left(\frac{h+2k}{3} + \frac{l}{2} \right)} \right)$$

وحيث أن شدة الأشعة السينية المنعكسة تتناسب مع $|S_{hkl}|^2$ نحصل على

$$|S_{hkl}|^2 = S_{hkl} S_{hkl}^* = 4s^2 \cos^2 \pi \left(\frac{h+2k}{3} + \frac{l}{2} \right)$$

ويمكن تمييز أربعة حالات (n - عدد صحيح) باستخدام حساب المثلثات لحساب جيب

التمام هم:

$$S_{hkl}^2 = 4 \text{ على } h+2k=3n-1 \text{ و } -1 \text{ عدد زوجي ، نحصل على}$$

$$S_{hkl}^2 = 0 \text{ على } h+2k=3n-2 \text{ و } 1 \text{ عدد فردي، نحصل على}$$

$$S_{hkl}^2 = s^2 \text{ على } h+2k=3n \pm 1 \text{ و } 1 \text{ عدد زوجي، نحصل على}$$

$$S_{hkl}^2 = 3s^2 \text{ على } h+2k=3n-4 \text{ و } 1 \text{ عدد زوجي، نحصل على}$$

لذلك فإن التركيب السداسي ذو العبوة المتراسة يتميز باختفاء الانعكاسات التي لها

$$-1 \text{ عدد فردي و } h+2k=3n \text{ أو } 2h+k=6n-3k=3n' \text{ و } n' - \text{ عدد صحيح أيضا.}$$

مثال 5-7

في تجربة حيود بواسطة كاميرا ديبي-شرر لقياس ثابت الشبكة المكعبة (a)

الفاناديوم (V) تم استخدام أشعة سينية ذات طول موجي $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$ ونتجت المعلومات

التالية:

رقم الحلقة	1	2	3	4	5	6	7
زاوية براغ θ_{hkl}°	22.1	30.5	38.5	46	53.5	61.7	72

عين ثابت الشبكة المكعبة (a) لعنصر الفاناديوم؟

الحل

بما أن شبكة الفاناديوم مكعبة الشكل لذلك يكتب قانون براغ على الصورة التالية:

$$\frac{4 \sin^2 \theta_{hkl}}{\lambda^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2} = \frac{N}{a^2}$$

حيث a ثابت الشبكة المطلوب حسابه. ندون الحسابات في الجدول التالي، حيث

تكون المعلومات العملية والمحسوبة منها مباشرة في الأعمدة من الاول إلى الرابع.

رقم الحلقة	θ_{hkl}°	$\sin \theta_{hkl}$	$\frac{4 \sin^2 \theta_{hkl}}{\lambda^2}$	N	(hkl)	a (Å)
1	22.1	0.360	0.2177	2	(110)	3.025
2	30.5	0.507	0.4318	4	(200)	3.034
3	38.5	0.622	0.6499	6	(211)	3.03
4	46	0.719	0.8685	8	(220)	3.028
5	53.5	0.804	1.0859	10	(310)	3.029
6	61.7	0.880	1.3009	12	(222)	3.029
7	72	0.951	1.5193	14	(321)	3.029

نبحث عن قاسم مشترك قيمته ستكون $\frac{1}{a^2}$ (وهو القاسم الذي عندما نقسم عليه كل

عناصر العمود الثالث تنتج لدينا أرقاماً اقرب ما يكون إلى أرقام صحيحة قليلة. يكون

القاسم المشترك للنظام المكعبي إما 0.2177 (مقابل للحلقة الاولى) أو نصفه 0.1088 أو ثلثه 0.0725. نجرى عملية القسمة (لاختيار احد القواسم) للحلقة الرابعة لنجد:

$$\frac{0.8685}{0.2177} = 3.98, \quad \frac{0.8685}{0.1088} = 7.97, \quad \frac{0.8685}{0.0725} = 11.96$$

ومن ذلك يتضح أن القاسم المشترك الأكثر ملائمة هو الاول أو الثاني، $\frac{4}{\lambda^2} = 1.68$.

ولنجرب الآن الحلقة الخامسة: $\frac{1.0859}{0.2177} = 4.98$ و $\frac{1.0859}{0.1088} = 9.97$ ونستمر بالحسابات فنأخذ الحلقة السابعة لنجد: $\frac{1.5193}{0.2177} = 6.97$ و $\frac{1.5193}{0.1088} = 12.95$. وهكذا يتضح ترك القاسم المشترك 0.2177 لأنه يؤدي إلى ظهور $N = 7$ الممنوعة للشبكات المكعبة. لذلك فالقاسم المشترك هو 0.1088. نجرى قسمة عناصر العمود الرابع على هذا القاسم المشترك ونسجل في العمود الخامس اقرب عدد صحيح لنواتج القسمة. من قيم N نعين أدلة ميلر للحلقات وتدون في العمود السادس. ثم نحسب قيم a باستخدام المعادلة السابقة وتدونها في العمود السابع.

و يتبين من جدول الحسابات أن:

(أ) شبكة الفاناديوم مكعبة متركزة الجسم bcc بسبب وجود الانعكاسات ذات الأدلة $h + k + l = \text{عدد زوجي}$.

(ب) ثابت الشبكة هو 3.029 \AA (ليس المتوسط الحسابي ولكن قيمة a عند الزوايا الكبيرة، لان الزوايا الكبيرة تعطى نتائج أدق).

ملخص الباب

✕ لكي تكون الأشعة مناسبة للاستخدام في دراسة التركيب البلوري لمادة الحالة

الصلبة يجب أن يكون الطول الموجي للأشعة مساويا تقريبا للمسافة بين الذرات.

✕ يمكن استخدام العديد من أنواع الفوتونات في تجارب الحيود لدراسة التركيب

البنائي للمادة المتبلورة منها: الأشعة السينية، النيوترونات والإلكترونات.

✕ تستخدم النيوترونات المعجلة في دراسة وتحديد الخصائص المغناطيسية لبلورات

بعض أنواع المواد الصلبة وتحديد طيف الأمواج المرنة نظرا لغياب الشحنة

والتفاعل الكولومي.

✕ تستخدم الإلكترونات في تجارب الحيود وذلك بسبب شحنتها الكهربائية، الأمر الذي

يجعلها تتفاعل بشدة مع ذرات المادة. بسبب شحنتها تكون مسافة الاختراق

للالكترونات اقل منها في حالة الأشعة السينية ولذلك تستخدم الأشعة الالكترونية في

الكشف عن العيوب السطحية لأغشية رقيقة من المواد أو إكمال ما لم تستطعة

الأشعة السينية.

✕ يتكون طيف الأشعة السينية من طيف متصل يحتوى على جميع الأطوال الموجية

للأشعة السينية ويعتمد على جهد التعجيل وطيف خطي ويعتمد على التركيب الدقيق

لذرات مادة الهدف.

✖ تفترض المعالجة الدقيقة لعملية الحيود أن البلورة تتكون من الكتلونات منفردة.

يكون عامل التشتت على الصورة

$$f = \sum_l e^{i\bar{s} \cdot \bar{r}_l}$$

حيث يشمل المجموع على كل الكتلونات في النظام و \bar{s} هو متجه التشتت.

$$\bar{s} = \bar{k} - \bar{k}_0$$

وبتطبيق النتيجة على ذرة منفصلة نحصل على عامل التشتت الذري،

$$f_a = \int_0^R 4\pi r^2 \rho(r) \frac{\sin sr}{sr} dr$$

يمكن كتابة عامل التشتت للبلورة على الصورة

$$f_{cr} = FS$$

حيث F عامل التركيب البنائي الهندسي و S عامل التركيب البنائي للشبكة والذين

يعرفان على النحو الآتي:

$$F = \sum_j f_a e^{i\bar{s} \cdot \bar{\delta}_j}$$

حيث يكون المجموع على كل الذرات في خلية الوحدة و

$$S = \sum_l f_a e^{i\bar{s} \cdot \bar{R}_l^{(C)}}$$

ويكون هذا المجموع على كل خلايا الوحدة في البلورة. يعتمد F فقط على

الخصائص الذرية وشكل خلية الوحدة بينما يعتمد S على تركيب الشبكة فقط.

وبفحص عامل التركيب البنائي للشبكة، S، يتبين انه يتلشى في كل الظروف

ماعدا عندما يساوى متجه التشتت متجه الشبكة الانقلابية، $\bar{s} = \bar{G}$ ، وهو نفس شرط براغ للانعكاس من المستويات الذرية العمودية على \bar{G} .

✕ في حالة الأشعة السينية المشتتة نستقبل الأشعة بعد حيودها عبر البلورة وتكون

الصورة التي نحصل عليها في هذه الحالة عبارة عن مسحا يسمى بالشبكة

الإنقلابية والتي تسمى أيضا بالشبكة المرافقة الشبكة الفعلية في فضاء فورييه.

✕ ترتبط الشبكة الانقلابية بالشبكة الحقيقية ارتباطا وثيقا وتتحدد تماما بتحديد

متجهات الأساس لها والتي تعتمد على متجهات الأساس للشبكة البلورية.

✕ تعرف خلية الاولية الانقلابية على أنها الخلية الموجودة في الفضاء الانقلابي والتي

تقابلها خلية فيجنر-زايتس في الفضاء الحقيقي.

✕ يتعين التركيب البنائي للمادة المتبلورة عادة بواسطة إحدى التقنيات العديدة المختلفة

لحيود الأشعة السينية. كما يمكن الحصول على معلومات إضافية عن التركيب،

أيضا، بواسطة حيود الإلكترونات والنيوترونات.

✕ للحصول على تداخل البناء للأشعة السينية المشتتة يجب أن تكون الأشعة المشتتة

بواسطة مستويات متعاقبة في طور واحد بعد تركها سطح البلورة، بمعنى يجب أن

تكون الأشعة الساقطة والمشتتة في الطور نفسه.

✕ الغرض من تجربة الحيود هو الحصول على معلومات كمية عن الحجم (ثابت

الشبيكة (a) و الشكل المميز (SC, BCC, FCC) لخلية الوحدة.

✗ يستخدم حيود الأشعة السينية لغرض: التعرف على أنظمة بلورية وتعيين ثابت

الشبيكة و التعرف على مستويات معينة أو الاتجاهات المهمة.

✗ يوجد مبدآن يمكن معهما تحقيق حيود الأشعة السينية في الحالة الصلبة لقانون

براغ معمليا: الاول هو ثبوت زاوية سقوط الأشعة، θ و تغير الطول الموجي

للأشعة، λ ، والثاني هو ثبوت الطول الموجي للأشعة، λ ، وتغير زاوية سقوط

الأشعة، θ .

✗ توجد طريقتان للحصول على حزمة أشعة سينية أحادية اللون هما: طريقة

الامتصاص (بواسطة مرشح) وطريقة الانعكاس (بواسطة موحد لون).

✗ تُستخدم طريقة لاوى في تحديد تناظر واتجاه البلورات الأحادية الصغيرة المعروفة

التركيب وذلك بتحليل نموذج حيود الأشعة السينية الناتج.

✗ يعتمد أسلوب العمل في طريقة ديباي-شيرر على استخدام ضوء أحادي اللون

(الطول الموجي ثابت) وزاوية سقوط متغيرة.

✗ تبني فكرة عمل طريقة مطياف الحيود على مبدأ استخدام طول موجي، λ ، ثابت

وتغيير زاوية سقوط الأشعة، θ .

✗ يتعين التركيب البلوري من تحليل نموذج حيود الأشعة السينية للبلورة وذلك طبقا

لقانون براغ $2d\sin\theta = n\lambda$ ، حيث d المسافة بين المستويات المتوازية و θ زاوية سقوط الأشعة و λ الطول الموجي للأشعة السينية.

أسئلة وتمارين

- 1- أذكر خصائص الأشعة التي تصلح لدراسة التركيب البنائي للمادة الصلبة؟
- 2- قارن بين كل من الأشعة السينية والنيوترونات المعجلة والالكترونات المعجلة من حيث الطاقة والطول الموجي واستخدامها في تجارب الحيود.
- 3- اشرح بالتفصيل طريقة توليد الأشعة السينية مع رسم الجهاز المستخدم؟
- 4- أشرح منشأ أنواع الطيف المختلفة للأشعة السينية؟
- 5- استنتج معادلة براغ لحيود الأشعة السينية في المواد المتبلورة للحصول على تداخل بناء.
- 6- توجد عدة طرق معملية لدراسة حيود الأشعة السينية في المادة الصلبة. اذكر المبدأ المستخدم في كل طريقة.
- 7- قارن بين الطرق المعملية المختلفة لحيود الأشعة السينية في المادة الصلبة من حيث طبيعة العينة والمعلومات التي يمكن الحصول عليها بواسطة كل طريقة؟
- 8- استنتج التعبير الرياضي لعامل البناء التركيبي؟
- 9- استنتج التعبير الرياضي لتشتت الأشعة بواسطة البلورة؟

10- عرف الشبكة الإنقلابية وعين حجم الخلية الاولى الإنقلابية للمكعب البسيط؟

11- ماذا يحدث في تجارب التشتت عندما تكون $a \ll \lambda$ ؟ وماذا يحدث عندما تكون

$$a \gg \lambda$$

12- ما هي متطلبات الطول الموجي لتشتت الأشعة بواسطة الشبكة البلورية؟

13- اكتب قانون براغ و اشرح المتغيرات فيه ولماذا يوضع $n=1$ في الواقع العملي؟

14- إذا كان أقل طول موجي للأشعة السينية هو $\lambda = 1.23 \text{ \AA}$ ، فما طاقة الحركة بوحدة

الإلكترون فولت لالكترونات الاولى التي تصطدم بهدف أنبوبة التوليد؟

15- سداسي له المتجهات الانتقالية الاولى في الفضاء الحقيقي على النحو

$$\bar{a}' = \left(\frac{\sqrt{3}a}{2} \right) \bar{x} + \left(\frac{a}{2} \right) \bar{y} \quad \& \quad \bar{b}' = \left(\frac{\sqrt{3}a}{2} \right) \bar{x} + \left(\frac{a}{2} \right) \bar{y} \quad \& \quad \bar{c}' = c\bar{z}$$

حيث \bar{x} و \bar{y} و \bar{z} وحدة المتجهات المتعامدة. أثبت أن :

$$(أ) \text{ حجم الخلية الاولى في الفضاء الحقيقي يساوى } \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c$$

(ب) المتجهات الاولى للشبكة الإنقلابية تعطى بالعلاقات الآتية:

$$\bar{a}^* = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \right) \bar{x} + \left(\frac{2\pi}{a} \right) \bar{y} \quad \& \quad \bar{b}^* = -\left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \right) \bar{x} + \left(\frac{2\pi}{a} \right) \bar{y} \quad \& \quad \bar{c}^* = \frac{2\pi}{c} \bar{z}$$

16- إذا كان طول حافة خلية الوحدة للبلورة المكعبة هو $\lambda = 2.62 \text{ \AA}$. أوجد زاوية براغ

المقابلة للانعكاس من المستويات (100) ، (110) ، (111) ، (200) ، (210) و (211) لأشعة

سينية أحادية اللون لها طول موجي $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$.

17- تتعكس الأشعة السينية ذات طول موجي 1.54 \AA من المستويات (110) في البلورة

المكعبة ذات خلية وحده لها $a = 6 \text{ \AA}$. احسب زاوية براغ لكل رتب الانعكاس، n .

18- بفرض أنبوبة الأشعة السينية ذات هدف نحاس تولد أشعة ذات طول موجي

$\lambda = 1.54 \text{ \AA}$. (أ) احسب المسافة بين المستويات (111) في بلورة الألومونيوم إذا

علمت أن زاوية براغ لانعكاس الأشعة من هذه المستويات هي 19.2° . تذكر أن

للألومونيوم تركيب مكعبي متمركز الوجة.

(ب) بفرض أن كثافة والوزن الذري للألومونيوم هما 2.7 g/cm^3 و 27.0 على

الترتيب، احسب قيمة عدد افوجادرو.

19- إذا كانت زاوية براغ للانعكاس من المستويات (110) في بلورة الحديد المتمركزة

الجسم هي 19.2° لأشعة ذات طول موجي $\lambda = 1.45^\circ$ ، احسب:

(أ) طول حافة المكعب لبلورة الحديد. وما هي زاوية براغ للانعكاس من المستويات

(111)؟

(ب) كثافة الحديد المتمركز الجسم إذا علمت أن الوزن الذري للحديد هو 55.8 ؟

20- أي الانعكاسات التالية سوف يغيب في الشبكة المتمركزة الجسم: (100)، (110)،

(111)، (200)، (210)، (220) و (211)؟

21- أي الانعكاسات التالية سوف يغيب في الشبكة المتمركزة الوجة: (100)، (110)،

(111)، (200)، (210)، (220) و (211)؟

22- عين الشبكة الإنقلابية للشبكة ثنائية الأبعاد التي لها $a = 1.25 \text{ \AA}$ و $b = 2.5 \text{ \AA}$

و $\gamma = 120^\circ$ ؟

23- بفرض أن أبعاد خلية الوحدة في الفضاء الحقيقي هي $a = 45 \text{ \AA}$ و $b = 6 \text{ \AA}$

و $c = 8 \text{ \AA}$ و $\alpha = \beta = 90^\circ$ و $\gamma = 120^\circ$ ، عين:

(أ) متجهات الأساس للخلية الإنقلابية.

(ب) حجم كل من الخلية الحقيقية والخلية الإنقلابية.

(ج) المسافة بين المستويات (210).

(د) زاوية براغ للانعكاس من المستويات السابقة.

24- ارسم الشبكة المقلوبة لشبكة مستوية مستطيلة (a,b)، ثم حدد مناطق بريليون

الثلاث الاولى فيها. ثم احسب طول اقصر متجهين في الشبكة.

25- اكتب مقالة عن الطرق التجريبية لدراسة حيود الأشعة السينية في المادة الصلبة.

26- أشعة سينية ذات طول موجي $\lambda = 1.5 \text{ \AA}$ تنعكس من المستويات (222) في بلورة

مكعبة لها خلية وحدة ذات $a = 5 \text{ \AA}$. احسب زاوية براغ θ للرتبة $n = 1$.

27- في البلورة المكعبة في السؤال السابق تم استبدال خلية الوحدة بخلية رباعي ذات

$a = 4.5 \text{ \AA}$ و $c = 6 \text{ \AA}$. احسب زاوية براغ θ للانعكاس (222)؟

28- احسب زاوية براغ θ للانعكاس (222) في بلورة المعيني التي لها $a = 3 \text{ \AA}$ و

$$b = 3.5 \text{ \AA} \text{ و } c = 8 \text{ \AA}$$

29- تسقط حزمة من الإلكترونات ذات طاقة 150 eV على عينة من مسحوق النيكل

(Ni). احسب اصغر زاويتي براغ التي يحدث عندها انعكاس وتداخل بناء إذا

علمت أن التركيب البلوري للنيكل هو مكعب متمركز الاوجه وطول ضلعه 3.25 \AA .

الباب السادس

اهتزازات الشبكة البلورية

Lattice Vibrations



الباب السادس

اهتزازات الشبكة البلورية

Lattice Vibrations

المحتوى

- 1-6 مقدمة
- 2-6 الموجات المرنة.
- 3-6 أنماط وكثافة الحالات للوسط المتصل.
- 4-6 الفونون.
- 5-6 التشتت المرن والتشتت غير المرن.
- 6-6 موجات الشبكة أحادية الذرة أحادية البعد.
- 7-6 أنماط اهتزاز الشبكة ثنائية الذرة أحادية البعد.
- 8-6 أنماط اهتزاز الشبكة ثلاثية الأبعاد.
- 9-6 كثافة الحالة في الشبكة.
- 10-6 امتصاص البلورات للأشعة تحت الحمراء.

الأهداف

بعد استكمال دراسة هذا الباب يجب أن يكون الدارس قادر على:-

- ✗ معالجة انتشار موجة مرنة في قضيب طويل في بعد واحد.
- ✗ استنتاج الصيغة الرياضية التي تصف كثافة الحالة للاهتزازات البلورية الناتجة عند انتشار موجة مرنة في الجسم الصلب في الأبعاد الثلاثة.
- ✗ تعريف وشرح أهمية مفهوم الفونون في فيزياء الجوامد.
- ✗ مناقشة التشتت المرن وغير المرن للموجات في الشبكة.
- ✗ مناقشة موجات الشبكة أحادية الذرة أحادية البعد من حيث استنتاج علاقة التشتت ومدى الأمواج الطويلة والمقارنة بين سرعة الطور وسرعة المجموعة.
- ✗ مناقشة تماثل الشبكة في فضاء q - ومنطقة بريليون الأولى واستنتاج عدد الأنماط في منطقة بريليون الأولى.
- ✗ مناقشة موجات الشبكة الثنائية الذرة أحادية البعد والثنائية الذرة ثنائية البعد.
- ✗ مناقشة خصائص الشبكة ثلاثية الأبعاد.
- ✗ شرح كيف تمكن العلماء من التحقق من امتصاص الأشعة تحت الحمراء بواسطة البلورة .

1-6 مقدمة

تعتبر الشبكة البلورية ذات أهمية خاصة نظراً للترتيب الطويل المدى الذي تتمتع به والذي ينتج قمم حادة في نماذج حيود الأشعة السينية وخاصة في الأبعاد الثلاثة. ومع ذلك فإن لاهتزازات الشبكة أهمية كبيرة تساهم في العديد من الخصائص الفيزيائية للجسم الصلب على النحو التالي:

✕ تنتج التوصيلية الحرارية في المواد العازلة من انتشار اهتزازات الشبكة والتي يمكن أن تكون كبيرة نسبياً (في الحقيقة، التوصيلية الحرارية للماس تساوى تقريباً ست مرات أكبر منها في حالة معدن النحاس).

✕ في التشتت تقلل اهتزازات الشبكة من الشدة النقطية وتسمح أيضاً بحدوث التشتت غير المرن حيث تتغير طاقة المشتت (النيوترون) نتيجة امتصاص أو توليد فونونات داخل الهدف.

✕ تقوم تفاعلات الإلكترون-الفونون بإعادة تطبيع (تسوية) خصائص الإلكترونات (حيث تجعلها أثقل).

✕ تأتي التوصيلية الفائقة من تشتت الإلكترون - فونون المتعدد بين الكثرونات الزمن المعكوس (time reversed).

في الأبواب السابقة تمت دراسة التركيب البنائي للبلورات وفي هذه الدراسة تم افتراض أن الذرات المكونة للبلورة ساكنة في أماكنها في الشبكة البلورية. في الحقيقة، لا

توجد الذرات في حالة سكون ولكنها تتذبذب حول مواضع اتزانها نتيجة الطاقة الحرارية. في هذا الباب سنناقش اهتزازات الشبكة بالتفصيل وتأثير ذلك على العديد من الخصائص البلورية. في البداية سوف نعتبر الاهتزازات البلورية في مدى الأطوال الموجية المرنة (الطويلة) والذي فيه سنقارن مختلف النماذج المستخدمة في تفسير الحرارة النوعية للمادة الصلبة. في هذا الصدد، وجد أن التفسير النظري يتفق مع التجارب العملية فقط عند استخدام المفاهيم الكمية. لذلك سندخل في دراستنا مفاهيم الفونون والوحدة الكمية للموجات الصوتية، ثم سنتبع ذلك بمناقشة لاهتزازات الشبكة، آخذين في الاعتبار الطبيعة المتفردة (غير المتصلة) للشبكة، وأخيرا سنناقش كيف تمكن العلماء من التحقق العملي لامتصاص الأشعة تحت الحمراء بواسطة البلورة.

2-6 الموجات المرنة ELASTIC WAVES

كما نعلم، يتكون الجسم في الحالة الصلبة من ذرات متفردة ويجب أخذ هذا التقرد في الاعتبار عند مناقشة اهتزازات الشبكة. تأتي الاهتزازات نظرا لصعوبة وصول درجة حرارة المادة إلى الصفر المطلق وكلما ارتفعت درجة الحرارة اتسع نطاق هذه الاهتزازات التي يطلق عليها الذبذبات الشبكية. تؤدي هذه الذبذبات إلى انتقال الموجات داخل البلورة. وعندما يكون الطول الموجي اكبر بكثير من الثابت البلورية يطلق على هذه الموجات اسم الموجات المرنة وهنا، يمكن غض النظر عن الطبيعة الذرية للمادة ومعالجة البلورة كوسط متصل (غير متفرد). تكون الموجات المرنة ذات التردد المنخفض

عبارة عن موجات صوتية.

سنفحص الآن انتشار موجة مرنة عبر بلورة على شكل قضيب مرن طويل ومتجانس، كما هو مبين بالشكل 1-6. بفرض أن موجة طولية تنتشر طوليا عبر القضيب، فإن القضيب سوف يعاني من إجهاد داخلي وهذا الإجهاد يولد انفعال طولي مما يسبب إزاحة نقط الشبكة عن مواضع الاتزان. دعنا نفترض أن الإزاحة المرنة عند النقطة x هي $u(x)$ لذا يمكن التعبير عن الانفعال الطولي، ξ ، بالصورة،

$$\xi = \frac{du}{dx}, \quad 1-6$$

حيث يمثل هذا مقدار التغير في الطول لكل وحدة طول. يعرف ثابت المرونة (أيضا بمعامل ينج) Y ، بأنه نسبة الإجهاد إلى الانفعال، أي أن،

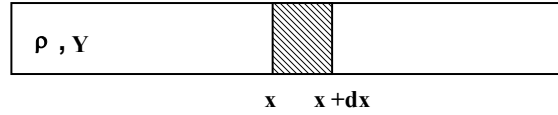
$$Y = \frac{\text{stress}}{\text{strain}} = \frac{\text{Force / area}}{\xi} = \frac{S}{\xi}$$

حيث S يعرف بالإجهاد (القوة لكل وحدة مساحة) وهو أيضا دالة في المسافة، x . من العلاقة السابقة نجد أن،

$$S = \xi Y, \quad 2-6$$

لكي نختبر ديناميكية القضيب، نختار عنصر طول من القضيب dx ، كما هو مبين بالشكل السابق. وبفرض أن كثافة مادة القضيب هي ρ ومساحة مقطعه A' فإنه يمكننا باستخدام قانون نيوتن الثاني كتابة معادلة الحركة لعنصر الطول على الصورة،

$$(\rho A' dx) \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = [S(x + dx) - S(x)] A'. \quad 3-6$$



الشكل 1-6

الطرف الأيسر من هذه المعادلة هو ببساطة حاصل الكتلة في العجلة، بينما يكون الطرف الأيمن عبارة عن محصلة القوة الناتجة عن الإجهاد المطبق على نهاية عنصر الطول من القضيب. وبوضع $\frac{\partial S}{\partial x} dx S(x+dx) - S(x) =$ عندما يكون عنصر الطول صغيراً، والتعويض عن S من المعادلة 2-6 ثم استخدام المعادلة 1-6، فإنه يمكن إعادة كتابة معادلة الحركة على الصورة،

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\rho}{Y} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0, \quad 4-6$$

والتي هي عبارة عن معادلة الموجة المعروفة جيداً في بعد واحد. بحل هذه المعادلة يمكن الحصول على سرعة المجموعة وأيضاً سرعة الطور. يكون حل هذه المعادلة (عبارة عن انتشار موجة مستوية) على الصورة

$$u = Ae^{i(qx - \omega t)}, \quad 5-6$$

حيث q هو العدد الموجي ($q = \frac{2\pi}{\lambda}$)، ω تردد الموجة و A سعة الموجة. بالتعويض بهذا الحل في المعادلة 4-6 نحصل على العلاقة،

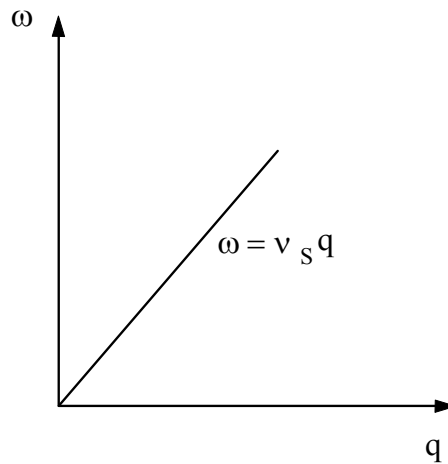
$$\omega = v_s q, \quad 6-6$$

حيث v_s ثابت. تربط العلاقة 6-6 بين التردد والعدد الموجي وتعرف هذه العلاقة بعلاقة الانتشار أو التشتت (dispersion)، حيث

$$v_s = \sqrt{\frac{Y}{\rho}}. \quad 7-6$$

وبما أن سرعة الموجة تساوى $\frac{\omega}{q}$ ، فإن الثابت v_s في المعادلة 6-6 يساوى هذه السرعة وتم التعبير عنها بدلالة خصائص الوسط بالمعادلة 7-6. لا تنسى أن الموجات المستخدمة في هذه المعالجة هي الموجات الصوتية المألوفة.

يبين الشكل 2-6 علاقة الانتشار للموجة المرنة وهو عبارة عن خط مستقيم له ميل يساوى سرعة الصوت. يتحقق هذا النوع من الانتشار، حيث ω ترتبط خطياً مع q ، بموجات مألوفة أخرى. على سبيل المثال، للموجة الضوئية التي تنتشر في الفراغ علاقة انتشار $\omega = cq$ ، حيث c سرعة الضوء. هذا بالإضافة إلى أن انتشار الموجات الصوتية في السوائل والغازات يحقق علاقات أخرى مماثلة.



الشكل 2-6 اعتماد التردد على العدد الموجى (منحنى الانتشار) للموجة المرنة. عادة، لا تتحقق العلاقة الخطية السابقة وقد يلاحظ وجود حيود عن الخطية ويعرف هذا الحيود بالانتشار. سنرى لاحقاً أن تأثير تفرد الشبكة (عدم اتصالها) يكون بإدخال

كمية ملحوظة من الانتشار إلى المنحنى المبين في الشكل 6-2، خاصة عندما يكون الطول الموجي قصير إلى الحد الذي يمكن مقارنته بالمسافة بين الذرات.

يمكن استخدام المعادلة 6-7 لتقدير قيمة معامل ينج. تبين القياسات أن القيم

النمذجية للمواد الصلبة هي $v_s = 5 \times 10^5 \text{ cm/s}$ و $\rho = 5 \text{ g/cm}^3$ ، والتي تؤدي إلى

$$Y = 5 \times (5 \times 10^5)^2 = 1.25 \times 10^{12} \text{ g/cms}^2$$

إلى هذا الحد، فإننا قمنا بمعالجة موجة طولية، والآن نستطيع تطبيق نفس النوع من التحليل على الموجات المستعرضة أو على موجات القص، ويتم هذا بادخال ثابت مرونة القص المناظر لمعامل ينج والذي يرتبط بسرعة موجة القص بعلاقة شبيهه بالمعادلة 6-7. حينئذ، يمكن استخدام ثابتي المرونة لوصف انتشار موجة مرنة اختيارية في الجسم الصلب.

في معالجتنا السابقة تم، ضمنا، افتراض أن بلورة الجسم الصلب تكون موحدة الخصائص (متجانسة) في جميع الاتجاهات. ومع ذلك، وفي الحقيقة، فإن البلورة على غير ذلك، الأمر الذي يجب أخذه في الاعتبار، وفيما يلي سنشرح تأثير ذلك على خصائص المرونة بشكل مبسط.

عموما، يؤدي عدم التوحد في الخصائص إلى إدخال عدد من ثوابت المرونة اكبر من ثابتي المرونة المطلوبين في حالة الصلب المتجانس. تبين اعتبارات التماثل، بالرغم من أن الكثير من تلك الثوابت ترتبط فيما بينها، الحقيقة التي تنتج تناقضا كبيرا في عدد

الثوابت المستقلة. على سبيل المثال، في الحالة المهمة للبلورة المكعبة يمكن رؤية انه يلزم فقط ثلاثة ثوابت مستقلة و يرمز لها بالرموز C_{11} و C_{12} و C_{44} . يربط الثابت C_{11} الإجهاد والانفعال الإنضغاطي على امتداد الاتجاه [100]، أي في اتجاه المحور x، بينما يرتبط الثابت C_{44} الإجهاد والانفعال القصي في نفس الاتجاه، كما يربط الثابت C_{12} الإجهاد الإنضغاطي في اتجاه ما والانفعال في اتجاه آخر، ربما يكون ذلك، مثلاً، اتجاه - x و اتجاه - y.

يمكن تعيين الثوابت الثلاثة عن طريق قياس سرعات الصوت في اتجاهات معينة في البلورة بطريقة عملية. على سبيل المثال، يمكن توضيح أن سرعات الموجات الطولية وموجات القص على امتداد الاتجاه [100] هي $\sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}}$ و $\sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}}$ على الترتيب والتي يمكن حسابها بناء على المعادلة 2-6. يمكن تعيين الثابت C_{12} من سرعة الموجة الطولية على امتداد الاتجاه [111] والتي وجد أنها تساوى $\sqrt{(C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44})/3\rho}$.

3-6 أنماط الاهتزاز وكثافة الحالات للوسط المتصل

MODES OF VIBRATIONS AND DENSITY OF STATES OF A CONTINUOUS MEDIUM

3-6-1 حالة البعد الواحد

عندما اعتبرنا موجات مرنة تنتشر خلال قضيب طويل في بعد واحد، كما هو مبين

بالشكل 1-6 كان الحل على الصورة المعطاة بالمعادلة 5-6، أي أن

$$u = Ae^{iqx}.$$

8-6

هنا تم حذف عامل الزمن لأنه غير مناسب للمناقشة الحالية. سنعتبر الآن تأثير الشروط

الحدودية على الحل 6-8. تتعين الشروط الحودية بواسطة القيود الخارجية المطبقة على نهايات القضيب. على سبيل المثال، قد يتم تثبيت النهايات بينما يهتز داخل القضيب أو تترك النهايات حرة لتهتز مع القضيب. الشرط الحدي، الذي سوف نجده أكثر مناسبة والذي سيستخدم خلال المناقشات التالية، يعرف بالشرط الحدي الدوري، ونعني بذلك أن الطرف الأيمن من القضيب مقيد بالشكل الذي معه يكون دائما في نفس حالة تذبذب الطرف الأيسر للقضيب. يمكن تخيل ذلك بفرض أنه عندما يتشوه القضيب ليصنع شكل دائرة فإن الموجة عند الطرف الأيمن للقضيب تتفق وتتطبق على نفسها عند الطرف الأيسر. بفرض أن طول القضيب هو L وبفرض أننا أخذنا نقطة الأصل عند الطرف الأيسر فإن شرط الدورية يعني أن

$$u(x=0) = u(x=L), \quad 9-6$$

حيث أن $u(x)$ هو الحل المعطى في المعادلة 6-8. بالتعويض بالمعادلة 6-8 في 6-9 نجد أن

$$e^{iqL} = 1. \quad 10-6$$

تفرض هذه المعادلة شرطا على القيم المقبولة للعدد q : أي أن قيم q التي تحقق المعادلة 6-10 تكون هي فقط القيم المسموحة. وحيث أن $e^{in2\pi} = 1$ لأي عدد صحيح n ، ينتج من المعادلة 6-10 أن قيم q المسموحة تكون،

$$q = n \frac{2\pi}{L}, \quad 11-6$$

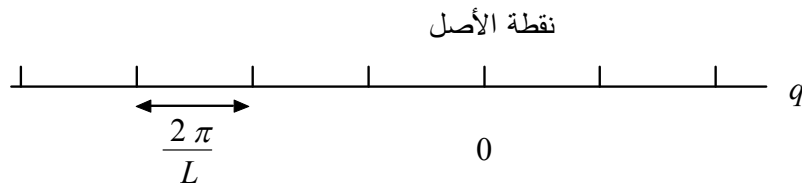
حيث $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ وهكذا. عند رسم هذه القيم على امتداد محور q فإنها تكون

شبكة من النقاط الفراغية موزعة بانتظام في بعد واحد، كما يبين الشكل 3-6. عندما يكون طول القضيب طويلاً فإن المسافات البينية تصبح صغيرة وتكون النقاط شبكة شبه متصلة.

تمثل كل قيمة من قيم q في المعادلة 6-11 (أو كل نقطة في الشكل 3-6) نمط اهتزاز. أفترض أننا اخترنا فترة اعتباطية dq في فضاء q ، ونبحث عن عدد الأنماط التي لها قيم q تقع في هذه الفترة. نفترض هنا أن L كبيرة، بحيث أن النقاط تكون شبه متصلة وهذا بالطبع حقيقي للأشياء العينية (الماكروسكوبية macroscopic) التي نتعامل معها. وبما أن المسافة البينية للنقاط هي $2\pi/L$ ، فإن عدد الأنماط يكون مساوياً للمقدار

$$\frac{L}{2\pi} dq. \quad 12-6$$

ولكن يرتبط العدد الموجي q والتردد ω معا بواسطة علاقة انتشار، ويمكننا أنا نبحت عن عدد الأنماط في مدى من التردد $d\omega$ الذي يقع بين ω و $\omega + d\omega$.



الشكل 3-6 القيم المسموحة للعدد q .

