

بنية المادة الكثيفة

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

1.1 الجسم البلّوري والجسم اللابلّوري

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

1.1.1 الحالة البلّورية الدقيقة أو الميكروبلّورية والحالة الزجاجية

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

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

• تصلّب بطيء جداً

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

• تصلّب سريع

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

• تصلب فجائي

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

نتيجة: نميز بشكل أساسي حالتين للجسم الصلب هما:

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

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

ومع اكتشاف انعراج الأشعة السينية RX في البلّورات (فون لو M.Von Laue 1912) وتصنيع أول مقياس لانعراج الأشعة السينية RX Diffractometre من قبل براغ (W.H et W.L Bragg 1913) تم التحقق المباشر للطبيعة الدورية للترتيب البلّوري وبذلك أصبح تعيين البنية البلّورية للمادة حقيقة ملموسة. ومن الطرق الأخرى التي ساهمت في دراسة البلّورات كان المجهر أوالميكروسكوب الإلكتروني ومطياف الطنين المغناطيسي RMN ومطياف موس باور Mossbauer . وهكذا وبمعرفة البنية البلّورية الذرية، وتحديد مواقع الذرات في الفراغ، أصبح بمقدورنا وصف الجسم البلّوري من وجهة نظر كيميائية، كتحديد ماهية الروابط بين الذرات و الجزئيات، كما أصبح المجال مفتوحاً أمام المختصين في دراسة الجسم الصلب لربط الخواص الفيزيائية والكيميائية للمركبات الصلبة ببنيتها البلّورية.

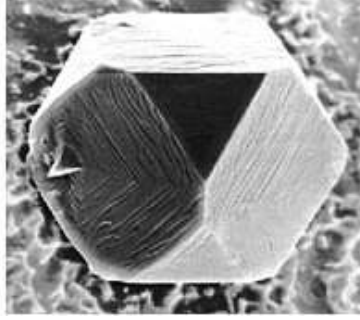
تُصنّف بعض المواد الكيميائية التي تأخذ شكلاً خاصاً بها مثل السكر والملح الصخري الكبريت ...، كأجسام بلّورية. حيث تبدو حبيبات كلور الصوديوم كمكعبات صغيرة ولكن بوضعها تحت المجهر نلاحظ تعرض رؤوس هذه المكعبات للكسر نتيجة الاحتكاك الميكانيكي مع مرور الزمن وتشكل وجوه مثلثية (مثلث متساوي الأضلاع) يمكن لها أن تزداد حتى نحصل في بعض الحالات على ثماني وجوه منتظم كما في الشكل 1

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



الشكل 1. بلّورات كلور الصوديوم تحت المجهر.

إن تعميم تلك الظاهرة يفسر لنا صعوبة تغيير الشكل الطبيعي للبلّورات والمثال الأكثر شهرةً هو الماس الخام الذي تنكسر زوايا بلّوراته دائماً بزاوية ثنائية مقدارها 109,47 درجة. الشكل 2.



