جامعة ذي قار
كلية الهندسة
قسم الهندسة الميكانيكية

المحاضرة الاولى : البنية البلورية

الأهداف

بعد دراسة هذه الوحدة يصبح المتدرب قادراً على:

- الإلمام بأساسيات الذرة.
- فهم الروابط بين الذرات وعلاقتها بالتوزيع الإلكتروني للذرة.
- التمييز بين المواد الهندسية ومعرفة خصائصها.
- معرفة معنى الخلايا الوحدية وفهم خصائصها.
- إدراك أهمية المستويات والمتجهات البلورية والتعامل معها.

الوقت المتوقع للتدريب

7 ساعات

المتطلبات السابقة

مبادئ الكيمياء والفيزياء والرياضيات (المساحات والحجوم ونظرية فيثاغورس)

مقدمة

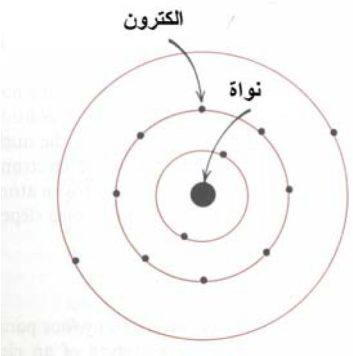
الذرة هي أصغر وحدة في المادة . في المواد الصلبة تترابط الذرات ببعضها تربطاً وثيقاً ويعتمد نوع هذا الترابط وقوته، وبالتالي خواص المادة، على خصائص ذرة العنصر أو ذرات العناصر المكونة للمادة. في كثير من الأحيان ، خصوصاً في المعادن ، يكون الترابط وبالتالي و ضع الذرات مرتباً في منظومة ثلاثية الأبعاد. يمكن دراسة هذه المنظومة ومعرفة الكثير عنها ، وبالتالي الكثير عن خواص المادة، عن طريق وحدة صغيرة منها تحتوى على عدد محدود من الذرات و تسمى الخلية الوحدية. في هذه الوحدة سوف ندرس خصائص الذرة وأنواع الترابط بين الذرات و كذلك الخلية الوحدية و خصائصها.
في هذه الحقيبة سوف تتناوب كثيراً كلمتا معدن و فلز وهما يعنيان نفس الشيء.

1-1 الذرة

تتكون الذرة من نواة صغيرة جداً يدور حولها جسيمات سالبة الشحنة تسمى إلكترونات في مدارات ، كما هو موضح بشكل (1-1) . تتكون النواة من جسيمات موجبة الشحنة تسمى بروتونات وجسيمات متعادلة (أي ليس عليها أي شحنة) تسمى نيوترونات. الذرة متعادلة كهربياً أي أن عدد الشحنات الموجبة (البروتونات) يساوى عدد الشحنات السالبة (الإلكترونات). كتلة البروتون تساوى تقريباً كتلة النيوترون وهي حوالي 1.67×10^{-27} كجم أما كتلة الإلكترون فهي أقل بكثير من ذلك وهي حوالي $9.11X10^{-31}$ كجم و بالتالي فإن معظم كتلة الذرة مركزة في النواة. تترابط أجزاء النواة لوجود قوى خاصة تسمى القوة النووية. فعندما تتقارب الجسيمات لدرجة كبيرة تصبح قوى الجذب كبيرة جداً و أكبر بكثير من قوى التنافر بين البروتونات.

1-1-1العدد الذري

يعرف العدد الذري للذرة بأنه عدد البروتونات أو عدد الإلكترونات.



شكل (1-1) الذرة

2-1-1 الوزن الذري

يعرف الوزن الذري للذرة بأنه عدد البروتونات + عدد النيوترونات و يستخدم في قياسه ما يسمى بوحدة الكتلة الذرية (**amu**).

3-1-1 النظائر

هي الذرات التي لها نفس العدد الذري (عدد البروتونات) ولكنها تختلف في وزنها الذري (أي تختلف في عدد النيوترونات). مثال لذلك الكربون فهناك كربون به **6** بروتونات و **6** نيوترونات أي أن وزنه الذري **12** وهناك كربون نظير به **6** بروتونات و **8** نيوترونات أي أنه وزنه الذري **14**. عموماً فإن الوزن الذري لعنصر ما يكون متوسط الأوزان الذرية لنظائره وبالتالي فهو عادة لا يكون عدداً صحيحاً، أما العدد الذري فيكون عدداً صحيحاً دائماً. عادة ما تعرف وحدة الكتل الذرية بأنها **1/12** لنظير الكربون الذي وزنه الذري .**12**

4-1-1 المدارات

كما أشرنا من قبل فإن الإلكترونات تدور حول الذرة في مدارات و تتوزع الإلكترونات في هذه المدارات طبقاً لقواعد معينة يمكن تلخيصها و تبسيطها فيما يلي:

أ) يرمز للمدارات بحروف **k,l,m,n...** أو بأرقام **n =1,2,3,4...** . بحيث يكون أقرب مدار للنواة هو 1 (أو **k**) والذي يليه هو**2** (أو n) ... و هكذا.

ب) سعة المدار (أو أكبر عدد إلكترونات يمكن استيعابها في المدار) يمكن حسابه من العلاقه $2n^2$

أي أن سعة المدار 1 (أو **k**) هي **2** وسعة المدار **2** (أو **l**) هي **8** وسعة المدار **3** (أو **m**)هي **18** ....الخ.

ج) تنقسم هذه المدارات إلى مدارات داخلية تسمى **f,d,p,s**. سعة المدار **s** هي **2** إلكترون، سعة المدار**p** هي**6** إلكترونات، سعة المدار **d** هي **10** إلكترونات و سعة المدار **f** هي **14** إلكتروناً.

د) المدار **n=1** لا يوجد به غير **s** والمدار n=2 يوجد به **p,s** والمدار n=3 يوجد به **d,p,s ...** و هكذا.

هـ) تتوزع الإلكترونات بين المدارات المختلفة حسب قواعد خاصة بطاقة الإلكترونات.

مثال: باستخدام جدول (**1-1**) وضح التوزيع الإلكتروني لعنصر الماغنسيوم (**Mg**)

الحل: من الجدول فإن العدد الذري (عدد الإلكترونات) في الماغنسيوم هو **12** وهي موزعة كالآتي $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2$ و معنى ذلك أن المدار الأول به **2** إلكترون في **s** ($1s^2$) والمدار الثاني به **2** إلكترون في **s** و **6** إلكترونات في **p** ($2s^2\ 2p^6$) و المدار الثالث به **2** إلكترون في **s** ($3s^2$).

5-1-1 إلكترونات التكافؤ

تعرف إلكترونات التكافؤ بأنها عدد الإلكترونات في المدار الأخير.

مثال: من جدول (**1-1**) أوجد إلكترونات التكافؤ لكل من الخارصين (**Zn**) والجرمانيوم (**Ge**).

