سلسلة الدروس و المحاضرات

مدخل إلى فيزياء الحالة الصلبة

الجزء الأول

موجه إلى طلبة السنة الثالثة فيزياء

L.M.D

I

من إعداد

الدكتور مبروك غوقالي

أستاذ محاضر بجامعة الشهيد حمة لخضر بالوادي

بسم الله الرحمن الرحيم

تمهيد

بسم الله الرحمن الرحيم, الحمد لله رب العالمين, والصلاة والسلام على أشرف المرسلين, وعلى آله وصحبه أجمعين

لقد بين لنا الله من خلال النظام الكوني, استمرارية المواد كأشياء, وتكرار الظواهر كعلاقات سببية, لنراقبها وندركها وننتفع بها في حياتنا بعد أن نقف على حقيقة سلوكها, ونستدل بها على قدرته ووحدانيته, مصداقا لقولته تعالى **سنريهم آياتنا في الآفاق وفي أنفسهم حتى يتبين لهم أنه الحق....(53)** سورة فصلت

والفيزياء تعد دائما في مقدمة العلوم المعنية بدراسة المواد والظواهر الطبيعية المختلفة, وهي التي تقود التقدم العلمي والتقني للبشر فنظرة سريعة لما يتم حولنا من إنجازات في مجالات عدة كارتياد الفضاء, و ثورة المعلومات, ونظم الاتصالات, وغيرها كفيلة بإلقاء الضوء على الدور العظيم الذي تضلع به الفيزياء.

وفيزياء الحالة الصلبة -موضوع هذا الكتاب- هي أحد فروع الفيزياء المعنى بالبحث في طبيعة المواد الصلبة وخصائصها المختلفة: الميكانيكية والكهربية و المغناطيسية والحرارية والضوئية وغيرها.

والأجسام الصلبة قد تكون بلورية فتشكل مملكة مترامية الأطراف, رعاياها من المعادن والمواد العازلة و أشباه الموصلات والموصلات الفائقة, وغيرها. وهي تسلك في الظروف المختلفة ضروبا متباينة من السلوك الذي يوحي بمجالات تطبيقية شاسعة. كما أنها قد تكون غيربلورية, ولها هي الأخرى تطبيقاتها الخاصة

والكتاب الذي بين أيدينا يحاول أن يصحب القارئ العربي في جولة قصيرة إلى دنيا فيزياء الأجسام الصلبة, حيث اختيرت محتوياته بعناية لكي تلبي احتياجات المقرر الدراسي لمقياس الفيزياء الصلبة I في الجزء الأول منه و مقياس خصائص الأجسام الصلبة في جزئه الثاني وكلاهما خاص بطلاب السنة الثالثة فيزياء **L.M.D**, وقد صيغت فصول هذا الكتاب بشكل مترابط يجعل القارئ لا يجد صعوبة في الفهم و الاسترسال من فصل لآخر

والله نسأل أن يعيننا على عرض محتويات كتابنا هذا بجزأيه الأول والثاني بالطريقة التي تيسر للقارئ فهمها واستيعابها. ونأمل أن يوجهنا القارئ الكريم إذا ما صادفته هنة أو ملحوظة يرى إضافتها هنا أو هناك .. متمثلين قول القائل:

إن تجد عيبا فسد الخللا   جل من لا عيب فيه وعلا

المحتويات

1

المحتويات

1 البنى البلورية

2 انعراج الأشعة السينية و الشبكة المعكوسة

المحتـــويـــات

2 انعراج الأشعة السينية و الشبكة المعكوسة

3 الروابط الذرية و الخواص المرونية

المحتـــويـــات

3 الروابط البلورية و الخصائص المرونية

4 اهتزازات الشبكة البلورية و الخصائص الحرارية

المحتويات

4

الاهتزازات الشبكية و الخواص الحرارية

الفصل الأول

البنى البلورية

البنى البلورية

1-1 مقدمة

توجد ا ادة أربعة حالات هي: ا الة الغازية، وا الة السائلة وا الة الصلبة وحالة البلازما،إذ تلـف التركيـب البنائي للمادة من حالة إ أخرى حسب قوى الربط ا سيطرة على ا ادة، ففي الغازات تكون قوى الربط ب ا زيئـات صغ ة جدا أو منعدمة تقريبا،الأمر الذي معه تكون جزيئات الغاز متباعدة و حركة دائمة الفراغ الذي تويهـا. و ا الة السائلة تكون قوى الربط ب ا زيئات أك منها ا الة الغازية لدرجة أ ا عل ا زيئات متلامسة وتكون حركة ا زيئات شكل سريان أو تدفق للسائل، وبالتا تظهر السوائل معامل لزوجة أك منه ا الة الغازية، بينما ا الـة الصلبة تكون قوى الربط كب ة جدا الأمر الذي معه تأخذ ا ادة شكلا جامدا و ددا ويكون ا معامل لزوجة متنـاهي الك ويكون ا تركيبا بنائيا ثابتا. حالة البلازما هي وجود ا ادة على هيئة أنوية ذرية و ثل هذه ا الة 99% من مكونات الكون ا نظور.طبعا كن ويل ا ادة من شكل إ آخر وذلك بتغي الظروف ا يطة مثل الضغط ودرجة ا رارة. و تلف ا صائص الفيزيائية للمادة باختلاف حالتها.