الشكل 2. بلورات الماس

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

اللابلّورية amorphous

1.1.2 الحالة المرتبة والحالة غير المرتبة

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

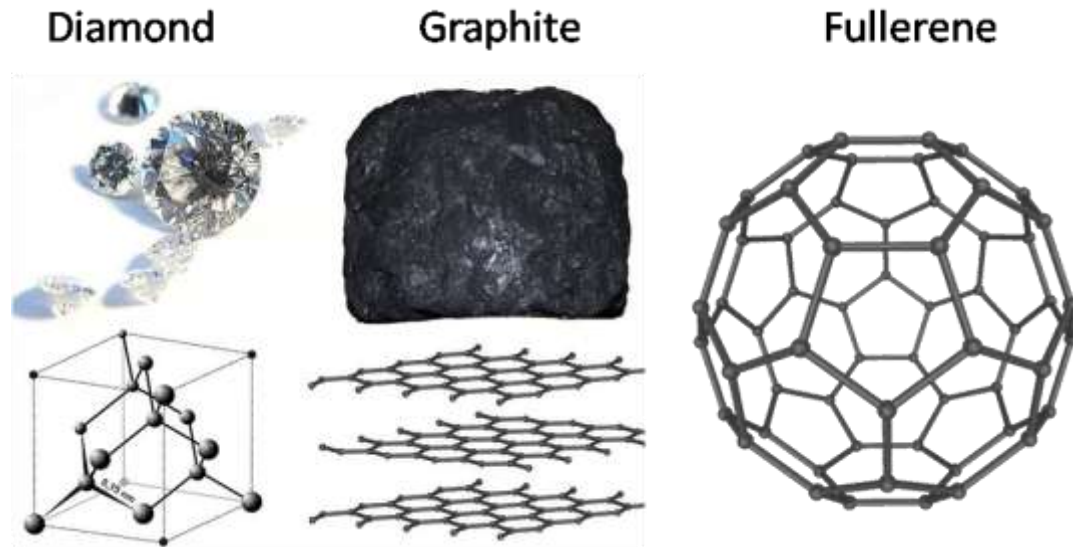


البلّوري ولكن ماذا عن الجسم اللابلّوري؟

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

الشكل 3. الحالة المرتبة والحالة غير المرتبة

إن تصنيف الأجسام الصلبة كأجسام بلّورية أو لابلّورية يعتمد على التوزّع الداخلي للذرات، ولكن هل يمكن اعتبار ذلك معياراً للتمييز فيما بينها؟ إن الجواب على هذا السؤال غير واضح فالكربون يأخذ عدة أشكال في الحالة الصلبة: بلّورات ثلاثية الأبعاد (الماس) وصفائح ثنائية البعد (الغرافيت) وكرات من الكربون تشبه كرة القدم (الفوليرين C_{60}) والكربون في الحالة الزجاجية. الشكل 4.



الشكل 4

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

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

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

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

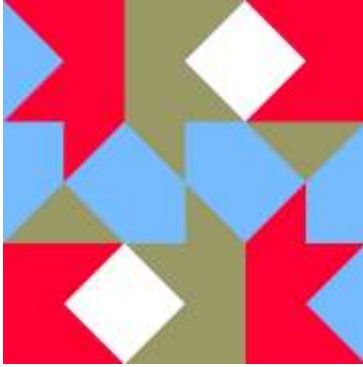
1.2 عناصر التناظر

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

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

1.2.1 عناصر تناظر التوجه أو الاتجاه

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



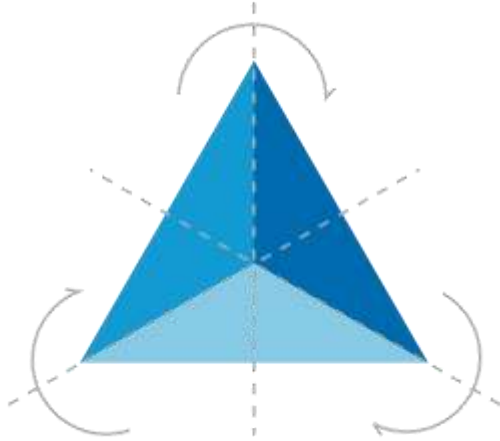
1.2.1.1 مركز التناظر C

(تناظر الجسم بالنسبة لنقطة منه).
إذا كان الجسم F يملك مركز تناظر C فإنه يكون مطابقاً لـ F' الناتج عن عملية تطبيق التناظر بالنسبة لهذا المركز. الشكل 5.

الشكل 5. مركز التناظر

1.2.1.2 محور الدوران A_n

إذا كان الجسم يملك محور دوران A_n فإنه ينطبق على نفسه بعد دورانه حول هذا المحور بزاوية مقدارها $\alpha = 2\pi/n$. الشكل 6.