جدول (1-1)
التوزيع الالكترونى لبعض العناصر الهامة

العنصر	الرمز	العدد الذرى	التوزيع الالكترونى
Hydrogen	H	1	$1s^1$
Helium	He	2	$1s^2$
Lithium	Li	3	$1s^2\,2s^1$
Beryllium	Be	4	$1s^2\,2s^2$
Boron	B	5	$1s^2\,2s^2 2p^1$
Carbon	C	6	$1s^2\,2s^2 2p^2$
Nitrogen	N	7	$1s^2\,2s^2 2p^3$
Oxygen	O	8	$1s^2\,2s^2 2p^4$
Fluorine	F	9	$1s^2\,2s^2 2p^5$
Neon	Ne	10	$1s^2\,2s^2 2p^6$
Sodium	Na	11	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^1$
Magnesium	Mg	12	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^2$
Aluminum	Al	13	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^2 3p^1$
Silicon	Si	14	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^2 3p^2$
Phosphorus	P	15	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^2 3p^3$
Sulfur	S	16	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^2 3p^4$
Chlorine	Cl	17	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^2 3p^5$
Argon	Ar	18	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^2 3p^6$
Potassium	K	19	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^2 3p^6\,4s^1$
Calcium	Ca	20	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^2 3p^6\,4s^2$
Scandium	Sc	21	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^2 3p^6 3d^1\,4s^2$
Titanium	Ti	22	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^2 3p^6 3d^2\,4s^2$
Vanadium	V	23	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^2 3p^6 3d^3\,4s^2$
Chromium	Cr	24	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^2 3p^6 3d^5\,4s^1$
Manganese	Mn	25	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^2 3p^6 3d^5\,4s^2$
Iron	Fe	26	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^2 3p^6 3d^6\,4s^2$
Cobalt	Co	27	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^2 3p^6 3d^7\,4s^2$
Nickel	Ni	28	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^2 3p^6 3d^8\,4s^2$
Copper	Cu	29	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^2 3p^6 3d^{10}\,4s^1$
Zinc	Zn	30	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^2 3p^6 3d^{10}\,4s^2$
Gallium	Ga	31	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^2 3p^6 3d^{10}\,4s^2 4p^1$
Germanium	Ge	32	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^2 3p^6 3d^{10}\,4s^2 4p^2$
Arsenic	As	33	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^2 3p^6 3d^{10}\,4s^2 4p^3$
Selenium	Se	34	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^2 3p^6 3d^{10}\,4s^2 4p^4$
Bromine	Br	35	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^2 3p^6 3d^{10}\,4s^2 4p^5$
Krypton	Kr	36	$1s^2\,2s^2 2p^6\,3s^2 3p^6 3d^{10}\,4s^2 4p^6$

الحل: من جدول (**1-1**) نجد أن توزيع الإلكترونات في الخارصين هو $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^{10}\ 4s^2$ أي أن عدد الالكترونات في المدار الأخير (إلكترونات التكافؤ) هو **2**.

توزيع الإلكترونات في الجرمانيوم $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^6\ 3d^{10}\ 4s^2\ 4p^2$ أي أنه عدد إلكترونات التكافؤ هو **4**.

تعتبر إلكترونات التكافؤ هامة جداً لسببين:

أ) تعتمد كثير من الخواص الكيميائية والفيزيائية على إلكترونات التكافؤ.

ب) مسؤوليتها المباشرة عن طرق الترابط بين الذرات كما سوف نرى.

6-1-1 قاعدة الثمانية

إذا أمعنا النظر في جدول (1-1) نجد أنه لا يوجد في المدار الأخير سوى **s** أو **s** و**p** . هناك قاعدة هامة وهي باستثناء الهيدروجين والهيليوم، فإن وجود ثمانية إلكترونات في المدار الخارجي (أي امتلاء **p** ,**s**) يعطي الذرة مقداراً كبيراً من الثبات والاستقرار كما أن اتجاه الذرات للوصول إلى هذا التركيب يمثل القوة الدافعة للروابط بين الذرات. الغازات الخاملة مثل الأرجون والنيون (**Ne, Ar**) لا تتفاعل لأن لها ثمانية إلكترونات في المدار الأخير. أما بالنسبة للهيليوم فهي الحالة الوحيدة التي تكتفي بإلكترونين وذلك لوجود مدار واحد فقط. العناصر الأخرى التي ليس لها هذا العدد منه إلكترونات التكافؤ تسعى لتحقيقه بإحدى السبل الآتية:

أ) فقد الإلكترونات.

ب) اكتساب الإلكترونات.

ج) المشاركة مع ذرات أخرى في المدارات الأخيرة.

7-1-1 الأيون

عندما تفقد الذرة إلكتروناً أو أكثر فإنها تصبح موجبة الشحنة وفى هذه الحالة تسمى أيوناً موجباً أوكاتيوناً، أما إذا اكتسبت الذرة إلكتروناً أو أكثر فإنها تصبح سالبة الشحنة وتسمى أيوناً سالباً أو أنيوناً.

2-1 الروابط الذرية في المواد الصلبة

هناك نوعان من الروابط تربط بين الذرات في المواد الصلبة. روابط أساسية و هي تعتمد على إلكترونات التكافؤ في الذرات و تنقسم هذه إلى:

أ) الرابطة الأيونية.

ب) الرابطة التساهمية.

ج) الرابطة المعدنية.

هناك روابط ثانوية وهي لا تعتمد على إلكترونات التكافؤ وهي عادة أقل قوة بكثير من الروابط الأساسية.

1-2-1 الرابطة الأيونية

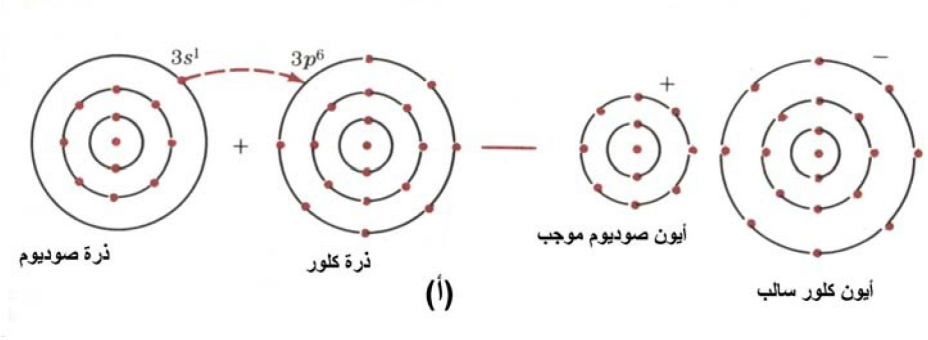
تتم عادة بين الفلزات (المعادن) واللافلزات (اللا معادن). تتميز الفلزات بأن عدد إلكترونات التكافؤ لا يتعدى ثلاثة وبالتالي فإنه من الأسهل لها فقد إلكترونات التكافؤ للوصول لحالة استقرار عن اكتساب عدد كبير من الإلكترونات. بالنسبة سلافلذات فإن عدد إلكترونات التكافؤ كبير و بالتالي يسهل اكتساب إلكترونات للوصول للعدد ثمانية (أو هو عدد الاستقرار). مثال لهذه الرابطة كلوريد الصوديوم. الصوديوم (**Na**) فلز به إلكترون واحد في المدار الأخير و الكلور (**Cl**) لا فلز به سبعة إلكترونات في المدار الأخير.

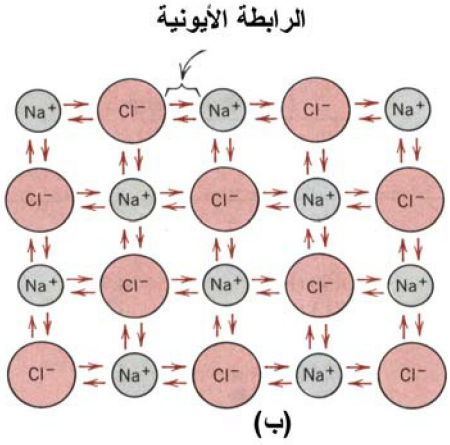
يفقد الصوديوم الإلكترون ليتحول إلى أيون موجب و يكتسب الكلور هذا الإلكترون ليتحول إلى أيون سالب. تتجاذب هذه الأيونات وتحدث الرابطة الأيونية.