تعرف كثافة الحالات $(g(\omega))$ في مدى من التردد، $d\omega$ ، بأنه عدد أنماط الاهتزاز لكل وحدة تردد في هذا المدى، وبالتالي فإن $g(\omega)d\omega$ تعطي العدد الكلي للأنماط في هذا المدى. بمقارنة هذا التعريف مع المعادلة 6-12 يمكننا كتابة $g(\omega)d\omega = \left(\frac{L}{2\pi}\right) dq$ أو

$g(\omega) = \left(\frac{L}{2\pi} \right) \left(\frac{dq}{d\omega} \right)$. نلاحظ من الشكل 4-6 أن حساب $g(\omega)$ يجب أن يتضمن الأنماط

الواقعة في الحيز السالب للعدد الموجي q كما يتضمن الأنماط الواقعة في الحيز الموجب.

تمثل الأنماط الأولى الموجات التي تنتشر إلى اليسار، بينما تمثل الأنماط الثانية تلك

الموجات التي تنتشر إلى اليمين. ويكون التأثير هو أن نضرب التعبير السابق لكثافة الحالة

$g(\omega)$ في 2. أي أن

$$g(\omega) = \frac{L}{\pi} \left(\frac{dq}{d\omega} \right). \quad 13-6$$

تمثل المعادلة 13-6 عدد أنماط الاهتزاز الواقعة في مدى التردد $d\omega$ ، وهذه هي

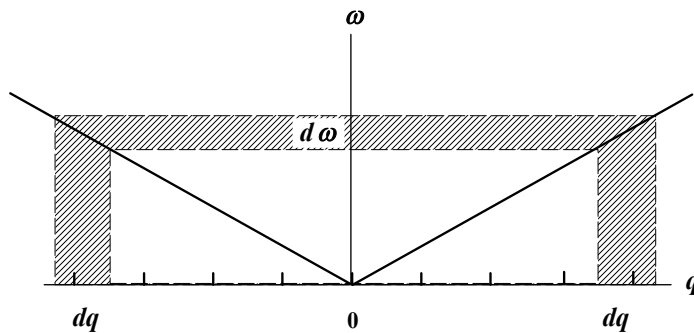
النتيجة العامة في حالة البعد الواحد، ومن هذه المعادلة نرى أن كثافة الحالات $g(\omega)$

تتبع بواسطة معادلة الانتشار. ومن العلاقة الخطية المعطاة في معادلة الانتشار 6-6،

$$\left(\frac{d\omega}{dq} \right) = v_s, \text{ نحصل على}$$

$$g(\omega) = \frac{L}{\pi} \frac{1}{v_s}, \quad 14-6$$

ويتضح من هذه المعادلة أن $g(\omega)$ مقدار ثابت لا يعتمد على ω .



الشكل 4-6 يتكون منحنى التشتت من جزئين يمثلان الموجات التي تنتشر في الاتجاهين الأيمن والأيسر.

6-3-2 حالة الأبعاد الثلاثة

الآن، سنوسع المعالجة والنتائج التي حصلنا عليها في الفصل السابق لتغطي حالة

الأبعاد الثلاثة. في هذه الحالة وعلى غرار المعادلة 6-8 يكون الحل كالآتي،

$$u = Ae^{i[q_x x + q_y y + q_z z]} = Ae^{i\bar{q} \cdot \bar{r}}, \quad 15-6$$

حيث تم وصف الانتشار بمتجه الموجة \bar{q} ، والذي له اتجاه يحدد الانتشار وله سعة تتناسب

عكسيا مع الطول الموجي. هنا، نحتاج مرة ثانية أن نتساءل عن تأثير الشروط الحدودية.

ومن اجل التبسيط، نعتبر عينة على شكل مكعب له طول L . وبتطبيق الشروط الحدودية

الدورية نجد أن قيم q المسموحة يجب أن تحقق الشرط $e^{i(q_x L + q_y L + q_z L)} = 1$. أي أن القيم

تعطى بالعلاقة

$$(q_x, q_y, q_z) = \left(n \frac{2\pi}{L}, m \frac{2\pi}{L}, l \frac{2\pi}{L} \right), \quad 16-6$$

حيث n و m و l أي أعداد صحيحة.

عند رسم هذه القيم في فضاء العدد الموجي، q ، كما هو مبين بالشكل 6-5،

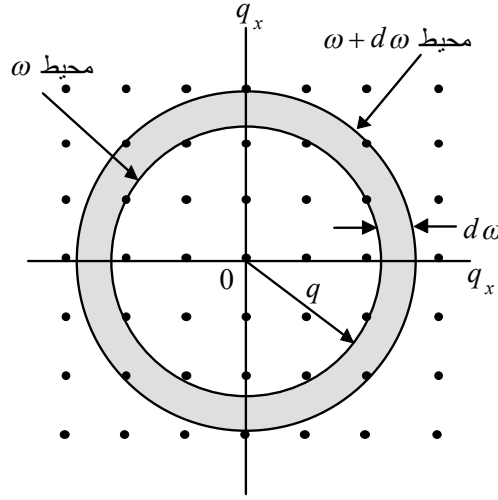
نحصل على شبكة مكعبة ثلاثية الأبعاد. يكون الحجم المخصص لكل نقطة في فضاء q

$$\text{هذا هو } \left(\frac{2\pi}{L} \right)^3.$$

تعين كل نقطة في الشكل 6-5 نمط واحد. نفترض إننا نريد إيجاد عدد الأنماط

داخل كرة نصف قطرها هو q . يكون حجم هذه الكرة هو $\frac{4\pi}{3} q^3$ ، وحيث أن حجم كل

نقطة هو $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$ ، فإن عدد الأنماط هو



الشكل 5-6 مخطط يمثل مقطع مستوى لقيم q المسموحة لموجة تنتشر في الأبعاد الثلاثة.

$$\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{4\pi}{3} q^3 = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} q^3, \quad 17-6$$

حيث $V = L^3$ هو حجم العينة. تعطى المعادلة السابقة عدد كل الموجات المسموحة والتي

لها q اقل من قيمة معينة، والتي تنتشر في كل الاتجاهات. بإجراء التفاضل للمعادلة

السابقة بالنسبة إلى q ، نحصل على

$$\frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi q^2 dq, \quad 18-6$$

وتعطى هذه المعادلة عدد الأنماط، أو النقط، في القشرة الكروية التي لها أنصاف الأقطار

q و $q + dq$ في الشكل 5-6.

كما ذكرنا من قبل، تعرف كثافة الحالة $g(\omega)$ بالشكل الذي يعطى التعبير $g(\omega)d\omega$

عدد الأنماط التي يقع ترددها في الفترة $(\omega, \omega + d\omega)$. يمكن الحصول على عدد الأنماط

من المعادلة 18-6 بتحويل المتغير من q إلى ω ، والذي يمكن إنجازه باستخدام علاقة

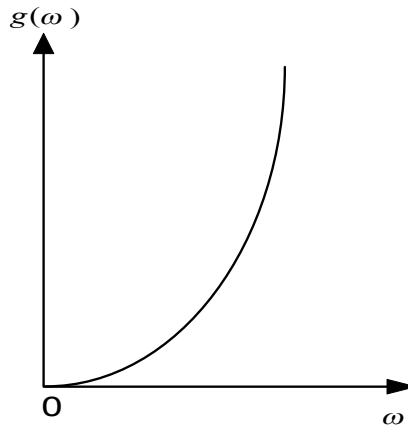
الانتشار. باستخدام العلاقة $\omega = v_s q$ والمعادلة 6-6 نجد

$$g(\omega)d\omega = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \left(\frac{\omega}{v_s} \right)^2 \frac{d\omega}{v_s}.$$

يعطى هذا التعبير عدد النقط بين السطح الذي له تردد ثابت ω والسطح الذي له تردد ثابت $\omega + d\omega$. الأسطح المرسومة لكثافة الحالة في فضاء q هي أسطح كرات تحتوى فيما بينها على القشرة الكروية المبينة في الشكل 6-5. والتعبير السابق للمقدار $g(\omega)d\omega$ هو عدد النقط داخل القشرة.

وطبقا للمعادلة السابقة، فإن كثافة الحالة $g(\omega)$ تعطى بالعلاقة التالية،

$$g(\omega) = \frac{V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{v_s^3}. \quad 19-6$$



الشكل 6-6 كثافة الأنماط أو الحالات في الوسط المرن.

الشكل 6-6 يوضح العلاقة بين كثافة الحالة، $g(\omega)$ المحسوبة طبقا للمعادلة 19-6

والتردد ومن الشكل نجد أن $g(\omega)$ تزداد مع ω^2 ، على خلاف حالة البعد الواحد التي تكون فيها $g(\omega)$ مقدار ثابت. تعكس الزيادة في كثافة الحالة الحالية حقيقة أن حجم القشرة

الكروية في الشكل 6-5 يزداد مع q^2 وبالتالي مع ω^2 ، حيث تتناسب ω مع q .

يبقى تعديل أخير ضروري في هذه المعالجة. في المناقشة السابقة تم افتراض أن كل قيمة للعدد q تتضمن نمط واحد، وهذا ليس حقيقي تماماً في الحالة ثلاثية الأبعاد، لأن لكل قيمة من قيم q ربما تكون الموجة طولية أو مستعرضة، وفي الحقيقة، توجد ثلاثة أنماط مختلفة تصاحب نفس قيمة q : نمط طولي ونمطين مستعرضين. تختلف علاقات الانتشار للموجات الطولية عنها في حالة الموجات المستعرضة بسبب اختلاف سرعاتها، ولكن لو أهملنا هذا الاختلاف واعتبرنا سرعة مشتركة فإنه يمكننا الحصول على الكثافة الكلية للحالات من المعادلة 6-19 وذلك بضربها في المعامل 3. أي أن،

$$g(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{v_s^3} \quad 20-6$$

سنستفيد من هذه الصيغة لاحقاً فيما يخص نظرية ديبي (Debye) للحرارة النوعية. لاحظ أن $g(\omega)$ بالصدفة تتناسب مع حجم العينة V . في كثير من الأحيان يكون من الملائم حذف هذا العامل (الحجم) وذلك بوضعنا للحجم يساوي الوحدة.

وفيما يتعلق باختيار الشروط الحدودية يجب اخذ الملاحظة الآتية في الاعتبار. يمكن رؤية أنه عندما تكون الأطوال الموجية للأنماط صغيرة مقارنة مع أبعاد العينة فإن دالة كثافة الحالات، $g(\omega)$ ، لا تعتمد على اختيار الشروط الحدودية. وعند استخدامنا للشروط الدورية يكون ذلك بهدف جعل المعالجة أكثر سهولة من الناحية الرياضية.

4-6 الفونون THE PHONON

عند انتشار موجة صوتية في شبكة بلورية افترض العالم اينشتاين أن طاقة

المتذبذبات يتم التعبير عنها بواسطة ميكانيكا الكم بدلا من الميكانيكا التقليدية، أي انه افترض أن جميع المتذبذبات تهتز بنفس التردد الزاوي، ω . علاوة على ذلك فقد افترض اينشتاين أن طاقة المتذبذب (الذرة) عبارة عن كمية مقننة ويمكن كتابتها على الصورة

$$\varepsilon_n = n\hbar\omega,$$

حيث n عدد صحيح موجب أو صفر، أي $n=0,1,2,3,\dots$ و ω مقدار ثابت عبارة عن التردد الزاوي. تكون الطاقة الكلية للنظام (البلورة) هو المجموع الجبري لكل مناسب الطاقة للذرات الموجود. يتضح من المعادلة السابقة أن طاقة المتذبذب يمكن أن تكون في الحالة الأرضية هي صفر ($\varepsilon_0 = 0$ عند $n=0$) أو في إحدى الحالات المثارة والتي هي عبارة عن قيم مقننة أي أنها مضاعف صحيح للمقدار $\hbar\omega$ (أي أن $\varepsilon_n = n\hbar\omega$). بناء على ما سبق فإن مناسب الطاقة تتفصل بعضها عن البعض بمقدار ثابت من الطاقة يساوي $\hbar\omega$. تم تعريف المتذبذب الذي له كتلة تساوي كتلة الذرة وله طاقة تساوي $\hbar\omega$ بالفونون، أي أن الفونون هو موجة يمكن أن تمتص أو تنبعث بواسطة الشبكة أثناء الاهتزاز الحراري ولها وحدة الطاقة الكمية $\hbar\omega$.

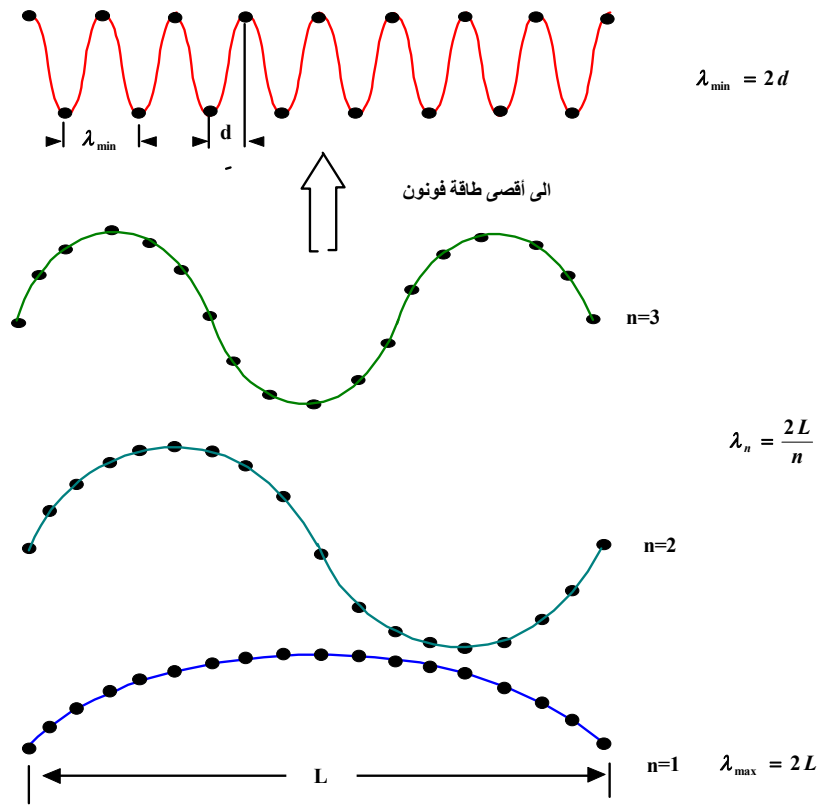
طبقا لما سبق، عند اهتزاز ذرات شبكة أحادية البعد، كما هو موضح بالشكل 6-7

فإن الأطوال الموجية للفونونات المتولدة سوف تأخذ القيم $\lambda_n = \frac{2L}{n}$ والتي تقع بين أقصى

طول موجي، $\lambda_{\max} = 2L$ ، وأقل طول موجي، $\lambda_{\min} = 2d$ ، حيث d المسافة بين الذرات و

L طول المستوى الذري.

يمكن توضيح المفهوم الفيزيائي للفونون باعتبار التشابه بين الاهتزاز الحراري للبلورة والإشعاع الحراري المنبعث من الجسم الأسود الذي وجده العالم بلانك. افترض بلانك أن الجسم الأسود يكون ممتلئاً بإشعاع حراري وفي حالة اتزان ويتم معاملة هذا الإشعاع كغاز من الفونونات طاقة كل منها تساوى $\hbar\omega = h\nu$ وكمية تحركه تساوى $p = \frac{\hbar\omega}{c} = \frac{h}{\lambda}$ ، حيث c سرعة الضوء.



الشكل 6-7 اهتزاز شبكة خطية.

بالمثل يمكن معاملة الموجات المرنة في الجسم الصلب كغاز من الفونونات طاقة كل منها تساوى $\hbar\omega = h\nu$ وكمية تحركها تساوى $p = \frac{\hbar\omega}{v} = \frac{h}{\lambda} = \hbar q$ ، حيث v سرعة الصوت و q هو العدد الموجي. باختصار يمكن القول أنه على غرار اعتبار أن الموجات الكهرومغناطيسية عبارة عن سيل من الفوتونات (تنتشر بسرعة الضوء)، فإنه يمكن

اعتبار أن الموجات الصوتية المرنة عبارة عن سيل من الفونونات (تنتشر بسرعة الصوت). يوجد العديد من الشواهد التجريبية التي أكدت أن طاقة الموجات الصوتية في البلورة مقننة (أي على شكل فونونات) ومنها: (1) تمكن العلماء من التفسير الصحيح للحرارة النوعية للصلب فقط عند افتراض أن طاقة المتذبذبات تكون مقننة. (2) في تجارب التشتت غير المرن للأشعة السينية والنيوترونات عند اصطدامها بذرّات الشبكة يحدث تغير في طاقة الأشعة. وأكدت التجارب أن هذا التغير يتناسب مع اختفاء أو ظهور فونون أو أكثر. على كل حال، فإن لمفهوم الفونون أهمية بالغة في فيزياء الحالة الصلبة وسننظر إليه بالتفصيل لاحقاً عند دراسة تفاعلات الفونون مع الأشكال الأخرى للإشعاع مثل الأشعة السينية والنيوترونية والضوء.

5-6 التشتت المرن والتشتت غير المرن ELASTIC AND NON-ELASTIC SCATTERING

بفرض أن العدد الموجي للفونون هو q فإنه يتفاعل مع المجالات والجسيمات وكأن له كمية تحرك $\hbar q$. وبفرض أن الفونون طويل الموجة فإنه سيرى الوسط الصلب كوسط متصل ويكون تشتته مرّن ويكون شرط الحيود هو،

$$\vec{K}' = \vec{K} + \vec{G} \quad 21-6$$

حيث \vec{G} و \vec{K} و \vec{K}' هو متجهات الشبكة المقلوبة والفونون الساقط والفونون المشتت على نحو الترتيب. إما في حالة التشتت غير المرّن فإن التفاعل يؤدي إلى اختفاء أو ظهور فونون جديد طبقاً لمبدأ حفظ كمية الحركة ويكون شرط الحيود هو

$$\vec{K}' \pm \vec{q} = \vec{K} + \vec{G}$$

22-6

حيث تدل الإشارة السالبة على اختفاء (امتصاص) فونون وتدل الإشارة الموجبة على ظهور فونون جديد.

بالإضافة إلى التفاعل السابق وعند سقوط فوتونات على الشبكة كما في حالة الأشعة السينية يحدث تشتت للفوتون بواسطة فونونات الشبكة عندما تكون طويلة الموجة (أكبر بكثير من ثوابت الشبكة)، وفي هذه الحالة، سوف يعتبر الفونون الشبكة كوسط متصل. بفرض فوتون له تردد زاوي ω ومتجه موجة \vec{K} يسقط على شبكة لها معامل انكسار i_r ، حيث $K = \frac{i_r \omega}{c}$ و c هي سرعة الضوء. ينتج عن التفاعل تغير متجه موجة الفوتون من \vec{K} إلى \vec{K}' وتردده من ω إلى ω' ويتغير اتجاهه وينتج أيضا ظهور أو اختفاء فونون، كما هو موضح في الشكل 6-8. بفرض أن هذا التفاعل يؤدي إلى ظهور فونون له متجه موجة \vec{q} وتردد زاوي $\omega_{ph} = v_s q$ ، حيث v_s سرعة الصوت، فإن مبدأ حفظ الطاقة يؤدي إلى العلاقة التالية

$$\hbar\omega = \hbar\omega' + \hbar\omega_{ph}.$$

23-6

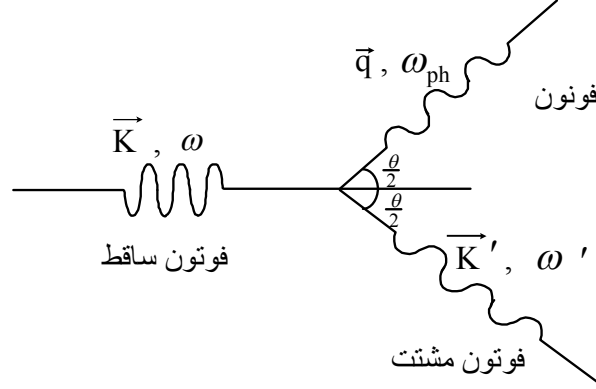
من مبدأ حفظ كمية الحركة نحصل على،

$$\vec{K} = \vec{K}' + \vec{q}.$$

24-6

وحيث أن سرعة الضوء أكبر بكثير من سرعة الصوت ($c \gg v_s$) فإن طاقة الفونون تمثل جزء صغير جدا من طاقة الفوتون وبالتالي فإن تردد الفونون المتولد تكون أصغر بكثير من تردد الفوتون ($\omega \gg \omega_{ph}$) وهذا يؤدي إلى أن يكون تردد الفوتون

المشتت تقريبا مساويا لتردد الفوتون الساقط ($\omega \approx \omega'$) وبالتالي $K \approx K'$ ومن مثلث القوى للتشتت نحصل على اتجاه الفونون من العلاقة الآتية ،



الشكل 6-8 تشتت فوتون وظهور فونون.

$$q \approx 2K \sin \frac{\theta}{2}$$

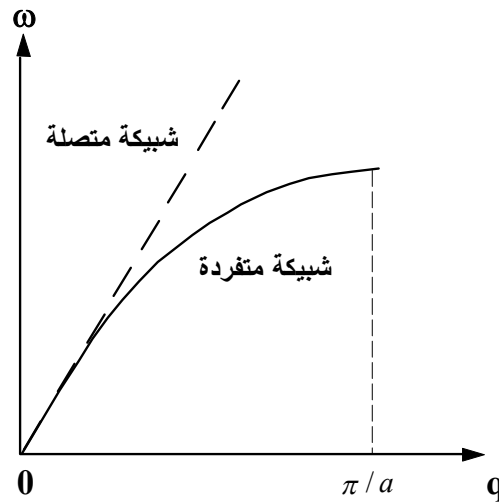
وحيث أن $K = \frac{i_r \omega}{c}$ و $\omega_{ph} = v_s q$ ، وبعد التعويض في المعادلة السابقة نحصل على الزاوية بين تردد الفونون وتردد الفوتون المشتت من العلاقة الآتية.

$$\omega_{ph} \approx \frac{2v_s}{c} \omega \sin \frac{\theta}{2}.$$

ومن هذه المعادلة يتضح أن زاوية التشتت تعتمد على النسبة بين تردد كل من الفونون والفوتون.

في جميع المعالجات السابقة، تم إهمال تفرد الشبكة واعتبارها كوسط متصل، حيث تم افتراض أن علاقة التشتت للفونون علاقة خطية ($\omega = v_s q$) وهذا صحيح فقط عند اعتبار الأطوال الموجية الأكبر بكثير من ثوابت البلورة. في هذا الفصل سوف نتخلى عن هذا التبسيط الخطير في المعالجة ونعتبر أن الجسم الصلب يتكون من ذرات متفردة

(منفصلة). عندما يتناقص الطول الموجي ويزداد العدد الموجي q ، فإن الموجة ترى الذرات وتبدأ في التشتت. يؤدي هذا التشتت إلى إعاقة انتشار للموجة وبالتالي إلى تقليل سرعتها. ومع زيادة q أكثر، يصبح التشتت أكثر فعالية (حيث تزداد قوة التشتت) ويؤدي ذلك إلى تناقص سرعة الموجة. يظهر هذا التأثير في منحنى الانتشار على شكل انحناء إلى أسفل، كما يبين الشكل 6-9 (لان ميل المنحنى هو سرعة الموجة).



الشكل 6-9 منحنى الانتشار المتوقع للشبكة المتفردة.

الآن، سنرى تأثير منحنى الانتشار التي حصلنا عليه من حل معادلة الحركة للشبكة والذي له الشكل العام، كما هو مبين في الشكل السابق. ومن أجل التبسيط سنبدأ بمناقشة شبكة أحادية البعد.

6-6 موجات الشبكة أحادية الذرة أحادية البعد

LATTICE WAVES OF ONE-ATOMIC LINEAR CHAIN

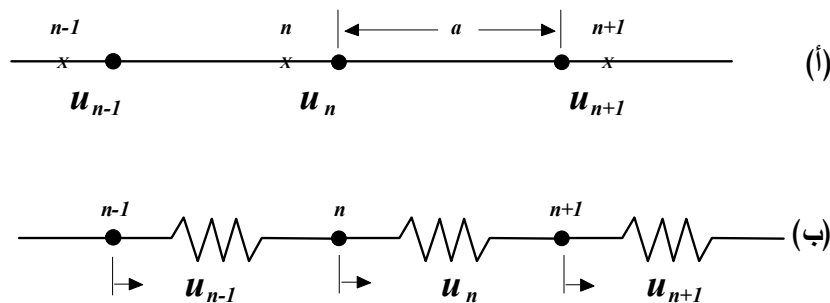
يحدث داخل الشبكة العديد من التفاعلات الموجية (الديناميكية) والتي تأتي من

وجود إثارات أولية (فونونات) لها جميع خصائص الازدواجية الموجية-الجسيمية طبقاً لقاعدة دي برولي.

6-6-1 علاقة الانتشار DISPERSION RELATION

لتعيين علاقة التشتت، نبدأ بأبسط الحالات وهي حالة شبكة أحادية الذرة أحادية البعد مع تفاعل مع أقرب الجيران، كما هو مبين بالشكل 6-10. عندما تكون الشبكة متزنة نجد أن كل ذرة تكون ساكنة في مكانها في الشبكة وتبعد كل ذرة عن الأخرى مسافة تساوي ثابت الشبكة (a). عند بدء الشبكة في الاهتزاز تراح كل ذرة مسافة صغيرة عن موقعها. وبسبب أن الذرات تتفاعل بعضها مع بعض فإن جميع الذرات سوف تتحرك معا ويجب أن نأخذ حركة الشبكة ككل في الاعتبار.

باعتبار الذرة رقم n، فإن القوة التي تمارس عليها من قبل الذرة المجاورة رقم (n+1) تعطى بالعلاقة $-\alpha(u_{n+1}-u_n)$ ، حيث u_n و u_{n+1} هما إزاحات الذرة رقم n و الذرة رقم (n+1) على وجه الترتيب و $(u_{n+1}-u_n)$ تمثل الإزاحة النسبية. يعرف المتغير α بثابت القوة بين الذرات.



الشكل 6-10 (أ) إزاحات شبكة أحادية الذرة أحادية البعد حيث تمت المبالغة في مقدار

الإزاحة لغرض التوضيح، (ب) تم تمثيل كل ذرة بمتذبذب (قوة مرنة) وتشير الأسهم إلى اتجاه الإزاحة.

تعرف فرضية أن القوة تتناسب مع الإزاحة النسبية بالتقريب التوافقي ومن المتوقع أن يتحقق بشكل جيد عندما تكون الإزاحة صغيرة. وهذا التقريب يكافئ قانون هوك المعروف من نظرية المرونة. وهكذا نفترض أن الذرات مرتبطة فيما بينها بزنجيركات مرنة. وبالمثل، فإن القوة التي تمارس على الذرة رقم n من قبل الذرة المجاورة رقم $(n-1)$ تعطى بالعلاقة $-\alpha(u_{n-1} - u_n)$. بتطبيق قانون نيوتن الثاني على حركة الذرة رقم n نحصل على

$$M \frac{d^2 u_n}{dt^2} = -\alpha(u_{n+1} - u_n) - \alpha(u_{n-1} - u_n) = -\alpha(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1})$$

حيث M هي كتلة الذرة. ويمكن إعادة كتابة هذه المعادلة على الصورة

$$M \ddot{u} = -\alpha(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) \quad 25-6$$

لاحظ أننا أهملنا التفاعل بين الذرة n وباقي الذرات ما عدا أقرب الجيران. ولحل هذه المجموعة اللانهائية من المعادلات التفاضلية دعنا نشترط أن المعادلة لا تتغير مع إزاحة النظام ككل بمقدار مضاعف صحيح لثابت الشبكة a . يتحقق هذا الشرط بأن يكون الحل على الصورة

$$u_n = A e^{i(qX_n - \omega t)} \quad 26-6$$

حيث X_n هو موضع الاتزان للذرة رقم n ، حيث $X_n = na$. المعادلة السابقة ما هي إلا معادلة موجة مستوية ولكن في الاحداثي المقنن na وتمثل كل الذرات التي تهتز بنفس

التردد ω ولها نفس السعة A . كما هو متوقع، فإن في مثل هذه الموجة تكون أطوار الذرات متشابهة (معشقة) بالشكل الذي معه يزداد الطور بانتظام من ذرة إلى الذرة التالية بمقدار qa .

بالتعويض من المعادلة 25-6 في 26-6 والتخلص من الكميات المشتركة

وإستخدام صيغة أويلر، $e^{iy} + e^{-iy} = 2\cos y$ ، نحصل على

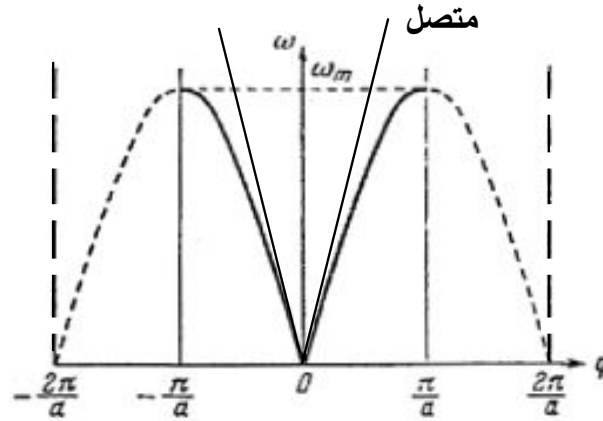
$$\omega = \omega_m \left| \sin \frac{qa}{2} \right|, \quad \omega_m = 2\sqrt{\frac{\alpha}{M}}. \quad 27-6$$

يشترط أن تكون ω في هذه المعادلة موجبة فقط وذلك بسبب المعنى الفيزيائي للتردد. تسمى المعادلة 27-6 بقانون الانتشار، وتختلف عن علاقة الانتشار للوتر المتجانس الذي يكون على الصورة $\omega = sq$.

عند رسم العلاقة البيانية بين q و ω نحصل على منحنى ذي فرعين أحدهما موجب والآخر سالب، كما يبين الشكل 6-11. من هذا الشكل يتضح أن علاقة الانتشار في فضاء- q عبارة عن دالة جيبية لها زمن دوري مقداره $\frac{2\pi}{a}$ وحد أقصى للترددات الموجية التي يمكن أن تنتشر على هذه الشبكة، ω_m .

لعلاقة الانتشار (المعادلة 27-6) أيضا العديد من الخصائص المهمة والمثيرة

للاهتمام وسوف نختبرها الآن بشئ من التفصيل ليس بالتطبيق في حالة شبكة البعد الواحد فقط ولكن في حالات البعدين والأبعاد الثلاثة أيضا.



الشكل 11-6 منحنى الانتشار لشبيكة أحادية البعد مع تفاعل مع اقرب جوار وهو عبارة عن موجة جيبيه.

2-6-6 مدى الأمواج الطويلة

بما أن منحنى الانتشار يكون دورياً ومتماثلاً حول نقطة الأصل، يمكننا حصر الاهتمام، على سبيل المثال، في المدى $0 < q < \pi/a$. نجد أن الترددات تغطي المدى المتصل $0 < \omega < \omega_m$ وهذه الترددات فقط هي التي تنتقل بواسطة الشبيكة، بينما يتم إعاقة الترددات الأخرى بشدة. ويمكن القول أن الشبيكة تعمل كمرشح ميكانيكي للتمرير-المنخفض.

بالنسبة للأمواج ذات الأطوال الموجية الكبيرة تكون قيمة q صغيرة جداً (أي أن $qa \ll 1$) ولذلك يمكن اعتبار أن الجيب مساوياً للزاوية، أي أن $\sin \frac{qa}{2} = \frac{qa}{2}$ ويصبح التردد الزاوي (علاقة الانتشار) على الصورة،

$$\omega = \left(\frac{\omega_m a}{2} \right) q, \quad 28-6$$

والتي هي عبارة عن علاقة خطية بين ω و q . وهذه العلاقة متوقعة لأنه في هذا المدى

تتصرف الفونونات ككمية متصلة مرنة. تعطى سرعة الصوت v_s بالعلاقة $v_s = \frac{\omega_m a}{2}$.

يمكن استخدام المعادلة السابقة لربط ثابت القوة بين الذرات، α ، مع معامل يانج Y ، كما يلي.

نفترض شبكة مكعبة كالمبينة بالشكل 6-12. يحقق اهتزاز المستويات الذرية نفس

المعادلات كما هي في حالة الشبكة أحادية البعد. بمساواة سرعات الصوت التي نحصل

عليها من المعادلة 6-7 نجد أن $v_s = \sqrt{\frac{Y}{\rho}}$ وباستخدام المعادلة 6-27 والتعويض عن

$$\omega_m = \sqrt{\frac{4\alpha}{M}} \text{ و } \rho = \frac{M}{a^3} \text{ نحصل على}$$

$$\alpha = aY \quad 28-6$$

وهذه العلاقة مفيدة لتعيين قيمة α . بالتعويض بقيم فعلية لثابت الشبكة ومعامل يانج

نحصل على $\alpha = (5 \times 10^{-8})(10^{11}) = 5 \times 10^3 \text{ dyne/cm}$. لاحظ انه مع زيادة q فإن منحنى

الانتشار يحيد عن الخطية وينحني لأسفل كما هو متوقع و واضح في الشكل 6-9 وأخيرا

يتشعب عند أقصى تردد ω_m ، حيث،

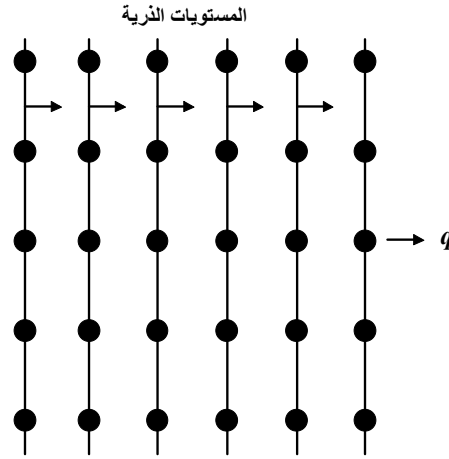
$$\omega_m = \sqrt{\frac{4\alpha}{M}} \quad 30-6$$

يكون اعتماد هذا التردد على كل من ثابت القوة وكتلة الذرة كما هو متوقع في حالة

المتذبذب التوافقي. بفرض أن $\alpha = 5 \times 10^3 \text{ dynes/cm}$ و $M = 2 \times 10^{-24} \text{ g}$ (الذرة

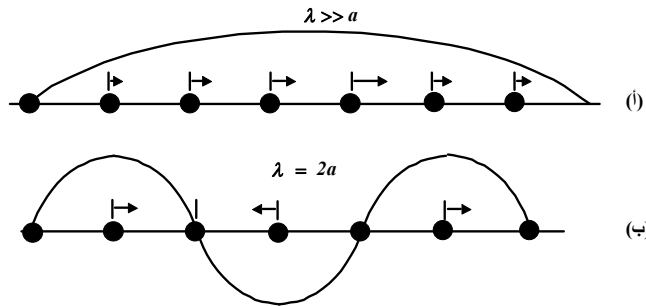
الهيدروجين)، يمكن حساب قيمة ω_m حيث $\omega_m = 2 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ وهي في مدى الأشعة تحت

الحمراء.



الشكل 6-12 حركة المستويات الذرية.

يمكن أيضا فهم النتيجة السابقة لسلوك منحنى التشتت في المدى $0 < q < \pi/2$ بطريقة كيفية كالآتي: عندما تكون قيم q صغيرة، تكون $\lambda \gg a$ وتتحرك الذرات معا في طور واحد، كما هو مبين في الشكل 6-13 (أ). ولهذا تكون قوة الاسترجاع (المختزنة) لذرة ما نتيجة تأثير الذرات المجاورة صغيرة، وهذا هو سبب أن ω تكون صغيرة أيضا. في الحقيقة عندما تكون $q = 0$ تكون $\lambda = \infty$ وتتحرك الشبكة ككل كما لو كانت جسم جاسئ وهذا يؤدي إلى تلاشي قوة الاسترجاع. يحدث الحد المقابل عند $q = \pi/a$ (الشكل 6-13 ب)، حيث $\lambda = 2a$. كما يتضح من الشكل فإن الذرات المجاورة تكون خارج الطور وبالتالي تكون قوة الاسترجاع والتردد اكبر ما يمكن.



الشكل 6-13 (أ) الازاحات الذرية في مدى الموجات الطويلة. (ب) الازاحات الذرية عند $\lambda = 2a$.