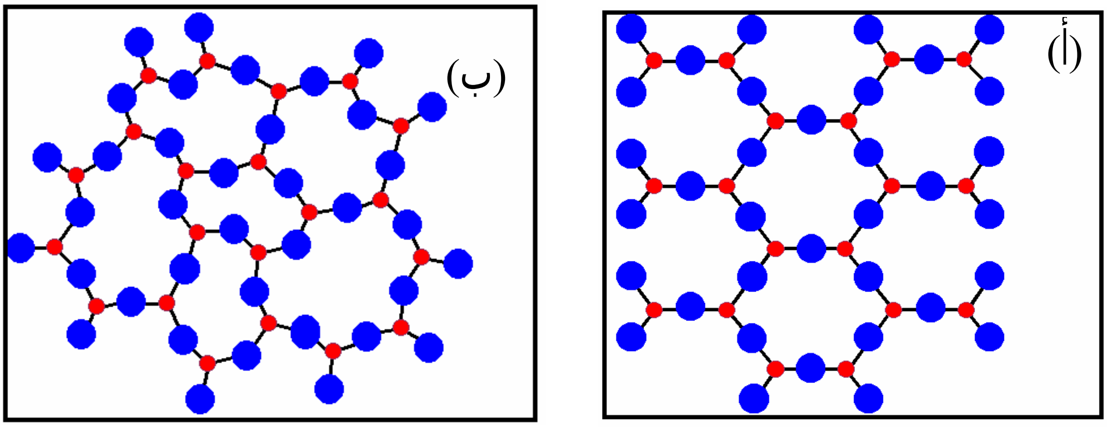
كن تصنيف ا واد الصلبة إ قسم رئيسي يعتمد كل منهما على الترتيب ا ندسي الداخلي لذرا ا و ا:

أ - المواد الصلبة البلورية

وفيها ينتظم ترتيب الذرات الفراغ يث تشكل طاً هندسياً دورياً وعندما ينتشر هذا النمط ليشغل كـل أجزاء ا ادة، فإن هذا يع أنه لدينا"بلورة وحيدة" أما إذا توقف اطراد دورية النمط ا ندسي عند ما يسمى دود ا بيبات فإن ا ادة حينئذ تكون"متعددة البلورات" أي تتكون من موعات صغ ة جداً من ا بيبات، أو البلورات الأحادية الصغ ة ا اهات تلفة.

ب- المواد الصلبة اللابلورية

وتضم ا واد الصلبة ال تتخذ ذرا ا أو جزيئا ا توزيعاً عشوائياً، حيثما يتس ا ذلك، عندما تتحول من ا الة ا ائعة (الغازية أو السائلة) إ ا الة الصلبة وتوصف هذه ا واد الصلبة اللابلورية أيضاً بأ ا لا شكلية ع أ ا لا تتخـذ شكلاً يزاً كما توصف بأ ا زجاجية نظراً لأ ا تتشابه مع الزجاج عشوائية ترتيب الذرات أنظر الشكل(1.1).



الشكل(1.1): ثيل مبسط بعدين: (أ) مادة بلورية - (ب) مادة لا بلورية

وهناك بعض ا واد الصلبة لا تنتمي اماً لأي من النوع ا ذكورين آنفا، حيث أ ا تقع بدرجات متفاوتة ب ا ال الكاملة التبلور و اللابلورية، و كن وصف الترتيب ا زئي للذرات فيها بتعي ما يسمى " بدرجة التبلور" و تد الترتيب ا نتظم بعض هذه ا واد شبه البلورية إ مسافات قص ة، فيوصف بأنه ذي مدى قص مقارن ـة بالترتيـب ذي ا ـدى الطويل ا واد كاملة التبلور.

ومن ا دير بالذكر أن ا ال البلورية هي ا ال الطبيعة لغالبية ا واد الصلبة، نظراً لأن طاقة الترتيب ا نتظم للذرات تكون أقل من طاقة ا لتوزيع العشوائي ا. وعموماً إذا تتح لذرات ا ادة فرصة ترتيب نفسها كما ينبغي، كأن تك ـبح حركتيها فإنه كن أن تتكون مادة لا بلورية . مثال ذلك الكربون "الزجاجي" الناتج من عملية التحلل عند درجات حرارة منخفضة، وبعض البوليمرات ا تتكون من عدد ك جداً من ا زيئات غ ا تناسقة . و حالات أخ ـرى لا تت ـاح الفرصة لنمو بلورات من سوائل عالية اللزوجة عند إ ت يدها بسرعة ، حيث يؤدي الت يد الفائق ميد السائل ب ـنفس النمط غ الدوري لترتيب جزيئاته . لكن مثل هذه ا واد كنها اكتساب ا ال البلورية بصورة كلية أو جزئية، عن طريق معا تها حرارياً بعملية تسمى التلدين وهي عملية تسخ يعقبه ت يد عدلات بطيئة منتظمة.

2-1 الشبكة البلورية

هي نوع من التمثيل الرياضي لنمط ترتيب نقطي مع ، حيث يتم توزيع عدد لا ائي من النقاط بطريق ـة هندس ـية تظهر ترتيباً شبكيا متوازياً يتميز بالتماثل والتكرار ا نتظم الدورية الفراغ، يث تكون البيئة ا يطة بأي نقطة منها مشا ة اماً للبيئة ا يطة بأي نقطة أخرى.

3-1 البنية البلورية:

البنية البلورية هي عبارة عن مع عدد لا ائي من الوحدات الذرية ا تماثلة تتكرر بشكل دوري ومنتظم (إذا كانت مثالية) يع ا اهات الفضاء. تتميز الب البلورية باستقرارها غالبا وامتلاكها لكثافة طاقة أصغريه وهذا التميز قق ا عا التالية:

1- افظ على الاعتدال الكهربائي البلور.

2- تكون يع الروابط ب الذرات ددة.

3- تبقى شدة التدافع النا ة عن (أيون - أيون) أصغريه.

4- تمع الذرات معا لتحتل حجما أصغريا.

تدعى الوحدات بوحدات البناء البلوري أو القواعد (الأسس). ثل كل قاعدة(أساس) بنقطة هندسية(با ع الرياضي) ندعوها عقدة و موعة العقد ا وزعة بانتظام ودورية تشكل ما يناه شبكة بلورية، فالبنية البلورية ما هي إلا تتابع منـتظم للقاعدة ا تموضعة نقاط الشبكة البلورية ا وزعة بشكل دوري الفراغ (أنظر الشكل(3.1)). وبشكل تصر:

شبكة بلورية + قاعدة (أساس) = بنية بلورية

ب أن تكون كافة القواعد كل الشبكة البلورية متماثلة تركيبها وعددها ذرا ا، و كن أن تتكون القاعدة من ذرة أو عدة ذرات شريطة أن تكون خاضعة لشروط الدورية نفسها.و أبسط التركيبات البلورية توجد ذرة واحدة لكل نقطة شبكية، كما هو ا ال بلورات النحاس والذهب و الفضة.