الشكل 6. محور تناظر من المرتبة 2

محاور الدوران في البلورات (الجدول 1):

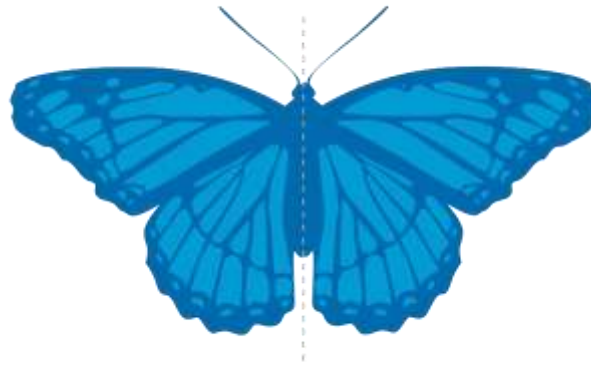
| المرتبة | رمز محور الدوران | زاوية الدوران بالدرجة |
|---------|------------------|-----------------------|
| 2 | A_2 | 180 |
| 3 | A_3 | 120 |
| 4 | A_4 | 90 |
| 6 | A_6 | 60 |

الجدول 1. محاور الدوران في البلورات

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

1.2.1.3 مستوى تناظر M_n

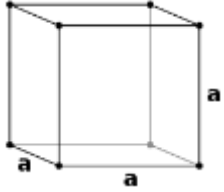
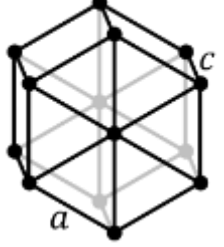
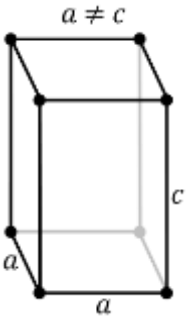
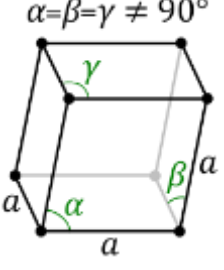
عندما يتمتع الجسم بمستوي تناظر فإنه يتطابق مع صورته بالنسبة لهذا المستوي كما يوضح الشكل 7 إذا كان مستوي التناظر هذا متعامداً مع محور دوران تناظري درجته n نرسم للمستوي في هذه الحالة بـ M_n يكافئ المستوي M_n في الشكل المجاور دوراناً A_2 متبوعاً بالتناظر بالنسبة لمركز تناظر C ، نقطة تقاطع المستوي M مع A_2 .

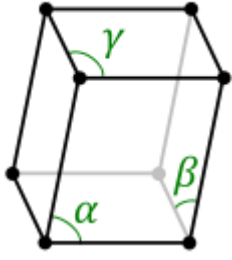
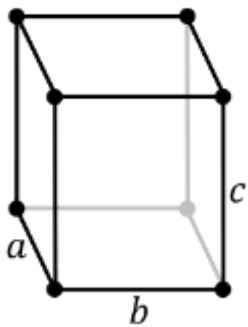
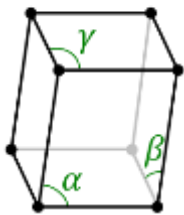


الشكل 7. مستوى التناظر

1.3 الجمل البلورية

تقود دراسة التناظر في البلورات الصلبة على المستوى المرئي إلى دراسة تناظر المجسمات الفراغية التي لا تملك سوى عناصر التناظر من النوع محور، مستوي، مركز وتسمح عناصر التناظر هذه بتمييز سبع جمل بلورية ينتمي إليها كل أنواع البلورات الموجودة في الطبيعة. يميز كل جملة بلورية بشكل عام مجسم متعدد الوجوه نقطة تقاطع أقطاره هي مركز تناظر بالنسبة للجملة البلورية. يتضمن الجدول 2 الآتي هذه الجمل السبعة.

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

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

الجدول 2 . الجمل البلورية السبعة

1.4 توصيف البلّورات

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

1.4.1 مفاهيم أولية

1.4.1.1 مولّد البلّورة

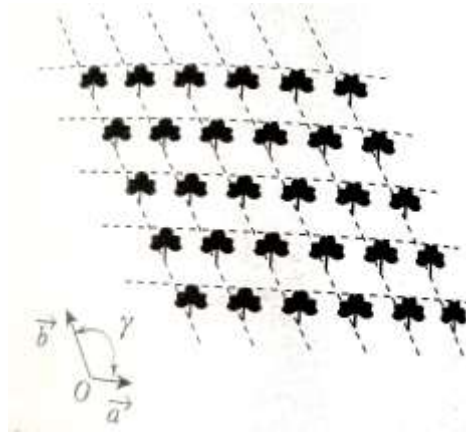
سوف نعرف مولّد البلّورة في فضاء ثنائي البعد، وسنعمم هذا التعريف من أجل فضاء ثلاثي الأبعاد.