3-6-6 سرعة الطور والمجموعة PHASE AND GROUP VELOCITY

الآن، سنناقش بعض خصائص الاهتزازات ذات الموجات الطويلة. عندما تكون q

صغيرة فإن علاقة الانتشار تكون على الصورة،

$$\omega = v_s q \quad ,$$

حيث v_s هي سرعة الصوت في الوسط المرن المتجانس. في الحالة العامة تعتمد سرعة

الصوت على العدد الموجي q وبالتالي يوجد انتشار للموجات. يمكن التمييز بين سرعة

الطور، v_p ، وسرعة المجموعة، v_g ، من خلال المفاهيم التالية. تكون سرعة الطور هي

المسئولة عن انتشار المستويات ذات الطور المتساوي، بينما تصف سرعة المجموعة

انتقال الطاقة. تعرف سرعة الطور وسرعة المجموعة بالعلاقات التالية،

$$v_p = \frac{\omega}{|q|} = v_s \left| \frac{\sin(aq/2)}{aq/2} \right|, \quad 31-6$$

$$v_g = \left| \frac{\partial \omega}{\partial q} \right| = v_s |\cos(aq/2)|. \quad 32-6$$

سنفحص الآن سلوك سرعة المجموعة في الشبكة المتفرقة (غير المتصلة). في

مدى الموجات الطويلة، حيث $\omega = v_s q$ ، تكون سرعة المجموعة، v_g ، مساوية لسرعة

الطور v_p وكلاهما تساوى سرعة الصوت v_s . في هذا المدى، تسلك الشبكة سلوك الجسم

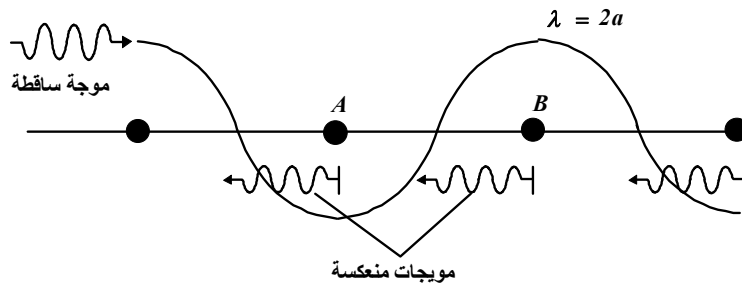
المتصل ولا يحدث انتشار. ولكن، مع زيادة q فإن v_g تتناقص بانتظام (كما يتبين من

الشكل 6-9، حيث v_g هو ميل منحنى الانتشار) وتصل إلى قيمة الصفر عند النقطة

$q = \pi/a$. وسبب هذا التناقص هو انه، مع زيادة q فإن تشتت الموجة بواسطة الذرات

المتفردة يصبح واضحا وملموساً.

انه من الشيق أن نلاحظ انه عند $q = \pi/a$ ، في الشكل 6-9، تتلاشى سرعة المجموعة، فما هو الشيء الذي يجعل قيمة q هذه تؤدي إلى تلاشي v_g . عند هذه القيمة نجد أن $\lambda = 2a$ ، وبالتالي فإن الموجات المشتتة من الذرات المجاورة تكون خارج الطور بمقدار π ، كما هو مبين بالشكل 6-14. لكن عندما تصل الموجة المنعكسة بواسطة الذرة B للموجة المنعكسة من الذرة A تكونا الاثنتين في طور واحد. وحيث أن هذا يحدث أيضا لكل الموجات الأخرى يترتب على ذلك إنه عند $q = \pi/a$ تتداخل كل الموجات المنعكسة تداخل بناء ويكون للإنعكاس قيمة عظمى. من الواضح أن ما يحدث شبيهه لشرط براغ ولكن هنا يطبق على الموجات المرنة. الآن قد فهمنا لماذا تكون $v_g = 0$ عند $q = \pi/a$ ، والسبب هو أن الموجات المنعكسة تكون قوية بالقدر الذي يجعلها تتحد مع الموجات الساقطة وتكون موجات موقوفة، والتي تتلاشى فيها سرعة المجموعة.



الشكل 6-14 انعكاس براغ لموجات الشبكة.

4-6-6 التماثل في فضاء- q : منطقة بريليون الأولى

توجد بعض خصائص التماثل الشيقة لمنحنى الانتشار المبين في الشكل 6-9،

حيث أن هذا المنحنى دوري في فضاء q - و متمائل بالنسبة للانعكاس حول نقطة الأصل، $q = 0$. سنبين الآن أن هذا التماثل ليس وليد الصدفة ولكنه ينتج مباشرة من التماثل الانتقالي للشبكة الحقيقية.

نفترض أولاً التماثل الدوري نظراً لأهميته. تبين العلاقة 6-28 أن الدالة $\omega(q)$

دورية في فضاء q - ولها فترة تساوى $2\pi/a$. هذا يعنى أن،

$$\omega(q + 2\pi/a) = \omega(q). \quad 33-6$$

لتوضيح ذلك سنعتبر المثال البسيط التالي. افترض النقط $q = \pi/2a$

و $q' = q + 2\pi/a$. تكون الأطوال الموجية المقابلة لهذه النقط هي $\lambda = 4a$ و $\lambda' = 4a/5$ على

الترتيب، وكما هو مبين في الشكل 6-15 (أ). لاحظ من الشكل أن هاتين الموجتين

تمثلان تماماً نفس الحركة الفيزيائية. بالرغم من أنه توجد اهتزازات أكثر للموجة الأقصر

إلا إن اهتزازات الذرات نفسها متشابهة في الحالتين ولذلك قلنا أن الموجتين متماثلتين

فيزيائياً. لذلك فإنه يجب أن يكون للموجتين نفس التردد. يمكن الحصول على نفس

الاستنتاج لأي نقطتين q و q' ، حيث $q' = q + n(2\pi/a)$ لأي عدد صحيح n . وهذا يفسر

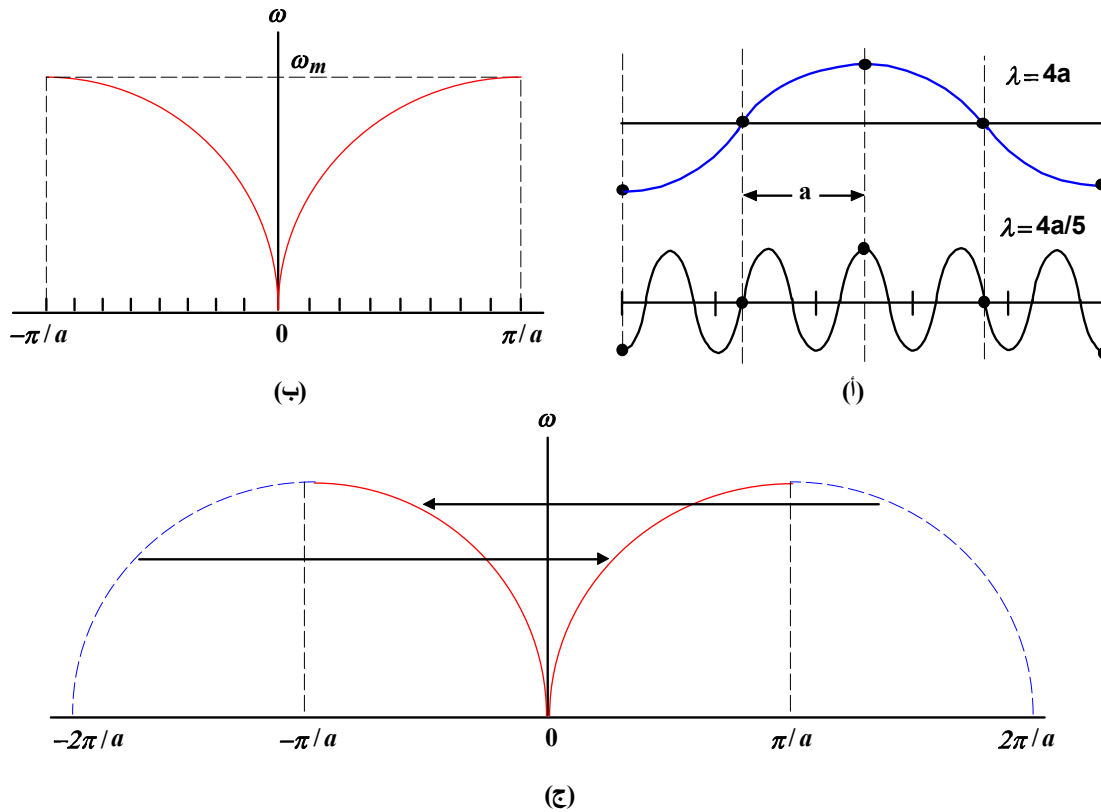
لماذا يكون التردد ω دالة دورية في العدد الموجى وله دورة تساوى $2\pi/a$.

تبين هذه المناقشة انه في الشبكة المتفردة لا يكون الطول الموجى المصاحب

لموجة معينة قيمة وحيدة لأنه يمكن لنفس الموجة تخصيص العديد من قيم q المكافئة، التي

ترتبط بعضها مع بعض بانتقال في فضاء q - يساوى $2\pi/a$. يوجد لكل قيمة من قيم q

هذه طول موجي مقابل. ومن أجل الحصول على تمثيل وحيد يجب اختيار فترة معينة في فضاء- q يكون لها طول يساوي الدورة $2\pi/a$. من حيث المبدأ، يكون هذا الاختيار اعتباطي تماما، على كل حال، يكون الاختيار الذي نجده أكثر مناسبة في المدى $-\frac{\pi}{a} < q < \frac{\pi}{a}$. في هذا الاختيار، تتعين الموجة بقيمة وحيدة للعدد الموجي q وبالتالي طول موجي وحيد. يكون الاختيار بالشكل الذي معه يكون للطول الموجي λ أكبر قيمة ممكنة تتفق مع مجموعة الازاحات الذرية المعطاة. تم إزالة الأطوال الموجية المقابلة للذبذبات الإضافية بين الذرات غير الجديرة بالملاحظة.



الشكل 6-15 (أ) موجات مستعرضة طبقا $q = \pi/2a$ و $q' = q + 2\pi/a$ أو $\lambda = 4a$ و (ب) يكون المدى $-\pi/a < q < \pi/a$ كافيا ليعطى طول موجي وحيدا لكل الذبذبات الفيزيائية في شبكة أحادية البعد. (ج) تكون المناطق المتصلة بأسهم في فضاء- q متكافئة فيزيائيا.

يبين الشكل 6-15 (ب) رسم لمنحنى انتشار الشبكة يقتصر على الفترة المختارة. ويوضح الشكل 6-15 (ج) بعض المناطق المكافئة للفترة $0 < q < \pi/a$ وأخرى مكافئة للفترة $-\pi/a < q < 0$. لاحظ أن الفترتين $0 < q < \pi/a$ و $-\pi/a < q < 0$ غير متكافئتين، حيث أنهما لا يمكن أن ترتبطتان بانتقال يساوى $n2\pi/a$. لاحظ أن الفترة $-\pi/a < q < \pi/a$ في الحقيقة هي منطقة بريليون الأولى (1st Brillouin zone) للشبكة أحادية البعد. يترتب على ذلك أنه يمكننا أن نقصر اهتمامنا في فضاء q على منطقة بريليون الأولى فقط، ونغض النظر عن المناطق الأعلى رتبة، حيث رأينا سابقاً أنها تكون متكافئة مع منطقة بريليون الأولى. لاحظ أيضاً، أن شرط براغ يتحقق عند نهايات المنطقة، $(\pm\pi/a)$ ، وهو يعتبر سمة أخرى وجد أنها تتحقق في الشبكات ذات الأبعاد الأعلى.

ننتقل فيما يلي إلى دراسة التماثل الانعكاسي في فضاء q ، بمعنى

$$\omega(-q) = \omega(q).$$

34-6

لكي نثبت هذا، لاحظ أن النمط q يمثل موجة تنتشر في شبكة نحو اليمين، بشرط أن يكون $q > 0$. ويمثل النمط $-q$ موجة لها نفس الطول الموجي ولكن تنتشر نحو اليسار. وحيث أن الشبكة تكون متكافئة في هذين الاتجاهين، فإنها تستجيب للموجتين بنفس الطريقة ويجب أن تكون الترددات المقابلة مماثلة.

طبقاً للمناقشة السابقة، فإن خصائص التماثل يجب أن تبقى صحيحة بشكل عام

بغض النظر عن نوع التفاعل بين الذرات لأن هذه الخصائص هي وليدة تماثل الشبكة في الحيز الحقيقي. على سبيل المثال، لو تم اعتبار تفاعلات أخرى، بجانب تفاعلات اقرب الجيران، فإن علاقة الانتشار تصبح أكثر تعقيدا، ولكن يبقى تماثل الانتقال والانعكاس في فضاء- q صالحا.

5-6-6 عدد الأنماط في المنطقة الأولى

لم نعتبر حتى الآن تأثيرات الشروط الحدودية على اهتزاز الشبكة المتفردة. كما في حالة الخط المتصل، سوف نعتبر شروط حدية دورية وهذا يعنى أن يكون لأول ولاحذر ذرات نفس التذبذب. نجد أن قيم q المسموحة هي فقط ،

$$q = n \frac{2\pi}{L} , \quad 35-6$$

حيث $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. وهذا يؤدي إلى شبكة منتظمة من قيم q لها مسافة فاصلة تساوى $2\pi/L$. عندما يكون L كبيرة، كما هو الحال في أي شبكة ذات حجم عيني (ماكروسكوبية)، فإن النقط المسموحة تصبح أكثر تقارب، ويصبح توزيعها على امتداد محور- q شبه متصل. يكون العدد الكلي للنقط داخل المنطقة الأولى هو N حيث $(2\pi/a)/(2\pi/L) = L/a = N$ هو العدد الكلي للذرات، أو لخلايا الوحدة في الشبكة. وتعتبر هذه النتيجة (عدد نقط q المسموحة يساوى عدد خلايا الوحدة في الشبكة) مهمة لأنها تتحقق عموما بشكل جيد. مثل هذا الاستنتاج متوقع لأن قيم q داخل المنطقة تصف بشكل فريد كل أنماط الاهتزاز في الشبكة. لذلك فإن عدد هذه القيم يجب

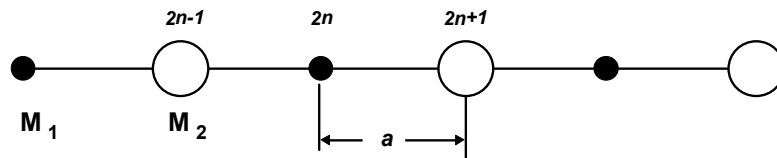
أن يساوى عدد درجات الحرية في الشبكة والذي هو عبارة عن N .

6-7 أنماط اهتزاز الشبكة ثنائية الذرة أحادية البعد

VIBRATION OF 1D DIATOMIC LATTICE

الآن، نعتبر شبكة ثنائية الذرة في بعد واحد. بالإضافة إلى الملامح التي تملكها الشبكة أحادية الذرة، فإن الشبكة ثنائية الذرة تظهر بعض الخصائص الإضافية المهمة في طيف الاهتزاز الأكثر تعقيداً، حيث أن الشبكة تحتوى على أكثر من ذرة لكل وحدة بسيطة في الجسم. من أهم هذه الملامح هو ظهور مدى من الذبذبات الممنوعة وكذلك مدى من الذبذبات المسموحة، كما سوف نبين.

اعتبر شبكة خطية شبكة ثنائية الذرة، كما يبين الشكل 6-16، كما فى حالة كلوريد الصوديوم على سبيل المثال. تتكون خلية وحدة من ذرتين هما الصوديوم والكلور ولهما الكتل M_1 و M_2 والمسافة التي تفصل بين الذرتين المتجاورتين هي a . يمكن معالجة حركة الشبكة بنفس الأسلوب الذي اتبعناه في الشبكة أحادية الذرة. وبما انه توجد ذرتين مختلفتين فإنه يكون لدينا معادلتين للحركة على الصورة الآتية:



الشكل 6-16 شبكة ثنائية الذرة أحادية البعد وفيها يكون طول خلية الوحدة $2a$.

$$M_1 \frac{d^2 u_{2n+1}}{dt^2} = -\alpha(2u_{2n+1} - u_{2n} - u_{2n+2}) \quad \&$$

$$M_2 \frac{d^2 u_{2n+2}}{dt^2} = -\alpha(2u_{2n+2} - u_{2n+1} - u_{2n+3}) \quad 36-6$$

حيث α ثابت القوة و n عدد صحيح موجب. من الطبيعي استخدام شرط تماثل الانتقال مرة أخرى والبحث عن حل على صورة موجة تنتشر تكتب على هيئة المصفوفة الآتية

$$\begin{bmatrix} u_{2n+1} \\ u_{2n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_1 e^{iqX_{2n+1}} \\ A_2 e^{iqX_{2n+2}} \end{bmatrix} e^{-i\omega t}. \quad 37-6$$

لاحظ أن جميع الذرات التي لها الكتلة M_1 يكون لها سعة اهتزاز A_1 وجميع الذرات التي لها الكتلة M_2 يكون لها السعة A_2 . بالتعويض بالمعادلة 37-6 في 36-6 وعمل بعض التبسيط المباشر نجد

$$\begin{bmatrix} 2\alpha - M_1\omega^2 & -2\alpha \cos(qa) \\ -2\alpha \cos(qa) & 2\alpha - M_2\omega^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix} = 0. \quad 38-6$$

وحيث أن المعادلات في المصفوفة السابقة تكون متجانسة فإنه يوجد حلولاً حقيقية فقط إذا تلاشى محدد مصفوفة المعاملات وهذا يؤدي إلى المعادلة ،

$$\begin{bmatrix} 2\alpha - M_1\omega^2 & -2\alpha \cos(qa) \\ -2\alpha \cos(qa) & 2\alpha - M_2\omega^2 \end{bmatrix} = 0. \quad 39-6$$

المعادلة السابقة عبارة عن معادلة تربيعية في ω^2 ويكون جذريها على الصورة،

$$\omega^2 = \alpha \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \alpha \sqrt{\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2(qa)}{M_1 M_2}}. \quad 40-6$$

تعرف المعادلة السابقة بعلاقة الانتشار. وطبقاً للإشارات في هذه المعادلة فإنه توجد علاقتي انتشار وبالتالي يوجد منحنين للانتشار أو فرعين مصاحبين للشبكة ثنائية الذرة يسميان بالفرع الضوئي والفرع السمعي وبين هذين الفرعين توجد فجوة تردد، كما هو مبين بالشكل 6-17. يكون الفرع السفلى مقابلاً للإشارة السالبة في المعادلة السابقة

ويسمى الفرع السمعي، بينما يسمى الفرع العلوي بالضوئي.

يبدأ الفرع السمعي من نقطة الأصل ويزداد خطياً في البداية (وهذا يفسر لماذا

يسمى بالسمعي) ثم يتناقص معدل الزيادة حتى يثبت التردد عند القيمة $(2\alpha/M_2)^{1/2}$ وذلك

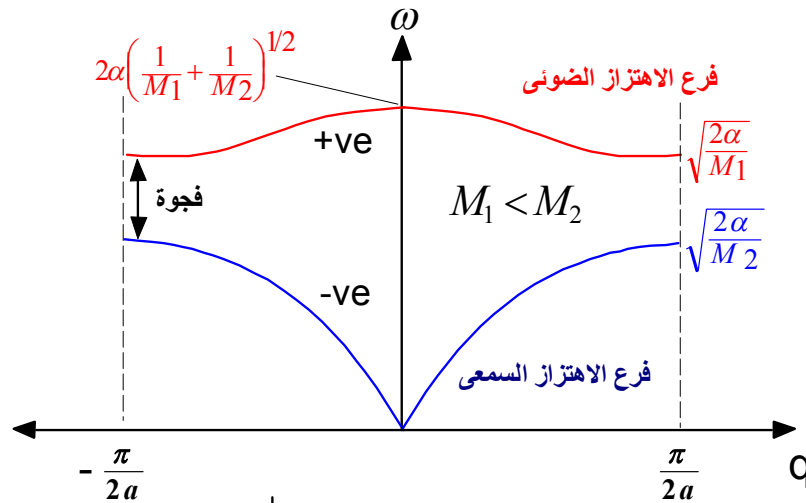
عند $q = \pi/2a$ ، كما يتضح من 6-40، بفرض أن $M_1 < M_2$. على الجانب الآخر، يبدأ

الفرع الضوئي عند $q = 0$ بقيمة محددة للتردد مقدارها $\omega = \left[2\alpha \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \right]^{1/2}$ ثم

يتناقص ببطء حتى يثبت عند القيمة $\omega = (2\alpha/M_2)^{1/2}$ عند $q = \pi/2a$. يعرف مدى التردد

بين أقل قيمة للتردد في الفرع السمعي وأعلى قيمة للتردد في الفرع الضوئي بفجوة

التردد. ولذلك يمكن القول أن الشبكة ثنائية الذرة تعمل كمرشح ميكانيكي لتحرير الشريط.



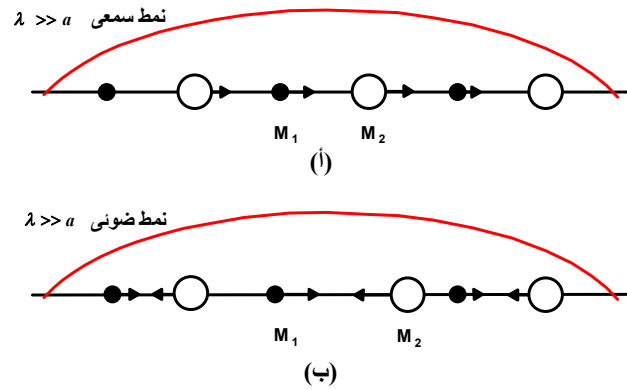
الشكل 6-17 فروع اهتزاز الشبكة ثنائية الذرة الضوئي والسمعي.

يمكن رؤية الفرق الديناميكي بين الفرع السمعي والفرع الضوئي بوضوح عند

مقارنتهما عند $q = 0$ (طول موجي لانهائي). يمكن استخدام المعادلة 6-38 للحصول على

النسبة بين السعات، A_1/A_2 . بوضع $\omega = 0$ للفرع السمعي نجد أن المعادلة تتحقق فقط عند

$A_1 = A_2$ ، ويكون للذرتين (الجزئ) السعة نفسها وتكونا في الطور نفسه. ويمكن القول أن الجزئ (وبالاحرى الشبيكة ككل) يتذبذب كجسم جاسئ له مركز ثقل يتحرك إلى الأمام والى الخلف، كما هو مبين في الشكل 6-18(أ). وعند زيادة q يغيب تحقق المعادلة 6-38 مع الشرط $A_1 = A_2$ ولكن يظل تحرك الذرات في نفس الطور تقريبا.



الشكل 6-18 (أ) إزاحة الذرات في النمط السمعي عند $q = 0$. (ب) إزاحة الذرات في النمط الضوئي عند $q = 0$.

$$\text{بوضع } \omega = \left[2\alpha \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \right]^{1/2} \text{ في الفرع الضوئي نجد أن}$$

$$M_1 A_1 + M_2 A_2 = 0 \quad 41-6$$

وهذا يعنى أن التذبذب الضوئي يحدث بالشكل الذي معه يظل مركز كتلة الخلية ثابت في مكانه. أي أن يكون تحرك الذرتين خارج الطور بمقدار π وتكون نسبة السعات هي

$$A_2 / A_1 = M_1 / M_2$$

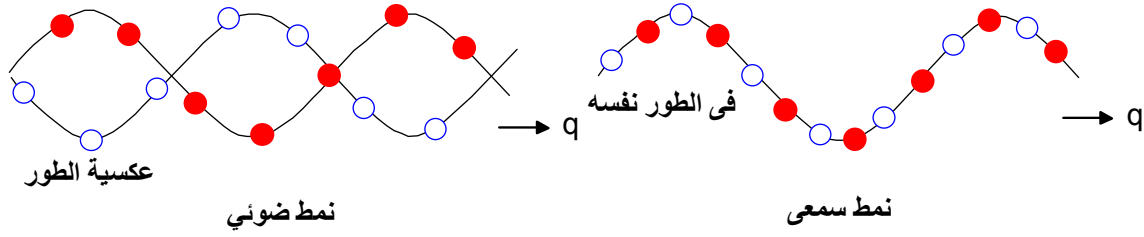
والسبب الفيزيائي لتسمية الفرع العلوي بالضوئي هو: أولاً، أن تردد هذا الفرع

يعطى تقريبا بالمقدار $(2\alpha/M)^{1/2}$ ، والذي له قيمة نموذجية تساوى المقدار

$3 \times 10^{13} \text{ s}^{-1} \approx (2 \times 5 \times 10^3 / 10^{-23})^{1/2}$ عند استخدام قيم نموذجية لكل من α و M . يقع هذا

التردد في مدى الأشعة تحت الحمراء. علاوة على ذلك، إذا كانت الذرات مشحونة، كما في حالة بلورة كلوريد الصوديوم (NaCl)، فإن الخلية تحمل عزم ثنائي قطب كهربى قوى عندما تتذبذب الشبكة في النمط الضوئي وهذا يؤدي إلى انعكاس وامتصاص قوى للأشعة تحت الحمراء بواسطة الشبكة.

أخيراً، نلاحظ أن منحنى الانتشار للشبكة ثنائية الذرة يحقق نفس خصائص التماثل في فضاء q - كما في حالة الشبكة أحادية الذرة. على سبيل المثال، تكون موجة الانتشار دورية ولها دورة مقدارها $\pi/2a$ ولها تماثل انعكاسي حول $q=0$. لاحظ أن منطقة بريليون الأولى تقع في المدى $-\frac{\pi}{2a} < q < \frac{\pi}{2a}$ ، حيث أن فترة الشبكة الحقيقية هي $2a$ وليس a . بالرجوع إلى الشكل 6-17 وباستخدام الشروط الحدودية الدورية، يمكن رؤية أن عدد قيم q المسموحة داخل المنطقة الأولى هو N وبالتالي يكون العدد الكلى للأنماط داخل هذه المنطقة هو $2N$ ، حيث يوجد نمطين سمعي وضوئي لكل q . ويمكن فهم طبيعة هذين النمطين إذا اعتبرنا حركة الذرات المختلفة في الشبكة. تتحرك الذرات في الفرع السمعي بنفس الطريقة وتكون حركة الذرات كلها في طور واحد، أي أن الموجة تعتبر موجة طولية ولهذا سميت سمعية، أما بالنسبة للفرع الضوئي نجد أن الذرات تتحرك بحيث تكون عكسية في الطور، أي موجات مستعرضة وتشبه الموجات الكهرومغناطيسية ولذا سمي بالفرع الضوئي وتكون أشكال الموجة في النمطين كما هو مبين بالشكل 6-19.



الشكل 6-19 موجات ضوئية وسمعية مستعرضة.

8-6 أنماط اهتزاز الشبكة ثلاثية الأبعاد VIBRATION MODES OF 3D LATTICE

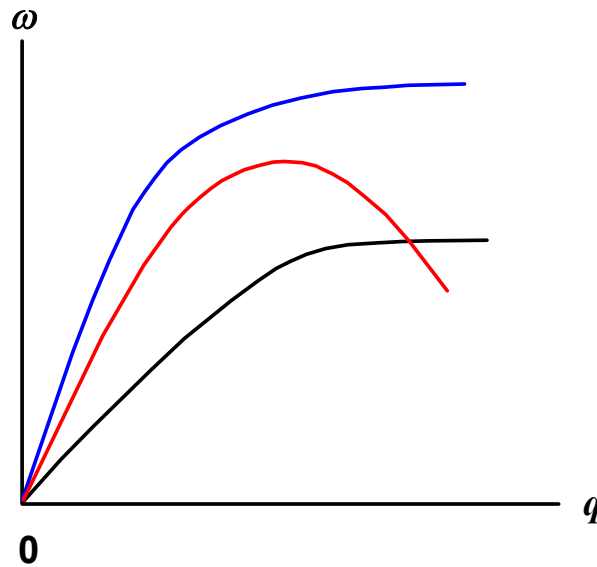
نستطيع الآن وصف الحالة العامة للشبكة ثلاثية الأبعاد. نعتبر شبكة برافية التي فيها خلية الوحدة تحتوي على ذرة واحدة. ترتبط الذرات بعضها مع بواسطة التفاعل المتبادل. يمكن كتابة معادلة الحركة لكل ذرة على غرار المعادلة 6-27، ويمكن كتابة نمط الحل الطبيعي على الصورة

$$\vec{u}_n = \vec{A} e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)} \quad , \quad 42-6$$

حيث يصف متجه الموجه \vec{q} كل من الطول الموجي واتجاه الانتشار. في هذا المقام، يكون الحديث بدلالة المتجه مهم لأن الانتشار يحدث في ثلاثة أبعاد. يصف المتجه \vec{A} كل من السعة و اتجاه اهتزاز الذرات وبالتالي يصف استقطاب الموجة، بمعنى هل تكون الموجة طولية (\vec{A} يوازي \vec{q}) أو أن الموجة مستعرضة (\vec{A} عمودي على \vec{q}). في الحقيقة، لا تكون الموجة في الشبكة طولية تماماً ولا مستعرضة تماماً بل خليط من النوعين.

عند التعويض بالمعادلة 6-42 في معادلة الحركة نحصل على ثلاث معادلات في نفس الوقت تتضمن A_x و A_y و A_z وهي مركبات متجه السعة \vec{A} . ترتبط هذه المعادلات

معا وهي تكافئ مصفوفة معادلات $|3 \times 3|$. بكتابة المعادلة العددية لهذه المصفوفة نحصل على المعادلة المحددة، على غرار المعادلة 6-39 والتي تكون من الدرجة الثالثة في ω^2 . تعطى جذور هذه المعادلة ثلاثة علاقات انتشار (منحنيات انتشار)، كما هو مبين بالشكل 6-20. تمر الفروع الثلاثة بنقطة الأصل وهذا يعنى أن كل الفروع في هذه الشبكة عبارة عن فروع سمعية. طبعاً، من المتوقع هذا لأننا نعالج شبكة برافية أحادية الذرة.



الشكل 6-20 منحنيات الانتشار لشبكة برافية أحادية الذرة في الأبعاد الثلاثة.

لاحظ انه، في حالة الأبعاد الثلاثة ليس بالضرورة أن تكون علاقات الانتشار متجانسة في فضاء q بل تعتمد بشكل أساسي على اتجاه الاستقطاب (مستوى الانتشار). ويمكن الحصول على مزيج من الأنماط منها الضوئي الطولي والضوئي المستعرض والسمعي الطولي والسمعي المستعرض كلها معا أو بعضها وهذا يعتمد على نوع الشبكة واتجاه الانتشار. ويمكن قياس منحنيات الانتشار في الشبكة بواسطة التشتت غير المرين للأشعة السينية أو أشعة النيوترونات، كما يمكن حسابها نظريا بطريقة مماثلة للطريقة

المستخدمة في حالة البعد الواحد. في هذه الحالة يتم افتراض ثابت قوة طبقا لتفاعل الذرة مع ذرات الجوار المختلفة ويتم التعويض في معادلة الحركة للحصول على الحل في شكل معادلات عددية تعطى منحنيات الانتشار. حينئذ يمكن مقارنة منحنيات الانتشار هذه مع النتائج المعملية واختيار ثابت قوة يؤدي إلى توافق بين النظري مع العملي.

نناقش الآن خصائص التماثل في فضاء- q ومنطقة بريليون الأولى في الأبعاد الثلاثة. يمكن كتابة علاقة الانتشار في الشبكة ثلاثية الأبعاد على الصورة،

$$\omega = \omega_j(q), \quad 43-6$$

حيث يصف المدلول الحرفي z فرع الانتشار المراد. تحقق علاقة الانتشار لكل فرع على حده خصائص التماثل تماما كما شرحنا في حالة الشبكة أحادية البعد. في المناقشة التالية، سنحذف التفاصيل الرياضية، لأنها تكون شبيهة لمثيلتها في حالة الشبكة أحادية البعد.

أولا، الدالة $\omega_j(q)$ تحقق خاصية الدورية، أي انه

$$\omega_j(\vec{q} + \vec{G}) = \omega_j(\vec{q}), \quad 44-6$$

حيث \vec{G} هو متجه الشبكة الانتقالية. هذا يعنى أنه يمكننا حصر اهتمامنا في منطقة بريليون الأولى فقط.

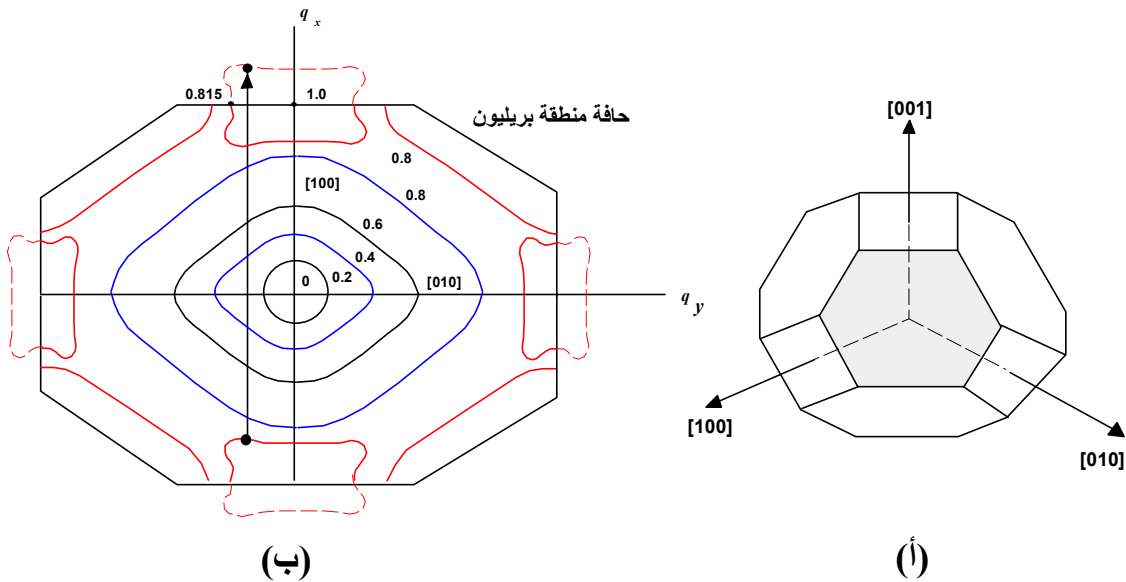
ثانيا، أيضا يتحقق التماثل لانعكاسي في علاقة الانتشار وبالتالي يمكن كتابة

$$\omega_j(-q) = \omega_j(q). \quad 45-6$$

لاحظ مرة أخرى، أن خصائص التماثل هذه تأتي مباشرة من التماثل الانتقالي للشبكة الحقيقية وتتحقق دائما بغض النظر عن نوع الصلب المأخوذ في الاعتبار.

يبين الشكل 21-6 منطقة بريليون الأولى لعنصر الألومونيوم ذات الشبكة المكعبة

المتكرزة الأوجه ورسم لحدود التردد في هذه المنطقة. يتضح من الرسم تحقق عناصر التماثل الدوري والانعكاسي والدوراني.



الشكل 21-6 (أ) منطقة بريليون الأولى لعنصر الألومونيوم. (ب) قطاع مستوى لحدود فرع النمط الضوئي الطولي (وحدات الأرقام هي $2\pi \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$).

9-6 كثافة الحالة في الشبكة DENSITY OF STATES OF A LATTICE

كما ذكرنا من قبل، تعرف كثافة الحالة، $g(\omega)$ ، بحيث يعبر المقدار $g(\omega)d\omega$ عن

عدد الأنماط في مدى التردد $(\omega, \omega + d\omega)$. تلعب دالة كثافة الحالة دور مهم في معظم

الظواهر الفيزيائية التي تتضمن اهتزاز الشبكة وعلى وجه الخصوص الحرارة النوعية.

من قبل، تم حساب هذه الدالة للشبكة المتصلة واستخدمت في سياق نموذج ديبيي للحرارة

النوعية. هنا سنقوم باستنتاج شكل الدالة المناسبة للشبكة المنفردة ثم سيتم استخدام النتائج

وتكريسها (في الباب القادم) للحصول على نظرية كاملة لوصف الحرارة النوعية.

نعتبر أولاً حالة الشبكة أحادية البعد. تعطى العلاقة العامة المستنتجة من قبل لكثافة

الحالات في الصورة،

$$g(\omega) = \frac{L}{\pi} \frac{1}{d\omega/dq} \quad 47-6$$

نرى أن الدالة $g(\omega)$ قد تم حسابها باستخدام علاقة الانتشار. وهكذا، بالنسبة للخط المتصل فإن علاقة

$$\text{الانتشار } \omega = v_s q \text{ تؤدي إلى } g(\omega) = L / \pi v_s, \text{ بينما تؤدي علاقة الانتشار } 27-6, \omega = \omega_m \left| \sin \frac{qa}{2} \right|,$$

إلى،

$$g(\omega) = \frac{2L}{\pi a \omega_m} \left[\cos \frac{qa}{2} \right]^{-1}. \quad 48-6$$

تم رسم اعتماد هذه الدالة ($g(\omega)$) على التردد في الشكل 22-6، ومنه يتضح أن $g(\omega)$

تبدأ بقيمة محدد عند $\omega = 0$ وتزداد قيمتها مع زيادة ω وتصل إلى قيمة لانهائية عند

$\omega = \omega_m$. على الجانب الآخر، تتلاشى كثافة الحالة، $g(\omega)$ ، عندما يكون $\omega > \omega_m$ وذلك

نظراً لأن هذا يقع خارج منطقة بريليون.