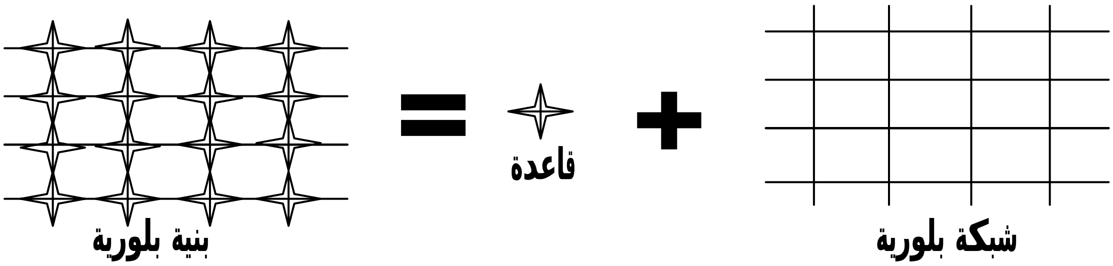
وتتركب البلورة ا ثالية من قواعد مرتبة على شبكة بلورية فراغية ثلاثية الأبعاد يث يبدو هذا الترتيب عند النظر إليه من نقطة شبكية ذات متجه موضع $\vec{r}$ هو نفسه عند النظر إليه من نقطة أخرى $\vec{r}'$ (وهو ما يسمى بالتناظر الانسحا) طبقا للمعادلة:

$$\vec{r}' = \vec{r} + \vec{R} \qquad (1-1)$$

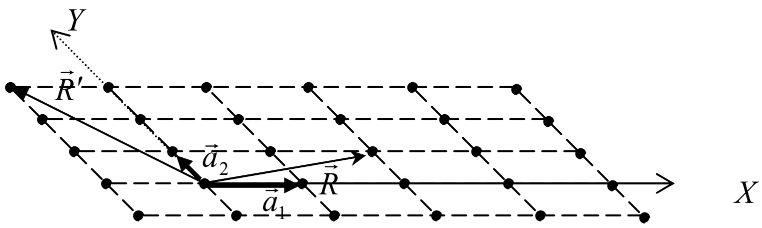
يسمى $\vec{R}$ شعاع الانسحاب(الانتقال) الأساسي وهو يصل ب أي عقدت (قاعدت) الشبكة البلورية ويعرف با عادلـة التالية:

$$\vec{R} = n_1\,\vec{a}_1 + n_2\,\vec{a}_2 + n_3\,\vec{a}_3 \qquad (2-1)$$

حيث: $\vec{a}_1$ ، $\vec{a}_2$ ، $\vec{a}_3$ تسمى أشعة الانسحاب الأولية وهي ددة وثابتة كل شبكة بلوريـة،و n_1، n_2، n_3 هـي أعـداد صحيحة اختيارية(أنظر الشكل(4.1)) .



الشكل(3.1): تكوين بنية بلورية مستوية



الشكل(4.1): ثيلان لشعاع الانسحاب الأساسي شبكة بلورية مستوية: $\vec{R}=2\vec{a}_1+\vec{a}_2$ و $\vec{R}'=-\vec{a}_1+3\vec{a}_2$

4-1 التناظر البلوري

يتأتى اختلاف خصائص بلورات ا واد الصلبة من تباين شكل الشبكات البلورية ا.وينتج هذا التباين من اختلاف أبعاد وزوايا قواعد التركيب البلوري.ولكي كن تصنيف الشبكات البلورية ب أخذ مبدأ التناظر با سبان.والتناظر هو ول الشيء بطريقة ما لكي ينطبق على نفسه مرة أخرى، ينشأ التناظر ا ندسي الأجسام ا تبلورة بسبب تكرار الوحدات البنائية(القواعد) بشكل منتظم، ويعت أهم ا صائص ا ندسية ال يز خلايا الوحدة للجسم الصلب ا تبلور، حيث تتميز كل خلية وحدوية بنوع واحد أو أكثر من أنواع التناظر ا ندسي .

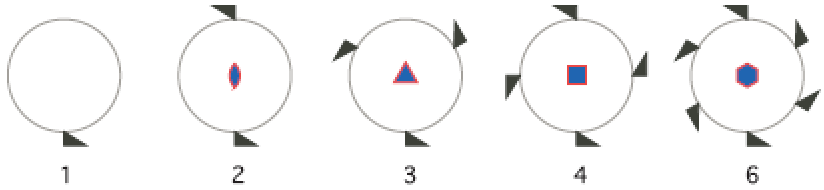
كن تصنيف التناظر البلوري إ صنف تناظر انسحا بشعاع الانسحاب الرئيسي $\vec{R}$ وتناظر نقطي، بالنسبة ذا الأخ هناك ثلاث أنواع من التناظرات أساسية وهي: التناظر الدورا و التناظر الانعكاسي و التناظر الانقلا أما بقية التناظرات الأخرى فتنجم من تراكب التناظرات الأساسية ا ذكورة.