تعريف المولّد:

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

1.4.1.2 الشبكة

يتكرر المولّد دورياً في فضاء ثنائي البعد بوساطة شعاعين هما a و b مستقلين خطياً طويلتيهما a و b والزاوية المحصورة بينهما هي γ . يكفي إضافة شعاع ثالث مستقل خطياً عن الشعاعين الآخرين لكي نعمم هذه الظاهرة في فضاء ثلاثي البعد. الشكل 8.



الشكل 8. البنية الدورية ثنائية البعد وشبكة برافيه.

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

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

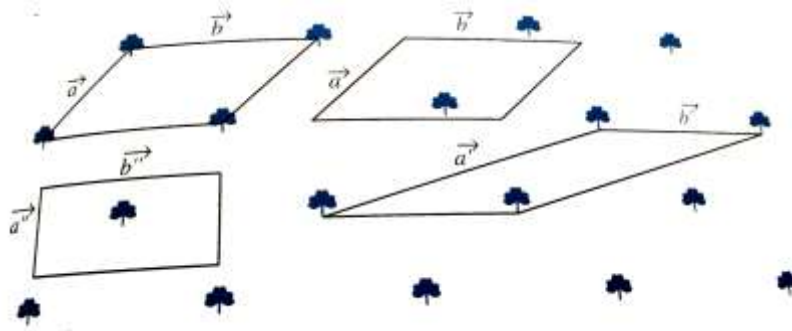
من الواضح أن مركز الانسحاب هو عقدة من عقد الشبكة الانسحابية. عندما نطبق انسحاباً شعاعه \vec{t} على مولد البلورة ينتقل هذا المولد لمكان مولد آخر مطابق له تماماً، وبشكل عام ينتقل التوزيع الإلكتروني الذي يميز التوزيع الذري لتوزيع مطابق له تماماً.

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

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

1.4.1.3 الخلية العنصرية

تمثل الخلية العنصرية في فضاء ثنائي البعد المساحة الصغرى التي يمكن أن نمسح بها كل المستوي بتطبيق الانسحاب $(\vec{t} = m\vec{a} + n\vec{b})$ حيث m و n هي أعداد صحيحة. الشكل 9.



الشكل 9. الخلية العنصرية لشبكة مستوية

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

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

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

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

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

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

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

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

1.4.1.4 متحولات الخلية العنصرية

يمثل الجدول 3 التالي المتحولات المميزة لكل جملة بلورية:

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

جدول 3. الجمل البلورية

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

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

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

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

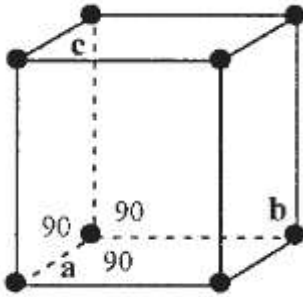
حيث m', n', p' تأخذ القيمة 0 أو 0,5.

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

1.4.2.1 النموذج البسيط (P) simple ou Primitif :

نرمز له بالحرف اللاتيني (P)

يعبر الشكل المجاور عن هذا النموذج .