تمثل المساحة تحت المنحنى العدد الكلي للأنماط والذي يساوي N (ويمكن الحصول

عليه بواسطة عملية التكامل للمعادلة 47-6). يبين الشكل السابق أيضاً كثافة الحالة

للمنموذج المتصل والتي يكون ترددها العلوي هو تردد ديبي (المساحة تحت الخط الأفقي

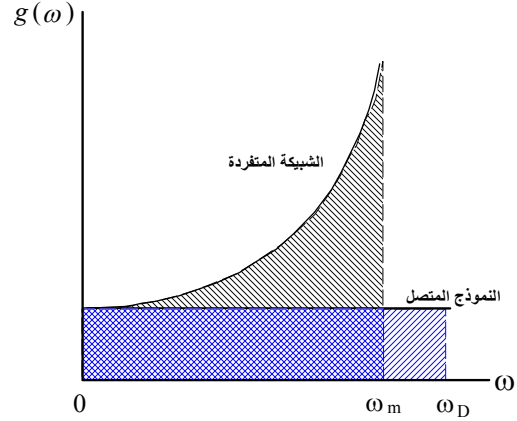
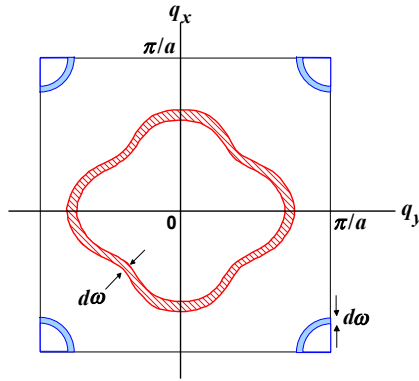
وهي تساوي N أيضاً).

لإيجاد $g(\omega)$ للشبكة ثلاثية الأبعاد نتبع نفس الطريقة العامة والتي نفترض فيها

الفرع رقم z ونرسم حدود المحيط (الكتور) $\omega_j(\vec{q}) = \omega$ و $\omega_j(\vec{q}) = \omega + d\omega$ كما هو مبين

في الشكل 6-23، ثم نعد عدد الأنماط المحصورة بين هذين السطحين. يساوى هذا العدد

$$g_j(\omega)d\omega \text{ ومنه نعين } g_j(\omega).$$



الشكل 6-23 حساب عدد الأنماط. تمثل

المنطقة المخططة قشرة بئر الجهد داخل منطقة بريليون، وتوضح المنطقة المظلمة الوضع عندما تكون قيم التردد كبيرة جدا ويتقاطع حدود التردد مع حدود منطقة بريليون.

الشكل 6-22 اعتماد هذه الدالة $(g(\omega))$ على التردد ومقارنة كثافتي الحالة في حالتي النموذج المتصل والشبكة المتفرقة.

يوضح الشكل 6-24 السمات العامة للدالة $g_j(\omega)$ ، حيث تزداد $g_j(\omega)$ كدالة في

ω^2 ، لأن الأنماط المتضمنة هنا تكون أنماط موجات سمعية طويلة. ومع استمرار تزايد ω

تظهر الدالة $g_j(\omega)$ بعض التفاصيل التركيبية الذي تتعين بواسطة علاقة الانتشار الحقيقية

والتي بدورها تعين شكل القشرة في الشكل 6-23. (بالطبع، تتحدد علاقة الانتشار

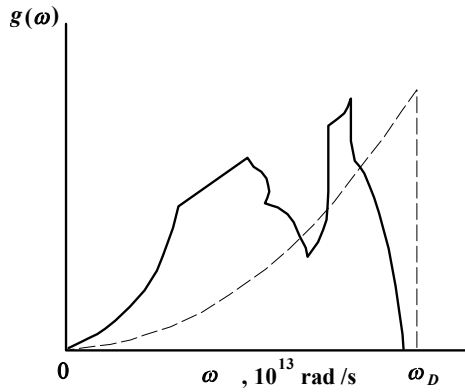
بواسطة ثابت قوة التفاعل بين الذرات وبالتالي تعتمد على شكل البلورة محل الدراسة.)

عند بعض الترددات تتناقص $g_j(\omega)$ بشكل فجائي وفي النهاية تتلاشى كلية، كما هو مبين

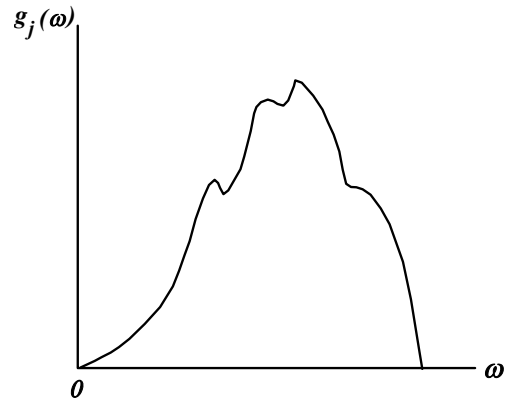
بالشكل. يمكن فهم هذا السلوك بالرجوع إلى الشكل 6-23، حيث تبدأ القشرة بالتقاطع مع

حدود منطقة بريليون عند بعض الترددات، وعندما يحدث ذلك فإن الأنماط التي داخل

المنطقة تتناقص (حيث لا تحسب الأنماط التي تقع خارج المنطقة). عندما يكون نصف قطر القشرة كبير بحيث تقع القشرة بالكامل خارج المنطقة فإن كثافة الحالة، $g_j(\omega)d\omega$ ، تتلاشى بالكامل.



الشكل 6-25 كثافة الحالة الكلية للنحاس. المنحنى المتقطع هو تقريب ديبي، والمنحنى المتصل تم الحصول عليه من نتائج تشتت النيوترونات.



الشكل 6-24 منحنى نموذجي لكثافة الحالات.

لإيجاد كثافة الحالة الكلية نجمع كثافات الحالة لكل الأفرع المنفصلة على النحو،

$$g(\omega) = \sum_j g_j(\omega). \quad 48-6$$

تبين كثافة الحالة الكلية $g(\omega)$ نفس نوع السلوك الموجود بالشكل 6-24 ما عدا أن تركيب المنحنى يكون أكثر تعقيدا وذلك بسبب التداخل بين الأفرع المختلفة. يبين الشكل 6-25 منحنيات كثافة الحالة الكلية لعنصر النحاس.

10-6 امتصاص البلورات للأشعة تحت الحمراء

INFRARED ABSORPTION BY CRYSTAL

تمكن العلماء من التحقق العملي من صحة اهتزاز الشبكة وذلك باعتبار تأثير شبكة خطية ثنائية الذرة عند تعريضها لأشعة كهرومغناطيسية (في مدى تردد الأشعة

تحت الحمراء) لها شدة تعطى بالعلاقة التالية،

$$E = E_0 e^{i\omega t},$$

حيث ω هو التردد ويكون في حدود 3×10^{12} Hz والطول الموجي 100 micron تقريباً.

تكون قيمة المتجه الموجي لهذه الأشعة حوالي $k = \frac{2\pi}{\lambda} = 600 \text{ cm}^{-1}$. تكون قيمة k هذه

اصغر بكثير من قيمة أكبر متجه موجي لاهتزاز الشبكة، حيث $k = \frac{2\pi}{a} = \dots \text{ cm}^{-1}$ ، ولذلك

عند تعريض الشبكة للأمواج الأشعة تحت الحمراء نعتبر علاقة الانتشار عندما يؤول

المتجه k إلى الصفر. في هذه الحالة يجب تعديل معادلات الحركة للذرات وحلولها بحيث

تتضمن حد جديد وهو $(\pm eE_0)$ والذي يعبر عن القوة التي يؤثر بها المجال

الكهرومغناطيسي للأشعة على الأيونات الموجبة والسالبة. وبذلك يصبح حل المعادلتين

الموجيتين للأيونين m و M هو،

$$-m\omega^2 A = \beta B(e^{ika} + e^{-ika}) - 2\beta A - eE_0,$$

و

$$-M\omega^2 B = \beta A(e^{ika} + e^{-ika}) - 2\beta B + eE_0. \quad 49-6$$

وعندما تكون k صغيرة تصبح المعادلتان على الصورة،

$$-m\omega^2 A = 2\beta(B - A) - eE_0,$$

و

$$-M\omega^2 B = 2\beta(A - B) + eE_0. \quad 50-6$$

يمكن حل المعادلتين السابقتين وتعيين الثوابت A و B على الصورة،

$$A = \frac{eE_o}{M(\omega_o^2 - \omega^2)} \quad \& \quad B = -\frac{eE_o}{m(\omega_o^2 - \omega^2)} ,$$

حيث $\omega_o^2 = \frac{2\beta(m+M)}{mM}$ هي القيمة التي تتأخر $k=0$ ، أي عند حدود الفرع الضوئي. من

المعادلتين السابقتين يتضح حدوث أكبر سعة حركة للذرات عندما تقترب قيمة ω من ω_o ويتم عندئذ امتصاص طاقة الحركة اللازمة من طاقة الأشعة تحت الحمراء الساقطة وكلما ازدادت سعة الحركة تزداد درجة الامتصاص الداخلي للطاقة المستخدمة في إثارة ذبذبات الشبكة.

ملخص الباب

✕ تهتز ذرات الشبكة نظرا لصعوبة وصول درجة حرارة المادة إلى الصفر المطلق وكلما ارتفعت درجة الحرارة اتسع نطاق هذه الاهتزازات التي يطلق عليها الذبذبات الشبكية، و تؤدي الاهتزازات إلى انتقال الموجات داخل البلورة. وعندما يكون الطول الموجي أكبر بكثير من الثوابت البلورية يطلق على هذه الموجات اسم الموجات المرنة و تكون الموجات المرنة ذات التردد المنخفض موجات صوتية.

✕ عند فحص انتشار موجة مرنة عبر عينة على شكل قضيب طويل تكون معادلة

الموجة على الصورة $u = Ae^{i(qx - \omega t)}$ ، حيث $q = \frac{2\pi}{\lambda}$ هو العدد الموجي و ω هو

التردد و A هو سعة الموجة. تكون معادلة الانتشار في هذه الحالة معادلة خطية

على الصورة $\omega = v_s q$ ، حيث v_s هي سرعة الصوت.

✗ عند انتشار موجة مرنة خلال قضيب طويل فإن أنماط اهتزاز الوسط تعطى

بالمعادلة $u = Ae^{iqx}$ ، حيث $q = n \frac{2\pi}{L}$ و $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ و L هو طول

القضيب. تعرف الدالة $g(\omega)d\omega = \left(\frac{L}{2\pi}\right)dq$ بعدد أنماط الاهتزاز في مدى التردد

الواقع بين ω و $\omega + d\omega$ و تكون علاقة الانتشار في هذه الحالة على الصورة

$$g(\omega) = \frac{1}{v_s} \frac{L}{\pi} \quad \text{وبالتالي تكون كثافة الحالات على الصورة،} \quad \left(\frac{dq}{d\omega}\right) = v_s$$

✗ في حالة الأبعاد الثلاثة تكون معادلة الموجة على الصورة $u = Ae^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}$ ، حيث يوصف

الانتشار بمتجه الموجة \vec{q} ، له اتجاه يحدد الانتشار وله سعة تتناسب عكسيا مع الطول

الموجي. يكون عدد أنماط الاهتزاز المسموحة في هذه الحالة والتي لها q اقل من

قيمة معينة هي $\frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi q^3$ ، حيث $V = L^3$ هو حجم العينة. يكون عدد النقط بين

السطح الذي له تردد ثابت ω والسطح الذي له تردد ثابت $\omega + d\omega$ هو

(تكون أسطح كثافة الحالة في فضاء q أسطح كرات $g(\omega)d\omega = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \left(\frac{\omega}{v_s}\right)^2 \frac{d\omega}{v_s}$

تحتوى فيما بينها على القشرة الكروية). وتكون كثافة الحالات هي $g(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{v_s^3}$

حيث أن كل قيمة للعدد q تتضمن 3 أنماط (نمط طولي ونمطين مستعرضين).

✗ يعرف الفونون بأنه متذبذب له كتلة تساوى كتلة الذرة وله طاقة تساوى $\hbar\omega$. أي أن

الفونون هو موجة يمكن أن تمتص أو تنبعث بواسطة الشبكة أثناء الاهتزاز الحراري

ولها وحدة الطاقة الكمية $\hbar\omega$. كما يمكن القول أنه على غرار اعتبار الموجات

الكهرومغناطيسية عبارة عن سيل من الفوتونات (تنتشر بسرعة الضوء)، فإنه يمكن اعتبار أن الموجات الصوتية المرنة عبارة عن سيل من الفونونات (تنتشر بسرعة الصوت).

✕ في حالة الشبكة أحادية البعد تكون علاقة الانتشار للموجات على الصورة

$$\omega = \omega_m \left| \sin \frac{qa}{2} \right| \text{ و } \omega_m = 2\sqrt{\frac{\alpha}{M}} \text{ ، حيث } \omega_m \text{ هو أقصى تردد. عند مدى (حد) الموجات}$$

الطويلة، $q \rightarrow 0$ ، يمكن تقريب علاقة الانتشار إلى الصورة $\omega = \left(\frac{\omega_m a}{2} \right) q$ والتي هي

عبارة عن علاقة خطية بين ω و q و تكون سرعة الصوت v_s في هذه الحالة هي

$$v_s = \frac{\omega_m a}{2} \text{ ، حيث } a \text{ هي المسافة الفاصلة بين ذرات الشبكة.}$$

✕ يمكن التمييز بين سرعة الطور، v_p ، وسرعة المجموعة، v_g ، حيث تكون سرعة الطور

هي المسئولة عن انتشار المستويات ذات الطور المتساوي، بينما تصف سرعة

المجموعة انتقال الطاقة. تعرف سرعة الطور وسرعة المجموعة بالعلاقات

$$v_g = \left| \frac{\partial \omega}{\partial q} \right| = v_s |\cos(aq/2)| \text{ و } v_p = \frac{\omega}{|q|} = v_s \left| \frac{\sin(aq/2)}{aq/2} \right|$$

✕ في الشبكة الخطية أحادية الذرة يبين منحنى الانتشار وجود خصائص التماثل، حيث أن

هذا المنحنى دوري في فضاء q ومتماثل بالنسبة للانعكاس حول نقطة الأصل، $q=0$

و هذا التماثل ليس وليد الصدفة ولكنه ينتج مباشرة من التماثل الانتقالي للشبكة

الحقيقية. وتعرف الفترة $-\pi/a < q < \pi/a$ في فضاء q بمنطقة بريليون الأولى

ويتحقق شرط براغ عند نهايات المنطقة، $(\pm \pi/a)$ ، كما يحقق التماثل الانعكاسي في فضاء q ، عندما $\omega(-q) = \omega(q)$. ويتعين عدد الأنماط في منطقة بريليون الأولى بالعلاقة

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \text{ حيث } n = \frac{L}{2\pi} q \text{ و } (2\pi/a)/(2\pi/L) = L/a = N$$

✕ في حالة الشبكة الخطية ثنائية الذرة يوجد منحنيين انتشار مصاحبين للشبكة ثنائية الذرة

يسميان الفرع الضوئي والفرع السمعي وبينهما فجوة تردد، طبقا للعلاقة

$$\omega^2 = \alpha \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \alpha \sqrt{\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2(qa)}{M_1 M_2}}$$

يحقق منحني الانتشار للشبكة

ثنائية الذرة نفس خصائص التماثل في فضاء q كما في حالة الشبكة أحادية الذرة،

بمعنى أن تكون موجة الانتشار دورية ولها دورة مقدارها $\pi/2a$ ولها تماثل انعكاسي

حول $q=0$ و تقع منطقة بريليون الأولى في المدى $-\frac{\pi}{2a} < q < \frac{\pi}{2a}$ ، حيث أن فترة

الشبكة الحقيقية هي $2a$ وليس a .

✕ في الشبكة ثلاثية الأبعاد يحدث الانتشار في ثلاثة أبعاد ولا تكون الموجة في الشبكة

طولية تماما ولا مستعرضة تماما بل خليط من النوعين. يمكن الحصول على مزيج من

الأنماط منها الضوئي الطولي والضوئي المستعرض والسمعي الطولي والسمعي

المستعرض كلها معا أو بعضها وهذا يعتمد على نوع الشبكة واتجاه الانتشار.

✕ فى الشبكة ثلاثية الأبعاد تعطى كثافة الحالات لكل فرع بالعلاقة

$$g(\omega) = \frac{2L}{\pi a \omega_m} \left[\cos \frac{qa}{2} \right]^{-1} \cdot \text{لإيجاد كثافة الحالة الكلية نجمع كثافات الحالة لكل الأفرع}$$

$$g(\omega) = \sum_j g_j(\omega) \text{ المنفصلة على النحو،}$$

✕ تمكن العلماء من التحقق العملي من صحة اهتزاز الشبكة وذلك باعتبار تأثير شبكة

خطية ثنائية الذرة عند تعريضها لأشعة كهرومغناطيسية (فى مدى تردد الأشعة

تحت الحمراء).

أسئلة وتمارين

1- عين كثافة الحالات لوسط متصل ثنائي الذرة وله حدود دورية.

2- إذا علمت أن العلاقة $q = n \frac{2\pi}{l}$ تعطى قيم q مسموحة لخط متصل له حدود دورية.

ارسم بعض قيم الطول الموجى المقابلة وقارن ذلك مع القيم التى تحصل عليها من متذبذب يهتز.

3- هل تتوقع وجود موجات صوتية فى الجزيئات الصغيرة؟ إذا كانت الإجابة لا، كيف تفسر انتشار الصوت فى المواد الغازية؟

4- بين أن العدد الكلى للأنماط فى منطقة بريليون الأولى لشبكة خطية ثنائية الذرة يساوى $2N$ (العدد الكلى لدرجات الحرية)؟

5- ماذا يحدث لفجوة التردد عندما تتساوى كتلة ذرات الشبكة الخطية ثنائية الذرة،

وقارن النتائج مع الشبكة أحادية الذرة؟

6- استنتج النسبة بين سرعة الطور وسرعة المجموعة في شبكة خطية أحادية الذرة؟

7- استنتج باستخدام معادلة حركة موجة طولية داخل قضيب (في بعد واحد) أن سرعة

الموجة تعطى بالعلاقة $v_s = \sqrt{\frac{Y}{\rho}}$ ، حيث Y معامل يانج و ρ كثافة مادة القضيب.

8- أثبت أن درجة حرارة ديبي تعطى بالعلاقة $\theta_D = \sqrt{\frac{Y}{m}}$.

9- بفرض أن كثافة البلورة هي 2.25 g/cm^3 والتردد الزاوي للفرع الضوئي في البلورة

يساوى $3.2 \times 10^{13} \text{ rad s}^{-1}$ ، احسب المسافة الفاصلة بين الذرات، ومعامل يانج و سرعة

انتشار الصوت في البلورة.

10- أوجد الصيغة الرياضية التي تصف كثافة الحالات لوسط ثنائي البعد له شرط

حدود دورية.

11- أشرح كيف تمكن العلماء من التحقق العملي من صحة اهتزاز الشبكة بواسطة

امتصاص الأشعة تحت الحمراء؟

الباب الثامن
نظرية الإلكترون الحر في الفلزات

**Free Electron Theory
in Metals**



الباب الثامن

نظرية الإلكترون الحر فى الفلزات

Free Electron Theory in Metals

المحتوى

1-8 مقدمة.

2-8 منشأ إلكترونات التوصيل.

3-8 النموذج التقليدي لغاز الإلكترونات الحرة.

4-8 التوصيلية الكهربائية للفلزات طبقاً للنموذج التقليدي.

5-8 اعتماد التوصيلية الكهربائية على درجة الحرارة.

6-8 السعة الحرارية طبقاً لنموذج غاز الإلكترونات الحرة.

7-8 سطح فيرمى.

8-8 تأثير سطح فيرمى على التوصيلية الكهربائية.

9-8 التوصيلية الحرارية فى المعادن.

10-8 حركة الإلكترونات فى المجال المغناطيسي.

11-8 التوصيلية الكهربائية المترددة والخصائص الضوئية.

12-8 الانبعاث الأيونى الحرارى.

13-8 فشل نموذج الإلكترون الحر

الأهداف

بعد استكمال دراسة هذا الباب يجب أن يكون الدارس قادراً على:-

- ✗ شرح مفهوم منشأ إلكترونات التوصيل في الفلزات وكيفية حساب عددها.
- ✗ الإلمام بفروض ومناقشة النموذج التقليدي لغاز الإلكترونات الحرة.
- ✗ استنتاج الصيغة الرياضية التي تصف التوصيلية الكهربائية للفلزات طبقاً للنموذج التقليدي لغاز الإلكترونات الحرة.
- ✗ مناقشة اعتماد التوصيلية الكهربائية للفلز على كل من تركيز الإلكترونات وسرعة تحركها وزمن الاسترخاء وحساب كثافة التيار.
- ✗ مناقشة اعتماد التوصيلية الكهربائية للفلز على كل من تركيز الإلكترونات والكتلة الفعالة للإلكترون .
- ✗ تعريف زمن الاسترخاء وتأثيره في تفسير التباين الكبير في قيم التوصيلية الكهربائية للمعادن والمواد شبه الموصلة.
- ✗ مناقشة اعتماد التوصيلية الكهربائية للفلز على درجة الحرارة بدلالة تشتت إلكترونات التوصيل.
- ✗ حساب السعة الحرارية على ضوء نموذج درودى ولورنتز ومناقشة اعتمادها على درجة الحرارة.
- ✗ تعريف درجة حرارة - وسطح- فيرمى واستنتاج الصيغة الرياضية التي تصف طاقة فيرمى ومناقشة تأثير سطح فيرمى على التوصيلية الكهربائية.
- ✗ شرح كيفية حدوث عملية التوصيل الحرارى في المعادن وحسابه بطريقة كمية.
- ✗ دراسة بعض الأمثلة لحركة الإلكترونات في المجال المغناطيسي مثل تأثير هول ورنين السيكلوترون.
- ✗ مناقشة التوصيلية الكهربائية المترددة وارتباطها بالخصائص الضوئية للمعادن وذلك بدلالة ثابت العزل الكهربى ومعامل الانكسار.
- ✗ دراسة ومناقشة الانبعاث الأيونى الحرارى.

8-1 مقدمة

تتميز الفلزات بخصائص فيزيائية عديدة تجعلها على رأس قائمة المواد التي تقتحم حياتنا اليومية نظرا لأهميتها التكنولوجية. من هذه الخصائص تمتعها بصلاية وكثافة عالية بالإضافة إلى توصيلها للحرارة ولل كهرباء بشكل جيد وتميزها بدرجة لمعان تجعلها قادرة على عكس الضوء. يعتبر تفسير منشأ هذه الخصائص الفيزيائية من الأهمية البالغة لكل من يهتم باستخدام هذه المواد في التطبيقات العملية. كما سنرى في هذا الباب، أن تتميز الفلزات بالخصائص الفيزيائية يرجع إلى تمتعها بتركيب ذرى وبلوري يجعلها غنية بتركيز عالي من الإلكترونات الحرة والتي تعتبر أساس مناقشة مختلف معظم الخصائص الفيزيائية.

سنناقش في هذا الباب، نموذج الإلكترونات الحرة الذى يفترض أن الإلكترونات تكون ضعيفة الارتباط بذراتها وتتحرك داخل الفلز بحرية دون التأثير بوجود ذرات المادة ولا تتفاعل مع أيونات البلورة. بعد ذلك سنصف كيف تحمل الإلكترونات الحرة التيار الكهربى عند تطبيق مجال خارجي، ثم نتطرق إلى مشاركة الإلكترونات فى حساب الحرارة النوعية. يقدم هذا المدخل مفاهيم مهمة لمستوى وسطح فيرمى واللذين سوف يستخدمان فى تنقيح طريقة وصف ومعالجة التوصيل الكهربى والحرارى فى الفلزات. سوف نناقش أيضا، تأثير المجال المغناطيسى على حركة الإلكترونات الحرة ونبين على وجه الخصوص كيف أمكن استخدام رنين السيكلوترون (cyclotron resonance) وقياس

تأثير هول (Hall's effect) في الحصول على معلومات أساسية عن الفلزات.

ونظراً لوجود بعض الخصائص الشيقة التي تصاحب الفلزات عند دراستها في مدى التردد الضوئي، فإننا سنناقش بالتفصيل ارتباط التوصيلية الكهربائية المترددة ببعض الخصائص الضوئية وسنبين كيف استطاع نموذج الإلكترونات الحرة من تفسير معظم هذه الخصائص. سنناقش أيضاً، ظاهرة الانبعاث الأيوني الحراري للإلكترونات من الفلزات وأخيراً، سنقدم نقد لنموذج الإلكترونات الحرة وسنبين أوجه قصوره.

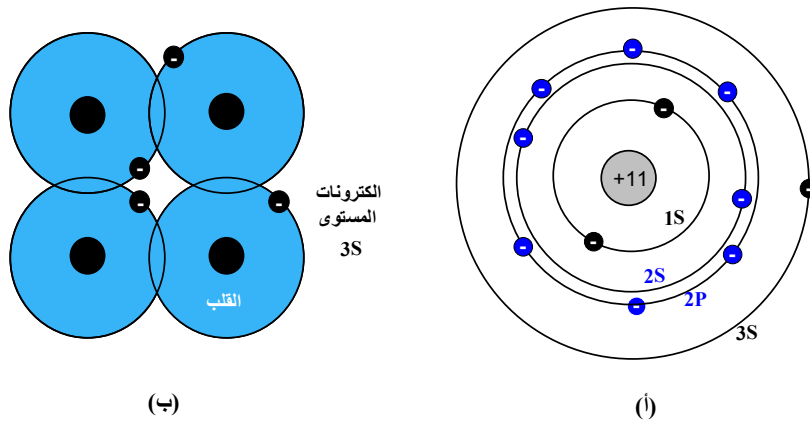
ORIGIN OF CONDUCTION ELECTRONS

2-8 منشأ إلكترونات التوصيل

إلكترونات التوصيل هي عبارة عن إلكترونات التكافؤ في الفلزات البسيطة. على سبيل المثال، تحتوي ذرة الصوديوم ($_{11}\text{Na}^{23}$) على 11 إلكترون تتوزع حول النواة في مستويات الطاقة على النحو $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ ، كما يبين الشكل 1-8 (أ)، وبالتالي يحتوي المدار الأخير ($3s$) على إلكترون واحد يسمى إلكترون التكافؤ.

عندما تتقارب ذرات الصوديوم لتكوين بلورة أحادية فإن مدارات إلكترونات التكافؤ ($3s$ في هذه الحالة) في الذرات المختلفة تتداخل، كما هو مبين بالشكل 1-8 (ب) وتصبح إلكترونات التكافؤ أكثر حرية وتتحرك داخل البلورة وكأنها لا تتبع ذرة بعينها وبالتالي يمكن اعتبارها إلكترونات حرة. في هذه الحالة، يمكن تخيل أن كل ذرة صوديوم تظهر على شكل جزئين: الجزء الأول هو القلب الداخلي للذرة ويحتوي النواة بالإضافة إلى 10 إلكترونات موجودة في المدارات الثلاثة الأولى ($1s^2 2s^2 2p^6$) والثاني عبارة عن

الإلكترون الحر الموجود في المدار الأخير (3S) (أو بالأحرى الذي يتحرك بحرية داخل البلورة). مما سبق يمكن القول بأن الإلكترونات الحرة لا تتبع ذرة بعينها بل تتبع البلورة ككل حيث يمكنها أن تتحرك داخل البلورة وتحمل التيار الكهربائي، في حين تكون إلكترونات قلب الذرة مقيدة في مكانها داخل الذرة ولا تكون حرة.



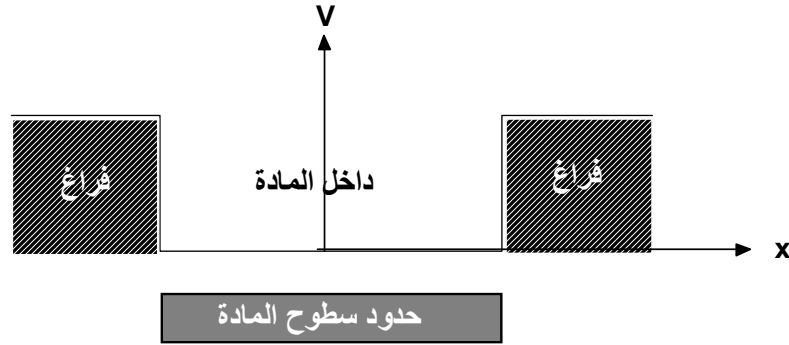
الشكل 8-1

يمكن حساب عدد الإلكترونات الحرة، فمثلا في بلورة الصوديوم الأحادية التكافؤ (وبالمثل في Li، Ag، K، ...) التي تحتوى على عدد N من الذرات فإنها تحتوى أيضا على عدد N من الإلكترونات الحرة التي تقوم بعملية حمل الشحنة الكهربائية داخل البلورة عند التأثير عليها بمجال كهربائي خارجي. بينما في بلورات الفلزات ثنائية التكافؤ (مثل Mg، Cd، Zn...) فإن عدد الإلكترونات الحرة يكون ضعف العدد السابق أي يكون $2N$ وفي البلورة الثلاثية التكافؤ يكون العدد 3 أمثاله في البلورة الأحادية وهكذا. بشكل عام، يمكن حساب عدد الإلكترونات الحرة في وحدة الحجم بالعلاقة، $\nu \frac{\rho N_A}{M}$ ، حيث ν تكافؤ الفلز، ρ كثافة المادة، N_A عدد أفوجادرو و M الجزيء الجرامى.

3-8 النموذج التقليدي لغاز الإلكترونات الحرة

THE CLASSICAL MODEL OF FREE-ELECTRON GAS

نموذج غاز الإلكترونات الحرة هو نموذج ظهر في القرن التاسع عشر لتصوير شكل إلكترونات التوصيل في مادة الفلز. في هذا النموذج يمكن تخيل أن إلكترونات التوصيل حرة تماما (مثل جزيئات الغاز) ماعدا وجود جهد على السطح الذي بدوره يقوم بحصر الإلكترونات داخل حدود العينة ولا تستطيع تجاوز سطوح المادة، كما هو مبين بالشكل 2-8. طبقا لهذا النموذج، فإن إلكترونات التوصيل تتحرك داخل العينة بدون تصادمات، ماعدا الانعكاس العرضي عند السطح، تماما كما في حالة جزيئات الغاز المثالي، لذلك نطلق على إلكترونات التوصيل غاز الإلكترونات الحرة.

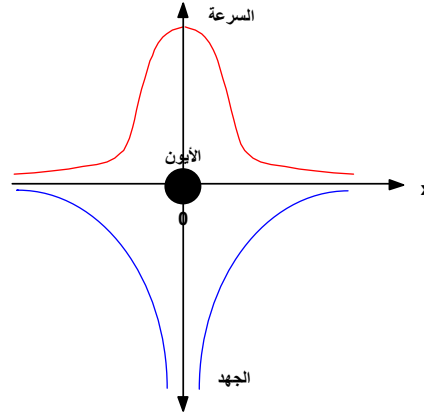


الشكل 2-8 مخطط الجهد في نموذج غاز الإلكترون الحر

الآن سنناقش بشئ من التفصيل نموذج الإلكترون الحر. من المدهش أن هذا النموذج يجب أن يصلح في كل الحالات بالرغم من أننا ومن الوهلة الأولى نتوقع تفاعل إلكترونات التوصيل بعضها مع بعض وتفاعلها أيضا مع الأيونات في الخلفية. يكون هذا التفاعل قويا، لذلك تعاني الإلكترونات الخارجية من التصادمات بصفة مستمرة لذا يجب

الأخذ في الاعتبار تصور الغاز على أنه غير مثالي بدرجة كبيرة. وهنا يبرز التساؤل التالي، إذا كان الأمر كذلك، فلماذا يصلح حينئذ نموذج غاز الإلكترون الحر؟ كانت الإجابة على هذا التساؤل الأساسي غير معروفة للعلماء الأوائل الذين افترضوا هذا النموذج. أما الآن فنحن نعرف الإجابة، ولكن حيث إنها تحتاج استخدام بعض مفاهيم ميكانيكا الكم فمن الأفضل تأجيل مناقشتها إلى الباب التالي (الجزء الثاني) وسنقدم هنا بياناً كيفي مختصر.

السبب في أن التفاعلات بين الأيونات تبدو ضعيفة سيتضح فيما يلي. بالرغم من أن الإلكترون يتفاعل مع الأيون من خلال الجذب الكولومي، إلا أن التأثيرات الكمية تدخل جهداً تنافرياً إضافياً يحاول إلغاء الجذب الكولومي، الأمر الذي معه يكون الجهد الكلي الناتج والذي يعرف بالجهد-الزائف (pseudopotential) ضعيفاً وخاصة في حالة المعادن القلوية. الطريقة الأخرى لتوضيح ذلك وهي ملاحظة أنه، عندما يمر إلكترون بأيون فإن سرعته تتزايد بشكل فجائي في المنطقة المجاورة للأيون، نتيجة التناقص في الجهد، كما هو موضح في الشكل 8-3. لهذا السبب، فإن الإلكترون يقضي جزءاً صغيراً من الوقت بالقرب من الأيون، حيث يكون الجهد قوياً بينما يقضي معظم الوقت حيث يكون الجهد ضعيفاً وبذلك يتصرف الإلكترون كما لو كان حراً. هذا بالإضافة إلى أنه، عندما يكون الإلكترون بعيداً جداً عن الأيون فإنه يكون محجوباً عنه بواسطة تأثير الإلكترونات الأخرى والتي يمكن القول بأنها تكون قناعاً يحجب الإلكترون عن النواة.



الشكل 3-8 تغير السرعة الموضعية للإلكترون فى الفراغ.

نأتى الآن إلى تفاعل الإلكترونات فيما بينها وإلى أسباب أن هذا التفاعل يكون ضعيفا. فى الحقيقة، يوجد سببين لذلك: السبب الأول هو انه طبقا لمبدأ باولى للاستبعاد فإن الإلكترونات التى لها لف مغزلي متوازي تميل إلى البقاء بعيدة بعضها عن بعض. ثانيا، وحتى لو كان اللف المغزلي فى اتجاه مضاد فإن الإلكترونات تميل إلى البقاء بعيدة بعضها عن بعض لكي تقلل طاقة النظام. عندما يصبح الإلكترونين متقاربين جدا فإن طاقة الوضع الكولومى تصبح كبيرة جدا وهذا ينتهك ميل النظام الإلكتروني بأن يكون له أقل طاقة ممكنة. عند تنفيذ هذين الاعتبارين رياضيا تنتج الحالة التالية. يحاط كل إلكترون بمنطقة كروية تكون خالية من الإلكترونات الأخرى وتسمى الفجوة وأحيانا تسمى بفجوة فيرمى (Fermi hole) ويكون لها نصف قطر حوالي 1\AA . عندما يتحرك الإلكترون فإن فجوته تتحرك معه. الآن، نرى لماذا يكون التفاعل فيما بين الإلكترونات ضعيفا. إذا قمنا بفحص التفاعل بين إلكترونين معينين فإننا نجد أن الإلكترونات الأخرى تقوم بتوزيع نفسها بالشكل الذي معه يكون الإلكترونان قيد الفحص محجوبين أحدهما عن الآخر، وبالتالي فإن التفاعل بينهما يكون ضعيفا جدا.

يختلف غاز الإلكترون الحر في الفلزات عن الغاز العادي في بعض النواحي المهمة: أولاً، يكون غاز الإلكترون الحر مشحوناً على خلاف الغاز العادي (الذي يكون عبارة عن جزيئات متعادلة). في الحقيقة، يمكن تشبيه غاز الإلكترونات الحر بالبلازما (plasma). ثانياً، يكون تركيز الإلكترونات في الفلزات كبيراً جداً، $N \cong 10^{29} \text{ electron/cm}^3$ ، بينما يكون الغاز العادي في حدود $N \cong 10^{25} \text{ electron/cm}^3$ ، وبمقارنة حجم عدد الإلكترونات (أو الجزيئات) مع حجم البلورة (أو الإناء في حالة الغاز العادي) نجد أنه يمكن إهمال حجم الإلكترونات. أخيراً يمكن تلخيص أهم فروض نموذج غاز الإلكترونات الحرة التقليدي في الفلزات على النحو التالي: 1- يشبه غاز الإلكترونات الحرة الغاز العادي في كثير من الأوجه منها: أنه يمكن إهمال حجم مكوناته (حجم الإلكترونات) مقارنة بالحجم الكلي الذي يشغله الغاز، ويمكن إهمال القوى المتبادلة بين الإلكترونات الحرة. 2- يمكن وصف حركة كل جسيم (كل إلكترون) بالإحداثيات ومركبات السرعة. 3- يكون الغاز الإلكتروني في حالة اتزان حراري مع الشبكة البلورية.

مما سبق يمكننا أن نخلص بأنه طبقاً لنظرية غاز الإلكترونات الحرة، يمكننا أن نتخيل أن الفلز كما لو يتكون من أيونات موجبة موزعة بشكل هلامي منتظم وتسبح في بحر من الشحنات السالبة وبذلك لا يوجد تفاعل بين الإلكترونات والأيونات.