1-4-1 التناظر الدوراني

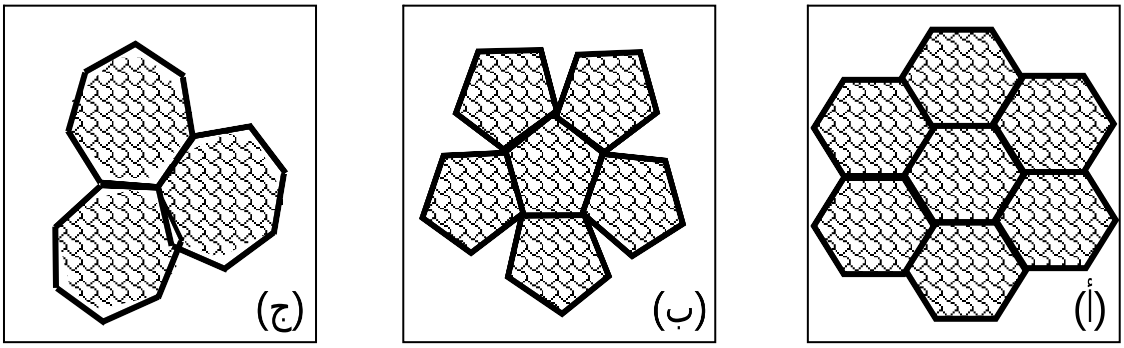
وهو عملية دوران بزاوية $\theta=\frac{2\pi}{n}$ تتم حول ور مع ر بإحدى عقد الشبكة البلورية تطابق شكل الشبكة البلورية بعد الدوران مع شكلها الأصلي، يع هذا التناظر حور يدعى ور التناظر الدورا نرمز له بالرمز A_n حيث n عدد صحيح يع عن رتبة التناظر الدورا وهي تأخذ القيم 1،2،3،4،6 فقط (أنظر الشكل(5.1)) و ال تقابل

الزوايا 2π ، π ، $\frac{2\pi}{3}$ ، $\frac{\pi}{2}$ ، $\frac{\pi}{3}$ على الترتيب ذلك أنه لا يوجد اور تناظر من رتب أحرى أي لا توجد أية شبكة بلورية كنها أن تعود إ وضعها الأصلي بأي عملية دوران من غ ا ذكورة آنفا، فلا يوجد مثلاً ور تناظر اسي أو سباعي للشبكة البلورية .أنظر الشكل(6.1).

يرمز اور الدوران A_2 ، A_3 ، A_4 ، A_6 الأشكال ا ندسية بـ: ، ، ، على الترتيب.



الشكل(5.1): رتب اور التناظر الدورا ا مكنة.



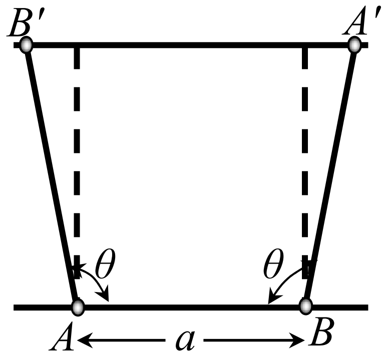
الشكل(6.1): الإثبات ا ندسي لوجود ور تناظر سداسي (أ) ولعدم وجود ور تناظر اسي(ب) و ور تناظر سباعي(ج) وفق إيضاح كبلر للتناظر البلوري.

كن بالطرق الرياضية البحتة إثبات أن اور التماثل الدورانية لا كن إلا أن تكون أحادية أو ثنائيـة أو ثلاثيـة أو رباعية أو سداسية . فإذا اعت نا أن الشكل(7.1) هو لشبكة مستوية ثابتها الدوري a الا اه الأفقي، وبفرض وجود ور تناظر رتبته n ر بنقطة الشبكة B ووجود أقرب ور مناظر له ر بالنقطة A فإن الدوران بزاوية θ حول B ينقـل النقطة A إ A' والدوران ا ماثل حول ا ور A ينقل النقطة الشبكية B إ B' واضح أن النقطت A' و B' تنتميان لأحـد صفوف الشبكة البلورية ويتضح من هندسة الشكل أن:

$$B'A' = AB(1 + 2\cos(\theta)) = a(1 + 2\cos(\theta)) \quad (3\text{-}1)$$

ونظراً لأن $A'B'$ يوازي AB فإن طول $A'B'$ ب أن يكون مضاعفات صحيحة لثابـت الـشبكة a ، ومـن فـإن ا قدار $2\cos(\theta)$ ب أن يـساوي أعـدادا صـحيحة ـددة هـي ± 2 ، ± 1 ، 0 وتكـون الزوايـا θ ا نـاظرة هـي

فقط 180^o، 360^o، 0^o، 60^o، 120^o، 90^o. وباستخدام مفهوم عملية التناظر $\theta = \frac{360^o}{n}$ تكون اور التماثل الدورانيـة أحادية وثنائية وثلاثية ورباعية وسداسية، وتكون هي نفسها حالة الشبكة ثلاثية الأبعاد.

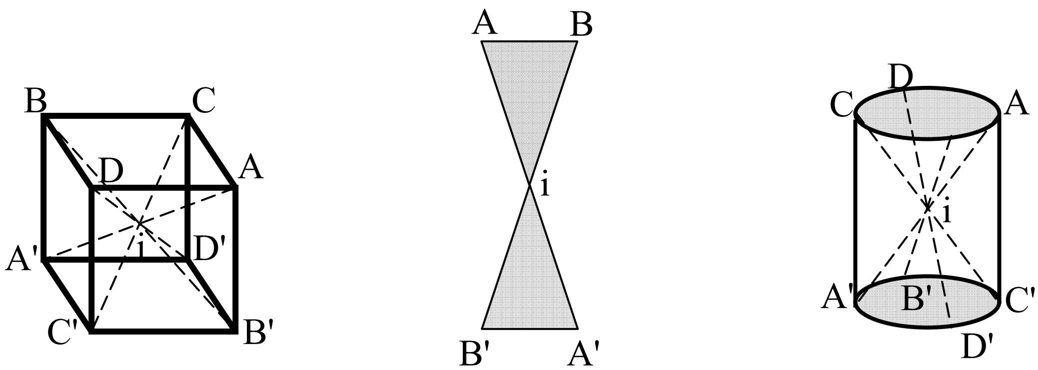


الشكل(7.1): الإثبات ا ندسي لوجود عدد دود من اور التناظر .