شكل (**1-2** أ) وشكل(**1-2 ب**) يوضحان الرابطة الأيونية.

2-2-1 الرابطة التساهمية

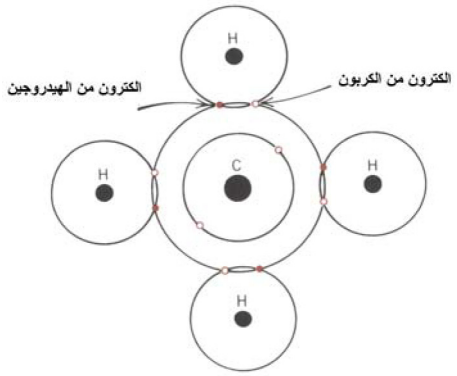
في هذه الرابطة تصل حالة الاستقرار عندما تتشارك الذرات في الالكترونات. عندما تترابط ذرتان رابطة تساهمية فإن كل ذرة تشارك بإلكترون واحد على الأقل في هذه الرابطة و يمكن إعتبار هذه الإلكترونات تخص كلاً من الذرتين. شكل (**1-3**) يوضح الرابطة التساهمية للميثان (CH_4). من الشكل يتضح أن الذرات تتقارب إلى حد كبير و يؤدى ذلك إلى تجاذب قوى شديد بين الذرات الأمر الذي يحتاج إلى طاقة كبيرة لفصل الرابطة. مثال لهذه الرابطة مادة الماس التي ترتبط جميع ذرات الكربون





شكل(1-2) الرابطة الأيونية

المكونة لها بروابط تساهمية وبالتالي نجد أنه الألماس أكثر المواد صلادة ولا ينصهر إلا عند درجة حرارة تقارب **3000** درجة مئوية.



شكل (1-3) الرابطة التساهمية

1-2-2-1الجزيء

هو عبارة عن مجموعة ذرات مترابطة مع بعضها برابطة تساهمية و يمكن تعريف الوزن الجزيء بأنه مجموع الأوزان الذرية للذرات المكونة له.

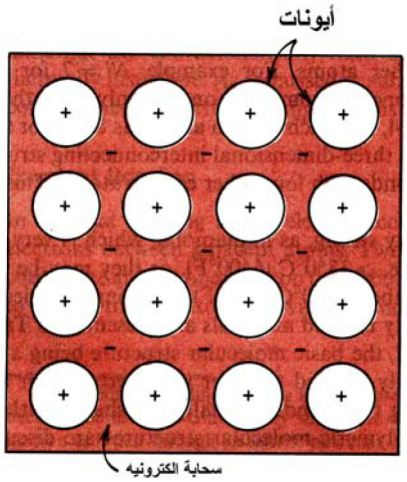
مثال: إذا كان الوزن الذري لذرة الهيدروجين هو **1.008 amu** والوزن الذري لذرة الكربون هو **12.011 amu** أوجد الوزن الذري لجزيء الميثان.

الحل: من شكل (**1-3**) نجد أنه جزيء الميثان يحتوى على أربع ذرات من الهيدروجين وذرة كربون وبالتالي فالوزن الجزيء للميثان هو **4xH + C**

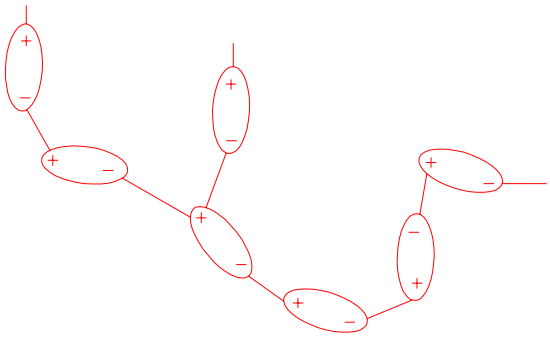
$$4x1.008 + 12.011 =$$
$$16.043 \text{ amu} =$$

1-2-3 الرابطة الفلزية (المعدنية)

هي خاصة بالفلزات (المعادن). تتميز الفلزات بأن عدد إلكترونات التكافؤ بذراتها لا تزيد عن ثلاثة. تعتمد هذه الرابطة على إطلاق ذرات الفلزات لإلكترونات التكافؤ لتصبح حرة الحركة بين الذرات وتصبح بقية الذرات أيونات موجبة. تكون هذه الإلكترونات ما يسمى بالسحابة الالكترونية التي تعمل على ربط الأيونات الموجبة ببعضها . شكل (1-4) يمثل الرابطة المعدنية. هذه الرابطة قد تكون ضعيفة كما في حالة الزئبق حيث تبلغ درجة حرارة انصهاره **$39^{O}C$-** أو قد تكون قوية جداً كما في حالة التنجستن حيث تبلغ درجة انصهاره **$3410^{O}C$.**



شكل (1-4) الرابطة المعدنية



شكل (1-5) ترابط الجزيئات ثنائية القطبية.

1-2-4 الروابط الثانوية

من المعروف أن الذرات والجزيئات متعادلة كهربياً ولكن التوزيع المتجانس للإلكترونات في الذرة أوالجزيء قد يختل بمعنى أن جزءاً من الذرة أو الجزيء يصبح سالباً والجزء الآخر موجباً و تترابط الذرات أو الجزيئات بحيث إن الجزء السالب في ذرة أو جزيء يتجاذب مع الجزء الموجب من ذرة أو جزيء آخر وتسمى هذه الذرات أو الجزيئات ثنائية القطبية. شكل (**1- 5**) يوضح ترابط جزيئات ثنائية القطبية.

وتكون ثنائية القطبية هذه إما:

أ) مؤقتة أي لحظية الوجود ولا يتعدى عمرها بضع ثوان و لكنها متجددة بمعنى أنه كلما تلاشى جزيء ثنائي القطبية ظهر جزئ غيره فتبقى الجزيئات مرتبطة ببعضها.

ب) دائمة أي لا تتغير مع الوقت وهي أكثر استقراراً وبالتالي فإن ثنائية القطبية الدائمة أقوى بكثير من ثنائية القطبية المؤقتة . في العموم فإن الروابط الثانوية أقل قوة من الروابط الأساسية.

1-3 المواد الهندسية

يمكن تعريف المواد الهندسية بأنها المواد ذات الأهمية الهندسية و يمكن تقسيمها لثلاثة أنواع وهي الفلزات و البوليمرات و الخزفيات و معظم الاختلافات الأساسية في الخواص بينها سببها التركيب الإلكتروني لذراتها وبالتالي أنواع الروابط.

1-3-1 الفلزات

تتميز الفلزات عموماً بأن عدد إلكترونات التكافؤ لا يزيد عن ثلاثة مما يؤدي إلى حرية حركة الإلكترونات كما ذكرنا من قبل. للفلزات خواص مميزة نذكر منها ما يلي:

أ) التوصيل الجيد للكهرباء والحرارة.

ب) لها بريق و لمعان عندما تصقل.

ج) غير منفذة للضوء.

د) لها قابلية كبيرة للتشكيل.

هـ) لها كثافة عالية (أكثر من الماء).