4-8 التوصيلية الكهربائية للفلزات طبقا للنموذج التقليدي

Electrical Conductivity of Metals According to the Classical Model

نجحت نظرية غاز الإلكترونات الحرة في تفسير العديد من الظواهر الفيزيائية وعلى رأسها قانون أوم (Ohm's law) للتوصيل الكهربائي في الفلزات. ينص هذا القانون على أنه " عند تطبيق فرق جهد كهربائي، V ، على سلك معدني فإن فرق الجهد يسبب مرور تيار كهربائي، I ، داخل السلك طبقا للعلاقة،

$$I = \frac{1}{R}V \quad 1-8$$

حيث R المقاومة الكهربائية للسلك. وعند أخذ أبعاد السلك في الاعتبار (الطول، مساحة المقطع)، كما هو موضح بالشكل 4-8، يمكن الحصول على كثافة التيار الكهربائي، المجال الكهربائي والمقاومة الكهربائية على النحو التالي،

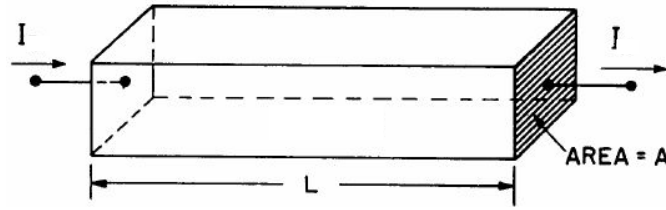
$$J = \frac{I}{A} \quad \& \quad E = \frac{V}{L} \quad \& \quad R = \frac{L\rho}{A} \quad 2-8$$

حيث J كثافة التيار الكهربائي و E شدة المجال الكهربائي و R المقاومة الكهربائية و ρ المقاومة النوعية لمادة السلك. تعرف التوصيلية النوعية، σ ، بأنها مقلوب المقاومة النوعية، ρ ، بمعنى أن،

$$\sigma = \frac{1}{\rho} \quad 3-8$$

بالتعويض من المعادلات 2-8 و 3-8 في المعادلة 1-8 نحصل على،

$$j = \sigma E \quad 4-8$$



الشكل 4-8

تبين المعادلة 4-8 أن كثافة التيار في الموصل تتناسب مع شدة المجال الكهربى المتكون عبر الموصل وهذا أيضا هو شكل من أشكال قانون أوم. يكون ثابت التناسب فى المعادلة 4-8 هو عبارة عن التوصيلية النوعية، σ ، وهى كمية فيزيائية تصف الخصائص الكهربائية للمادة وفيما يلى يمكن إثبات أنها ترتبط بالإلكترونات التوصيل فى الفلز.

ينتج التيار الكهربى من حركة إلكترونات التوصيل تحت تأثير المجال الكهربى نظرا لأن الإلكترونات عبارة عن جسيمات مشحونة. فى الفلز تكون إلكترونات التوصيل هي المسئولة عن التوصيل لان الأيونات تكون مقيدة مع نقط الشبكة وتهتز حول مواضع اتزانها.

لمناقشة حركة إلكترونات التوصيل فى المجال الكهربى سنعتبر فيما يلى حركة إلكترون واحد. عندما يتحرك الإلكترون فى مجال كهربى شدته E فإنه يتتأثر بقوة مقدارها $-eE$ ، حيث $-e$ شحنة الإلكترون. ونظرا لتصادمات الإلكترون مع مكونات الوسط، فإنه توجد قوة احتكاك مقدارها $-m^* \frac{v}{\tau}$ ، حيث v سرعة الإلكترون و τ زمن

التصادم و m^* هي الكتلة الفعالة للإلكترون. باستخدام قانون نيوتن نحصل على،

$$m^* \frac{dv}{dt} = -eE - m^* \frac{v}{\tau}.$$

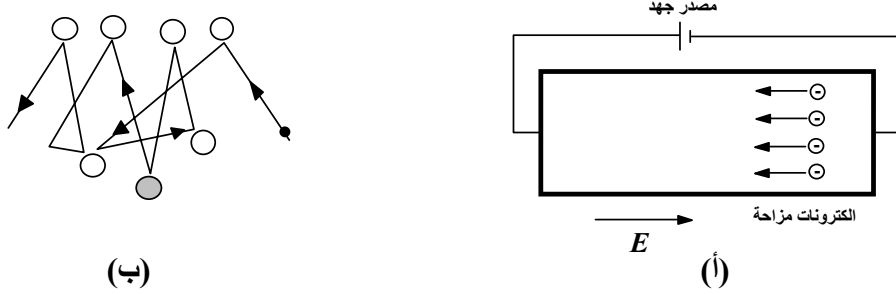
نرى أن تأثير التصادم في صورة الاحتكاك أو قوة اللزوجة يميل إلى تخفيض السرعة إلى قيمة الصفر. سنهتم فقط بحل المعادلة السابقة في حالة الاستقرار (حالة الثبات)، أي أن $\frac{dv}{dt} = 0$. في هذه الحالة، يكون الحل المناسب للمعادلة 5-8 على الصورة الآتية،

$$v = - \frac{e\tau}{m^*} E . \quad 6-8$$

تسمى هذه السرعة بسرعة الإلكترون في حالة الاستقرار، وفيما يتعلق بالاحتكاك تسمى عادة بالسرعة النهائية وتكون في عكس اتجاه المجال نظرا للشحنة السالبة على الإلكترون.

يجب أن نفرق بين نوعين من السرعة يصاحبان الإلكترون. السرعة التي تظهر في المعادلة 6-8 تسمى السرعة الإزاحية أو الانجرافية (drift velocity). تترابط هذه السرعة على سرعة أخرى أكبر بكثير وتعرف بالسرعة العشوائية (random velocity) وتنتج عن الحركة العشوائية للإلكترون. تماما كما في حالة الغاز العادي فإن للإلكترونات حركة عشوائية حتى في غياب المجال الخارجي وتكون ناتجة عن حقيقة أن الإلكترونات تتحرك وتتصادم ويتغير اتجاهها. توجد أيضا، الحركة العشوائية، والتي تكون مسئولة عن غياب التيار، في وجود المجال ولكن في الحالة الراهنة توجد محصلة سرعة إضافية في اتجاه عكس اتجاه المجال وتعطى بالمعادلة 6-8. يبين الشكل 5-8 الفرق بين السرعة العشوائية والسرعة الإزاحية. سنرمز إلى السرعة العشوائية بالرمز v_r والسرعة الإزاحية

بالرمز v_d ، حيث $v_d \ll v_r$ ، كما سيتضح لاحقا.



الشكل 5-8 (أ) تطبيق مجال كهربائي على سلك معدني بواسطة مصدر جهد. (ب) بيان للسرعة العشوائية والسرعة الإزاحية للإلكترونات، حيث تمثل الدوائر مراكز تشتت.

يمكن حساب كثافة التيار، J ، من المعادلة 6-8. بما أن الشحنة هي $(-Ne)$ لكل وحدة حجم وحيث أن السرعة الإزاحية للإلكترونات تعطى بالمعادلة 6-8، فإن كمية الشحنة التي تعبر وحدة المساحة من المقطع في وحدة الزمن تعطى بالعلاقة،

$$J = (-Ne)v_d = (-Ne)\left(-\frac{e\tau}{m^*}E\right) = \frac{Ne^2\tau}{m^*}E. \quad 7-8$$

يكون التيار موازيا للمجال الكهربائي. بمقارنة المعادلة الأخيرة مع قانون أوم (4-8) يمكن الحصول على التعبير الآتي للتوصيلية الكهربائية الذي نبحث عنه.

$$\sigma = \frac{Ne^2\tau}{m^*}. \quad 8-8$$

يتضح من هذه المعادلة أن التوصيلية تزداد بزيادة تركيز الإلكترونات، N . كما يتضح أيضا أن التوصيلية تتناسب عكسيا مع m^* وهذا منطقي لأنه كلما زادت كتلة الجسيم كلما كان تحركه صعبا داخل الشبكة. يأتي التناسب مع τ لأن τ هو في الحقيقة الزمن بين تصادمين متتاليين، أي متوسط زمن العمر الحر ونلاحظ انه كلما كان τ اكبر فإن الإلكترون يحتاج زمن اكبر للتعجيل بواسطة المجال بين التصادمات وتكون السرعة

الإزاحية أكبر وبالتالي تزداد التوصيلية σ .

يمكن حساب التوصيلية الكهربائية بواسطة المعادلة 8-8 بمعرفة قيم المتغيرات في الطرف الأيمن. يسمى متوسط زمن العمر الحر، τ ، أيضا بزمن الاسترخاء (relaxation time). لمعرفة سبب هذه التسمية، دعنا نفترض انه تم تطبيق مجال كهربى لفترة طويلة كافية لتتكون السرعة الإزاحية، $v_{d,0}$ ، ثم عند تلك اللحظة تم إزالة المجال فجأة. بعد إزالة المجال فإن السرعة الإزاحية تتبع العلاقة التى تنتج من المعادلة 8-5 عند وضع $E = 0$ ، أي أن،

$$m^* \frac{dv}{dt} = -m^* \frac{v}{\tau}. \quad 9-8$$

يكون حل هذه المعادلة المناسب للشروط الابتدائية على الصورة،

$$v_d(t) = v_{d,0} e^{-t/\tau}. \quad 10-8$$

تبين هذه المعادلة أن السرعة الإزاحية تؤول للصفر عند زمن الاسترخاء ويسمى هذا السلوك بعملية الاسترخاء. يبين الجدول 8-1 التوصيلية الكهربائية وتركيز الإلكترونات وزمن الاسترخاء لبعض المعادن.

جدول 8-1 التوصيلية الكهربائية وتركيز الإلكترونات وزمن الاسترخاء لبعض المعادن.

العنصر	$\sigma, \Omega^{-1} \cdot m^{-1}$	N, m^{-3}	τ, s	العنصر	$\sigma, \Omega^{-1} \cdot m^{-1}$	N, m^{-3}	τ, s
النحاس	5.88	8.45	2.7	الصوديوم	2.11	2.5	3.1
الفضة	6.21	5.85	4.1	البوتاسيوم	1.39	1.3	4.3
الذهب	4.55	5.90	2.9	الربيدوم	0.80	1.1	5.75
الزنك	1.69	13.10	--	السيوميوم	0.50	0.85	--
الكاديوم	1.38	9.28	--	الانديوم	1.14	11.5	--

للحصول على بعض الملامح الفيزيائية بوضوح يمكن كتابة زمن الاسترخاء على الصورة التالية،

$$\tau = \frac{l}{v_r}, \quad 11-8$$

حيث l الزمن بين تصادمين متتاليين و v_r هي السرعة العشوائية. طبقاً للمعادلة السابقة يمكن كتابة التوصيلية الكهربائية على الصورة،

$$\sigma = \frac{Ne^2 l}{m^* v_r}. \quad 12-8$$

على ضوء المعادلة السابقة يمكن تفسير التباين الكبير في قيم التوصيلية الكهربائية للمعادن والمواد شبه الموصلة، حيث يرجع ذلك إلى اختلاف كل من تركيز الإلكترونات ومتوسط طول المسار الحر والسرعة العشوائية للإلكترونات.

الآن يمكن مناقشة منشأ زمن الاسترخاء للإلكترونات. تم إدخال زمن الاسترخاء في المعالجة الحالية نتيجة وجود قوى الاحتكاك التي تعيق حركة الإلكترون. تعزى قوى الاحتكاك هذه إلى وجود تصادمات للإلكترونات مع أيونات الفلز أثناء حركته داخل الشبكة البلورية تؤدي إلى تخفيض كمية حركه الإلكترونات. يظهر هذا النموذج عدم اتفاق مع العديد من النقاط التجريبية، على سبيل المثال، يمكن حساب متوسط زمن المسار الحر بواسطة المعادلة 8-8. بوضع $\tau \cong 10^{-14} \text{ s}$ و $v_d \cong 10^6 \text{ m.s}^{-1}$ نجد أن

$$l \cong 10^{-8} \text{ m} \cong 10^2 \text{ \AA}$$

مرة قدر المسافة البينية للذرات. تكون هذه المسافة اكبر بكثير من المسافة المتوقعة إذا

كانت الإلكترونات تصطدم حقا مع الأيونات عندما تمر بها، خاصة في تراكيب العبوة المتراسة والتي فيها يتوقع أن الإلكترونات لا تسير مسافة كبيرة بين التصادمات. يمكن شرح هذا التناقض فقط بواسطة المفاهيم الكمية.

طبقا لميكانيكا الكم، فإن للإلكترون طبيعة موجية، حيث يعطى الطول الموجى له بواسطة علاقة دى برولى (de Broglie) على النحو، $\lambda = \frac{h}{m^* v_r}$. ومعروف من نظرية انتشار الموجات فى التراكيب المتفردة انه عندما تنتشر موجه خلال شبكة دورية فإنها تستمر فى الانتشار بشكل غير محدد دون أن تنتشت. فى هذه الحالة، تقوم ذرات الشبكة بامتصاص طاقة من الموجه ثم تبثها مرة أخرى بحيث تكون المحصلة النهائية هو جعل الموجه تستمر فى الانتشار بدون تعديل فى الاتجاه أو فى الشدة، بالرغم من حدوث تغير فى سرعة الانتشار. هذا ما يحدث لموجه الإلكترون فى الشبكة المنتظمة، ماعدا أننا نتعامل مع موجات مادية.

8-5 اعتماد التوصيلية الكهربائية على درجة الحرارة

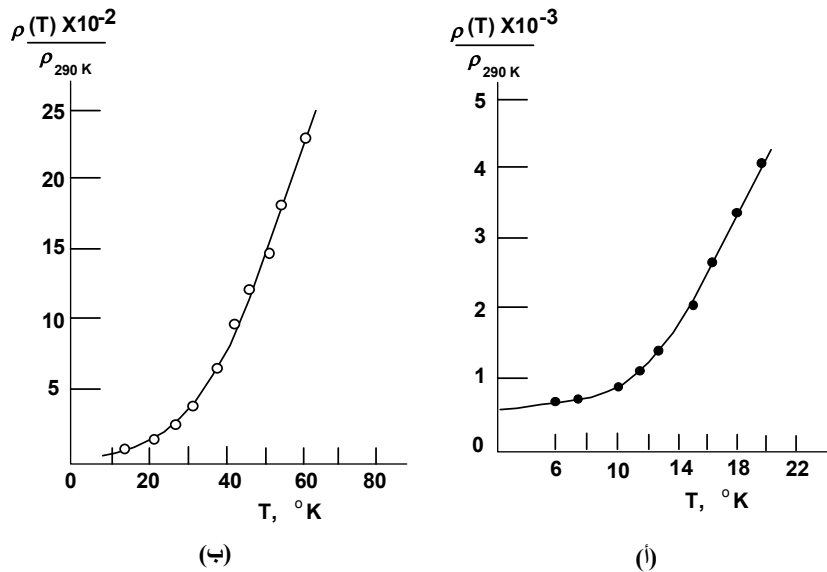
TEMPERATURE DEPENDENCE OF ELECTRICAL CONDUCTIVITY

تتغير التوصيلية الكهربائية للفلز مع درجة حرارته ويوصف هذا التغير عادة بتغير المقاومة النوعية، ρ ، مع درجة الحرارة، كما هو مبين بالشكل 8-6 للفلز. يتبين من الشكل السابق أن المقاومة النوعية تزداد مع درجة الحرارة. فى البداية تكون الزيادة طفيفة ثم تكون الزيادة خطية مع ارتفاع درجة الحرارة حتى درجة الانصهار. ينطبق هذا

السلوك على معظم الفلزات تقريبا. لتفسير هذا السلوك، نستخدم التعبير الرياضي للمقاومة طبقا للمعادلة 8-8 ويكون على الصورة،

$$\rho = \frac{m^*}{Ne^2} \frac{1}{\tau} \quad 13-8$$

في الحقيقة، أن زمن التصادم τ هو مقدار احتمال أن يعاني الإلكترون من التشتت (بواسطة التصادم) في وحدة الزمن، بمعنى لو أن $\tau = 10^{-16} \text{ s}$ فإن معنى ذلك أن الإلكترون يعاني عدد 10^{16} من التصادمات في الثانية الواحدة. ولكن كما بينا من قبل أن الإلكترون يعاني من التصادمات بسبب عدم كمال البناء البلوري بسبب وجود الشوائب. يمكن تقسيم العيوب عن كمال البناء البلوري إلى صنفين. الصنف الأول هو نتيجة اهتزاز أيونات الشبكة (الفونونات) حول مواضع اتزانها نتيجة الإثارة الحرارية للأيونات. الصنف الثاني هو مختلف العيوب الساكنة مثل الشوائب الغريبة والعيوب البلورية.



الشكل 6-8 اعتماد المقاومة النوعية لفلز الصوديوم على درجة الحرارة: (أ) في مدى درجات الحرارة المنخفضة، (ب) في مدى درجات الحرارة المرتفعة.

مما سبق يتضح أن احتمال تشتت الإلكترون هو مجموع احتمالات تصادم الإلكترون مع فونون واحتمال تصادمه مع عيب بلوري وبالتالي يمكن كتابة زمن التصادم

على الصورة،

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{ph}} + \frac{1}{\tau_i}, \quad 14-8$$

حيث يكون الحد الأول في هذه المعادلة نتيجة الفونونات والذي من المتوقع أن يعتمد على درجة الحرارة، T . يكون الحد الثاني نتيجة الشوائب وهو لا يعتمد على درجة الحرارة.

بالتعويض من المعادلة 14-8 في المعادلة 13-8 نجد أن،

$$\rho = \rho_i + \rho_{ph}(T) = \frac{m^*}{Ne^2} \frac{1}{\tau_i} + \frac{m^*}{Ne^2} \frac{1}{\tau_{ph}} \quad 15-8$$

وهكذا نلاحظ أن المقاومة النوعية عبارة عن جزئين: الجزء الأول (ρ_i) يكون نتيجة التشتت بواسطة الشوائب وهو لا يعتمد على درجة الحرارة ويسمى المقاومة النوعية المتبقية (المتخلفة). ينتج الجزء الآخر من المقاومة النوعية من التشتت بواسطة الفونونات وهذا الجزء يعتمد على درجة الحرارة ويسمى المقاومة النوعية المثالية، والذي يعنى المقاومة النوعية للعينة النقية. يطلق على المفهوم السابق للمقاومة النوعية (المعادلة 8-15) قاعدة ماتثييسن (Matthiessen rule).

عند درجات الحرارة المنخفضة فإن التشتت يتم بواسطة الفونونات ويكون صغيرا

ويمكن إهماله، وبالتالي فإن $\tau_{ph} \rightarrow 0$ ويترتب على ذلك أن $\rho_{ph} \rightarrow \infty$ وتكون المقاومة

النوعية $\rho = \rho_i$ وهى قيمة ثابتة وهذا يتفق مع الشكل 8-6.

مع ارتفاع درجة الحرارة فإن التشتت بواسطة الفونونات يصبح ذا قيمة فعالة

وبالتالي فإن $\rho_{ph}(T)$ تزداد وهذا يسبب زيادة فى المقاومة الكلية. عندما تكون درجة

الحرارة عالية بالقدر الكافي يصبح هذا التشتت سائدا وتكون المقاومة النوعية $\rho \cong \rho_{ph}(T)$. فى مدى درجات الحرارة المرتفعة تزداد المقاومة زيادة خطية مع درجة الحرارة.

من المتوقع أن المقاومة النوعية نتيجة الشوائب، ρ_i ، يجب أن تزداد مع زيادة تركيز الشوائب وسوف نرى أن ρ_i تتناسب مع تركيز الشوائب، N_i ، حتى لو كان هذا التركيز صغيرا. كما نلاحظ أن $\rho_{ph} \gg \rho_i$ عند التركيز الصغير للشوائب ماعدا عند درجات الحرارة المنخفضة. فيما يلى سوف نشق صيغ تقريبية لأزمنة التصادم وذلك باستخدام مفاهيم النظرية الحركية للغازات. للتبسيط، سوف نفترض أن التصادمات تحدث كما لو كانت بين كرات من النوع الصلب.

بالنسبة لتصادم الإلكترونات مع الشوائب فإن زمن التصادم يعطى بالعلاقة،

$$\tau_i = \frac{l_i}{v_r} \quad 16-8$$

حيث l_i متوسط المسار الحر للتصادم مع الشوائب. بفرض أن مساحة مقطع التشتت للشائبة، σ_i ، (التي تعرف على أنها المساحة التى تمثلها الذرة الشائبة أمام الإلكترون الساقط) فإنه على غرار المفهوم المؤلف من النظرية الحركية للغازات يمكن كتابة،

$$l_i \sigma_i N_i = 1 \quad \text{وبالتالى،}$$

$$l_i = \frac{1}{\sigma_i N_i} \quad 17-8$$

من المتوقع أن يكون المقدار σ_i هو نفس المساحة الهندسة الفعلية للذرة الشائبة، أي انه

بشكل تقريبي يكون $\sigma_i \cong 1 \text{ \AA}^2$. بالتعويض من المعادلات 8-16 و 8-17 فى المعادلة 8-15 يمكن إيجاد ρ_i ونجد أن ρ_i تتناسب مع تركيز الشوائب N_i .

الآن سنحاول حساب τ_{ph} وهو صعب بعض الشيء ولكن المعادلات مثل 8-16

و 8-17 لا تزال صالحة حيث يمكننا كتابة،

$$l_{ph} = \frac{1}{N_{ion} \sigma_{ion}}, \quad 18-8$$

حيث ρ_{ion} مساحة مقطع التشتت للأيون و N_{ion} تركيز أيونات الفلز فى الشبكة البلورية. يجب أن نلاحظ هنا أن ρ_{ion} ليس لها علاقة بمساحة المقطع الهندسي للأيون، ولكنها تساوى المساحة التى يمثلها الأيون المتقلب حراريا بالنسبة إلى الإلكترون المار به. بفرض أن إزاحة الأيون عن موضع الاتزان هي x ، فإن متوسط مساحة مقطع التشتت تكون تقريبا على النحو

$$\sigma_{ion} \cong \pi \langle x^2 \rangle, \quad 19-8$$

حيث $\langle x^2 \rangle$ تمثل القيمة المتوسط للمتغير x^2 . يمكن تقدير $\langle x^2 \rangle$ كما يلى. بما أن الأيون يكون عبارة عن متذبذب توافقى فإن متوسط طاقة وضعه تساوى نصف طاقته الكلية وهكذا باستخدام الشكل الكمي للمتذبذب نجد،

$$\frac{1}{2} k \langle x^2 \rangle = \langle E \rangle = \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / kT} - 1}. \quad 20-8$$

وبإدخال درجة حرارة ديباي (θ) حيث $\hbar \omega = k\theta$ يمكن التعويض فى المعادلة 8-15

ونحصل على $\rho_{ph}(T)$ على الصورة،

$$\rho_{ph}(T) = \left(\frac{\pi \hbar}{k \theta M} \right) \frac{1}{e^{\theta/T} - 1}, \quad 21-8$$

حيث M كتلة الأيون. في مدى درجات الحرارة $T \gg \theta$ يمكن كتابة المعادلة السابقة على الصورة،

$$\rho_{ph}(T) \cong \frac{\pi \hbar^2}{k \theta M} \frac{T}{\theta}. \quad 22-8$$

يتضح من هذه المعادلة أن المقاومة النوعية تعتمد خطياً على درجة الحرارة وهذا يتفق مع النتائج المعملية.

6-8 السعة الحرارية طبقاً لنموذج غاز الإلكترونات الحرة

يتم معاملة إلكترونات التوصيل في نموذج غاز الإلكترونات الحرة كجسيمات حرة تطيع قوانين الميكانيكا التقليدية. في هذا الفصل سوف نحسب السعة الحرارية لكل مول واحد من الإلكترونات الحرة وذلك على ضوء نموذج درودى ولورنتز (Drude-Lorentz).

من النظرية الحركية للغازات معروف جيداً أن للجسيم الحر المتزن عند درجة الحرارة T متوسط طاقة مقدارها $\frac{3}{2}kT$. لذلك فإن متوسط الطاقة لكل مول يكون على الصورة،

$$\langle \overline{E} \rangle = N_A \left(\frac{3}{2} kT \right) = \frac{3}{2} RT, \quad 23-8$$

حيث N_A هو عدد أفوجادرو و $R = N_A k$ الثابت العام للغازات. وتكون السعة الحرارية

للإلكترونات على الصورة،

$$C_e = \frac{\partial[E]}{\partial T} = \frac{3}{2}R \approx 3 \text{ cal/mol } ^\circ\text{A} . \quad 24-8$$

ويمكن كتابة السعة الحرارية الكلية للمعدن متضمنة الفونونات على الصورة،

$$C = C_{ph} + C_e . \quad 25-8$$

عند درجات الحرارة العالية تصبح المعادلة السابقة على الصورة،

$$C = 3R + \frac{3}{2}R = 4.5R . \quad 26-8$$

$$\approx 9 \text{ cal/mole } ^\circ\text{A}$$

تبين النتائج العملية أن السعة الحرارية للمعدن تساوى $3R$ تقريبا عند درجات الحرارة العالية تماما كما فى حالة المواد العازلة، بينما تبين القياسات الدقيقة (والتي تستبعد مشاركة الإلكترونات فى السعة الحرارية الكلية) أن C_e تكون اقل من القيمة التقليدية ($\frac{3}{2}R$) بمعامل قدرة 10^{-2} . ولكشف هذا التناقض يجب أن نتحول إلى بعض المفاهيم الكمية.

طبقا لميكانيكا الكم فإن طاقة الإلكترون فى المعدن تكون مقننة، كما يبين الشكل

7-8(أ). يتضح من هذا الشكل أن الإلكترونات فى المعدن (عند درجة حرارة $T = 0^\circ\text{K}$)

تحتل مستويات طاقة طبقا لمبدأ بولى للاستبعاد والذي ينص على أن كل مستوى طاقة

يتملى بعدد إلكترونين اثنين، لأحدهما عزم مغزلي لأعلى وللآخر عزم مغزلي لأسفل.

وبناء على ذلك، فإن إلكترونين اثنين فقط يشغلان مستوى الطاقة السفلى وآخرين يشغلان

المستوى الذي يعلوه... وهكذا حتى يتم تسكين جميع الإلكترونات. تسمى طاقة أعلى

مستوى مشغول بطاقة فيرمي (Fermi energy) وتكون في حدود 5 إلكترون فولت، كما يسمى مستوى الطاقة هذا بمستوى فيرمي (Fermi level). يتم وصف توزيع الإلكترونات بدلالة الطاقة عادة بواسطة دالة تسمى دالة توزيع الطاقة (energy distribution function) وتمثل هذه الدالة احتمال وجود (أو عدد) الإلكترونات عند طاقة معينة. عند درجة الصفر المطلق ($T = 0 \text{ } ^\circ\text{K}$) تكون دالة التوزيع على الصورة،

$$f(E) = \begin{cases} 1 & E < E_F \\ 0 & E > E_F \end{cases} \quad 27-8$$

تدل المعادلة السابقة على أن مستويات الطاقة التي تقع أسفل مستوى فيرمي (E_F) تكون ممتلئة تماما، بينما تكون المستويات التي تقع أعلى مستوى فيرمي فارغة تماما، كما هو مبين في الشكل 7-8 (ب). عندما ترتفع درجة حرارة النظام ($T > ^\circ\text{K}$) فإن الطاقة الحرارية تثير الإلكترونات ويتغير شكل دالة التوزيع. في الحقيقة، لا تتوزع الطاقة الحرارية على جميع الإلكترونات بالتساوي، كما في المعالجة التقليدية، وذلك لأن الإلكترونات التي تقع بعيدا أسفل مستوى فيرمي لا تمتص الطاقة وذلك لأنها لو فعلت فإنها ستنتقل إلى المستوى الأعلى والذي يكون مشغولا بالفعل وبالتالي فإنها لا تمتص الطاقة. لهذا فإن الإلكترونات التي تمتص الطاقة الحرارية هي فقط الإلكترونات التي تقع قريبة أسفل مستوى فيرمي وبالتالي تثار وتنتقل إلى مستويات طاقة أعلى من مستوى فيرمي. يكون عدد هذه الإلكترونات صغيرا بالمقارنة بالعدد الكلي للإلكترونات ويكون هذا العدد هو الذي يشارك في السعة الحرارية وفي هذه الحالة تكتب دالة التوزيع (عند

($T \neq 0^\circ\text{K}$) على الصورة،

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1} \quad 28-8$$

تسمى الدالة السابقة دالة توزيع فيرمى-ديراك (Fermi-Dirac). وكما يبين الشكل

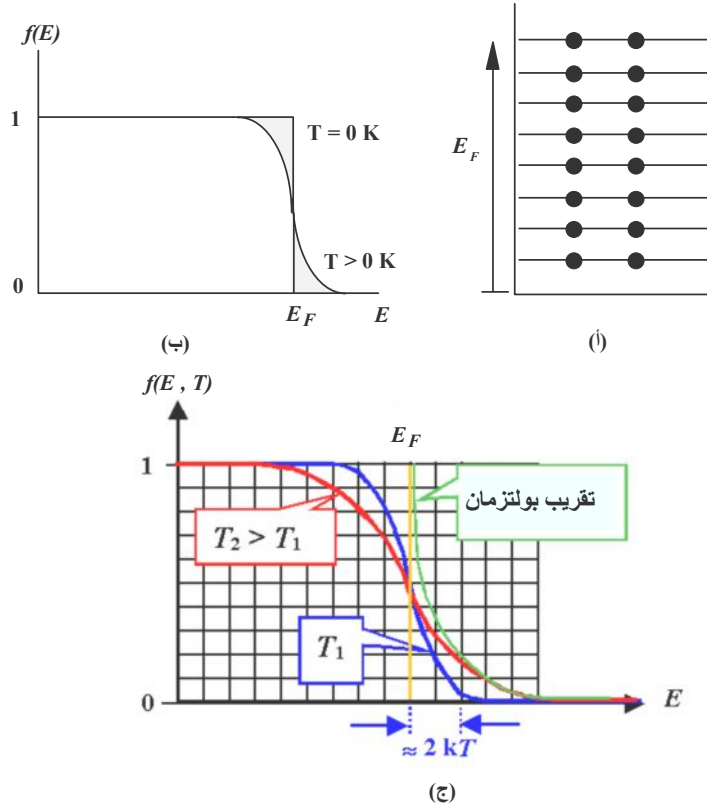
7-8(ب) تكون هذه الدالة شبيهة إلى حد كبير بدالة التوزيع عند الصفر المطلق ما عدا

بالقرب من مستوى فيرمى، حيث تم إثارة عدد صغير من الإلكترونات أسفل المستوى

وانتقلت إلى أعلاه. يمكن استخدام دالة التوزيع (المعادلة 28-8) لحساب الطاقة الحرارية

وبالتالى يمكن حساب السعة الحرارية للإلكترونات. يمكننا حساب السعة الحرارية بشكل

جيد بواسطة تقريب مبسط كما يلى.



الشكل 7-8 (أ) يتم ملئ مستويات الطاقة بالإلكترونات طبقاً لمبدأ باولى. (ب) دالة التوزيع عند الصفر

المطلق وعند درجة حرارة أعلى من الصفر المطلق. (ج) تغير دالة التوزيع مع ارتفاع درجة

الحرارة.

بما أن الإلكترونات التي تقع في المدى kT من مستوى فيرمي هي فقط التي تثار، فإننا يمكننا أن نخلص بأن عددها يكون kT/E_F . لهذا، فإن عدد الإلكترونات التي تثار لكل مول يكون في حدود $N_A(kT/E_F)$. وحيث أن كل إلكترون يمتص متوسط طاقة مقداره

$$kT, \text{ فإنه الطاقة الممتصة لكل مول تكون تقريبا في حدود, } \bar{E} = \frac{N_A(kT)}{E_F}.$$

وتكون السعة الحرارية على الصورة،

$$C_e = 2R \frac{kT}{E_F}. \quad 29-8$$

يتضح من هذه المعادلة أن السعة الحرارية للإلكترونات تكون اقل من القيمة التقليدية (R) بالمعامل $\frac{kT}{E_F}$. بفرض أن $E_F = 5 \text{ eV}$ و $T = 300 \text{ }^\circ\text{K}$ فإن المعامل يكون $1/200$ ومن المدهش أن هذا التناقص الكبير في قيمة السعة الحرارية يتفق جيدا مع النتائج العملية.

تعرف درجة حرارة فيرمي (T_F) من العلاقة $E_F = kT_F$. وباستخدام هذا التعريف يمكن كتابة السعة الحرارية على الصورة،

$$C_e = 2R \left(\frac{T}{T_F} \right).$$

كما يمكن كتابة الشكل الدقيق للسعة الحرارية للمعدن على الصورة،

$$C_e = \frac{\pi^2}{2} R \left(\frac{T}{T_F} \right). \quad 30-8$$

وهكذا، يتضح من المعادلة السابقة أن السعة الحرارية تتناسب خطيا مع درجة

الحرارة.

7-8 سطح فيرمي FERM SURFACE

الإلكترونات في المعدن تكون في حالة حركة عشوائية مستمرة ويمكن اعتبارها جسيمات حرة، لذلك فإن طاقة الإلكترونات تعتبر كلها طاقة حركة يمكن كتابتها على الصورة،

$$E = \frac{1}{2} m^* v^2, \quad 31-8$$

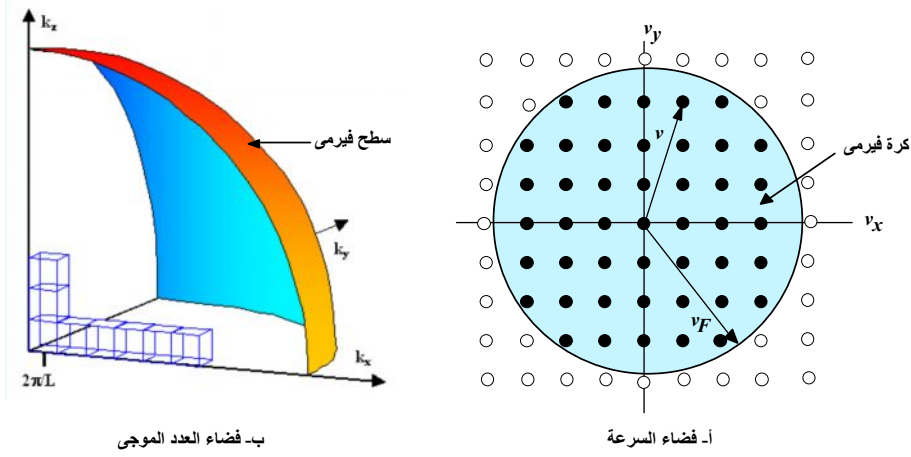
حيث v سرعة الجسيم.

دعنا الآن ندخل مبدأ فضاء السرعة الذي تكون المحاور فيه هي v_x و v_y و v_z . تمثل كل نقطة في هذا الفضاء سرعة معينة (مقداراً واتجاهاً). لفهم وتعريف سطح فيرمي، ندرس إلكترونات التوصيل في فضاء السرعة. وبما أن الإلكترونات تتحرك بسرعات عديدة ومختلفة وعشوائية فإنه يمكن تمثيلها بنقط تملأ فضاءاً متجانساً، كما هو ممثل في الشكل 8-8(أ). يبين الشكل 8-8(ب) فضاء العدد الموجي لمفهوم سطح فيرمي. يكون نصف قطر هذه الكرة هو سرعة فيرمي (v_F) والتي ترتبط بطاقة فيرمي بالعلاقة،

$$E_F = \frac{1}{2} m^* v_F^2. \quad 32-8$$

لاحظ، على كل حال أن كل النقط الواقعة خارج الكرة تكون فارغة (من الإلكترونات) وسبب ذلك أن هذه النقط تمثل طاقات أكبر من E_F وتكون غير مشغولة

بالإلكترونات عند $T = 0 \text{ } ^\circ\text{K}$ ، كما بيننا من قبل. وهكذا، تكون جميع النقاط داخل الكرة مشغولة بالكامل وتسمى هذه الكرة بكرة فيرمي وسطحها يسمى سطح فيرمي.



الشكل 8-8 مخطط يوضح كرة وسطح فيرمي.

يمثل سطح فيرمي أهمية كبيرة في العديد من ظواهر الحالة الصلبة، فعلى سبيل المثال، لا تتأثير خصائص الانتقال بشكل ملحوظ بدرجة الحرارة، حيث انه، عند رفع درجة الحرارة يثار فقط عدد قليل من الإلكترونات في الداخل وتنتقل إلى خارج سطح فيرمي ويكون لذلك تأثير طفيف جدا.

تكون سرعة فيرمي كبيرة جدا، فعند التعويض في المعادلة السابقة بالطاقة $E_F = 5 \text{ eV}$ نجد أن $v_F = (2E_F / m^*)^{1/2} \approx 10^6 \text{ m.s}^{-1}$ وهي أكبر من سرعة الضوء بمائة مرة. وهكذا فإن الإلكترونات الموجودة عند سطح فيرمي تتحرك بسرعة كبيرة جدا، بالإضافة إلى أن سطح فيرمي لا يعتمد على درجة الحرارة.

نتعين قيمة طاقة فيرمي بالدرجة الأولى بواسطة تركيز الإلكترونات، فكلما زاد التركيز كلما ارتفع مستوى الطاقة الأعلى اللازم لتسكين كل الإلكترونات (الشكل 8-

7(ب)) وبالتالي تكون E_F أعلى. كما سنرى لاحقا، يمكن كتابة E_F على الصورة،

$$E_F = \frac{\hbar}{2m^*} (3\pi^2 N^{2/3}). \quad 33-8$$

فيما يلي سنناقش تأثير سطح فيرمي على بعض الخصائص الفيزيائية التي تمت معالجتها من قبل.