1-4-2 التناظر الانقلابي:

وهو عملية تناظر تنجز حول عقدة من الشبكة البلورية تدعى مركز الانقلاب، حيث إذا أز ت كل عقدة ذات موضـع $\vec{r}$ إ ا وضع $-\vec{r}$ تعود الشبكة البلورية إ وضعها الأصلي. يرمز لعملية التناظر الانقلا وفق ا ركز (c) بـ c.

يبـ الشكل(8.1) بعض الأشكال الـ ا تناظر انقلا .



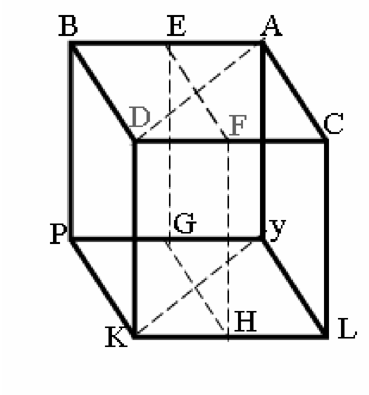
الشكل(8.1): أشكال ا تناظر انقلا .

1-4-3 التناظر الانعكاسي(المرآتي) وفق مستو:

نقول أن للشبكة البلورية تناظر انعكاسي وفق مستو بلوري معـ إذا ما أز ت كل عقدة مرآتيا وفق هذا ا ستوي وعادت الشبكة البلورية إ وضعها الأصلي. يرمز ذا النوع من التناظر بالرمز m.

نلاحظ الشكل(9.1) أن ا رم ACDKYL يناظر مرآتيا ا رم ADBPYK وفق ا ستوي AYKD(لازال هناك ـس مستويات أخرى تكافئ هذا ا ستوي الشكل ا كعـ) ، و متوازي ا ستطيلات ACFEGYLH يناظر مرآتيا متـوازي

ا ستطيلات EFDBPGHK وفق ا ستوي EFHG(لازال هناك مستوي آخرين يكافئان هذا ا ستوي الشكل ا كع).

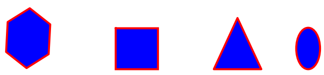


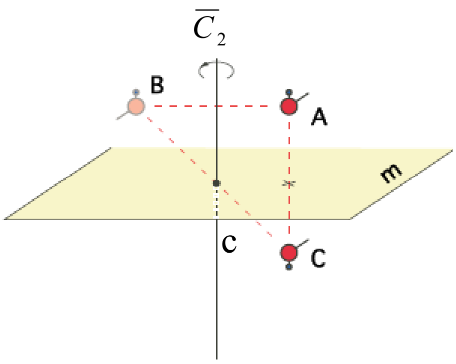
الشكل(9.1)**:** مستويا تناظر الشكل ا كع .

1-4-4 التناظر الدوراني الانقلابي:

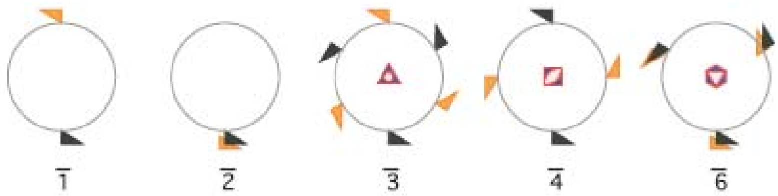
هو عملية مركبة من دوران حول ور A_n يليه انقلاب ء مركز انقلابc يرمز ور الدوران الانقلا هذه ا الة بـ $\overline{A}_n$، أما عملية التناظر ف مز ا بـ $\overline{n}$، حيث n هي رتبة التناظر الدورا .

يوضح الشكل(10.1) أن عملية دوران حول ور ثنائي $\overline{A}_2$ متبوعة بعملية انقلاب ء ا ركز c تكافئ الانعكاس على مستوي التناظر m.

يرمز اور الدوران الانقلا $\overline{A}_2$، $\overline{A}_3$، $\overline{A}_4$، $\overline{A}_6$ الأشكال ا ندسية بـ :  على الترتيب.أنظر الشكل(11.1).



الشكل(10.1)**:**رسم يوضح تكافؤ التناظرين m و$\overline{2}$.

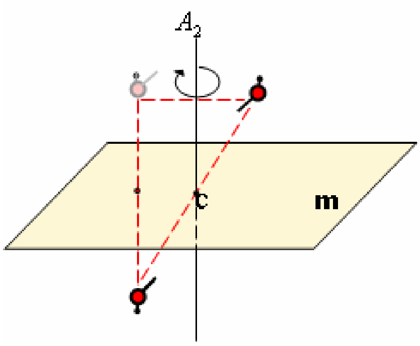


الشكل(11.1): رتب اور التناظر الدورا الانقلا ا مكنة.

5-4-1 التناظر الدوراني الانعكاسي:

هو عملية مركبة من دوران حول ور A_n يليه انعكاس وفق مستوٍ m ، يرمز لعملية التناظر هذه بـ $\frac{n}{m}$ حالة ما إذا كان ور الدوران عمودي على مستوي الانعكاس أما إذا كان يوازيه ف مز ا بالرمز nm.

يوضح الشكل(12.1) أن عملية دوران حول ور ثنائي A_2 متبوعة بعملية انعكاس وفق مستو m تكافئ عملية انقلاب ء ا ركز c.



الشكل(12.1):رسم يوضح تكافؤ التناظرين c و $\frac{2}{m}$.

ملاحظة: يرمز بـ $n\,mm$ لعملية التناظر ا ركبة من ور دوران ومستويي تناظر متعمدان ويوازيانه.و بالرمز mmm لعملية التناظر ا ركبة من ثلاثة مستويات متعامدة.