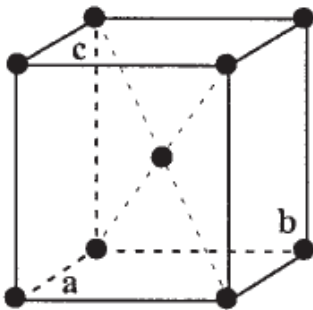


الشكل 10. النموذج البسيط

1.4.2.2 النموذج المتمركز (I) :

أو *Internal centered mode*

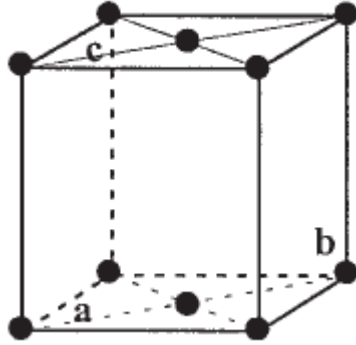
نرمزه بالحرف اللاتيني (I) يتميز هذا النموذج بوجود مولد في مركز الخلية العنصرية بالإضافة لوجود مولد آخر في المبدأ (0,0,0) ووجوده في الرؤوس الثمانية للخلية العنصرية والانسحاب الإضافي هنا هو $t' = 1/2 a + 1/2 b + 1/2 c$



الشكل 11. النموذج المتمركز

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

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



$$t' = 1/2 a + 1/2 b \text{ أو}$$

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

$$\text{أو } t' = 1/2 a + 1/2 c$$

الشكل 12. النموذج ذو القاعدة المتمرزة.

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

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

أو *Face centered*

mode نرمز له بالحرف

اللاتيني (F)، يتميز هذا

النموذج بوجود مولد في كل

وجه من أوجه الخلية العنصرية

بالإضافة للمولدات في الرؤوس

الثمانية.

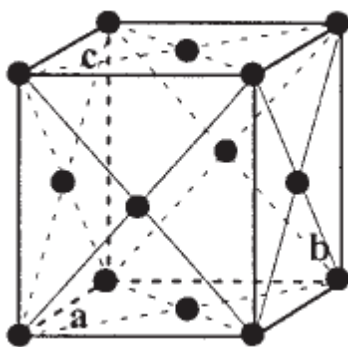
ويمكن الحصول على هذا النموذج

انطلاقاً من النموذج (P) وذلك

بإضافة الانسحابات التالية :

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

الشكل 13. النموذج متمركز الوجوه



$$t' = 1/2 b + 1/2 c \quad \text{و}$$

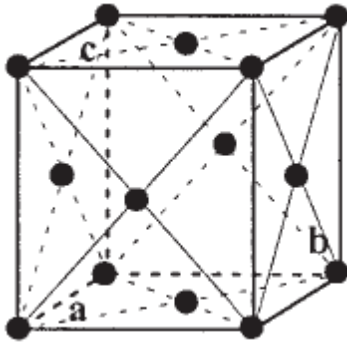
$$t' = 1/2 a + 1/2 c \quad \text{و}$$

1.4.3 عدد المولدات Z :

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

حساب عدد المولدات في الخلية العنصرية

لحساب عدد المولدات ضمن خلية عنصرية ما نتبع القواعد التالية:



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

الشكل 14 . المواقع المحتملة لمولد أو عنصر في خلية

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

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

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

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

1.4.4 الكتلة الحجمية

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

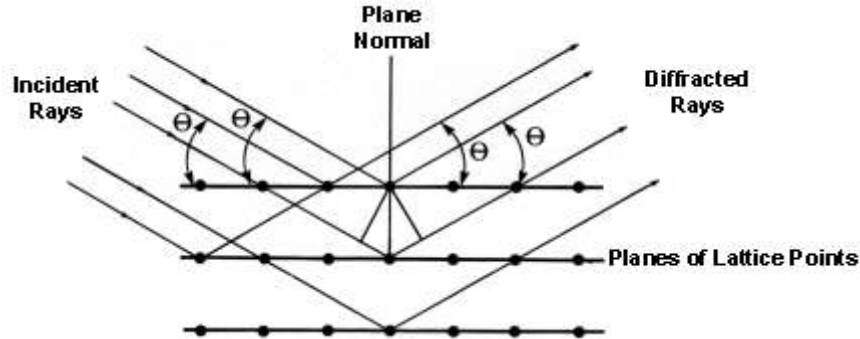
$$\rho = \frac{M \cdot z}{V \cdot N_a} \quad \text{الواحدة } \text{kg m}^{-3}$$

1.5 الدراسة التجريبية

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

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

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



الشكل 15. انعراج الأشعة السينية في البلورات

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

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

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

البعد الشبكي d :

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

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

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