2-3-1 البوليمرات

هي عبارة عن سلاسل طويلة (جزيئات عملاقة) من ذرات الكربون المرتبطة بالهيدروجين و قد تشمل بعض العناصر الأخرى و لكن الأساس هو الكربون والهيدروجين و أغلبها له الخواص التالية:

أ) سيئة التوصيل للكهرباء والحرارة.

ب) عاكسة سيئة للضوء وبالتالي فإنها تكون شفافة أو شبه شفافة عندما تكون على شكل شرائح رقيقة.

ج) بعضها يمكن تشكيلة بسهولة ولذلك فإنه في كثير من الأحيان يطلق الناس أسم اللدائن عند الإشارة إلى البوليمرات و لكنة في الواقع فأن اللدائن جزء من البوليمرات.

3-3-1 الخزفيات

و هي عادة ما تتكون من فلزات ولا فلزات و تكون الرابطة الذرية إما أيونية بالكامل أو الجزء الأغلب فيها أيونى. من أهم خصائص الخزفيات أنها:

أ) شديدة الصلادة (صعبة التشكيل) .

ب) قصفة (سهلة الكسر) .

ج) عازلة للكهرباء والحرارة.

كل المعادن و كثير من الخزفيات تسمى مواد بلورية أو بمعنى آخر ذو بنية بلورية. في هذه المواد ، ترتب الذرات في أشكال هندسية ثلاثية الأبعاد بطريقة منتظمة و متكررة ولمسافات ذرية كبيرة ، كما تترابط الذرة في هذا النظام مع أقرب جيرانها من الذرات. يمكن تمثيل الذرات هنا على أنها كرات

مصمتة و تتلامس كل ذرة مع أقرب جيرانها من الذرات. في بعض الأحيان تمثل فقط مواقع الذرات بنقاط عند مركز الكرات في منظومة ثلاثية الأبعاد و تسمى هذه المنظومة بالبنية التشابكية.

4-1 الخلية الوحدية

في المواد المتبلورة يمكن تمثيل البنية البلورية عن طريق مجموعة صغيرة من الذرات تتكرر في الأبعاد الثلاثة. تسمى مجموعة الذرات المتكررة هذه الخلية الوحدية و يمكن تشبيه هذه العملية بالجدار المبنى من الطوب. فالجدار يشبه البنية البلورية ككل والطوبة، و هي الوحدة المتكررة، تشبه الخلية الوحدية. تعتبر دراسة الخلية الوحدية مفيدة جداً لسببين:

أ) احتوائها على عدد صغير من الذرات و بالتالي يسهل دراستها .

ب) يمكن استخلاص معلومات هامة عن البنية البلورية ككل للمادة من دراسة الخلايا الوحدية .

هناك أنواع كثيرة من الخلايا الوحدية ولكن أهمها بالنسبة للمعادن النظام المكعبى والنظام السداسي للخلايا. معظم المعادن (أكثر من **90%**) تحتوي على إحد هذين النظامين.

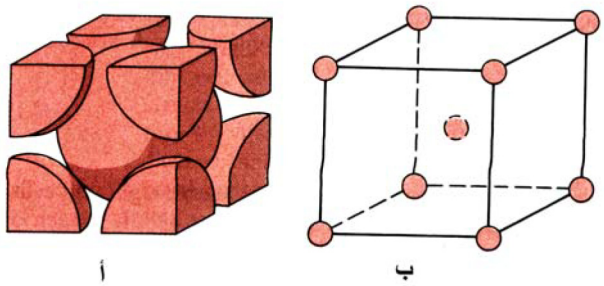
النظام المكعبي في المعادن يحتوي عادة على إحدى هذين الخليتين:

أ) النظام المكعبي مركزي الجسم (**BCC**) .

ب) النظام المكعبي مركزي الوجه (**FCC**) .

أما النظام السداسي فهو عبارة عن منشور سداسي محكم التعبئة ويسمى النظام السداسي المزدحم (**HCP**).

1-4-1 النظام المكعبي مركزي الجسم (BCC)



شكل (1-6) أ - الشكل الحقيقي لتوزيع الذرات بنظرية الكرات المصمتة في ال BCC.
ب - الشكل المبسط لتوزيع الذرات في ال BCC.

الرمز **BCC** لهذا النظام يأتي من الإنجليزية (**Body Centered Cubic**). شكل هذه الخلية عبارة عن مكعب به ذرة في مركزه وذرة في كل ركن من أركانه. يوضح شكل (**1-6أ**) الشكل الحقيقي لتوزيع الذرات بنظرية الكرة المصمتة كما يوضح الشكل (**1-6**ب) الشكل المبسط لتوزيع الذرات في ال **BCC**.

هناك عدة معادن لها هذا النوع من الخلايا الوحدية مثل الحديد والكروم والبوتاسيوم والصوديوم والتنجستن. هناك أربع معلومات هامة يمكن استخلاصها من الخلية وهى:

أ) العدد التنسيقي.

ب) العدد الفعلي للذرات في الخلية.

ج) العلاقة بين أبعاد الخلية و نصف قطر الذرة.

د) نسبة الازدحام الذرية.

1-1-4-1 العدد التنسيقي

يعرف العدد التنسيقي بأنه أقرب ذرات للذرة. و بنموذج الكرة المصمتة فإنه عدد الذرات التي تلامس الذرة. في الواقع فإن جميع الذرات في النظام البلوري متماثلة بمعنى أنه إذا أوجدنا العدد التنسيقي لذرة فإن جميع الذرات يكون لها نفس العدد التنسيقي.

من شكل (**1-6أ**) نجد أن ثمانية الذرات في الأركان تلمس الذرة التي في المركز وعلى هذا الأساس فإن العدد التنسيقي هنا هو ثمانية.

2-1-4-1 العدد الفعلي للذرات في الخلية

العدد الفعلي للذرات في الخلية هو عدد الذرات داخل الخلية. من شكل (**1-6أ**) نجد أن ذرة المركز بكاملها داخل الخلية، وذرات الأركان نصيب كل خلية منها **1/8**.

العدد الفعلي للذرات في ال **BCC** = **1+8x1/8**

2 =

3-1-4-1 العلاقة بين أبعاد الخلية و نصف قطر الذرة

يقصد هنا بأبعاد الخلية طول ضلع المكعب و تسمى في بعض الأحيان بثابت الشبكية (**Lattice Constant**) شكل (**1-7**) يوضح هذه العلاقة. إذا فرضنا أن طول ضلع المكعب (a) و نصف قطر الذرة **r**:

$$\sqrt{3}\, a = 4\, R$$

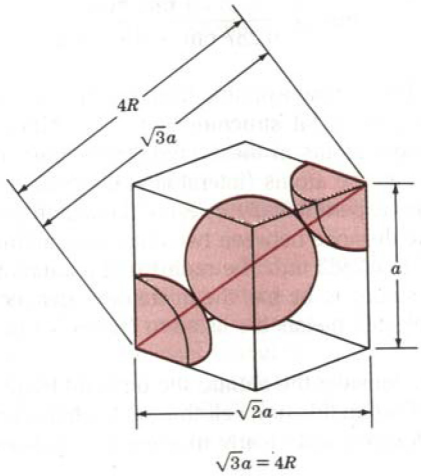
$$a = 4/\sqrt{3}R$$

مثال: إذا كان نصف قطر ذرة الحديد **0.124** نانو متر (**nm**) أوجد ثابت شبكية ذرة الحديد.