6-4-1 تمثيل عمليات التناظر بالمتحدات:

تؤدي عمليات التناظر إ إطباق الشبكة البلورية على نفسها، وعليه كن اعتبار عمليات التناظر النقطية ما هي إلا تغ ا ا اور البلورية من اور ا (X_1,X_2,X_3) إ اور ا (X'_1,X'_2,X'_3)، حيث تتغ لة إحداثيات عقد الشبكة البلورية ا عرفة اور ا (X_1,X_2,X_3) بالشكل $\sum x_1,x_2,x_3$ إ لة الإحداثيات $\sum x'_1,x'_2,x'_3$ ا عرفة ا اور (X'_1,X'_2,X'_3). يعـ عن هذا التغ متد يوب ام توجيه ا اور (X_1,X_2,X_3) بالنسبة للمحاور (X'_1,X'_2,X'_3) الذي يكتب كما يلي:

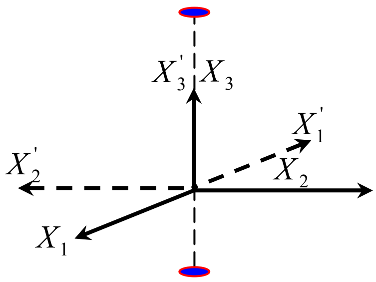
$$[C_{ij}]=\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} \end{bmatrix} \qquad (4\text{-}1)$$

$$C_{ij}=\cos(X_i^{'},X_j) \qquad (5\text{-}1)$$

حيث: $i=1,2,3$ تع عن الإحداثيات ا ديدة و $j=1,2,3$ تع عن الإحداثيات القد ة.

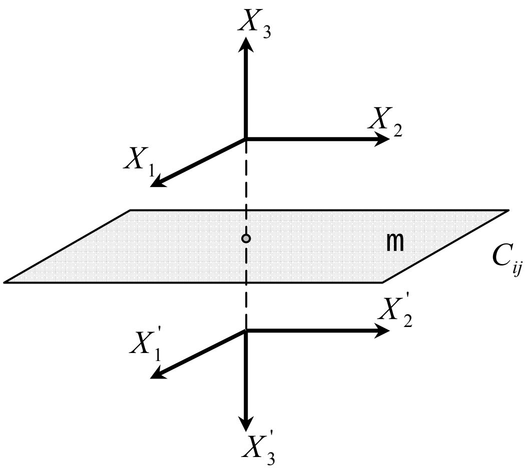
أمثلة: تكتب تدات عمليات التناظر وفق ا عادلتا (4-1) و(5-1):

1. الدوران على ا ور X_3 باعتباره ورا ثنائيا A_2:



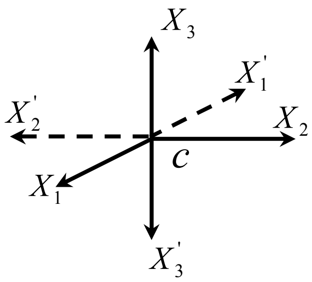
$$C_{ij}(X_3,\pi)=\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

الانعكاس وفق مستوي عمودي على X_3:



$$C_{ij}(m\perp X_3)=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

2. الانقلاب ع مركز انقلاب c:



$$C_{ij}(i)=\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

7-4-1 الزمرة النقطية و الزمرة الفضائية:

الزمرة النقطية هي كل عمليات التناظر ا يتطلب إجراؤها بقاء عقدة ما من عقد الشبكة البلوريـة ثابتـة لا تتحـرك، وتتكون من التناظرات التالية:

أ- التناظر دورا ذو الرتبة n .

ب- التناظر الانعكاسي ا رآ m.

ت- التناظر الانقلا i.

ث- مركبات من التناظرات ا ذكورة آنفا.

أما الزمرة الفضائية فهي تتكون من تراكب التناظرات التالية: الزمرة النقطية و عمليات التناظر الانسحابية و عمليات تناظر أخرى: اور لولبية، مستويات انزلاقية...إ .

5-1 خلية الوحدة:

تعرف خلية الوحدة بأ ا أصغر متوازي سطوح كن بتكراره توليد البنية البلورة،وهي نوعان خلية الوحدة الأولية و خلية الوحدة الاصطلاحية(غ الأولية)، حيث قق **خلية الوحدة الأولية** ا صائص التالية:

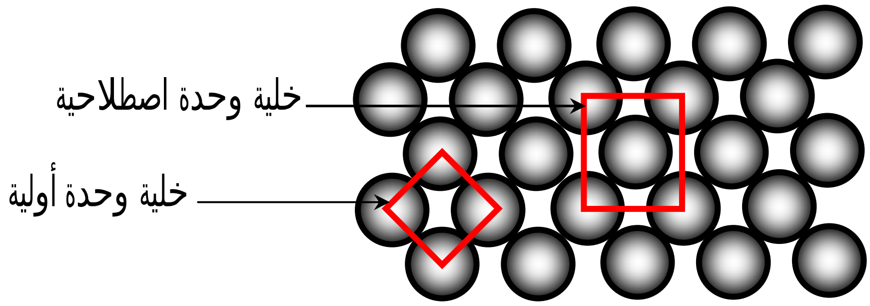
- افظ على التناظر الانسحا و لكن لا افظ بالضرورة على التناظر النقطي للشبكة البلورية ال هي جزء منها .
- تنتمي ا عقدة (قاعدة) أو ذرة واحدة فقط.
- تتواجد عقد الشبكة البلورية على رؤوسها فقط.
- ا حجم أصغر من يع ا لايا الاختيارية الأخرى دده أشعة الانسحاب الأولية $\vec{a}_1$ ، $\vec{a}_2$ ، $\vec{a}_3$ و هو

$$V_e = \vec{a}.(\vec{b} \times \vec{c}) \quad (6\text{-}1)$$

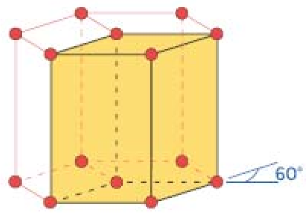
أما خلية الوحدة الاصطلاحية فهي قق ا صائص التالية:

- افظ على التناظر الانسحا و التناظر النقطي للشبكة البلورية ال هي جزء منها.
- تنتمي ا عقدة واحدة أو أكثر.
- تتواجد عقد الشبكة البلورية على رؤوسها و مركزها و مراكز أوجهها ...إ
- ا حجم أصغر من يع ا لايا الاختيارية الأخرى.