8-8 تأثير سطح فيرمي على التوصيلية الكهربائية

EFFECT OF FERMI SURFACE ON ELECTRICAL CONDUCTIVITY

لدراسة تأثير سطح فيرمي على التوصيلية الكهربائية ومقارنتها مع الصورة التقليدية نعتبر الشكل 8-8. في غياب المجال الكهربائي تتمركز كرة فيرمي عند نقطة الأصل، كما هو مبين بالجزء (أ) من الشكل. في هذه الحالة، تتحرك مختلف الإلكترونات بسرعة كبيرة جدا وتحمل تيارات مختلفة وتكون محصلة التيار النهائي صفرا نظرا لتماثل عشوائية الحركة في كل الاتجاهات. عند تطبيق مجال كهربائي في الاتجاه الموجب لمحور x (مثلا) فإن كل إلكترون يكتسب سرعة إزاحية $v_d = -(e\tau/m^*)E$ ، كما تبين المعادلة 8-6. تؤدي هذه السرعة إلى إزاحة سطح فيرمي في عكس اتجاه المجال المطبق كما يبين الشكل 8-8(ب). بالرغم من أن هذه الإزاحة تكون صغيرة جدا وبالرغم من أن معظم الإلكترونات تلاشى تأثير بعضها بعض (على شكل أزواج من الإلكترونات يتحرك في كل منها إلكترون في اتجاه عكس اتجاه حركة الإلكترون الآخر)، فإنه يوجد عدد قليل (بعض) من الإلكترونات لا يتلاشى تأثيرها (الجزء المظلل من الشكل) وبالتالي ينتج التيار

الكهربى المشاهد. يمكن حساب كثافة التيار الناتج كما يلى.

يكون جزء الإلكترونات (التي لم يتلاشى تأثيرها والتي تكون مسئولة عن التوصيل

الكهربى) هو v_d/v_F وبالتالي يكون تركيزها هو $N(v_d/v_F)$. وحيث أن كل إلكترون

يتحرك بسرعة $-v_d$ ، فإن كثافة التيار الناتج تعطى بالعلاقة،

$$J \approx -eN(v_d/v_F)(-v_d) = Nev_d.$$

بالتعويض عن السرعة الإزاحية، $v_d = -(e\tau/m^*)E$ ، نحصل على،

$$J = \frac{Ne^2\tau_F}{m^*} E,$$

حيث τ_F هو زمن تصادم الإلكترون الموجود عند سطح فيرمى. لذلك يمكن كتابة

التوصيلية الكهربائية على الصورة،

$$\sigma = \frac{Ne^2\tau_F}{m^*}.$$

34-8

المعادلة السابقة هي معادلة تقريبية ولا تختلف عن المعادلة التي حصلنا عليها

بالطريقة التقليدية فيماعدنا انه تم استبدال زمن التصادم τ بزمن تصادم فيرمى τ_F . وهكذا

يتبين أن الصورة الحقيقية للتوصيلية الكهربائية تختلف قليلا عن الصورة التقليدية التي

يفترض فيها أن جميع الإلكترونات تتحرك بسرعة v_d وجميعها تشارك بالتساوي فى حمل

التيار فى حين أن التيار يحمل بواسطة عدد قليل فقط وهى الإلكترونات التي تتحرك

بسرعة عالية. كما ترى، تعطى كلا الصورتين نفس النتيجة ولكن التصور الأخير هو

الأكثر دقة.

يتضح الآن أهمية سطح فيرمي في ظواهر النقل، حيث أن التيار الكهربائي يحمل بواسطة الإلكترونات التي تقع فقط بالقرب من سطح فيرمي، بينما ليس للإلكترونات التي تقع في العمق علاقة بالتوصيل الكهربائي.

8-9 التوصيلية الحرارية في المعادن THERMAL CONDUCTIVITY IN METALS

كما بيننا في الباب السابق، تتدفق الطاقة الحرارية من طرف القضيب الأعلى درجة حرارة إلى الطرف الأقل. يتناسب التيار الحراري (كمية الطاقة الحرارية التي تعبر وحدة المساحة من المقطع في وحدة الزمن) مع الميل الحراري، أي أن ،

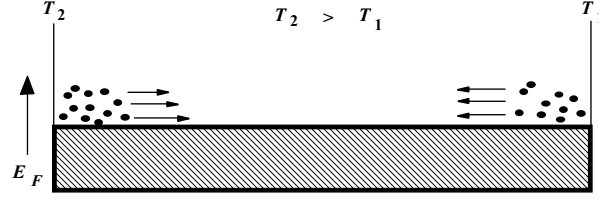
$$Q = -K \frac{dT}{dx} ,$$

حيث K تسمى التوصيلية الحرارية. في المواد العازلة تنتقل الحرارة أساساً بواسطة الفونونات، بينما في المعادن فإنها يمكن أن تنتقل بواسطة كل من الإلكترونات والفونونات. ولهذا يمكن كتابة التوصيلية الحرارية على صورة مجموع مشاركة كل من الإلكترونات والفونونات على النحو،

$$K = K_e + K_{ph} ,$$

حيث تشير K_e و K_{ph} إلى الإلكترونات والفونونات على الترتيب. في معظم المعادن تكون مشاركة الإلكترونات في التوصيل الحراري أكبر من مشاركة الفونونات، حيث $K_{ph} \approx 10^{-2} K_e$ ، لذا سنهمل تأثير الفونونات في المعالجة الحالية.

يمكن توضيح كيف تحدث عملية التوصيل الحراري بواسطة الإلكترونات بالشكل



الشكل 9-8 مخطط يوضح فيزياء التوصيل الحراري وفيه تقوم الإلكترونات ذات الطاقة الأعلى (الموجودة على اليسار) بنقل الطاقة الحرارية إلى الطرف الأيمن.

عند الطرف الساخن من القضيب (على اليسار من الشكل)، تتحرك الإلكترونات في جميع الاتجاهات ولكن جزء معين منها يتحرك إلى اليمين ويحمل الطاقة الحرارية إلى الطرف البارد من القضيب. بالمثل، عند الطرف البارد من القضيب (على اليمين من الشكل)، تتحرك الإلكترونات في جميع الاتجاهات ولكن جزء معين منها يتحرك إلى اليسار ويحمل الطاقة الحرارية إلى الطرف الساخن. وبالرغم من أن عدد الإلكترونات التي تتحرك في اتجاهين متضادين يكون متساوياً، إلا أنه في المتوسط تكون طاقة الإلكترونات التي تتحرك من اليسار إلى اليمين أكبر من طاقة الإلكترونات التي تتحرك من اليمين إلى اليسار وبالتالي فإن المحصلة النهائية تكون انتقال الطاقة إلى اليمين مسببة تياراً حرارياً. لاحظ أن الطاقة الحرارية تنتقل بواسطة تلك الإلكترونات القريبة من سطح فيرمي وذلك لأن الإلكترونات الأخرى (الموجودة في العمق) تلاشى تأثير بعضها بعض.

لحساب التوصيلية الحرارية بطريقة كمية نستخدم العلاقة $K = \frac{1}{3} S_v v l$ ، حيث S_v

الحرارة النوعية عند حجم ثابت و v سرعة الإلكترونات و l متوسط طول المسار الحر

للجسيم تحت الاعتبار. في الحالة الحالية حيث تتضمن الإلكترونات، فإن S_v تكون

الحرارة النوعية للإلكترونات ويجب استنتاجها من المعادلة 8-30، كما يجب أيضا استبدال الثابت العام R بالمقدار Nk ، حيث أننا نتعامل مع الحجم وليس المول. بالإضافة إلى ما سبق يجب استبدال كل من v و l بالمقادير v_F و l_F على الترتيب، حيث أن الإلكترونات الواقعة على سطح فيرمي فقط هي المؤثرة. وهكذا،

$$K = \frac{1}{3} \left(\frac{\pi^2 k^2 T}{2E_F} \right) v_F l_F.$$

وحيث أن $E_F = \frac{1}{2} m^* v_F^2$ و $\frac{l_F}{v_F} = \tau_F$ فإنه يمكن تبسيط المعادلة السابقة إلى الصورة،

$$K = \frac{\pi^2 N k^2 T \tau_F}{3 m^* 2 E_F}. \quad 35-8$$

المعادلة السابقة تعبر عن التوصيلية الحرارية بدلالة الخصائص الإلكترونية للمعدن. بالتعويض فى المعادلة السابقة بالقيم الإلكترونية المعتادة نجد أن

$$K \approx 50 \text{ cal/m}^\circ\text{K-s}.$$

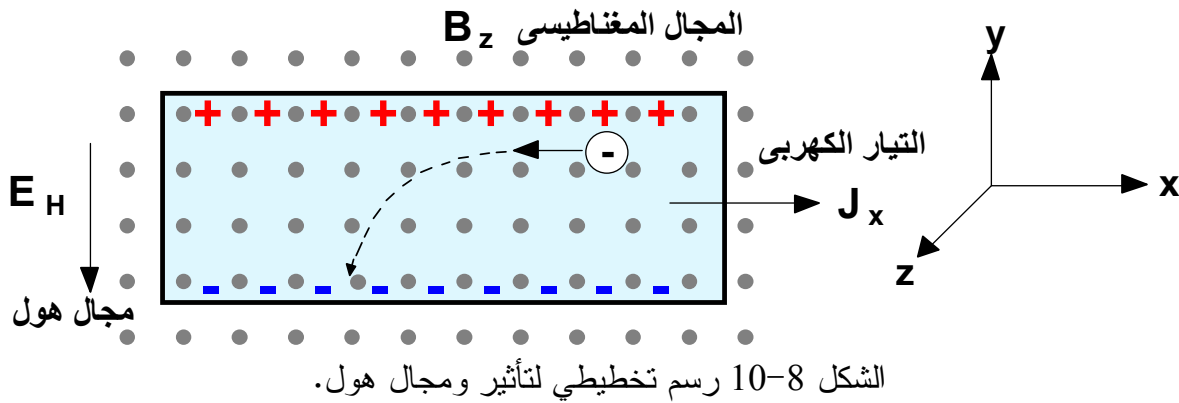
8-10 حركة الإلكترونات فى المجال المغناطيسي

ELECTRON MOTION IN A MAGNETIC FIELD

يولد تطبيق مجال مغناطيسي على المعدن العديد من التأثيرات الشيقة والتي تنتج من إلكترونات التوصيل، مثل تأثير هول (Hall's effect) و رنين السيكلوترون (cyclotron resonance). فى هذا الفصل، سوف نستخدم هذين التأثيرين فى فحص خصائص إلكترونات التوصيل.

10-8 تأثير هول HALL'S EFFECT

عندما يمر تيار كهربى، J_x ، فى سلك فى اتجاه محور x تحت تأثير مجال مغناطيسى عمودي على هذا الاتجاه شدته B_z يتولد مجال كهربى عمودي على كل من التيار الكهربى والمجال المغناطيسى، أى فى اتجاه محور y . تعرف الظاهرة السابقة بتأثير هول ويمكن توضيحها بالشكل 10-8.



لفهم هذا التأثير نفترض أولاً حالة ما قبل تطبيق المجال المغناطيسى. فى هذه الحالة يتدفق التيار الكهربى فى الاتجاه الموجب لمحور x وهذا يعنى أن إلكترونات التوصيل تتحرك بسرعة ازاحية \vec{v} فى الاتجاه السالب لمحور x . عند تطبيق المجال المغناطيسى فإن الإلكترونات تقع فى نفس الوقت تحت تأثير قوة لورنتز (Lorentz force) مقدارها $\vec{F} = e(\vec{v} \times \vec{B})$ وتسبب هذه القوة انحناء لحركة الإلكترونات فى الاتجاه الأسفل كما هو مبين بالشكل 10-8. ومع مرور الوقت تتكدس الإلكترونات على السطح السفلى وتولد بالاستقطاب شحنات موجبة مساوية على السطح العلوى. يولد تراكم الشحنات السالبة والموجبة على السطحين السفلى والعلوى مجالا كهربيا يسمى مجال هول.

لحساب مجال هول افترض أن قوة لورنتز التي تؤدي إلى تراكم الشحنات في

المكان الأول تكون في الاتجاه السالب لمحور y وتعطى بالعلاقة،

$$F_L = ev_x B_z.$$

اختفاء الإشارة السالبة من المعادلة السابقة يعنى أن F_L تكون سالبة وذلك لأن v_x

تكون في الاتجاه السالب لمحور x ، كما يوضح الشكل. ينتج المجال المتكون بالشحنة

الموجود على السطح قوة تعاكس قوة لورنتز. تستمر عملية تراكم الشحنة حتى تتساوى

قوة هول (F_H) تماما مع قوة لورنتز ونحصل على حالة اتزان. عند هذه الحالة تكون

$F_H = F_L$ وبالتالي نحصل على،

$$-E_H = -ev_x B_z$$

$$\therefore E_H = v_x B_z,$$

36-8

ويسمى هذا المجال مجال هول.

أحيانا يكون من المفيد التعبير عن هذا المجال بكميات قابلة للقياس ولذلك يتم

التعبير عن السرعة v_x بدلالة كثافة التيار $J_x = N(-e)v_x$ وهذا يؤدي إلى،

$$E_H = \frac{1}{Ne} J_x B_z.$$

37-8

يتضح من المعادلة السابقة أن مجال هول يتناسب طرديا مع كل من كثافة التيار

وشدة المجال المغناطيسي ويعرف ثابت التناسب ($\frac{E_H}{J_x B_z}$) هذا بثابت هول ويرمز له عادة

بالرمز R_H . وهكذا يكون ثابت هول على الصورة،

$$R_H = -\frac{1}{Ne}$$

38-8

تعتبر النتيجة السابقة مهمة جدا من الناحية العملية. وبما أن ثابت هول يتناسب عكسيا مع كثافة الإلكترونات (N) فإن هذا يعنى أننا يمكننا تعيين N بواسطة قياس جهد هول عمليا وتعتبر هذه الطريقة هي الطريقة القياسية لتعيين تركيز الإلكترونات فى المادة. ومن الناحية العملية فإن هذه التقنية ذات قيمة لأنه، بخلاف N ، فإن الكمية الأخرى التى يعتمد عليها ثابت هول هي شحنة الإلكترون ($-e$) وهى ثابت فيزيائي أساسي وقيمه معروفة بدقة. يبين الجدول 2-8 قيم ثابت هول لبعض المعادن الشائعة.

من السمات الأخرى المفيدة لثابت هول والتى تعطى معلومات إضافية عن المادة هي أن إشارة الثابت تحدد على نوع حاملات التيار، حيث تدل الإشارة السالبة على أن حاملات التيار هي الإلكترونات، بينما تدل الإشارة الموجبة على أن حاملات التيار هي الفجوات الموجبة.

الجدول 2-8 قيم ثابت هول بوحدات فولت م³ / أمبير. وبر مقاسه فى درجة حرارة الغرفة لبعض المعادن الشائعة

المعدن	ثابت هول	المعدن	ثابت هول
Na	- 2.50	Au	- 0.72
Li	-1.7×10^{-10}	Cd	+ 0.60
Cu	- 0.55	Zn	+ 0.30
Ag	- 0.84	Al	- 0.30

يبين التحليل السابق سمة شيقة لعملية انتقال الإلكترونات فى وجود المجال المغناطيسي وهى أن التيار نفسه المتدفق فى اتجاه محور x لا يتتأثر بالمجال. ولهذا فإن المقاومة الكهربائية لا تعتمد على المجال المغناطيسي.

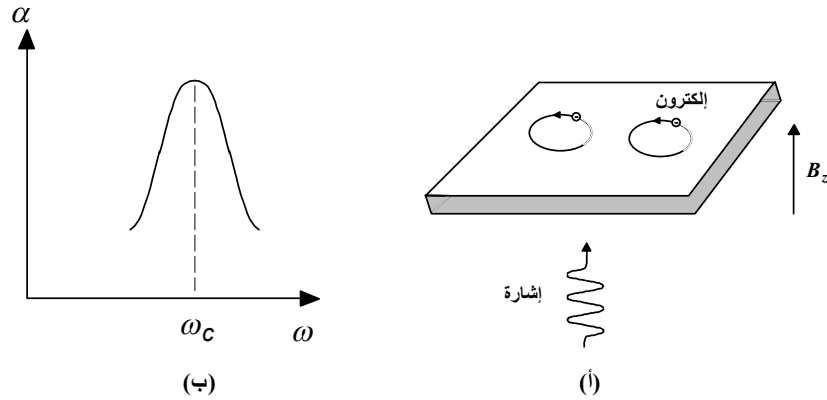
CYCLOTRON RESONANCE

2-10-8 رنين السيكلوترون

يبين الشكل 11-8 (أ) مفهوم ظاهرة رنين السيكلوترون. في هذه الظاهرة عند تطبيق مجال مغناطيسي عمودي على شريحة معدنية فإن ذلك يجعل الإلكترونات تتحرك في مسار دائري عكس اتجاه حركة عقارب الساعة في مستوى عمودي على المجال. تسمى مثل هذه الحركة بحركة السيكلوترون. يعطى تردد هذه الحركة (تردد السيكلوترون) بالعلاقة الآتية،

$$\omega_c = \frac{eB}{m^*}.$$

39-8



الشكل 11-8 (أ) رسم تخطيطي يبين حركة السيكلوترون، (ب) اعتماد معامل الامتصاص على التردد.

بالتعويض في هذه المعادلة بكتلة الإلكترون الحر نجد أن التردد الخطي

للسيكلوترون يكون ،

$$\nu_c = \frac{\omega_c}{2\pi} = 2.8 B \text{ GHz} ,$$

حيث B بالكيلوجاوس. فإذا كانت $B = 1 \text{ KG}$ فإن التردد يكون $\nu_c = 2.8 \text{ GHz}$ ويكون في

مدى الموجات الميكرونية.

افترض الآن أن إشارة كهرومغناطيسية تمر عبر الشريحة المعدنية في اتجاه موازى للمجال المغناطيسي، كما هو مبين بالشكل 8-11(ب)، فإن المجال الكهربى للإشارة سوف يؤثر على الإلكترونات ويتم إمتصاص جزء من طاقة الإشارة بواسطة الإلكترونات. يكون معدل الإمتصاص قيمة عظمى عندما يتساوى تردد الإشارة مع تردد السيكلوترون، أي أن،

$$\omega = \omega_c \quad 40-8$$

تعبر هذه المعادلة عن حالة الرنين فى السيكلوترون وعندما تتحقق هذه الحالة يكون الإلكترون فى طور واحد مع الموجة على مدى كامل الدورة. عندما لا تتحقق هذه المعادلة فإن الإلكترون يكون فى طور واحد مع الموجة على مدى جزء من الدورة يمتص فيها الطاقة من الموجة وفى باقى الدورة يكون خارج طور الموجة ويفقد الطاقة التى امتصها.

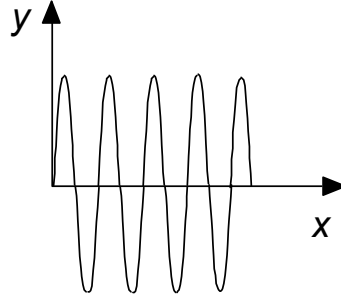
يستخدم رنين السيكلوترون بشكل شائع فى قياس كتلة الإلكترون فى المعادن والمواد شبه الموصلة. يتم تعيين تردد السيكلوترون من المنحنى ويعوض به فى المعادلة 8-39 لحساب قيمة الكتلة الفعالة للإلكترون. وتعتبر هذه الطريقة دقيقة جدا وخاصة عند استخدام شعاع الليزر.

8-11 التوصيلية الكهربائية المترددة والخصائص الضوئية

التوصيلية الكهربائية المترددة هي توصيلية المادة فى وجود المجال الكهربى المتردد

وترتبط هذه التوصيلية بالخصائص الضوئية بصلة وثيقة. يغطى مصطلح "الضوئية" هنا مدى الترددات والذي لا يقتصر على المدى المرئي فقط.

اعتبر الآن موجة كهرومغناطيسية مستعرضة تنتشر فى اتجاه محور x ومستقطبة فى اتجاه محور y ، كما يبين الشكل 8-12.



الشكل 8-12 موجة كهرومغناطيسية مستعرضة تنتشر فى اتجاه محور x ومستقطبة فى اتجاه محور y .

يمكن التعبير عن المجال الكهربى بالعلاقة،

$$E_y = E_0 e^{i(qx - \omega t)} . \quad 41-8$$

وتكون معادلة الحركة لإلكترون التوصيل فى وجود هذا المجال المتردد، كما ذكرنا

من قبل على الصورة،

$$m^* \frac{dv}{dt} = -eE - m^* \frac{v}{\tau} ,$$

والتي تعطى الحل فى الحالة المستقرة على الصورة،

$$v_y = -\frac{e\tau}{m^*} \frac{1}{1 - i\omega\tau} E . \quad 42-8$$

فى ضوء هذه المعادلة، تعطى كثافة التيار ($J_y = N(-e)v_y$) التوصيلية الكهربائية

المترددة على الصورة،

$$\sigma^* = \frac{\sigma_o}{1-i\omega\tau}, \quad 43-8$$

حيث $\sigma_o = \frac{Ne^2\tau}{m^*}$ هي التوصيلية الكهربائية الاستاتيكية المعتادة. التوصيلية في المعادلة 8-43

43 كمية مركبة يمكن كتابتها على الصورة $\sigma^* = \sigma' + i\sigma''$ والتي تكون مركبتها الحقيقية والتخيلية على الصورة،

$$\sigma' = \frac{\sigma_o}{1+\omega^2\tau^2}, \quad \sigma'' = \frac{\sigma_o\omega\tau}{1+\omega^2\tau^2}. \quad 44-8$$

يمثل الجزء الحقيقي σ' التيار الذي يكون في نفس الطور وينتج تسخين جول المقاوم، بينما يمثل الجزء التخيلي σ'' التيار الحثي والذي يكون خارج الطور بزاوية $\frac{\pi}{2}$. يظهر اختبار اعتماد جزئي التوصيلية السابقين على التردد في مدى الترددات المنخفضة ($\omega\tau \ll 1$) أن $\sigma'' \ll \sigma'$ وهذا يعني أن الإلكترونات تظهر سلوك مقاومي بالدرجة الأولى. وحيث أن $\tau \equiv 10^{-14} s$ فإن هذا يغطي كامل مدى الترددات المألوفة وحتى مدى الأشعة تحت الحمراء البعيد. في مدى التردد العالي ($\omega\tau \gg 1$) والذي يقابل المدى المرئي ومدى الأشعة فوق البنفسجية فإن $\sigma'' \ll \sigma'$ وهذا يدل على السلوك الحثي للإلكترونات. في هذا المدى لا يتم امتصاص طاقة من المجال ولا تظهر حرارة جول.

دعنا الآن ننظر إلى استجابة الإلكترونات من وجهة نظر أخرى وذلك باعتبار إحدى معادلات ماكسويل والتي هي،

$$\nabla \times \mathbf{H} = \varepsilon_L \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mathbf{J}, \quad 45-8$$

حيث يمثل الحد الأول في الطرف الأيمن تيار الإزاحة المصاحب لاستقطاب قلوب

الأيونات في الشبكة، بينما يمثل الحد الثاني (J) التيار الحمل الحرارى للإلكترونات التوصيل. يكون التيار الأخير في حالة المجال المتردد على الصورة

$$= \sigma^* E = \left(\frac{\sigma^*}{-i\omega} \right) \frac{\partial E}{\partial t} \quad \text{وبالتعويض في 8-45 نحصل على،}$$

$$\nabla \times = \varepsilon^* \frac{\partial E}{\partial t}, \quad 46-8$$

حيث ε^* ثابت العزل الكهربى الكلى، حيث

$$\varepsilon^* = \varepsilon_L + i \frac{\sigma^*}{\omega}. \quad 47-8$$

وهكذا فإننا نرى الآن إلكترونات التوصيل كجزء من الوسط العزل وهذا معقول، حيث أن الإلكترونات تتذبذب حول مواضع اتزانها بدون محصلة حركة انتقالية. بإدخال ثابت

العزل النسبى $\left(\varepsilon_r^* = \frac{\varepsilon^*}{\varepsilon_0} \right)$ والتعويض عن σ^* من المعادلة 8-44 فى المعادلة الأخيرة

نحصل على،

$$\begin{aligned} \varepsilon_r^* &= \varepsilon_r' + i\varepsilon_r'' \\ &= \left(\varepsilon_{L,r} - \frac{\sigma_0}{\varepsilon_r (1 + \omega^2 \tau^2)} \right) - i \frac{\sigma_0}{\varepsilon_0 (1 + \omega^2 \tau^2)}. \end{aligned} \quad 48-8$$

يعرف معامل الانكسار المركب للوسط (n) بالعلاقة،

$$n^* = \varepsilon_r^{*1/2} = n + i\kappa, \quad 49-8$$

حيث n هو معامل الانكسار المعتاد و κ معامل الإخماد (extinction

coefficient). فى تجارب الضوء عادة لا يتم قياس n و κ مباشرة ولكن تقاس

الانعكاسية R ومعامل الامتصاص α . ترتبط الانعكاسية مع معاملات الانكسار بالعلاقات،

$$R = \frac{(n-1)^2 + \kappa^2}{(n+1)^2 + \kappa^2} \quad \& \quad \alpha = \frac{2\varpi}{c} \kappa, \quad 50-8$$

حيث c سرعة الضوء في الفراغ. تصف المعادلات من 8-48 إلى 8-50 سلوك الإلكترونات في كامل مدى التردد ولكن من الأفضل فهم محتوياتها الطبيعية بفحص نتائجها في مناطق الترددات المختلفة، كما سنبين فيما يلي:

1- منطقة الترددات المنخفضة ($\omega\tau \ll 1$). تبين المعادلات السابقة أن $\bar{\varepsilon}_r$ تقل في هذا

المدى إلى القيمة التخيلية ($\bar{\varepsilon}_r \cong i\varepsilon_r''$) وبالتالي نحصل على،

$$|n| \cong |\kappa| = \left(\frac{\varepsilon_r''}{2} \right) = \left(\frac{\sigma_o}{2\varepsilon_o\omega} \right)^{1/2}. \quad 51-8$$

تعتمد الأشعة الضوئية التي تخترق المادة على عمق الاختراق طبقا للعلاقة

حيث $I = I_o e^{-\alpha x}$ ، شدة الأشعة الساقطة و x عمق الاختراق و α معامل الامتصاص و

يعرف مقلوب معامل الامتصاص ($\delta = 1/\alpha$) بعمق القشرة. وهكذا فإن $1/\alpha$ يعتبر مقياسا

للمسافة التي يخترقها الشعاع الضوئي قبل أن يتم امتصاص طاقته. يمكن كتابة عمق

الامتصاص على الصورة،

$$\delta = \left(\frac{\varepsilon_o c^2}{2\sigma_o \omega} \right)^{1/2}. \quad 52-8$$

2- منطقة الترددات العالية ($\omega\tau \gg 1$). يغطي هذا المدى من الترددات منطقة الأشعة

المرئية والأشعة فوق البنفسجية. تبين المعادلة 8-48 أن ε_r^* تقل في هذا المدى إلى القيمة

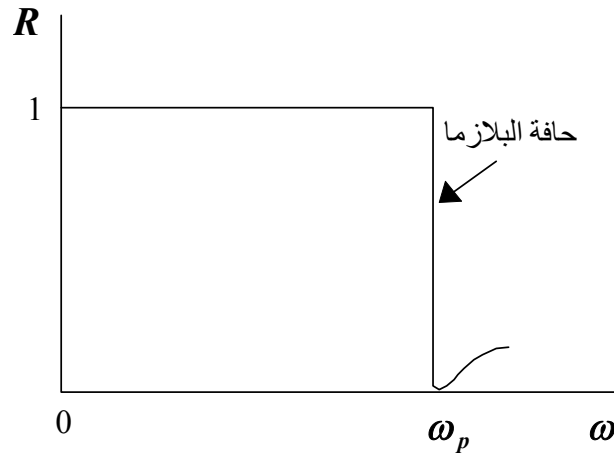
الحقيقية وبالتالي نحصل على،

$$\varepsilon_r = \varepsilon_{L,r} \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \right), \quad 53-8$$

حيث

$$\omega_p^2 = \frac{Ne^2}{\varepsilon_L m^*}, \quad 54-8$$

حيث استخدمنا العلاقة $\sigma_o = ne^2\tau/m^*$. يعرف التردد ω_p بتردد البلازما وسوف نكشف عن مغزاه بشكل مختصر فيما يلي. من المعادلة 53-8 يمكننا أن نرى أنه يمكن تقسيم مدى الترددات المرتفعة إلى منطقتين. المنطقة الأولى والتي فيها يكون التردد اقل من تردد البلازما ($\omega < \omega_p$) و يكون $\varepsilon_r < 0$ وبالتالي من المعادلة 49-8 نجد $n = 0$. وعلى ضوء المعادلة 50-8 يؤدي ذلك إلى $R = 1$ وهذا يظهر انعكاسية تامة. في المنطقة الأخرى ($\omega > \omega_p$) حيث $\varepsilon_r > 0$ يكون $\kappa = 0$. في هذه المنطقة يكون $\alpha = 0$ و $0 < R < 1$ ويعمل الوسط المعدني كعازل كهربائي شفاف لا يمتص الطاقة مثل الزجاج. يوضح الشكل 13-8 اعتماد الانعكاسية على التردد ويظهر هذا الشكل الانخفاض الفجائي عند $\omega = \omega_p$ والذي يعرف بحافة الانعكاس للبلازما (plasma reflection edge).



الشكل 13-8 حافة الانعكاس للبلازما.

يتبين من المعادلة 8-54 أن التردد ω_p يتناسب طردياً مع الكثافة الإلكترونية N .
يبين الجدول 8-3 الكثافات في المعادن تجعل ω_p تقع في أعلى المدى المرئي ومدى الأشعة فوق البنفسجية.

الجدول 8-3 قيم حافة الانعكاس (تردد البلازما) والأطوال الموجية المقابلة لبعض المعادن

Rb	K	Na	Li	
0.55	0.593	0.89	$1.22 \times 10^{16} \text{ s}^{-1}$	ω_p
3400 Å	3150 Å	2100 Å	1550 Å	λ_p

توجد خاصية شيقة أخرى لتردد البلازما يمكن استنتاجها من معادلة ماكسويل،

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \varepsilon \nabla \cdot \mathbf{E} = 0, \quad 55-8$$

حيث $\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}$ هي مجال الإزاحة الكهربائية المعتاد. تعترف هذه المعادلة بوجود

النمط الطولي الذي له $\nabla \cdot \mathbf{E} \neq 0$ فقط شريطة أن،

$$\varepsilon = \varepsilon_o \varepsilon_r = 0. \quad 56-8$$

يتبين من المعادلة 8-53 أن ε_r تتلاشى فقط عند $\omega = \omega_p$. شوهد هذا النمط في

المعادن ويعرف بنمط البلازما. لاحظ أن الجزء الحقيقي من مركبتي ثابت العزل الكهربائي

(ε_r') يمثل استقطاب الشحنات المستحثة بالمجال، بينما يمثل الجزء التخيلي (ε_r'')

امتصاص الطاقة بواسطة النظام.

12-8 الانبعاث الأيوني الحراري THERMIONIC EMISSION

في الأنابيب المفرغة، عند تسخين المهبط المصنوع من معدن فإن الإلكترونات

تنبعث من السطح وتعرف هذه الظاهرة بالانبعاث الأيوني الحراري. في هذا الفصل

سنناقش منشأ هذه الظاهرة في ضوء نموذج الإلكترونات الحرة.

يبين الشكل 8-14 مخطط لمستويات الطاقة للإلكترونات في المعدن طبقاً لنموذج الإلكترونات الحرة. عند الصفر المطلق ($T = 0^\circ \text{K}$) تكون كل المستويات ممثلة بالإلكترونات وحتى مستوى فيرمي (E_F) والذي أعلاه تكون المستويات فارغة من الإلكترونات. لاحظ أيضاً أن الإلكترونات الموجودة عند E_F لا تستطيع الهروب من المعدن بسبب وجود حاجز الطاقة عند السطح وهو عبارة عن بئر جهدي له الارتفاع ϕ ويسمى دالة الشغل. تختلف هذه الدالة من معدن إلى آخر ولكنها بشكل عام تقع في المدى من 1.5 إلى 5 إلكترون فولت. كما ذكرنا، لا تستطيع هذه الإلكترونات الهروب من سطح المعدن عند درجة الصفر المطلق، ولكن مع ارتفاع درجة الحرارة تكتسب الإلكترونات طاقة وتنتقل من المستويات أسفل مستوى فيرمي (E_F) إلى مستويات أعلى منه، أي أن المستويات أعلى مستوى فيرمي تبدأ في الانشغال بالإلكترونات. حتى المستويات الموجودة أعلى حاجز الجهد (أي التي عند طاقة أعلى من $E_F + \phi$) تصبح مأهولة بالإلكترونات إلى حد ما. الآن، تملك الإلكترونات الموجودة في هذه المستويات (الأخيرة) طاقة كافية لتتغلب على الحاجز وتكون هي المسؤولة عن الانبعاث المشاهد عند السطح.

دعنا الآن نحسب كثافة تيار الإلكترونات المنبعثة باعتبار أن سطح المعدن عمودي

على اتجاه محور x . يكون تركيز الإلكترونات التي تقع سرعتها في المدى من (v_x, v_y, v_z)

إلى $(v_x + dv_x, v_y + dv_y, v_z + dv_z)$ على النحو التالي،

$$d^3N = N \left(\frac{m^*}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-m^*(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)/2kT} dv_x dv_y dv_z. \quad 57-8$$

استخدمنا توزيع ماكسويل-بولتزمان لأن الإلكترونات المشاركة في عملية الانبعاث تكون كلها ذات الطاقة الأعلى (أعلى من مستوى فيرمي) يمكن وصفها بدقة بواسطة هذا التوزيع. تعطى كثافة التيار المنبعث نتيجة هذه الإلكترونات بالعلاقة التالية،

$$dJ_x = -e v_x d^3N, \quad 58-8$$

لإيجاد تعبير يصف كثافة التيار نتيجة كل الإلكترونات نأخذ المجموع على كل السرعات المعتبرة، أي أن،

$$J_x = \int dJ_x \\ = -eN \left(\frac{m^*}{2\pi kT} \right)^{3/2} \iiint v_x e^{-m^*(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)/2kT} dv_x dv_y dv_z. \quad 59-8$$

عند إجراء التكامل على كل السرعات يكون المدى لكل من السرعات v_y و v_z هو $(-\infty, +\infty)$ ، بينما يكون مدى السرعة v_x بحيث $\frac{1}{2}m^*v_x^2 \geq E_F + \phi$ لأن لهذه الإلكترونات

فقط سرعة كافية في الاتجاه المطلوب للهروب من السطح. لذلك نحصل على،

$$J_x = -eN \left(\frac{m^*}{2\pi kT} \right)^{3/2} \int_{v_{x0}}^{\infty} v_x e^{-m^*v_x^2/2kT} dv_x,$$

حيث $v_{x0} = [2(E_F + \phi)/m^*]^{1/2}$ تكون نتيجة تكامل هذه المعادلة هي،

$$J_x = AT^2 e^{-\phi/kT}, \quad 60-8$$

حيث $A = m^*ek^2/2\pi^2\hbar^2$. تكون القيمة العددية للثابت A هي $120 \text{ amp/cm}^2 \cdot \text{K}^2$. تعرف

المعادلة الأخيرة بعلاقة ريتشاردسن-دوشمان (Richardson-Dushman) والتي تتفق جيداً

مع النتائج المعملية. تبين هذه العلاقة أن كثافة التيار تزداد فجأة مع درجة الحرارة وبما

أن $\phi \gg kT$ فإن كثافة التيار تزداد بشكل أسى مع درجة الحرارة فى المدى المعتاد. يبين الجدول 4-8 قيم دالة الشغل لبعض المعادن تم الحصول عليها من قياسات الانبعاث الأيونى الحرارى.

الجدول 4-8 قيم دالة الشغل بوحدات الإلكترون فولت.

العنصر	W	Ta	Ni	Ag	Cs	Pt
ϕ	4.5	4.2	4.6	4.8	1.8	5.3

8-13 فشل نموذج الإلكترون الحر

فى هذا الباب، ناقشنا نموذج الإلكترون الحر بالتفصيل لنبين كم هو مفيد فى تفسير الخصائص المشاهدة للمعادن. على الرغم من ذلك فإن هذا النموذج ما هو إلا نوع من التقريب وله فى حد ذاته قيودا. الآن نذكر بشئ من الاختصار بعض الصعوبات التى تواجه النموذج من خلال النقاط التالية:

(أ) يفترض النموذج أن التوصيلية الكهربائية تتناسب مع تركيز الإلكترونات (طبقا للمعادلة 8-8). على النقيض، لا يوجد استنتاج محدد يمكن استخلاصه من الجدول 8-1 ولا سيما أن الكميات الأخرى فى المعادلة غير معروفة. ولكن من المدهش أن تظهر المعادن ثنائية التكافؤ توصيلية اقل منها فى حالة المعادن أحادية التكافؤ بالرغم من حقيقة أن المعادن الثنائية تملك تركيز إلكترونات اكبر من المعادن أحادية التكافؤ.