الحل: $a = 4/\sqrt{3} \times 0.124 = 0.2864$ nm

4-1-4-1 معامل الازدحام الذري (APF)

هو نسبة الحجم من الخلية الذي تحتله الذرات و يعرف باللغة الإنجليزية **Atomic Packing Factor** واختصارها (**APF**).



شكل (1-7) العلاقة بين أبعاد الخلية ونصف قطر الذرة في ال BCC

نسبة الازدحام الذري = العدد الفعلي للذرات بالخلية **X** حجم الذرة

حجم الخلية

مثال : احسب معامل الازدحام الذري في ال **BCC**

الحل:

$$APF = 2 \times 4/3\ \pi R^3$$

$$(4/\sqrt{R})^3$$

حيث أن حجم الذرة $= 4/3\ \pi R^3$

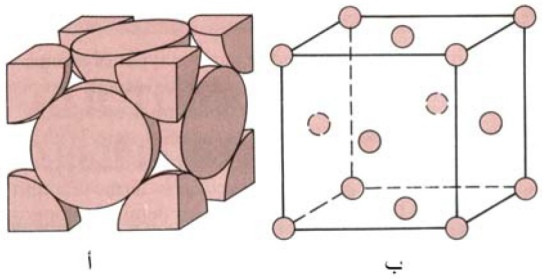
حجم الخلية $= (4/\sqrt{3}\ R)^3$

$APF = 0.68$

2-4-1 النظام ا لمكعبي مركزي الوجه FCC

الرمز **FCC** لهذا النظام يأتي من الإنجليزية (**Face Centered Cubic**) شكل هذه الخلية عبارة عن مكعب به ذرة في مركز كل وجه من أوجه وذرة في كل ركن من أركانه. يوضح شكل (**1-8 أ**)

الشكل الحقيقي لتوزيع الذرات بنظرية الكرة المصمتة كما يوضح شكل (**1-8** ب) الشكل المبسط لتوزيع الذرات في ال **FCC**.



شكل (1-8) أ - الشكل الحقيقي لتوزيع الذرات بنظرية الكرات المصمتة في ال FCC.
ب - الشكل المبسط لتوزيع الذرات في ال FCC.

هناك عدة معادن لها هذا النوع من الخلايا الوحدية مثل الألمنيوم والنحاس والرصاص والذهب والفضة والبلاتين. إذا فحصنا الشكل (**1-8**ا) من الوجه الأمامي فإن الذرة في مركز هذا الوجه تتلامس مع:

أ) أربع ذرات في الأركان الأمامية.

ب) أربع ذرات في مراكز الأوجه الخلفية في نفس الخلية.

ج) أربع ذرات في مراكز الأوجه الأمامية أي في الخلية التي أمامها.

بالتالي فإن العدد التنسيقي هو اثنا عشر . من شكل (**1-8** أ) نجد أن ذرات الأركان نصيب كل خلية منها **1/8** وذرات مراكز الأوجه نصيب كل خلية منها **1/2**.

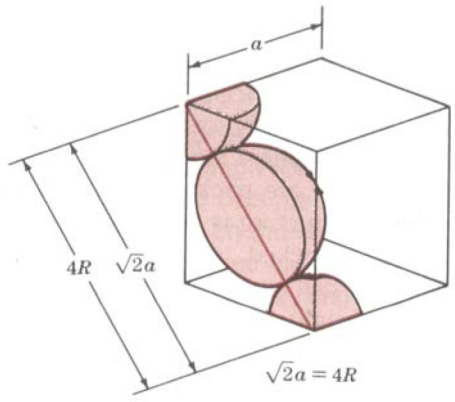
العدد الفعلي للذرات = **8 x 8 + 6 x 1/2**

4 =

من شكل (**1-9**) نجد أن العلاقة بين نصف قطر الذرة و ثابت الشبكية (أبعاد الخلية):

$$\sqrt{2}\, a = 4\, R$$

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



شكل (1-9) العلاقة بين أبعاد الخلية ونصف قطر الذرة في ال FCC

مثال: أوجد معامل الازدحام للخلية الوحدية **FCC**.

الحل: العدد الفعلي للذرات = **4**

حجم الخلية = $(4/\sqrt{2}\ R)^3$

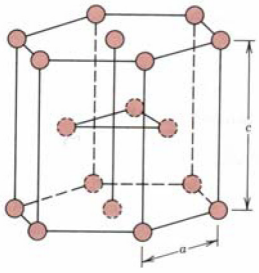
حجم الذرة = $4/3\ \pi\ R^3$

$$APF = \frac{4/3\ \pi\ R^3}{(4/\sqrt{2}\ R)^3} = 0.74$$

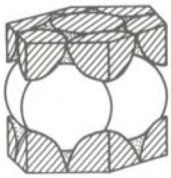
3-4-1 النظام السداسي المزدحم (HCP)

الرمز (**HCP**) لهذا النظام يأتي من الإنجليزية (**Hexagonal Close-Packed**) شكل هذه الخلية عبارة عن منشور سداسي توجد ذرة في كل ركن من أركانه، و ثلاث ذرات في داخله، وذرة في مركز كل من قاعدتيه.

شكل (**1-10 أ**) يوضح الشكل المبسط لتوزيع الذرات . شكل (**1-10ب**) يوضح شكل الكرات المصمتة لتوزيع الذرات.



أ



ب

شكل (1-10) أ- الشكل المبسط لتوزيع الذرات في ال HCP.

ب- الشكل الحقيقي لتوزيع الذرات بنظرية الكرات المصمتة في الHCP

هناك عدة معادن تتبع هذا النوع من الخلايا الو حديه أو قريبة منه مثل الزنك (الخارصين) والماغنسيوم والكوبالت و الزيركونيوم و التيتانيوم و البريليوم.

مثال: احسب حجم المنشور المزدحم في الحالة المثالية.

الحل : كما في شكل (**1-10أ**) هناك بعدان للخلية وهما طول ضلع القاعدة (**a**) و الارتفاع (C). في الحالة المثالية، تكون الذرة في مركز القاعدة مع ثلاث الذرات في الوسط هرماً ثلاثياً منتظماً طول ضلعه (**a**). يكون ارتفاع هذا الهرم نصف ارتفاع المنشور (**C/2**). من المعروف رياضياً أن ارتفاع الهرم الثلاثي المنتظم الذي طول ضلعه **a** هو **0.8165a**. و منه :

$$C/2 = 0.8165a$$
$$C = 1.633a$$

من المعروف رياضياً أيضاً أن مساحة الشكل السداسي المنتظم الذي طول ضلعه **a** هي تقريباً $2.6\ a^2$ ومنه نستطيع أن نحسب حجم المنشور.

حجم المنشور = مساحة القاعدة x الارتفاع

$$= 2.6a^2 \times 1.633a$$

$$= 4.24\ a^3$$

إذا فحصنا شكل (**1-10ب**) فإن أقرب الذرات للذرة التي في مركز القاعدة العلوية للمنشور هي كالتالي:

أ) ثلاث الذرات في منتصف المنشور.

ب) ست الذرات المحيطة بها بنفس القاعدة.

ج) ثلاث الذرات في وسط المنشور المجاور لهذا المنشور من أعلى و بالتالي فإن العدد التنسيقي هو إثناعشر.