يظهر الشكل(13.1) ثيل بعدين لية وحدة أساسية و خلية وحدة اصطلاحية نفس الشبكة البلورية، حيث يظهر أن ا لية الاصطلاحية وي عقدت واحدة ا ركز والأخرى على الرؤوس($1+\frac{1}{4}\times 4=2$) بينما ا لية الأساسية وي عقدة واحدة على الرؤوس فقط($\frac{1}{4}\times 4=1$) ، و الشكل(14.1) يب أيضا ثيلا الفراغ لية وحدة أساسية و خلية وحدة اصطلاحية نفس الشبكة البلورية حيث يظهر ور التناظر السداسي جليا ا لية الاصطلاحية على اليسار و الذي لا يوجد ا لية الأساسية.



الشكل(13.1): ثيل بعدين خلية وحدة أولية و خلية وحدة اصطلاحية نفس الشبكة البلورية.

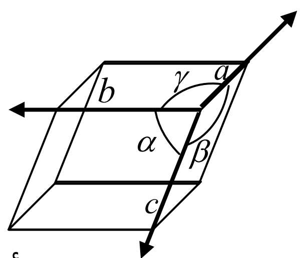


الشكل(14.1): ثيل الفراغ لية وحدة أولية داخل خلية الوحدة الاصطلاحية لنفس الشبكة البلورية.

8-1 تصنيف الشبكات البلورية الفضائية:

ينسب إ عا البلورات الفرنسي برا "Bravais" تصنيف الشبكات البلورية على أساس تناظرها إ أربع عـشرة نوعا((تتوزع عليها 230 زمرة فضائية)) موزعة على سبعة فئات بلورية((تتوزع عليهـا 32 زمـرة نقطيـة)) يوضـحها ا دولان(1.1) و(2.1). وعدد شبكات برا الأربع عشرة و الفئات البلورية السبعة دودة بعدد الطرق ا مكنة لترتيـب العقد(القواعد) الشبكية يث تكون البيئة ا يطة بأي عقدة منها اثلة اماً للبيئة ا يطة بأية عقدة أخرى. وتكون شـبكة برا بسيطة إذا كانت عقدها عند الأركان فقط، ويرمز ا ا دول بالرمز (S)، وعندما تشتمل على نقاط إضـافية مواضيع خاصة فنش إ ركزة الأوجه بالرمز (F)، و ركزة ا سم (C)، و ركزة القاعدة (BC).

لتصنيف الشبكات البلورية تار من الشبكة خلية وحدة ا التناظر النقطي نفسه الذي للشبكة البلورية(أي تار خلية وحدة اصطلاحية) ويتم التصنيف على أساسها، تكون هذه ا لية بشكل متوازي سطوح له ستة أوجه - كما هو موضح الشكل(15.1) - مركزه (c) و أحرفه هي a، b، c (من ا مكن أن تنطبق الأشعة $\vec{a}$، $\vec{b}$، $\vec{c}$ على أشعة الانسحاب الأوليـة $\vec{a}_1$، $\vec{a}_2$، $\vec{a}_3$) و زواياه هي α، β، γ حيث $\alpha=(\vec{c},\vec{b})$ و $\beta=(\vec{c},\vec{a})$ و $\gamma=(\vec{a},\vec{b})$.



الشكل(15.1): شكل ا لية الأولية.

1- **الفئة الثلاثية الميل**: خلية الوحدة بيئة متوازي سطوح عام حيـث: $a \neq b \neq c$ و $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq \frac{\pi}{2}$، وللخليـة الأولية هذه عنصرا تناظريا واحدا هو مركز الانقلاب $(c = \bar{1})$، يوجد نوع واحد من شبكات برا يندرج ت هذه الفئة هو النوع البسيط.

2- **الفئة أحاديـة الميل**: خلية الوحدة بيئة متوازي مستطيلات مائل با اه أحد أحرفـه حيـث: $a \neq b \neq c$ و $\alpha = \gamma = \frac{\pi}{2} \neq \beta$، ذه الفئة ور تناظر من الدرجة الثانية A_2 - ر ركز الوجه ا اوي للضلع a و b والوجه ا قابل له- ومستوي تناظر عمودي عليه بالإضافة إ مركز انقلاب (c) وبالتا تناظر الفئة هـو: $\frac{A_2}{m}c$ أو $\frac{2}{m}$، يوجد نوعان من شبكات برا يندرجان ت هذه الفئة ا النوع البسيط و ا مركز القاعدة .

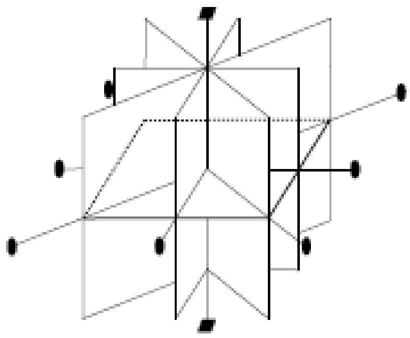
3- **الفئة المعينية المستقيمة**: خليـة الوحـدة بيئـة متـوازي مـستطيلات قـائم حيـث: $a \neq b \neq c$ و $\alpha = \gamma = \beta = \frac{\pi}{2}$، ذه الفئة ثلاثة اور تناظرية من الدرجة الثانية- ر راكز وجوه ا لية الأولية - عموديـة على ثلاثة مستويات تناظر بالإضافة إ مركز انقلاب (c) و عليه تناظر الفئة هـو: $\frac{A_2}{m}\frac{A_2}{m}\frac{A_2}{m}c$ أو $\frac{2}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$، يوجد أربعة أنواع من شبكات برا ال تنتمي إ هذه الفئة وهي: النوع البسيط و ا مركز القاعدة و ا مركز ا سم و ا مركز الأوجه.