(ب) الحقيقة التى تطيح بهذا النموذج هي أن بعض المعادن تظهر قيم موجبة لثابت هول

مثل الزنك والكاديوم، بدلا من القيم السالبة كما يتوقع هذا النموذج.

(ج) تبين قياسات سطح فيرمي انه غير كروي الشكل غالبا وهذا يتعارض مع النموذج

حيث يتوقع أن يكون سطح فيرمي كروي الشكل.

لا يمكن حل هذه الصعوبات (وصعوبات أخرى لا مجال لسردها هنا) إلا عن

طريق نظرية أكثر تطورا تأخذ في الاعتبار تفاعل الإلكترونات مع الشبكة.

ملخص الباب

⊠ عند تعبئة الذرات معا لتكون المعدن فإن إلكترونات التكافؤ تتفصل عن ذراتها الأم وتحرك في كافة أنحاء الشبكة وتتحول هذه الإلكترونات غير المقيدة إلى إلكترونات توصيل ويعطى تركيزها بالعلاقة $N = Z_v \frac{\rho_m N_A}{M_{mol}}$ ، حيث Z_v هو التكافؤ الذرى وباقي الرموز فى المعادلة لها المعاني المعتادة .

⊠ يمكن التعبير عن التوصيلية الكهربائية لإلكترونات التوصيل التى تعتبر جسيمات حرة لها زمن تصادم τ بالعلاقة $\sigma = \frac{Ne^2\tau}{m^*}$. بمقارنة هذه النتيجة مع القيم العملية يتبين أن زمن التصادم قصير للغاية ويكون فى حدود $10^{-14} s$ عند درجة حرارة الغرفة.

⊠ عند محاولة حساب زمن التصادم نجد أن الشبكة التامة لا تنتج تشتت. فقط اهتزاز الشبكة والعيوب البنائية الساكنة تولد التشتت وتعين زمن التصادم. عند معالجة اهتزاز الشبكة والعيوب الساكنة فى البلورة كآليات لا تعتمد على التصادم نجد أن المقاومة النوعية الكهربائية تكون $\rho = \rho_{ph}(T) + \rho_i$ ، حيث $\rho_{ph} \approx T$ هي المقاومة النوعية نتيجة تصادمات الإلكترونات مع اهتزاز الشبكة (الفونونات) و ρ_i هي المقاومة المتخلفة نتيجة تصادم الإلكترونات مع الشوائب الموجودة فى البلورة.

⊠ يمكن التعبير عن التوصيلية الحرارية فى المعادن بالعلاقة، $K = LT\sigma$ ، حيث L مقدار ثابت يعرف بعدد لورنتز $(L = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k}{e}\right)^2)$.

⊠ تبين النتائج العملية أن السعة الحرارية لإلكترونات التوصيل تكون اقل بكثير من

القيمة المتوقعة من ميكانيكا الإحصاء التقليدية وتم تفسير ذلك فى ضوء مبدأ باولى للاستبعاد، حيث تعتبر كل مستويات الطاقة أسفل مستوى فيرمى ممثلة بالإلكترونات. عند تسخين النظام فإن الإلكترونات القريبة فقط من مستوى فيرمى هي التى تثار.

$$C_e = \frac{\pi^2}{2} R \frac{kT}{E_F} \text{، تكون السعة الحرارية الإلكترونية لكل مول على الصورة،}$$

⊗ تتعين طاقة فيرمى بواسطة تركيز الإلكترونات ويمكن التعبير عنها فى الصورة،

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\pi^2 N)^{2/3}$$

⊗ عند تطبيق مجال مغناطيسي على جسم صلب فإن الإلكترونات تسلك مسار دائري

يسمى بالسيكلوترون ويكون تردد السيكلوترون على الصورة، $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$ ، وبقياس هذا

التردد يمكن تعيين الكتلة الفعالة للإلكترون. وعند تطبيق مجال مغناطيسي على سلك

يحمل تيار كهربى يتولد مجال كهربى عمودى على كل من التيار الكهربى والمجال

المغناطيسي. يسمى المجال الكهربى المتولد بمجال هول ويكون على الصورة،

$$E_H = RBJ \text{، حيث يكون ثابت هول على الصورة } R_H = \frac{1}{Ne} \text{، بقياس ثابت هول عمليا}$$

يمكن تعيين تركيز الإلكترونات N .

⊗ يمكن كتابة التوصيلية المركبة للإلكترونات التوصيل فى المعدن فى الصورة،

$$\sigma^* = \frac{\sigma_o}{1+i\omega\tau} \text{، حيث } \sigma_o \text{ هي التوصيلية الساكنة. يبين هذا الشكل للتوصيلية المركبة}$$

مزيج من السلوك المقاوم والحثى للإلكترونات. يكون السلوك المقاوم للإلكترونات

هو السائد في منطقة الترددات المنخفضة، $\omega < \frac{1}{\tau}$ ، بينما يكون السلوك الحثي هو

السائد في منطقة الترددات العالية، $\omega > \frac{1}{\tau}$. وبسبب أن τ يكون صغيرا جدا فإن

المنطقة الأولى تتضمن كل الترددات إلى أعلى وحتى الترددات الميكرونية.

✕ يمكن كتابة ثابت العزل الكهربائي للبلورة ككل متضمنة كل من الشبكة والإلكترونات

على الصورة، $\epsilon^* = \epsilon_L + \frac{i\sigma}{\omega}$. وبمعرفة قيمة ثابت العزل الكهربائي يمكن تعيين

خصائص الانعكاس والامتصاص في البلورة. يمكن تحديد أنظمة التردد التالية: 1-

في منطقة الترددات المنخفضة ($\omega \ll \frac{1}{\tau}$) تنفذ الموجات داخل المعدن لمسافة قصيرة

تعرف بعمق القشرة ويكون لها القيمة $\delta = \left(\frac{2\epsilon_0 c^2}{\sigma_0 \omega_0} \right)^{1/2}$. في هذه المنطقة تكون

الانعكاسية قريبة جدا من الواحد الصحيح. 2- في منطقة الترددات العالية ($\omega > \omega_p$)

يعمل المعدن كعازل كهربائي منتظم تسافر خلاله الموجات بدون اضمحلال.

✕ يشير نمط البلازما إلى التذبذب المستعرض للنظام الإلكتروني. يكون تردد هذا النمط

$$\omega_p = (Ne^2 / \epsilon_L m^*)^{1/2}$$

✕ عند تسخين المعدن فإن بعض الإلكترونات الموجودة عند نهاية ذيل دالة توزيع فيرمي

تكتسب كمية كافية من الطاقة وتستطيع الهروب من سطح المعدن. تكون كثافة تيار

الانبعاث الأيوني الحراري على الصورة، $J = AT^2 e^{-\phi/kT}$ ، حيث A مقدار ثابت و ϕ

هي دالة الشغل للمعدن.

أسئلة وتمارين

- 1- اذكر الفروض التي بنيت عليها النظرية التقليدية لغاز الإلكترونات الحرة؟
- 2- عنصر الألومنيوم ثلاثي التكافؤ وله وزن ذري 27 وكثافة مقدارها 2.7 g/cm^3 .
عند درجة حرارة الغرفة كان طول المسار الحر للإلكترون بين التصادمات $4 \times 10^{-14} \text{ s}$.
(أ) احسب المقاومة الكهربائية النوعية للألومنيوم عند درجة حرارة الغرفة.
(ب) إذا تم تطبيق فرق جهد مقداره 2 فولت عبر طرفي سلك من الألومنيوم طوله 10 متر ومساحة مقطعة 1 مم² فاحسب التيار الكهربائي المتدفق.
- 3- عرف المصطلحات الآتية: - التوصيلية الكهربائية، متوسط المسار الحر، مجال هول، رنين السيكلوترون.
- 4- كانت المقاومة الكهربائية النوعية لمعدن ما 0.02 أوم.متر وكانت قيمة معامل هول لهذا المعدن هي $5 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{C}$ وتم تطبيق مجال كهربائي مقداره 1 فولت/المتر عبر هذه المادة. استنتج المعلومات التي تعتقدها عن هذه المادة. (ملحوظة: يوجد على الأقل سبع متغيرات مختلفة يمكنك حسابها).
- 5- استنتج التعبير الرياضي لقانون أوم؟
- 6- ناقش باختصار الفروض الآتية: -
(أ) إمكانية إهمال القوى المتبادلة بين الإلكترونات الحرة.
(ب) إمكانية إهمال حجم مكونات الغاز الإلكتروني نسبة إلى الحجم الكلي الذي يشغله.
- 7- (أ) ارسم المخطط التوضيحي التي يستخدم لقياس تأثير هول عمليا مع كتابة اسم كل جزء؟
(ب) لما يكون قياس تأثير هول عمليا للمواد شبه الموصلة أسهل منه في حالة المعادن؟

8- عينة بلورية لمادة شبه موصلة طولها 5 مم وعرضها 4 مم وسمكها 2 مم. عند تطبيق فرق جهد 2 فولت عبر طرفيها يمر تيار كهربى عبر طول العينة مقداره 40 مللى أمبير. تم تطبيق مجال مغناطيسى شدته 0.1 تسلا عمودى على السطح الكبير للعينة يتولد جهد هول مقداره 15 مللى فولت عبر عرض العينة. احسب: - أ- التوصيلية الكهربائية، ب- كثافة حاملات الشحنة، ج- الحركية وسرعة فيرمى لهذه المادة شبه الموصلة.

9- المقاومة الكهربائية النوعية لعينة نقية من النحاس هى $1.72 \times 10^{-8} \Omega m$ وكان متوسط المسار الحر للإلكترونات هو 40 nm عند 300 K. عند إضافة 1% من النيكل بشكل متجانس إلى العينة ازداد متوسط المسار الحر للإلكترونات إلى 60 nm. احسب المقاومة الكهربائية النوعية لعينة النحاس الجديدة (مع النيكل). (ملحوظة استخدم قاعدة مانتيزين)

10- استنتج التعبير الرياضى لطاقة فيرمى، سرعة فيرمى وكثافة الحالة للإلكترونات فى حالة غاز الإلكترونات الحرة فى بعدين؟

11- تكون غاز إلكترونى فى بعدين فى بئر كمى لمادة GaAs/AlGaAs وكان له كثافة حالة مقدارها $2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. بفرض أن الإلكترونات لها كتلة الإلكترون الحر، احسب طاقة فيرمى وسرعة فيرمى للإلكترونات.

مسرد

Index



مسرّد للمصطلحات مرتب

طبقاً للأبجدية العربية

(١)

Orientation	اتجاهية
Thermodynamic equilibrium	اتزان ديناميكي حراري
Occupation probability	احتمال الإشغال
Statistical	احصائي
Scattering	استطارة (تبعثر)
Polarization	استقطاب
Orientation polarization	استقطابية اتجاهية
Electronic polarization	استقطابية الكترونية
Ionic polarizability	استقطابية أيونية
Trapping	اصطياد
Crystal directions	الاتجاهات البلورية
Thermodynamic probability	الاحتمال الديناميكي الحراري
Electrostriction	الانضغاط الكهربائي
Free surfaces	الأسطح الحرة
Crystal system	الأنظمة البلورية
Lattice parameter	البعد الشبكي
Elastic scattering	التشتت المرن
Thermal expansion	التمدد الحراري
Periodic table	الجدول الدوري
Ledge	الحافة
Ground state	الحالة الأرضية
Orthogonality condition	الحالة العمودية
Normalization condition	الحالة العيارية
Thermal Properties	الخصائص الحرارية
Angles between zones	الزوايا بين النطاقات
Squid	السكويد

Close-packed	العبوة المتراسة
Orbital quantum number	العدد الكمي المدارى
Radial quantum number	العدد الكمي النصف قطري
Wave number	العدد الموجى
Structural Defects	العيوب التركيبية
Electron-phonon interaction	الفعل البينى إلكترون - فونون
Spin - orbital interaction	الفعل اللفى المدارى
Atomic core	القلب الذرى
Conduction electrons	الكترونات التوصيل
Atomic density of planes	الكثافة الذرية للمستويات
Piezo electricity	الكهروضغطية
Zone	النطاق
Classical theory	النظرية التقليدية
Kinetic theory	النظرية الحركية
Crystal systems	النظم البلورية
Type I	النوع الأول
Type II	النوع الثانى
Absorption	امتصاص
Emission	انبعاث
Thermionic emission	انبعاث أيونى حرارى
Diffusion	انتشار
Short rang order	انتظام محدود (قصير)
Long rang order	انتظام ممتد (طويل)
Transition	انتقال
Dislocation	انخلاع
Edge dislocation	انخلاع طرفى (حدي)
Splitting	انشطار (تجزئة)
Compressibility	انضغاطي
Strain	انفعال

Anion	أنيون
Thermal vibration	اهتزاز حراري
Isothermal	إيزوثرمالي
Ether	أثير
Monochromatic	أحادي اللون
Mono	أحادية
Mono clinic	أحادية الميل
Miller's indices	أدلة ميلر
Adiabatic	أديباتيكي
Infrared	أشعة تحت الحمراء
X-rays	أشعة سينية
Longitudinal waves	أمواج طولية
Transverse waves	أمواج مستعرضة
Plane waves	أمواج مستوية
Stationary waves	أمواج موقوفة
Vibration modes of lattice	أنماط اهتزاز الشبكة
Stress	إجهاد
Cylindrical coordinates	إحداثيات اسطوانية
Polar coordinates	إحداثيات قطبية
Cartesian coordinates	إحداثيات كارتيزية
Spherical coordinates	إحداثيات كروية
Fermi-Dirac statistics	إحصاء فيرمي وديراك
Quantum statistics	إحصاء كمي
Displacement	إزاحة
Interstitial atom	إشابة تخلليه
Opacity	إعتام
Electron	إلكترون
Crystal growth	إنماء بلوري
Potential well	بئر جهد

Paramagnetic	بارا مغناطيسي
Seed crystal	بذرة بلورة
Bravais	برافى
Peroveskite	بروفسكيت
Plasma	بلازما
Crystal	بلورة
Covalent crystal	بلورة تساهمية
Molecular crystal	بلورة جزيئية
Metallic crystal	بلورة فلزية
Crystalline	بلوري
Ionic crystal	بلورية أيونية
Fine structure	بناء دقيق
Melting crucible	بوتقة صهر
Interfacial	بين سطحي

(ت)

Barkhausen effect	تأثير باركهوزن
Tolman effect	تأثير تولمان
Anomalous Zeeman effect	تأثير زيمان الشاذ
Meissner effect	تأثير ميزنر
Hall effect	تأثير هول
Fractional Hall effect	تأثير هول الجزئي
Degeneracy	تحلل
Structure analysis	تحليل بنائي
Phase transformation	تحول طوري
Order - disorder transformation	تحول من منتظم إلى غير منتظم
Charge flow	تدفق الشحنات
Plastic flow	تدفق لدن
Frequency	تردد

Collision frequency	تردد التصادم
Atomic frequency	تردد ذرى
Precession frequency	تردد رحوى
Concentration	تركيز
Concentration	تركيز
Eccentricity	تطرف
Polymorphism	تعدد الأشكال
Sterling's approximation	تقريب سترلنج
Quantization	تقنين (تكمية)
Multiplication of dislocations	تكاثر الانخلاعات
Valence	تكافؤ
Cubic	تكعيبي
Space quantization	تكمية الفراغ
Symmetry	تمائل
Thermal agitation	تهيج حراري
Harmonic	توافقي
Frequency distribution	توزيع الترددات
Angular distribution	توزيع زاوي
Conductivity	توصيلية
Current	تيار
Vortex currents	تيارات دوامية

(ث)

Dielectric constant	ثابت العزل
Madelung constant	ثابت ماديلونج
Hole	ثقب (فجوة)
Triclinic	ثلاثي الميل
Normal triplet	ثلاثي معتاد
Trigonal	ثلاثية الزوايا والأضلاع
Dipole	ثنائي قطب

Electric dipole

ثنائي قطب كهربى

(ج)

Particle

جسيم

Voltage

جهد

Excitation potential

جهد الإثارة

Ionization potential

جهد التأين

Threshold voltage

جهد العتبة

Periodic potential

جهد دورى

Energy barrier

حاجز جهد

Edge

حافة (طرف)

Energy state

حالة (مستوى) طاقة

Thermal equilibrium state

حالة الاتزان الحرارى

Steady state

حالة الاستقرار

Boundary condition

حالة الحدود

Excited state

حالة مثارة

Allowed state

حالة مسموحة

Charge carriers

حاملات الشحنة

Compartment

حجره

Grain boundaries

حدود الحبيبات

Phase boundaries

حدود الطور

Electronic specific heat

حرارة نوعية الكترونية

Atomic specific heat

حرارة نوعية ذرية

Molar specific heat

حرارة نوعية مولارية

Hall mobility

حركية هول

Etch pit

حفرة كشطية

Bloch walls

حوائط بلوخ

Diffraction

حيود

(خ)

Liquidus line

خط السائل

Solidus	خط الصلب
Energy contours	خطوط توزيع الطاقة (كونتور)
Vortex lines	خطوط دوامية
Primitive cell	خلية أولية
Non primitive cell	خلية غير أولية

(د، ذ)

Burger's circle	دائرة بروجر
Partition function	دالة التقسيم
Exponential function	دالة أسية
Debye function	دالة ديبي
Absolute temperature	درجة الحرارة المطلقة
Critical temperature	درجة حرارة حرجة
Debye temperature	درجة حرارة ديبي
Curie temperature	درجة حرارة كوري
Rotating	دوار
Diamagnetic	ديامغناطيسي
Intrinsic	ذاتي (نقي)
Substitutional atom	ذرة تبادلية

(ر، ز)

Oscilloscope	راسم الذبذبات
Tetragonal	رباعي الزوايا والأضلاع
Coupling	ربط بيني
Order	رتبة
Precession	رحوى
Packing	رص (تعبئة)
Cyclotron resonance	رنين السيكلوترون
Paramagnetic resonance	رنين بارامغناطيسي
Nuclear magnetic resonance	رنين نووي مغناطيسي
Relaxation time	زمن الاسترخاء

Cooper pair زوج كوبر

(س)

Super cooled liquid سائل فوق مبرد

Alloy سبيكة

Hexagonal سداسي

Drift velocity سرعة ازاحية

Particle velocity سرعة الجسم

Group velocity سرعة المجموعة

Drift velocity سرعة ازاحية (إنجرافية)

Molecular velocity سرعة جزيئية

Fermi surface سطح فيرمي

Heat capacity سعة حرارية

Permeability سماحية

(ش)

Vacancy شاغرة

Spiral network شبكة حلزونية

Semiconductor شبه موصل

Reciprocal lattice شبكية انقلابية (منعكسة)

Space lattice شبكية فراغية

Slit شق (فتحة مستطيلة)

Impurities شوائب

(ص-ظ)

Epilepsy صرع

Activation energy طاقة التنشيط

Energy gap طاقة الثغرة (الفجوة)

Activation energy طاقة تنشيط

Fermi energy طاقة فيرمي

Dual nature طبيعة مزدوجة

Mode طراز

Method	طريقة
Rotating crystal method	طريقة البلورة الدوارة
Laue method	طريقة لاو
Phase	طور
Bond length	طول الرابطة
Spectrum	طيف
Relaxation spectrum	طيف الاسترخاء
Frequency spectrum	طيف الترددات
Tunneling effect	ظاهرة الإنفاق
Levitation effect	ظاهرة الرفع
Transport phenomena	ظواهر الانتقال
Cooperative phenomena	ظواهر تعاونية

(ع، غ)

Extrinsic	عارضة (مشوبة)
Dielectric	عازل كهربى
Lattice structure factor	عامل بناء الشبكة
Coordination number	عدد التناسق
Frictionless	عديم الاحتكاك
Moment	عزم
Magnetic moment	عزم مغناطيسى
Anti parallel	عكس مواز
Dispersion relation	علاقة التشتت
Arrhenius relation	علاقة أرهينيوس
Klausius – Mosoti relation	علاقة كلاوزيوس وموزوتى
Madelung relation	علاقة ماديلنج
Symmetry elements	عناصر التماثل
Element of volume	عنصر حجم
Schottky defect	عيب شوتكى
Frenkel defect	عيب فرنكل

Lattice defects	عيوب الشبكة
Line defects	عيوب خطية
Planer defects	عيوب مستوية
Point defects	عيوب نقطية
Free electron gas	غاز الإلكترون الحر

(ف)

Filament	فتيلة
Velocity space	فراغ (فضاء) السرعات
Phase space	فراغ (فضاء) الطور
Fourier space	فراغ فورييه
Vacuum	فراغ (مخلخل)
Schottky vacancies	فراغات شوتكي
Frenkel vacancies	فراغات فرنكل
Void	فراغه
Hypothesis	فرض
Ferro electric	فروكهربية
Ferro magnetic	فرومغناطيسية
Momentum space	فضاء (فراغ) كمية الحركة
Metal	فلز (معدن)
Photon	فوتون
Optical photon	فوتون ضوئي
Entropy	فوضى (انتروبيا)
Fullerine	فولرين
Thermal phonon	فونون حراري
Acoustic phonon	فونون صوتي
Magnetic susceptibility	قابلية مغناطيسية

(ق)

Basis	قاعدة (الأساس)
Selection rule	قاعدة الاختيار

Lever rule	قاعدة ليفر
Mie's rule	قاعدة مى
Conservation law	قانون البقاء
Bragg's law	قانون براغ
Waies law	قانون فايس
Shell	قشرة
Sub shell	قشرة فرعية
Hyperbola	قطع زائد
Core	قلب
Bridge	قنطرة
Fick's diffusion laws	قوانين فيك للانتشار
Covalent force	قوة تساهمية
Shearing force	قوة قاصصة
Binding energy	قوى الترابط
Attractive forces	قوى جاذبة
Van der Waal forces	قوى فان درفال
Coulomb forces	قوى كولومية
Eigen values	قيم الطاقة

(ك)

Cation	كاتيون
Polarization catastrophe	كارثة الاستقطاب
Point mass	كتلة نقطية
Effective mass	كتله فعالة
Probability density	كثافة الاحتمال
Density of energy state	كثافة الحالة (مستويات الطاقة)
Packing density	كثافة الرص (التعبئة)
Energy density	كثافة الطاقة
Current density	كثافة تياريه
Density of energy state	كثافة مستويات الطاقة

Carbide	كربيد
Quantum	كمه
Flux quantum	كمه فيض
Electro magnetic	كهرومغناطيسية
(ل، م)	
Amorphous	لا بلورى (امورفى)
Anelasticity	لامرونة
Viscosity	لزوجة
Random velocity	سرعة عشوائية
Spin	لف (مغزلي)
Luster	لمعان
Bohar magneton	ماجنطون بوهر
Macroscopic	ماكرونية
Larmor precession	مبادرة لارمر
Pauli principle	مبدأ باولى
Uncertainty principle	مبدأ عدم اليقين
Quantization principle	مبدأ كمى
Remenant	متبقية
Burger's vector	متجه بروجر
Translation vectors	متجهات الانتقال
Basis vectors	متجهات الأساس
Oscillator	متذبذب
Harmonic oscillator	متذبذب توافقى
Equipartion	متساوي التوزيع
Polycrystalline	متعدد التبلور
Integral	متكامل
Face-Centered	متمركز الأوجه
Body-centered	متمركز الجسم
Base-centered	متمركز القاعدة

Mean free path	متوسط المسار الحر
Critical field	مجال حرج
Lorentz field	مجال لورنتز
Local field	مجال موضعي
Collector	مجمع
Collimator	مجمع أشعة
Probable	محتمل
Enthalpy	محتوى حراري (انثالبى)
Finite	محدود
Solid solution	محلول صلب
Axis of symmetry	محور التماثل
Axis of rotation	محور الدوران
Zone axis	محور النطاق
Orbit	مدار (فلك)
Scattering orbit	مدار الاستطارة
Stable orbit	مدار مستقر
Electron gun	مدفع الكتروني
Center of inversion	مركز الانقلاب
Center of symmetry	مركز التماثل
Elastic after effect	مرونة متأخرة
Free path	مسار حر
Slip plane	مستوى الانزلاق
Slipping plane	مستوى الانزلاق
Plane of reflection	مستوى الانعكاس
Plane of symmetry	مستوى التماثل
Energy levels	مستويات الطاقة
Atomic planes	مستويات ذرية
Powder	مسحوق
Radio tracer	مشع اقتفائي

Plateau	مصطبة
Anode	مصعد (أنود)
melt	مصهور
Amplifier	مضخم
Flexible	مطاطة
Diffractmeter	مطياف الحيود
Functional equation	معادلة دوالية
Schrödinger equation	معادلة شرودنجر
Impact parameter	معامل التصادم
Distribution parameter	معامل التوزيع
Thermal conductivity coefficient	معامل التوصيل الحرارى
Bulk modulus	معامل المرونة الحجمى
G – factor	معامل لاندى الانشطاري
Lande splitting factor	معامل لاندى الانشطاري
Miller indices	معاملات ميلر
Ortho rhombic	معيني قائم
Remenant magnetism	مغناطيسية متبقية (متخلفة)
Simple cubic	مكعبى بسيط
Face centered cub	مكعبى متمركز الأوجه
Face centered cub	مكعبى متمركز الأوجه
Body centered cub	مكعبى متمركز الجسم
Rocking curve	منحنى القلقة
Electron distribution curves	منحنيات التوزيع الالكتروني
Domain	منطقة
Brillion zone	منطقة بريليون
1 st Brillouin zone	منطقة بريليون الأولى
Cathode	مهبط (كاثود)
Elastic waves	موجات مرنة
Plane harmonic wave	موجة توافقية مستوية

Super conductivity	موصلية فائقة
Mechanism	ميكانيكية (آلية)
Field-ion microscope	ميكروسكوب المجال الايوني
Microscopic	ميكروسكوبية
Gradient	ميل
Thermal gradient	ميل حراري

(ن)

Valance band	نطاق التكافؤ
Conduction band	نطاق التوصيل
Energy band	نطاق طاقة
Forbidden energy band	نطاق طاقة محرم
Overlapped zones	نطاقات متداخلة
System	نظام
Energy system	نظام طاقة
Free electron theory	نظرية الإلكترون الحر
Permittivity	نفاذية
Criticism	نقد
Lattice point	نقطة شبكة
Diffraction pattern	نموذج حيود
Krong - Peny model	نموذج كرونيج وبني
Nucleus	نواة
Neutron	نيوترون

(ل)

Unit cell	وحدة الخلية
Josephson junction	وصلة جوزيفسن
p-n junction	وصلة موجب-سالب

مسرد للمصطلحات مرتب

طبقا للأبجدية الانجليزية

A

Absolute temperature	درجة الحرارة المطلقة
Absorption	امتصاص
Acoustic phonon	فونون صوتي
Activation energy	طاقة التنشيط
Activation energy	طاقة تنشيط
Adiabatic	أديباتيكي
Allowed states	حالة مسموحة
Alloy	سبيكة
Amorphous	لا بلورى (امورفى)
Amplifier	مضخم
Anelasticity	لامرونة
Angles between zones	الزوايا بين النطاقات
Angular distribution	توزيع زاوي
Anion	أنيون
Anode	مصعد (أنود)
Anomalous Zeeman effect	تأثير زيمان الشاذ
Anti parallel	عكس مواز
Arrhenius relation	علاقة أرهينيوس
Atomic core	القلب الذرى
Atomic density of planes	الكثافة الذرية للمستويات
Atomic frequency	تردد ذرى
Atomic planes	مستويات ذرية
Atomic specific heat	حرارة نوعية ذرية
Attractive forces	قوى جاذبة
Axis of rotation	محور الدوران
Axis of symmetry	محور التماثل

B

Barkhausen effect	تأثير باركهوزن
Base-centered	متمركز القاعدة

Basis	قاعدة (الأساس)
Basis vectors	متجهات الأساس
Binding energy	قوى الترابط
Bloch walls	حوائط بلوخ
Body centered cub	مكعبي متمركز الجسم
Body-centered	متمركز الجسم
Bohar magneton	ماجنتون بوهر
Bond length	طول الرابطة
Boundary condition	حالة الحدود
Bragg's law	قانون براغ
Bravais	برافى
Bridge	قنطرة
Brillion zone	منطقة بريليون
Bulk modulus	معامل المرونة الحجمى
Burger's circle	دائرة بروجر
Burger's vector	متجه بروجر
C	
Carbide	كربيد
Cartesian coordinates	إحداثيات كارتيزية
Cathode	مهبط (كاثود)
Cation	كاتيون
Center of inversion	مركز الانقلاب
Center of symmetry	مركز التماثل
Charge carriers	حاملات الشحنة
Charge flow	تدفق الشحنات
Classical theory	النظرية التقليدية
Close-packed	العبوة المتراسة
Collector	مجمع
Collimator	مجمع أشعة
Collision frequency	تردد التصادم

Compartment	حجره
Compressibility	انضغاطي
Concentration	تركيز
Concentration	تركيز
Conduction band	نطاق التوصيل
Conduction electrons	الكثرونات التوصيل
Conductivity	توصيلية
Conservation law	قانون البقاء
Cooper pair	زوج كوبر
Cooperative phenomena	ظواهر تعاونية
Coordination number	عدد التناسق
Core	قلب
Coulomb forces	قوى كولومبية
Coupling	ربط بيني
Covalent crystal	بلورة تساهمية
Covalent force	قوة تساهمية
Critical field	مجال حرج
Critical temperature	درجة حرارة حرجة
Criticism	نقد
Crystal	بلورة
Crystal directions	الاتجاهات البلورية
Crystal growth	إنماء بلوري
Crystal system	الأنظمة البلورية
Crystal systems	النظم البلورية
Crystalline	بلوري
Cubic	تكعيبي
Curie temperature	درجة حرارة كوري
Current	تيار
Current density	كثافة تياريه

Cyclotron resonance
Cylindrical coordinates

رنين السيكلوترون
إحداثيات اسطوانية

D

Debye function
Debye temperature
Degeneracy
Density of energy state
Density of energy state

دالة ديبي
درجة حرارة ديبي
تحلل
كثافة الحالة (مستويات الطاقة)
كثافة مستويات الطاقة

Diamagnetic
Dielectric
Dielectric constant
Diffraction

ديامغناطيسي
عازل
ثابت العزل
حيود

Diffraction pattern
Diffraction pattern

نموذج حيود

Diffraction pattern

مطياف الحيود

Diffusion

انتشار

Dipole

ثنائي قطب

Dislocation

انخلاع

Dispersion relation

علاقة التشتت

Displacement

إزاحة

Distribution parameter

معامل التوزيع

Domain

منطقة

Drift velocity

سرعة ازاحية

Drift velocity

سرعة ازاحية (إنجرافية)

Dual nature

طبيعة مزدوجة

E

Eccentricity

تطرف

Edge

حافة (طرف)

Edge dislocation

انخلاع طرفي (حدي)

Effective mass

كتله فعالة

Eigen values

قيم الطاقة

Elastic after effect	مرّنة متأخرة
Elastic scattering	التشتت المرّن
Elastic waves	موجات مرّنة
Electric dipole	ثنائي قطب كهربّي
Electro magnetic	كهرومغناطيسية
Electron	إلّكترون
Electron distribution curves	منحنيات التوزيع الالّكتروني
Electron gun	مدفع الّكتروني
Electronic polarization	استقطابية الّكترونية
Electronic specific heat	حرارة نوعية الّكترونية
Electron-phonon interaction	الفعل البيني إلّكترون - فونون
Electrostriction	الانضغاط الكهربّي
Element of volume	عنصر حجم
Emission	انبعاث
Energy band	نطاق طاقة
Energy barrier	حاجز جهد
Energy contours	خطوط توزيع الطاقة (كونتور)
Energy density	كثافة الطاقة
Energy gap	طاقة الثغرة (الفجوة)
Energy levels	مستويات الطاقة
Energy state	حالة (مستوى) طاقة
Energy system	نظام طاقة
Enthalpy	محتوى حراري (انثالبي)
Entropy	فوضى (انتروبيا)
Epilepsy	صرع
Equipartition	متساوي التوزيع
Etch pit	حفرة كشطية
Ether	أثير
Excitation potential	جهد الإثارة

Excited state	حالة مثارة
Exponential function	دالة آسية
Extrinsic	عارضة (مشوبة)
F	
Face centered cub	مكعبي متمركز الأوجه
Face centered cub	مكعبي متمركز الأوجه
Face-Centered	متمركز الأوجه
Fermi energy	طاقة فيرمى
Fermi surface	سطح فيرمى
Fermi-Dirac statistics	إحصاء فيرمى وديراك
Ferro electric	فرو كهربية
Ferro magnetic	فرو مغناطيسية
Fick's diffusion laws	قوانين فيك للانتشار
Field-ion microscope	ميكروسكوب المجال الايوني
Filament	فتيلة
Fine structure	بناء دقيق
Finite	محدود
First Brillouin zone	منطقة بريليون الأولى
Flexible	مطاطة
Flux quantum	كمه فيض
Forbidden energy band	نطاق طاقة محرم
Fourier space	فراغ فورييه
Fractional Hall effect	تأثير هول الجزئي
Free electron gas	غاز الإلكترون الحر
Free electron theory	نظرية الإلكترون الحر
Free path	مسار حر
Free surfaces	الأسطح الحرة
Frenkel defect	عييب فرنكل
Frenkel vacancies	فراغات فرنكل
Frequency	تردد

Frequency distribution	توزيع الترددات
Frequency spectrum	طيف الترددات
Frictionless	عديم الاحتكاك
Fullerine	فولرين
Functional equation	معادلة دوالية

G, H

G – factor	معامل لاندى الانشطاري
Gradient	ميل
Grain boundaries	حدود الحبيبات
Ground state	الحالة الأرضية
Group velocity	سرعة المجموعة
Hall effect	تأثير هول
Hall mobility	حركية هول
Harmonic	توافقي
Harmonic oscillator	متذبذب توافقي
Heat capacity	سعة حرارية
Hexagonal	سداسي
Hole	ثقب (فجوة)
Hyperbola	قطع زائد
Hypothesis	فرض

I

Impact parameter	معامل التصادم
Impurities	شوائب
Infrared	أشعة تحت الحمراء
Integral	متكامل
Interfacial	بين سطحي
Interstitial atom	إشابة تخلليه
Intrinsic	ذاتي (نقى)
Ionic crystal	بلورية أيونية
Ionic polarizability	استقطابية أيونية

Ionization potential	جهد التأين
Isothermal	ايزوثرمالى
J, K	
Josephson junction	وصلة جوزيفسن
Kinetic theory	النظرية الحركية
Klausius – Mosoti relation	علاقة كلاوزيوس وموزوتى
Krong – Peny model	نموذج كرونيج وبني
L	
Lande splitting factor	معامل لاندى الانشطاري
Larmor precession	مبادرة لارمر
Lattice defects	عيوب الشبكة
Lattice parameter	البعد الشبكي
Lattice point	نقطة شبكة
Lattice structure factor	عامل بناء الشبكة
Laue method	طريقة لاو
Ledge	الحافة
Lever rule	قاعدة ليفر
Levitation effect	ظاهرة الرفع
Line defects	عيوب خطية
Liquidus line	خط السائل
Local field	مجال موضعي
Long rang order	انتظام ممتد (طويل)
Longitudinal waves	أمواج طولية
Lorentz field	مجال لورنتز
Luster	لمعان
M	
Macroscopic	ماكرونية
Madelung constant	ثابت ماديلونج
Madelung relation	علاقة ماديلنج
Magnetic moment	عزم مغناطيسي

Magnetic susceptibility	قابلية مغناطيسية
Mean free path	متوسط المسار الحر
Mechanism	ميكانيكية (آلية)
Meissner effect	تأثير ميزنر
Melt	مصهور
Melting crucible	بوتقة صهر
Metal	فلز (معدن)
Metallic crystal	بلورة فلزية
Method	طريقة
Microscopic	ميكروسكوبية
Mie's rule	قاعدة مى
Miller indices	معاملات ميلر
Miller's indices	أدلة ميلر
Mode	طراز
Molar specific heat	حرارة نوعية مولارية
Molecular crystal	بلورة جزيئية
Molecular velocity	سرعة جزيئية
Moment	عزم
Momentum space	فضاء (فراغ) كمية الحركة
Mono	أحادية
Mono clinic	أحادية الميل
Monochromatic	أحادى اللون
Multiplication of dislocations	تكاثر الانخلاعات
N	
Neutron	نيوترون
Non primitive cell	خلية غير أولية
Normal triplet	ثلاثي معتاد
Normalization condition	الحالة العيارية
Nuclear magnetic resonance	رنين نووي مغناطيسي
Nucleus	نواة

O

Occupation probability	احتمال الإشغال
Opacity	إعتام
Optical photon	فوتون ضوئي
Orbit	مدار (فلك)
Orbital quantum number	العدد الكمي المداري
Order	رتبة
Order - disorder transformation	تحول من منتظم إلى غير منتظم
Orientation	اتجاهية
Orientation polarization	استقطابية اتجاهية
Ortho rhombic	معيني قائم
Orthogonality condition	الحالة العمودية
Oscillator	متذبذب
Oscilloscope	راسم الذبذبات
Overlapped zones	نطاقات متداخلة