فيها ستة منشورات وبالتالي فإن نصيب المنشور منها **1/6** والذرات في مراكز القاعدتين يشارك في نفس الشكل (**1-10ب**) نجد أن الثلاث ذرات في الوسط يقعن داخل المنشور وذرات الأركان يشارك في كل منهما منشورين و بالتالي فنصيب المنشور منها **1/2** و بالتالي فإن:

العدد الفعلي للذرات $= 3 + 12 \times 1/6 + 2 \times 1/2$

$$= 6$$

من الشكل (**1-10ب**) نستطيع أن نستنتج بسهولة أن :

$$a = 2R$$

مثال: احسب معامل الازدحام الذري لـ **HCP** في الحالة المثالية.

الحل : حجم الخلية في الحالة المثالية $= 4.24a^3$

العدد الفعلي للذرات في الخلية $= 6$

$$APF = \frac{6 \times 4/3\ \pi R^3}{4.24 \times (2R)^3}$$

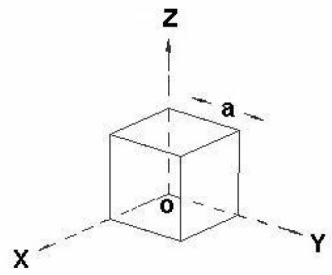
$$= 0.74$$

5-1 المستويات والمتجهات البلورية

تعتمد في كثير من الأحيان خواص المواد البلورية على الكثافة الذرية سواءاً الخطية (لوحدة الأطوال) أو المستوية (لوحدة المساحات). بناءاً على ذلك فإنه عند التعامل مع هذه المواد فإنه من المفيد تحديد متجهات و مستويات بلورية معينة. أكثر الطرق فاعلية و سهوله لدراسة المستويات والمتجهات البلورية يكون من خلال الخلية الوحدية و سوف نوضح ذلك من خلال دراسة المتجهات والمستويات البلورية في النظام المكعبي.

1-5-1المتجهات البلورية في النظام المكعبي

يمثل المتجه في النظام المكعبي بثلاثة أرقام صحيحة بين قوسين مربعين و يعبر عن الأرقام السالبة الصحيحة بخط في أعلى الرقم مثال لذلك المتجه **[121]** والمتجه **[O1$\bar{1}$]**. في المتجه الأخير $\bar{1}$ معناه **1** – . لقراءة أو رسم المتجه لابد من تعين نقطة أصل ورسم ثلاثة محاور منها في اتجاه **Z,Y,X** كما هو موضح بشكل **(1-11)**. تكون دائماً الاتجاهات الموجبة للمحاور كما هو موضح بالشكل أما نقطة الأصل فتكون اختيارية من بين ثمانية الأركان في للمكعب.



شكل (1-11) نقطة الأصل والمحاور في النظام المكعبي

1-1-5-1 قراءة المتجهات من خلية

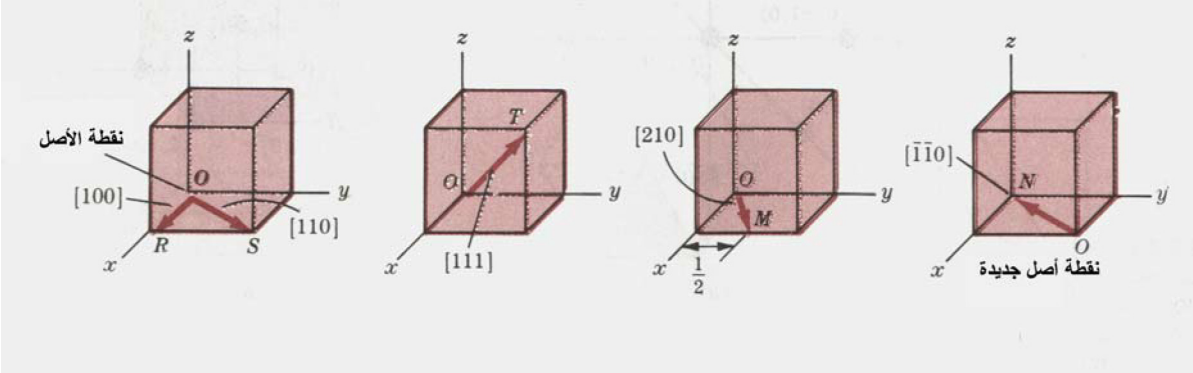
نتبع الخطوات التالية لقراءة متجه من خلية:

أ) يتم اختيار نقطة الأصل من أركان المكعب بحيث يمر بها المتجه مع الاحتفاظ باتجاهات المحاور كما في شكل **(1-11)**.

ب) نوجد إسقاط المتجه على ثلاثة المحاور بدلالة طول ضلع الخلية **(a)**.

ج) تضرب هذه الأرقام (ثلاثة الإسقاطات) أو تقسم بعامل مشترك لاختزالها لأصغر ثلاثة أرقام صحيحة.

د) توضع هذه الأرقام الصحيحة بين أقواس مربعة **[UVW]** حيث **U** هو العدد الصحيح للإسقاط على **محورV,X** هو العدد الصحيح للإسقاط على محور**W,Y** هو العدد الصحيح للإسقاط على محور**Z** يوضح شكل **(1-12)** بعض الأمثلة.



شكل (1-12) أمثلة للمتجهات

2-1-5-1 رسم متجه

عادة ما نتبع الخطوات التالية في رسم المتجه:

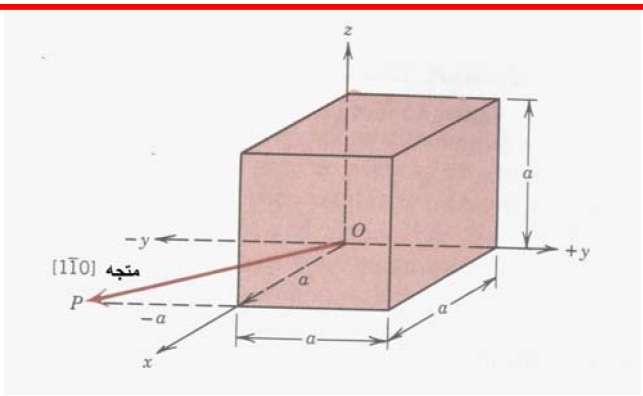
أ) نرسم الخلية و نقطة الأصل والمحاور كما في شكل (**1-11**) مع الأخذ في الاعتبار أن الاتجاهات الموجبة للمحاور هي اتجاهات الأسهم مع تثبيت نقطة الأصل.

ب) إذا كان المتجه هو [**UVW**] ، نبدأ المسار من نقطة الأصل على محور**X** مسافة قدرها **U** من الوحدات (الوحدة هي **a**) في اتجاه محور **X** إذا كانت **U** موجبة و في عكس اتجاه محور **X** إذا كانت **U** سالبة. من النقطة الجديدة نبدأ التحرك مسافة **V** موازياً لمحور **Y** إذا كانت **V** موجبه وعكس اتجاه محور**Y** إذا كانت **V** سالبة. من آخر نقطة نبدأ التحرك موازياً لمحور **Z** مسافة **W** في اتجاه محور**Z** إذا كانت **W** موجبة وفي عكس اتجاه محور**Z** إذا كانت **W**سالبة.

ج) نصل نقطة الأصل بآخر نقطة و يكون ذلك هو المتجه [**UVW**] .

د) قد يكون هذا المتجه خارج الخلية أي في الخلية المجاورة وهو يعطي نفس المعنى لأن الخلايا هنا متماثلة.

هـ) مثال لذلك في شكل (**1-13**).



شكل (1-13) مثال لرسم متجه

1-5-2المستويات البلورية في النظام المكعبي

يمثل المستوى في النظام المكعبى بثلاثة أرقام صحيحة بين قوسين دائريين ويعبر عن الأرقام السالبة الصحيحة بخط أعلى الرقم مثال لذلك **(111)**، **(10$\bar{1}$)**. في المستويات، تسمى هذه الأعداد الصحيحة بإحداثيات ميلر. لقراءة أو رسم مستوى لا بد من تعيين نقطة أصل ورسم ثلاثة محاور في اتجاه **X,Y,Z** كما هو موضح بشكل **(1-11)** وتكون دائماً الاتجاهات الموجبة للمحاور كما هو موضح بنفس الشكل. أما نقطة الأصل فتكون اختيارية من بين ثمانية الأركان للمكعب.

1-2-5-1 قراءة المستويات من خلية

نتبع الخطوات التالية لقراءة مستوى من خلية:

أ) إذا كان المستوى يمر بنقطة الأصل نختار نقطة أصل أخرى مع الاحتفاظ باتجاه المحاور.

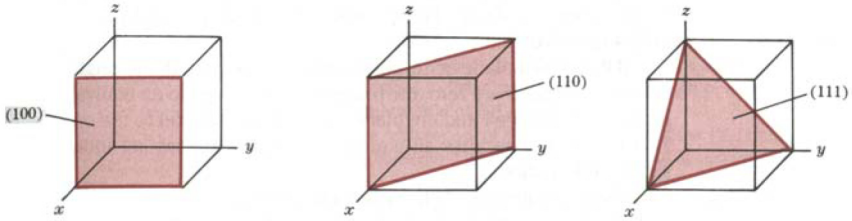
ب) نوجد نقط التقاطع مع المحاور مع الأخذ في الاعتبار:

- الاتجاهات السالبة والموجبة.
- التوازي بمعنى أنه إذا كان المحور موازياً للمستوى فإن نقطة التقاطع تكون في مالا نهاية.

ج) نوجد مقلوب نقاط التقاطع مع معرفة أن مقلوب مالا نهاية هو صفر.

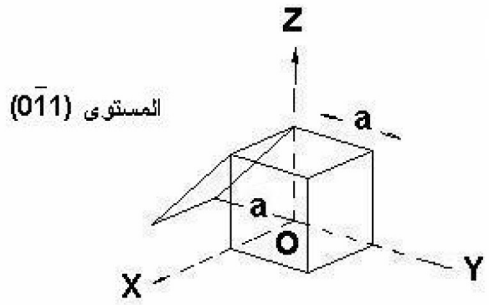
د) إذا كان ضرورياً نضرب الأرقام المقلوبة في عامل مشترك للحصول على أصغر أعداد صحيحة.

هـ) نضع الأعداد الصحيحة في قوسين دائريين **(hkl)** حيث **h** هو العدد المقابل لمحور **X** و**k** هو العدد المقابل لمحور **Y**، **l** هو العدد المقابل لمحور **Z**. أمثلة لذلك في شكل (1-14).



شكل (1-14) أمثلة للمستويات

1-5-2-2رسم مستوى



شكل (1-15) مثال لرسم مستوى

عادة ما نتبع الخطوات التالية في رسم المستوى :

أ) نرسم الخلية و نقطة الأصل والمحاور كما في شكل (**1-11**) مع الأخذ في الاعتبار أن الاتجاهات الموجبة للمحاور هي اتجاهات الأسهم مع تثبيت نقطة الأصل.

ب) إذا كان المستوى (**hkl**) نوجد مقلوب هذه الأرقام ثم نحدد نقاط على المحاور. نقطة على محور **X** تبعد عن نقطة الأصل بمقدار **1/h** من الوحدات (a) وتكون في اتجاه محور **X** إذا كانت القيمة موجبة و تكون عكس اتجاه محور **X** إذا كانت القيمة سالبة. بنفس الطريقة نحدد النقاط على محور **Y** والتي تبعد **1/k** من الوحدات (a) عن نقطة الأصل و على محور **Z** والتي تبعد **1/l** من الوحدات (a) عن نقطة الأصل. نصل ثلاث النقاط لنحصل على المستوى (**hkl**).

ج) إذا كان إحدى إحداثيات ميللر يساوي صفراً ، نحدد النقطتين الأخريين و نصل بينهما و نرسم منهما موازيات للمحور المقابل للصفر.

د) إذا كان هناك إحداثيتان يساوى كل منهما صفراً نحدد النقطة الباقية و نرسم منها خطان يوازيان المحاور المقابلة للأصفار. مثال لرسم مستوى في شكل (**1-15**).

6-1الكثافة الذرية للمتجهات و المستويات

1-6-1الكثافة الذرية للمتجهات

هي ببساطة عدد الذرات في وحدة الأطوال من المتجه و يمكن تعريفها كالآتي:

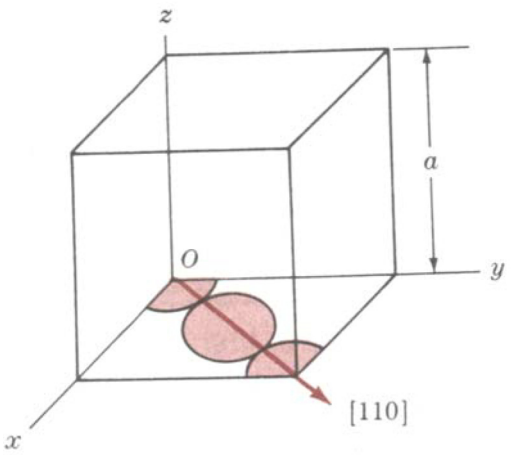
كثافة المتجه = عدد أقطار الذرات التي تتقاطع مع طول مختار من المتجه

الطول المختار للمتجه

مثال: احسب كثافة المتجه **[110]** للذهب إذا علمت أن ثابت الشبكية **(a) 0.408 nm**

(نانو متر= **nm**) هذا مع العلم بأن خلية الذهب من نوع **FCC**.

الحل : شكل (**1-16**) يوضح المتجه **[110]** في ال **FCC** .



شكل (1-16) المتجه [110] في ال FCC

الطول المختار للمتجه هو وتر الوجه = $\sqrt{2}\ a$

عدد أقطار الذرات التي تتقاطع مع هذا الطول = 1/2 + 1 + 1/2

= 2

كثافة المتجه= $2/\sqrt{2}a$

= 2 / NM 2 /√2 x 0.408 ذرة

= 2×10^6 / 2 /√2 x 0.408 مم/ ذرة

= 3.466×10^6 ذرة لكل مليمتر

1-6-2الكثافة الذرية للمستويات

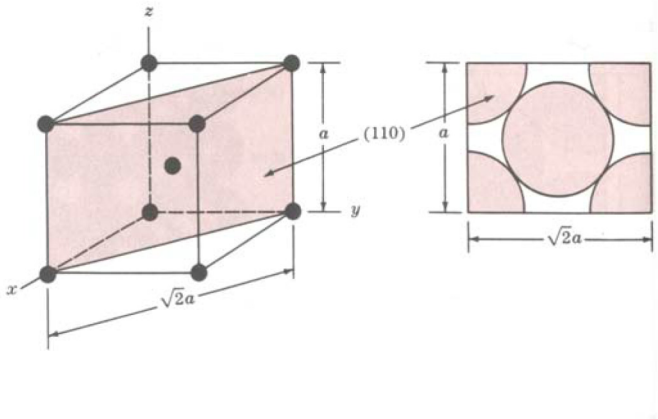
هي ببساطه عدد الذرات في وحدة المساحات من المستوى و يمكن تعريفها كالآتي:

عدد الذرات التي تتواجد مراكزها على مساحة مختارة من المستوى
المساحة المختارة من المستوى

كثافة المستوى =

مثال: احسب الكثافة الذرية للمستوى **(110)** للتنجستن إذا علمت أن ثابت الشبكية (a) **0.304** nm وأنه خلية التنجستن هي من نوع الـ **BCC**.