P

Packing	رص (تعبئة)
Packing density	كثافة الرص (التعبئة)
Paramagnetic	بارامغناطيسي
Paramagnetic resonance	رنين بارامغناطيسي
Particle	جسيم
Particle velocity	سرعة الجسيم
Partition function	دالة التقسيم
Pauli principle	مبدأ باولي
Periodic potential	جهد دوري
Periodic table	الجدول الدوري
Permeability	سماحية
Permittivity	نفاذية
Perovskite	بروفسكيت
Phase	طور

Phase boundaries	حدود الطور
Phase space	فراغ (فضاء) الطور
Phase transformation	تحول طوري
Photon	فوتون
Piezo electricity	الكهروضغطية
Plane harmonic wave	موجة توافقية مستوية
Plane of reflection	مستوى الانعكاس
Plane of symmetry	مستوى التماثل
Plane waves	أمواج مستوية
Planer defects	عيوب مستوية
Plasma	بلازما
Plastic flow	تدفق لدن
Plateau	مصطبة
p-n junction	وصلة موجب-سالب
Point defects	عيوب نقطية
Point mass	كتلة نقطية
Polar coordinates	إحداثيات قطبية
Polarization	استقطاب
Polarization catastrophe	كارثة الاستقطاب
Polycrystalline	متعدد التبلور
Polymorphism	تعدد الأشكال
Potential well	بئر جهد
Powder	مسحوق
Precession	رحوى
Precession frequency	تردد رحوى
Primitive cell	خلية أولية
Probability density	كثافة الاحتمال
Probable	محتمل

Q, R

Quantization	تقنين (تكمية)
--------------	---------------

Quantization principle	مبدأ كمي
Quantum	كمه
Quantum statistics	إحصاء كمي
Radial quantum number	العدد الكمي النصف قطري
Radio tracer	مشع اقتفائي
Random velocity	سرعة عشوائية
Reciprocal lattice	شبكة انقلابية (منعكسة)
Relaxation spectrum	طيف الاسترخاء
Relaxation time	زمن الاسترخاء
Remenant	متبقية
Remenant magnetism	مغناطيسية متبقية (متخلفة)
Rocking curve	منحنى القلقة
Rotating	دوار
Rotating crystal method	طريقة البلورة الدوارة

S

Scattering	استطارة (تبعثر)
Scattering orbit	مدار الاستطارة
Schottky defect	عيب شوتكي
Schottky vacancies	فراغات شوتكي
Schrödinger equation	معادلة شرودنجر
Seed crystal	بذرة بلورة
Selection rule	قاعدة الاختيار
Semiconductor	شبه موصل
Shearing force	قوة قاصة
Shell	قشرة
Short rang order	انتظام محدود (قصير)
Simple cubic	مكعبي بسيط
Slip plane	مستوى الانزلاق
Slipping plane	مستوى الانزلاق
Slit	شق (فتحة مستطيلة)

Solid solution	محلول صلب
Solidus	خط الصلب
Space lattice	شبكة فراغية
Space quantization	تكمية الفراغ
Spectrum	طيف
Spherical coordinates	إحداثيات كروية
Spin	لف (مغزلي)
Spin - orbital interaction	الفعل اللفي المداري
Spiral network	شبكة حلزونية
Splitting	انشطار (تجزئة)
Squid	السكويد
Stable orbit	مدار مستقر
Stationary waves	أمواج موقوفة
Statistical	احصائي
Steady state	حالة الاستقرار
Sterling's approximation	تقريب سترلنج
Strain	انفعال
Stress	إجهاد
Structural Defects	العيوب التركيبية
Structure analysis	تحليل بنائي
Sub shell	قشرة فرعية
Substitutional atom	ذرة تبادلية
Super conductivity	موصلية فائقة
Super cooled liquid	سائل فوق مبرد
Symmetry	تماثل
Symmetry elements	عناصر التماثل
System	نظام
T	
Tetragonal	رباعي الزوايا والإضلاع
Thermal agitation	تهيج حراري

Thermal conductivity coefficient	معامل التوصيل الحرارى
Thermal equilibrium state	حالة الاتزان الحرارى
Thermal expansion	التمدد الحراري
Thermal gradient	ميل حراري
Thermal phonon	فونون حراري
Thermal Properties	الخصائص الحرارية
Thermal vibration	اهتزاز حراري
Thermionic emission	انبعاث أيوني حراري
Thermodynamic equilibrium	اتزان ديناميكي حراري
Thermodynamic probability	الاحتمال الديناميكي الحرارى
Threshold voltage	جهد العتبة
Tolman effect	تأثير تولمان
Transition	انتقال
Translation vectors	متجهات الانتقال
Transport phenomena	ظواهر الانتقال
Transverse waves	أمواج مستعرضة
Trapping	اصطياد
Triclinic	ثلاثي الميل
Trigonal	ثلاثية الزوايا والإضلاع
Tunneling effect	ظاهرة الإنفاق
Type I	النوع الأول
Type II	النوع الثاني
U, V	
Uncertainty principle	مبدأ عدم اليقين
Unit cell	وحدة الخلية
Vacancy	شاغرة
Vacuum	فراغ (مخلخل)
Valence	تكافؤ
Valence band	نطاق التكافؤ

Van der Waal forces	قوى فان درفال
Velocity space	فراغ (فضاء) السرعات
Vibration modes of lattice	أنماط اهتزاز الشبكة
Viscosity	لزوجة
Void	فراغه
Voltage	جهد
Vortex currents	تيارات دوامية
Vortex lines	خطوط دوامية
W-Z	
Waies law	قانون فايس
Wave number	العدد الموجي
X-rays	أشعة سينية
Zone	النطاق
Zone axis	محور النطاق

ملحق الكتاب

Appendixes



ملحق 1

ملخص للوحدات الأساسية طبقاً للنظام الدولي للوحدات SI

تكون الوحدات الأساسية طبقاً للنظام الدولي على الصورة كجم.متر.ث أو جم سم.ث ويرمز لها كما هو مدون بالجدول التالي.

الكمية	الرمز	الوحدة
الكتلة	m	Kg كيلو جرام
الطول	l	m متر
الزمن	t	s ثانية

الكتلة

تقدر الكتلة في النظام الدولي بالكيلوجرام (كجم) وهو كتلة قطعة عيارية من البلاتين محفوظة في متحف بباريس. وتكون كسور ومضاعفات الكيلوجرام على النحو التالي:

$$\begin{aligned}
 1 \text{ جرام} &= 10^{-3} \text{ كجم} & 1 \text{ ملي جرام} &= 10^{-3} \text{ جم} \\
 1 \text{ ميكروجرام} &= 10^{-6} \text{ جم} & 1 \text{ باوند} &= 453.59237 \text{ جم} \\
 1 \text{ باوند (رطل انجليزي)} &= 16 \text{ أونس} & 1 \text{ طن} &= 2000 \text{ باوند} \\
 1 \text{ طن} &= 1000 \text{ كجم.}
 \end{aligned}$$

الطول

يقاس الطول طبقاً للنظام الدولي بوحدة المتر. ويعرف المتر بأنه المسافة إلى يقطعها الضوء في الفراغ لزمن مقداره $\frac{1}{299792458}$ من الثانية. وتكون كسور ومضاعفات المتر على النحو التالي :

$$\begin{aligned}
 1 \text{ سم} &= 10^{-2} \text{ م} & 1 \text{ مم} &= 10^{-3} \text{ م} \\
 1 \text{ ميكرومتر} &= 10^{-6} \text{ م} & 1 \text{ نانومتر} &= 10^{-9} \text{ م}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 1 \text{ أنجستروم} &= 10^{-10} \text{ م} = 10^{-1} \text{ نانومتر} & 1 \text{ بيكو متر} &= 10^{-12} \text{ م} \\
 1 \text{ بوصة} &= 2.54 \text{ سم} & 1 \text{ قدم} &= 0.3048 \text{ متر} \\
 1 \text{ كم} &= 1000 \text{ متر} = 0.62137 \text{ ميل}
 \end{aligned}$$

الزمن

يقدر الزمن فى النظام الدولي بالثانية وهى الفترة الزمنية التى تعادل 9192631770 دورة إشعاع بين المستويات الدقيقة للحالة الأرضية فى ذرة السيزيوم ^{133}Cs . وتكون كسور الثانية على النحو التالي:

$$\begin{aligned}
 1 \text{ ملى ثانية} &= 10^{-3} \text{ ثانية} & 1 \text{ مايكرو ثانية} &= 10^{-6} \text{ ثانية} \\
 1 \text{ نانو ثانية} &= 10^{-9} \text{ ثانية} & 1 \text{ بيكو ثانية} &= 10^{-12} \text{ ثانية} \\
 1 \text{ فيمتو ثانية} &= 10^{-15} \text{ ثانية} .
 \end{aligned}$$

الكلفن

الكلفن هو وحدة قياس درجة الحرارة المطلقة وتساوى $\frac{1}{273.16}$ من الدرجة الترموديناميكية للنقطة الثلاثية للماء.

الأمبير

الأمبير هو وحدة قياس شدة التيار الكهربى ويعرف على انه التيار الذى إذا مر فى سلكين متوازيين لانهايين فى الفراغ فإنه يحدث قوة تساوى 2×10^{-7} نيوتن لكل متر. وتكون كسور وحدة الأمبير على النحو التالي:

$$\begin{aligned}
 1 \text{ ملى أمبير} &= 10^{-3} \text{ أمبير} & 1 \text{ مايكرو أمبير} &= 10^{-6} \text{ أمبير} \\
 1 \text{ نانو أمبير} &= 10^{-9} \text{ أمبير} & 1 \text{ بيكو أمبير} &= 10^{-12} \text{ أمبير} .
 \end{aligned}$$

الشمعة (الكانديلا)

هى شدة الإضاءة فى اتجاه معين لمصدر يشع ضوء أحادى تردده 540×10^{12} هرتز وله شدة إشعاع فى هذا الاتجاه تساوى $\frac{1}{683}$ وات لكل سترديان.

الحجم

يقدر الحجم بالمتر المكعب، حيث $1 \text{ سم}^3 = 10^{-6} \text{ م}^3$ و $1 \text{ لتر} = 10^{-3} \text{ م}^3$

المول

المول هو كمية من المادة في نظام ما يحتوى على عدد من الذرات يساوى عدد افوجادرو (6.022×10^{23}) ، كما يعرف أيضا بأنه كمية المادة التى تحتوى على عدد من الجرامات يساوى الوزن الجزئى لها.

بعض علاقات التحويل المهمة

الطاقة	درجة الحرارة
<p>الوحدة الدولية جول (Joule)</p> <p>1 جول = 1 كجم م² /ثانية²</p> <p>= 0.23901 سعر</p> <p>= 1 كولوم × 1 فولت</p> <p>1 سعر = 4.184 جول</p>	<p>الوحدة الدولية كلفن</p> <p>0 K = 273.15 °C</p> <p>K = °C + 273.15 °C</p> <p>? °C = (5° C/9° F)(° F - 32° F)</p> <p>? °F = (9/5)°C + 32</p>
الضغط	الحجم
<p>الوحدة الدولية باسكال (Pa)</p> <p>1 Pa = 1 N/m²</p> <p>= 1 Kg/m².s²</p> <p>1 atmosphere = 101.325 k Pa</p> <p>= 760 mmHg</p> <p>= 760 torr</p> <p>= 14.70 lb/in²</p>	<p>الوحدة الدولية متر مكعب</p> <p>1 liter (L) = 1 × 10⁻³ m³</p> <p>= 1000 cm³</p> <p>= 1.056710 quarts</p> <p>1 كوارتر = ربع جالون</p> <p>1 gallon = 4 quarts</p>

الطيف المرئي

اللون المكمل	اللون	مدى الطول الموجي، nm
اصفر-اخضر	بنفسجي	400 – 435
اصفر	ازرق	435 – 480
احمر	ازرق-اخضر	480 – 500
أرجواني	اخضر	500 – 560
بنفسجي	اصفر-اخضر	560 – 580
ازرق	اصفر	580 – 595
اخضر-ازرق	برتقالي	595 – 650
ازرق-اخضر	احمر	650 – 750

بعض الثوابت الفيزيائية الأساسية

الرمز	القيمة	الكمية الفيزيائية	
eV	$1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$	Electron volt	الإلكترون فولت
S	1.4 KW/m^2	Solar constant	الثابت الشمسي
atm	101325 Pa	Slandered atmospheric pressure	الضغط الجوي القياسي
R	$8.314 \text{ JK}^{-1} \text{ mol}^{-1}$	Gas constant	ثابت الغاز الجزيء
h	$6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}$	Plank constant	ثابت بلانك
K	$1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$	Boltzmann constant	ثابت بولتزمان
R_H	$1.1 \times 10^7 / \text{m}$	Rydberg constant	ثابت رايدبرج

σ	$5.67 \times 10^{-8} \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-4}$	Steven-Boltzmann constant	ثابت ستيفان - بولتزمان
F	$96485309 \text{ Cmol}^{-1}$	Faraday constant	ثابت فارادى
G	$6.67 \times 10^{-11} \text{ Nm}^2/\text{Kg}^2$	Newton gravitational constant	ثابت نيوتن للجاذبية
c	$3 \times 10^8 \text{ m/s}$	Velocity of light	سرعة الضوء فى الفراغ
ϵ_o	$8.85 \times 10^{-12} \text{ F/m}$	Permittivity of space	سماحية الفراغ
-e	$-1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$	Electron charge	شحنة الإلكترون
g	9.80665 ms^{-2}	Gravitational acceleration	عجلة الجاذبية
N	$6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$	Avogadro's number	عدد افوجادرو
m_e	$9.11 \times 10^{-31} \text{ Kg}$	Electron mass	كتلة الإلكترون
m_p	$1.673 \times 10^{-27} \text{ Kg}$	Proton mass	كتلة البروتون
m_n	$1.675 \times 10^{-27} \text{ Kg}$	Neutron mass	كتلة النيوترون
ρ_{Hg}	13600 kg m^{-3}	Mercury density	كثافة الزئبق
ρ_w	1000 kg m^{-3}	Water density	كثافة الماء

تابع بعض الثوابت الفيزيائية الأساسية

ρ_{air}	1.29 kg m^{-3}	Air density at s.t.p.	كثافة الهواء
Φ_0	$= (h/2e)$ $2.07 \times 10^{-15} \text{ Wb}$	Magnetic flux quanta	كمية الفيض المغناطيسي
μ_B ($eh/2m_e$)	$9.274 \times 10^{-24} \text{ Jm}^2 / W$	Bohr magneton	مغنيط بوهر
R_H	25812.8Ω	Hall resistance quanta	مقاومة هول الكمّاءة
r_e	$2.818 \times 10^{-15} \text{ m}$	Electron radius	نصف قطر الإلكترون
a_0	$0.529177 \times 10^{-10} \text{ m}$	Bohr radius	نصف قطر بوهر
μ_0	$4\pi \times 10^{-7} \text{ N/m}^2$ $= 1.256 \times 10^{-6} \text{ H/m}$	Permeability of space	نفاذية الوسط
a.m.u.	$1.66 \times 10^{-27} \text{ Kg}$	Atomic mass unit	وحدة الكتل الذرية

متصدرات المضاعفات (Multiplication prefixes)

المتصدرة	الرمز	المعامل	المتصدرة	الرمز	المعامل
أتو (atto)	a	10^{-18}	سنتي (centi)	c	10^{-2}
فيمتو (femto)	f	10^{-15}	ديسي (deci)	d	10^{-1}
بيكو (pico)	p	10^{-12}	كيلو (kilo)	k	10^3
نانو (nano)	n	10^{-9}	ميغا (mega)	M	10^6
ميكرو (micro)	μ	10^{-6}	جيجا (giga)	G	10^9
ملي (milli)	m	10^{-3}	تيرا (tera)	T	10^{12}

رموز بعض الوحدات المشتقة

الكمية	الوحدة المشتقة	اسم الوحدة	الرمز
التردد	1/s	هرتز	Hz
الجهد الكهربائي	J/C	فولت	V
الحث	V s/A	هنري	H
السعة الكهربائية	e/V	فاراد	F
الشحنة الكهربائية	A s	كولوم	C
الضغط	N/m ²	باسكال	Pa
الطاقة	N m	جول	J
الفيض الضوئي	cd sr	ليومن	Lm
الفيض المغناطيسي	V s	وبر	Wb
القدرة	J/s	وات	W

N	Newton	نيوتن	kg/s ²	القوة
T	Tesla	تسلا	V s/m ²	المجال المغناطيسي
Ω	Ohm	أوم	V /A	المقاومة الكهربائية
S	Simens	سيمنز	A/V	الموصلية الكهربية
Bq	Beacurel	بيكريل	1/s	النشاط الإشعاعي
°C	Degree Celsius	درجة مئوية	K	درجة الحرارة

تحويلات مهمة لبعض الكميات

التحويلات	الكمية
1 V (volt) = 3.336×10^{-3} e.s.u.of potential (stat volt)	الجهد الكهربائي
1 H (henry) = 1.113×10^{-12} e.s.u.of induction (stat henry)	الحث
1 gallon (gal) = 3.785×10^{-3} m ³ 1 in ³ = 16.387 cm ³ 1.728 in ³ = 1 ft ³ = 0.028317 m ³ 27 ft ³ = 1 yard ³ = 0.764553 17 m ³ 1 m ³ = 10 ⁶ cm ³ = 35.31 ft ³ = 264.2 gal 1 liter = 10 ⁻³ m ³ = 1000 cm ³	الحجم
1 revolution = 2π radian = 360° 1 radian = 57.30° 1 degree = 1.745×10^{-2} radian = 60' = 3600"	الزاوية

$1 \text{ second} = \frac{1}{60} \text{ min} = \frac{1}{3600} \text{ h} = 1.157 \times 10^{-5} \text{ day}$ $1 \text{ year} = 365.24 \text{ days} = 8.766 \times 10^3 \text{ h} = 3.156 \times 10^7 \text{ s}$ $1 \text{ siderial day} = 0.9973 \text{ day}$	الزمن
$1 \text{ m.s}^{-1} = 100 \text{ m.s}^{-1} = 3.281 \text{ ft.s}^{-1} = 1.944 \text{ knot}$ $1 \text{ ft.s}^{-1} = 0.3048 \text{ m.s}^{-1} = 0.5925 \text{ knot (nautical mile.h}^{-1})$ $1 \text{ Km.h}^{-1} = 0.2778 \text{ m.s}^{-1} = 0.54 \text{ knot} = 0.6214 \text{ mile.h}^{-1}$	السرعة
$1 \text{ F (farad)} = 8.988 \times 10^{11} \text{ e.s.u.of capacitance (state farad)}$	السعة الكهربائية
$1 \text{ C (cuolomb)} = 2.998 \times 10^9 \text{ e.s.u.of charge (stat coulomb)}$	الشحنة الكهربائية
$1 \text{ atm (atmosphere)} = 1.03 \times 10^5 \text{ N.m}^{-2} = 76 \text{ cm Hg} = 14.7 \text{ lb.in}^{-2}$ $1 \text{ N.m}^2 \text{ or pascal} = 9.869 \times 10^{-6} \text{ atm} = 10^{-5} \text{ bar}$ $1 \text{ pascal} = 7.501 \times 10^{-4} \text{ cm Hg} = 10 \text{ dynes.cm}^{-2}$ $1 \text{ pascal} = 7.501 \times 10^{-3} \text{ torr}$ $1 \text{ bar} = 10^5 \text{ N.m}^{-2} = 0.9869 \text{ atm} = 75.01 \text{ cm Hg}$ $1 \text{ cm Hg} = 1.333 \times 10^3 \text{ N.m}^{-2} = 10 \text{ torr} = 27.85 \text{ lb.ft}^{-2}$ $1 \text{ psi (pound persquareinch)} = 6.895 \times 10^3 \text{ N.m}^{-2} = 6.805 \times 10^{-2} \text{ atm}$	الضغط
$1 \text{ kWh (kilowatt - hour)} = 3.6 \times 10^6 \text{ joule} = 8.598 \times 10^5 \text{ cal}$ $1 \text{ cal} = 4.187 \text{ joule} = 3.968 \text{ Btu} = 1.163 \times 10^{-6} \text{ kWh}$ $1 \text{ eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ joule} = 1.602 \text{ erg}$ $1 \text{ joule} = 9.478 \times 10^{-4} \text{ Btu} = 10^7 \text{ erg} = 0.2388 \text{ cal}$ $= 6.242 \times 10^{18} \text{ eV} = 2.778 \times 10^{-7} \text{ kWh}$ $1 \text{ Btu (British thermal unit)} = 1.055 \times 10^3 \text{ joule} = 252 \text{ cal}$	الطاقة
$1 \text{ مم} = 10^{-3} \text{ م}$ $1 \text{ نانومتر} = 10^{-9} \text{ م}$ $1 \text{ بيكو متر} = 10^{-12} \text{ م}$ $1 \text{ قدم} = 0.3048 \text{ متر}$	$1 \text{ سم} = 10^{-2} \text{ م}$ $1 \text{ ميكرومتر} = 10^{-6} \text{ م}$ $1 \text{ أنجستروم} = 10^{-10} \text{ م}$ $1 \text{ بوصة} = 2.54 \text{ سم}$ $1 \text{ كم} = 1000 \text{ متر} = 0.62137 \text{ ميل}$

12 in = 1 ft = 0.30480 m 3 ft = 1 yard = 0.914399 m $5\frac{1}{2}$ yards = 1 rood, pole, perch = 5.03 m 4 poles = 1 chain = 20.12 m 10 chains = 1 furlong = 201.168 m 8 gurlong or 1.760 yards = 1 mile = 1.6093 km	
1 yard = 3 ft = 91.44 cm = 36 in 1 in = 2.54 cm = 25.4 mm 1 Fermi (F) = 10^{-15} m = 10^{-13} cm = 10^5 Å 1 m = 10^{10} Å = 100 cm = 3.28 ft = 39.37 in 1 AU (astronomical unit) = 1.496×10^8 km 1 light year = 9.461×10^{12} km = 0.3066 parsec (pc) 1 pc = 3.086×10^{16} m = 3.262 light year	الطول
1 gee = 9.807 m.s^{-2} = 980.7 cm.s^{-2} = 32.17 ft.s^{-2} 1 ft.s ⁻² = 30.48 cm.s^{-2} = 3.108 gee 1 cm.s ⁻² = 0.01 m.s^{-2} = 1.02×10^{-3} gee 1 m.s ⁻² = 3.281 ft.s^{-2} = 0.102 gee	العجلة
1 kW (kilowatt) = 1000 Watt = 238.8 cal = 1.341 hp 1 hp (horsepower) = 745.7 Watt = 2.544×10^3 Btu.h ⁻¹ = 178.1 cal.s^{-1} 1 watt = 3.412 Btu.h^{-1} = 10^7 ergs.s^{-1} = $0.2388 \text{ cal.s}^{-1}$ 1 cal.s ⁻¹ = 4.187 watt = 3.088 ft/lb/s	القدرة
1 dyne = 1.02×10^{-6} kp (kilopound or kilogram force) = 2.248×10^{-6} lb 1 N = 10^5 dynes = 0.102 kp = 0.2248 lb 1 kp = 9.807 N = 2.205 lb	القوة
1 جرام = 10^{-3} كجم 1 باوند = 453.59237 جم 1 باوند (رطل انجليزي) = 16 أونس 1 طن = 2000 باوند 1 طن = 1000 كجم.	الكتلة

<p>1 grain = 6.48×10^{-5} kg</p> <p>1 dram(dr) = 1.772 grammes</p> <p>1 ounce(Oz) = 28.350 grammes</p> <p>16 dr = 1 ounce = 28.350 grammes</p>	
<p>16 Oz = 1 Pound = 0.453592 kg</p> <p>14 lb = 1 stone = 6.350 kg</p> <p>28 lb = 1 quarter = 12.70 kg</p> <p>100 lb = 1 cental = 45.359243 kg</p> <p>4 quarters (112 lb) = 1 hundred weight (cwt) = 50.8022 kg</p> <p>8 st = 1 hundred weight (cwt)</p> <p>1 kilogram = 1000 gram = 10^{-3} ton = 2.205 lb – mass</p> <p>1 gram = 5 carat = 15.43 grains</p> <p>1 amu (atomic mass unit) = 1.6605×10^{-27} kg</p> <p>1 carat = 0.2 g = 2×10^{-4} kg</p> <p>1 ounce – mass (Oz – mass) = 28.35 g = $\frac{1}{16 \text{ lb – mass}}$</p> <p>1 pound – mass = 0.4536 kg = 16 Oz - mass</p>	<p>الكتلة</p>
<p>1 lb – mass.ft⁻³ = 16.02 kg.m⁻³</p> <p>1 kg.m⁻³ = 10^{-1} g.cm⁻³ = 3.613×10^{-5} lb – mass.in⁻³</p> <p>1 slug.ft⁻³ 515.4 kg.m⁻³ = 32.17 lb – mas.ft⁻³</p>	<p>الكثافة</p>
<p>1 T (tesla) = Wb.m⁻² = 10^4 gauss</p>	<p>المجال المغناطيسي</p>
<p>1 barn = 10^{-24} cm² = 10^{-28} m²</p> <p>1 m² = 10^4 cm² = 1.55×10^3 in²</p> <p>1 in² = 6.9444×10^{-3} ft² = 6.451 cm²</p> <p>144 in² = 1 ft² = 929.03 dcm²</p> <p>9 ft² = 1 yard² = 0.836126 m²</p> <p>$30 \frac{1}{4}$ yard² = 1 pool, rood, perch</p>	<p>المساحة</p>

40 pools = 1 rood = 10.117 acres
 4 roods = 1 acre = 0.40468 hectare
 640 acres = 1 Mile² or 3097600 yard² = 259 hectars
 1 squar yard = 9 ft³

الرموز الإغريقية

N	ν	نيو	A	α	ألفا
Ξ	ξ	إكزاى	B	β	بيتا
Π	π	باى	Γ	γ	جاما
P	ρ	رو	Δ	δ	دلتا
Σ	σ	سيجما	E	ε	ايبسلون
T	τ	تاو	Z	ζ	زيتا
Φ	ϕ	فاى	H	η	ايتا
X	χ	كاى	Θ	θ	ثيتا
Ψ	ψ	بساى	K	κ	كابا
Ω	ω	اوميغا	Λ	λ	لامبدا
			M	μ	ميو

ملحق 2

بعض التكاملات القياسية و التقريبات الرياضية

1- تكاملات قياسية

1- إذا كانت $f'(x)$ هي المشتقة الأولى للدالة $f(x)$ بالنسبة إلى المتغير x فإن

$$\int \frac{f'(x)}{f(x)} dx = \ln|f(x)| + c$$

2- إذا كانت $f'(x)$ هي المشتقة الأولى للدالة $f(x)$ بالنسبة إلى المتغير x فإن

$$\int \frac{f'(x)}{\sqrt{f(x)}} dx = 2\sqrt{f(x)} + c$$

$$\int e^{ax} dx = \frac{1}{a} e^{ax} + C, a \neq 0 \quad -3$$

$$\int x e^{ax} dx = \frac{e^{ax}}{a^2} (ax - 1) + C, a \neq 0 \quad -4$$

$$\int x^n e^{ax} dx = \frac{1}{a} x^n e^{ax} - \frac{n}{a} \int x^{n-1} e^{ax} dx, a \neq 0 \quad -5$$

$$\int b^{ax} dx = \frac{1}{a} \frac{b^{ax}}{\ln b} + C; b > 0, b \neq 1 \quad -6$$

$$\int x^n b^{ax} dx = \frac{x^n}{a} \frac{b^{ax}}{\ln b} - \frac{n}{a \ln b} \int x^{n-1} b^{ax} dx; b > 0, b \neq 1 \quad -7$$

$$\int \ln ax dx = x \ln ax - x + C \quad -8$$

$$\int (\ln ax)^n dx = x (\ln ax)^n - n \int (\ln ax)^{n-1} dx \quad -9$$

$$\int \frac{\ln ax}{x} dx = \frac{1}{2} (\ln ax)^2 + C \quad -10$$

$$\cdot \int \frac{(\ln ax)^n}{x} dx = \frac{(\ln ax)^{n+1}}{n+1} + C \quad ; n \neq -1 \quad -11$$

$$\cdot \int \frac{(\ln ax)^n}{x^m} dx = -\frac{1}{m-1} \left[\frac{(\ln ax)^n}{x^{m-1}} - n \int \frac{(\ln ax)^{n-1}}{x^m} dx \right] \quad ; m \neq -1 \quad -12$$

$$\cdot \int \frac{1}{x \ln ax} dx = \ln |\ln ax| + C \quad -13$$

$$\cdot \int \frac{1}{x(\ln ax)^n} dx = \frac{-1}{(n-1)(\ln ax)^{n-1}} + C \quad ; n \neq 1 \quad -14$$

$$\cdot \int x \ln ax dx = \frac{1}{2} x^2 \ln ax - \frac{1}{4} x^2 + C \quad -15$$

$$\cdot \int \frac{x}{(ax+b)^2} dx = \frac{1}{a^2} \left\{ \ln |ax+b| + \frac{b}{ax+b} \right\} + C \quad -16$$

$$\cdot \int \frac{x^2}{(ax+b)^2} dx = \frac{x}{a^2} - \frac{b^2}{a^3(ax+b)} - \frac{2b}{a^3} \ln |ax+b| + C \quad -17$$

$$\cdot \int \frac{1}{x^2 - a^2} dx = \frac{1}{2a} \ln \left| \frac{x-a}{x+a} \right| + C \quad -18$$

$$\cdot \int \frac{x}{x^2 - a^2} dx = \frac{1}{2} \ln |x^2 - a^2| + C \quad -19$$

$$\cdot \int \frac{1}{x(x^2 - a^2)} dx = \frac{1}{2a^2} \ln \left| \frac{x^2 - a^2}{x^2} \right| + C \quad -20$$

$$\cdot \int \frac{1}{x(a^2 - x^2)^{3/2}} dx = \frac{1}{a^2 \sqrt{a^2 - x^2}} - \frac{1}{a^3} \ln \left| \frac{a + \sqrt{a^2 - x^2}}{x} \right| + C \quad -21$$

$$\int x \left(\sqrt{a^2 - x^2} \right)^n dx = -\frac{\left(\sqrt{a^2 - x^2} \right)^{n+2}}{n+2} + 2 \quad -22$$

2- تقريبات رياضية

1- عندما تكون الزاوية θ صغيرة جداً ومقاسه بالتقدير الدائري فإن

$$\cos \theta \cong 1 \text{ و } \tan \theta \cong \sin \theta \cong \theta$$

2- إذا كانت x صغيرة فإن $(1+x)^2 \cong 1+2x$ و $\sqrt{1+x} \cong 1+\frac{1}{2}x$ و $\frac{1}{1+x} \cong 1-x$

$$e^x = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots -3$$

$$\log(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \dots -4$$

$$1 - \cos \theta = \frac{\theta^2}{2} - \frac{\theta^4}{4} + \frac{\theta^6}{6} - \dots -5$$

$$\log_e y = \log_e 10 \log_{10} y = 2.303 \log_{10} y -6$$

$$(1+x)^n = 1 + nx + \frac{n(n-1)}{2!}x^2 + \frac{n(n-1)(n-2)}{3!}x^3 + \dots -7$$

ملحق 3

تقريب ستيرلنج

Stirling's Approximation

فى الفيزياء الاحصائية يكون عدد جزيئات النظام كبير جداً، الأمر الذى معه يصعب حساب مضروب عدد الجزيئات ($N!$) بالطرق التقليدية. لذلك يوجد العديد من طرق التقريب لحساب هذا المقدار ومن أشهرها طريقة ستيرلنج. وفى هذه الطريقة وجد أنه من المناسب استخدام الصيغة اللوغارتمية لمضروب العدد على النحو التالى،

$$\begin{aligned} \ln N! &= \ln N + \ln(N-1) + \dots + \ln 2 + \ln 1 \\ &= \sum_{n=1}^N \ln n \end{aligned} \quad A1$$

فى هذه المعادلة تم استخدام مفكوك الدالة والذى يمكن التعبير عنه بالمجموع المبين. فى المعادلة السابقة يمكن تمثيل الكمية $\ln n$ بواسطة مدرج تكراري، كما هو موضح فى الشكل A2. يتم تركيب الخط المنحنى المتصل لـ $\ln x$ هذا المدرج التكراري ويتضح من الشكل أنه كلما كانت قيم x و n كبيرة تكون المساحة تحت المدرج التكراري تقريباً مساوية لتلك التى تحت المنحنى المتصل. فى الحقيقة نجد أن المدرج التكراري لـ $n=N$ يمتد إلى النقطة $(N+1/2)$ (كما هو مبين بالشكل A1) وتتساوى المساحتين ويمكن كتابة العلاقة A1 على الصورة،

$$\sum_{n=1}^N \ln n \cong \frac{1}{2} \ln N + \int_1^N \ln x \, dx \quad A3$$

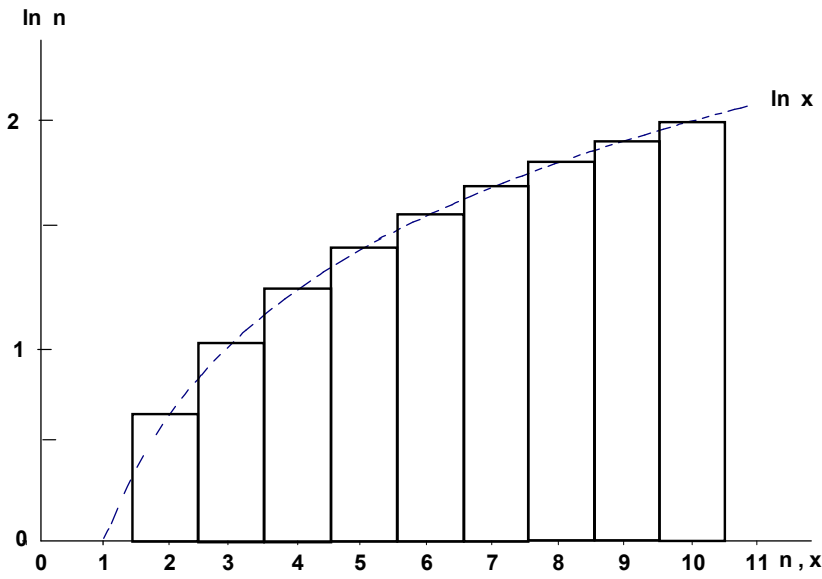
من المعادلة A3 نحصل على التقريب التالى،

$$\ln N! \cong (N - \frac{1}{2}) \ln N - N + 1 \quad A4$$

وقد أعطى العالم ستيرلنج تقريبا أكثر دقة من المعادلة السابقة على النحو التالي،

$$\ln N! \cong (N - \frac{1}{2}) \ln N - N + \frac{1}{2} \ln 2\pi \quad A5$$

بالتعويض بهذا المقدار في $N \ln N - N + 1$ فإن هذا المقدار يساوى مقدار التكامل في المعادلة A3.



الشكل A2 مدرج تكراري لـ $\ln n$ لقيم صحيحة لـ n مع تراكم المنحنى المستمر لـ $\ln x$ عليه.

ومع ذلك ، عند القيم الكبيرة لـ N والتي يعنى بها الميكانيكا الإحصائية (

وكذلك التى تتيح للحقيقة بأن الفروق والتفاضلات للحدود $\ln N!$ هي التى تكون ذات أهمية

عموماً) يكون كافيا أن يختزل التقريب لكلا المعادلتين A4 و A5 إلى الشكل،

$$\ln N! \cong N \ln N - N \quad A6$$

وهكذا تم تقريب المعادلتين A4 و A5 إلى الصورة A6 والتي تعرف بتقريب ستيرلنج.

فى الجدول A7 تم حساب المعادلات السابقة ومقارنتها مع معادلة ستيرلنج. ويتضح من

الحسابات أن تقريب ستيرلنج يتفق جيداً مع المعادلتين A4 و A5 عند قيم N الكبيرة

والتي يصعب معها استخدام الآلة الحاسبة المعتادة لحساب المضروب، ولذلك يستخدم هذا التقريب في مجال الفيزياء الاحصائية شكل شائع دون خطأ كبير.

الجدول A7

N	$N!$	A1 $\ln N!$	A5 $(N + 1/2) \ln N - N + 1/2 \ln 2\pi$	A6 $N \ln N - N$	A5/A6
5	1.2E+02	4.8	4.8	3.0	1.565572
10	3.6E+06	15.1	15.1	13.0	1.158913
25	1.6E+25	58.0	58.0	55.5	1.045575
50	3.0E+64	148.5	148.5	145.6	1.019744
100	9.3E+157	363.7	363.7	360.5	1.008935
150	5.7E+262	605.0	605.0	601.6	1.005692
170	7.3E+306	706.6	706.6	703.1	1.004959
171	#	#	711.7	708.2	1.004927
200	#	#	863.2	859.7	1.004150
500	#	#	2611.3	2607.3	1.001544
10^3	#	#	5912.1	5907.8	1.000740
10^5	#	#	1051299.2	1051292.5	1.000006
10^8	#	#	1742068084.5	1742068074.4	1.000000

يصعب حساب مضروب N بواسطة الآلة الحاسبة العادية.