الحل: شكل (1-**17**) يوضح المستوى (110) في خلية الـ **BCC**.



شكل (1-17) المستوى (110) في ال BCC

المساحة المختارة للمستوى هي مستطيل طوله $\sqrt{2}\ a$ و عرضه **a** كما هو موضح بالشكل.

المساحة المختارة = $\sqrt{2}\ a \times a$

$\sqrt{2}\ a^2$

عدد الذرات في هذه المساحة = $4 \times 1/4 + 1$

$= 2$

كثافة المستوى = $2/(\sqrt{2}a^2)$

= $2/(\sqrt{2}\ 0.304)^2$ ذرة / nm^2

$= 2/(\sqrt{2}\,(0.304)^2)\times 10^{12}$ مم^2/ ذرة

$= 1.53 \times 10^{13}$ ذرة لكل مليمتر مربع .

7-1 عائلة المتجهات والمستويات في النظام المكعبي

1-7-1 عائلة المتجهات

عائلة المتجهات عموماً هي المتجهات المتساوية في كثافتها الذرية و في النظام المكعبى هي المتجهات التي لها نفس الإحداثيات بغض النظر عن الترتيب والإشارة فمثلاً المتجهات **[100]، [00 $\bar{1}$]، [010]، [0 $\bar{1}$ 0]، [001]، [00$\bar{1}$]** ...

لها نفس الكثافة الذرية و بالتالي فهي من نفس العائلة. يرمز للعائلة بأقواس زوايا أي أن كل المتجهات السابقة من العائلة **<100>.**

2-7-1 عائلة المستويات

عائلة المستويات عموماً هي المستويات المتساوية في كثافتها الذرية و في النظام المكعبي هي المستويات التي لها نفس الإحداثيات بغض النظر عن الترتيب والإشارة فمثلاً المستويات **(210 ، (20 $\bar{1}$) ، (02 $\bar{1}$)** ...

لها نفس الكثافة الذرية و بالتالي فهي من نفس العائلة ورمز العائلة هنا هو **{120}**.

ملخص الوحدة الأولى

تناولنا في هذه الوحدة أساسيات الذرة من إلكترونات و بروتونات و نيوترونات و عدد ذري ووزن ذري ومدارات. ثم ركزنا على توزيع الإلكترونات في مدارات الذرة وأهمية الإلكترونات في المدار الأخير (إلكترونات التكافؤ).

تناولنا بعد ذلك العلاقة بين الروابط بين الذرات و التوزيع الإلكتروني ثم تناولنا الروابط الأساسية بين الذرات من رابطة أيونية ورابطة تساهمية ورابطة فلزية (معدنية) كذلك درسنا باختصار الروابط الثانوية. كان ذلك مدخلاً هاماً لتعريف المواد الهندسية و تقسيمها إلى مواد خزفية و مواد بوليمرية و مواد معدنية و تناولنا باختصار الخصائص الهامة لكل منها. تناولنا بعد ذلك الخلايا الو حدية وعرفناها بأنها مجموعة من الذرات تتكرر في ثلاثة الأبعاد الفراغية لتكون المادة ثم درسنا أهمها وهي الـ **HCP, BCC, FCC** وأوضحنا أهم خصائصها مثل العدد التنسيقي، العدد الفعلي للذرات في الخلية، العلاقة بين نصف قطر الذرة و أبعاد الخلية و معامل الازدحام .

تناولنا أخيراً المستويات والمتجهات البلورية و كيفية قراءتها من الخلية و كيفية رسمها في الخلية و معرفة الكثافة الذرية للمتجهات و المستويات ثم تعريف عائلات المستويات والمتجهات.

اختبر معلوماتك

1) العدد الذري هو:

أ) عدد الإلكترونات + عدد البروتونات في الذرة.

ب) عدد النيوترونات في الذرة.

ج) عدد البروتونات في الذرة.

د) عدد التكافؤ.

(2 إلكترونات التكافؤ هي:

أ) عدد الإلكترونات المكافئة للنيوترونات.

ب) العدد الذرى.

ج) عدد الإلكترونات في المدار الأخير للذرة.

د) الإلكترونات الداخلية في الذرة.

3) الأيون هو:

أ) ذرة فقدت أو اكتسبت بروتونات.

ب) ذرة بها نيوترونات أكثر من بروتونات.

ج) ذرة فقدت أو اكتسبت إلكترونات.

د) جزئ عملاق.

(4أي من الجمل الآتية ينطبق على الرابطة الأيونية.

أ) هي رابطه بين فلزات ولا فلزات عادة.

ب) هي رابطة تتلا حم فيها المدارات الأخيرة للذرات.

ج) هي رابطة ثانوية.

د) هي أساس الرابطة المعدنية.

(5 أي من الجمل الآتية تنطبق على الرابطة التساهمية:

أ) هي رابطة الجزيء.

ب) هي أساس الرابطة الفلزية.

ج) هي رابطة ثانوية لحظية .

د) هي رابطة ثانوية دائمة.

(6أي من الجمل آلاتية تنطبق على الرابطة الفلزية:

أ) هي رابطة ثانوية

ب) هي أساس الروابط في المواد الخزفية

ج) هي عبارة عن جزيئات عملاقة.

د) هي التي تطلق الإلكترونات في المدارات الأخيرة لتصبح حرة الحركة بين ذراتها.

(7 الخزفيات هي مواد:

أ) عازلة الحرارة .

ب) عازلة الكهرباء .

ج) معظمها تترابط روابط أيونية.

د) كل الذي ذكر.

(8 ا لبوليمرات هي عبارة عن:

أ) ذرات تترابط برابطة أيونية .

ب) جزيئات عملاقة.

ج) موصلات جيدة للحرارة .

د) مواد براقة.

(9الفلزات هي:

أ) المعادن و هي موصلة جيدة للكهرباء .

ب) مواد سائلة عند درجات الحرارة المخفضة.

ج) مواد شفافة.

د) كل الذي ذكر.

10) أقل الخلايا الو حدية ازدحاما هي:

أ) BCC .

ب) HCP .

ج) FCC .

د) (ب) ، (ج).

11) أكثر الخلايا الوحديه ازدحاما هي:

أ) HCP .

ب) BCC .

ج) FCC .

د) (ا) ، (ج).

(12 العدد التنسيقي هو:

أ) العدد الفعلي للذرات في الخلية.

ب) عدد أقرب جيران للذرة والتي تتلامس معها.

ج) عدد الإلكترونات .

د) عدد الذرات المجاورة للخلية.

13) أي مما يلي يمثل مستوى:

أ) (1 1 2.5).

ب) [121].

ج) ($\bar{1}$01).

د) (1,2,3,).

14) أي مما يلي يمثل متجه:

أ) (011).

ب) (2,1,1).

ج) {311}.

د) [101].

15) أي مما يلي يمثل عائلة متجهات.

أ) (012).

ب) {000}.

ج) <103>.

د) {112}.