4- **الفئـة الرباعيـة**: خلية الوحدة بيئـة متـوازي مـستطيلات أحـد وجوهـه مربـع حيـث: $a = b \neq c$ و $\alpha = \gamma = \beta = \frac{\pi}{2}$، ذه الفئة تناظر الفئة ا عينية ا ستقيمة لكن يتحول ا ور الثنائي العمودي على الوجه ا اوي للضلع a و b إ ور رباعي A_4 بالإضافة إ مستويي تناظر قطري مائل بزاوية 45° و اوران تناظريـان ثنائيان عمودين عليهما و مركز انقلاب (c) و عليه تنـاظر الفئـة هـو: $\frac{A_4}{m}\frac{2A_2}{2m}\frac{2A_2}{2m}c$ أو $\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$ (أنظـر للشكل(16.1))، يوجد نوعان من شبكات برا يندرجان ت هذه الفئة ا البسيط و ا مركز ا سم.

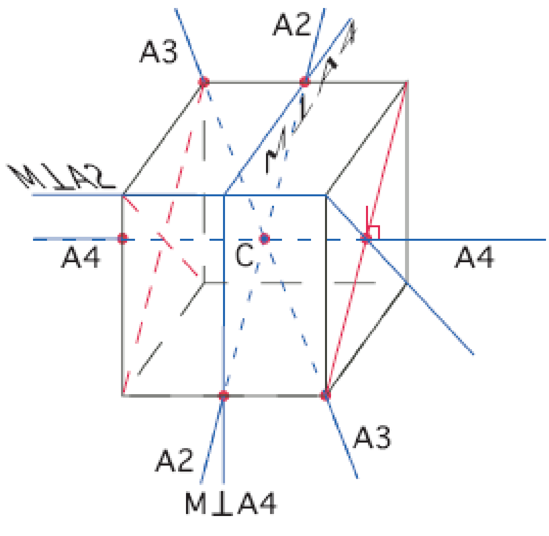
5- **الفئة المكعبة**: خلية الوحدة مكعبة حيث: $a = b = c$ و $\alpha = \gamma = \beta = \frac{\pi}{2}$، ذه الفئة أربعة اور ثلاثيـة- منطبقة على الأقطار ا سيمية- و ثلاثة اور من الرتبة الرابعة A_4 - ر راكز وجوه ا لية الأولية - عمودية على ثلاثة مستويات تناظر بالإضافة إ ستة اور ثنائية – ر نتصفات الأحرف – عمودية على سـتة مـستويات قطرية مائلة بزاوية 45° و إضافة إ مركز انقلاب (c) و عليه تناظر الفئة هو: $\frac{3A_4}{m}4A_3\frac{6A_2}{6m}c$ أو $\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$ (أنظر للشكل(17.1))، وي هذه الفئة ثلاثة أنواع من شبكات برا وهي: البسيطة وا مركزة ا ـسم وا مركـزة الأوجه.

6- الفئة الثلاثية متساوية الأحرف**:** خلية الوحدة يئة متوازي سطوح أحرفـه متـساوية حيـث: $a=b=c$ و $\alpha=\gamma=\beta\neq\frac{\pi}{2}$، ذه الفئة ور ثلاثي- منطبق على أحد اور ا سيمية - و ثلاثـة ـاور مـن الرتبـة الثانية A_2 - ر نتصفات الأحرف- عمودية على ثلاثة مستويات تناظر قطرية مائلة، إضافة إ مركز انقـلاب (c) و عليه تناظر الفئة هو: $A_3\frac{3A_2}{3m}c$ أو $\bar{3}\frac{2}{m}$، وي هذه الفئة نوعا واحدا من شبكات برا وهو: البسيط.

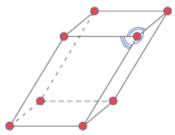
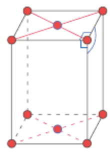
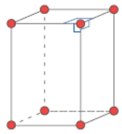
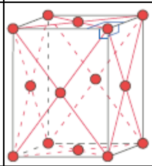
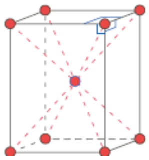
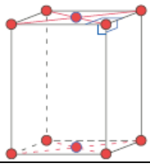
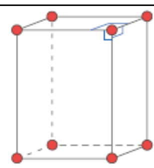
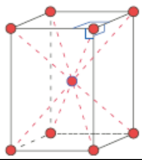
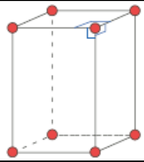
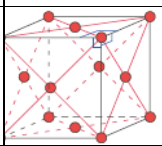
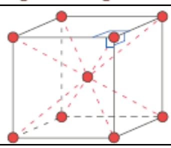
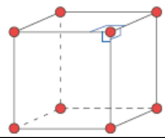
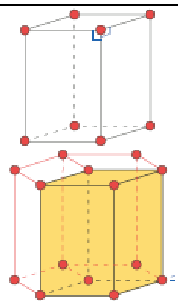
7- الفئة السداسية: خلية الوحدة يئة موشور سداسي حيث: $a=b=c$ و $\alpha=\gamma=\frac{\pi}{2},\beta=120^{o}$، ـذه الفئـة ور تناظر سداسي A_6 - ر ركزي الوجه ا سدس – ومستوي تناظر عمودي عليه، و ستة اور ثنائية – ر نتصفات الأحرف ومراكز الوجوه– عمودية على ستة مستويات ، إضافة إ مركز انقـلاب (c) و عليـه تناظر الفئة هو: $\frac{A_6}{m}\frac{3A_2}{3m}\frac{3A_2}{3m}c$ أو $\frac{6}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$، وي هذه الفئة نوعا واحدا من شبكات برا وهو: البسيط.



الشكل(16.1): عناصر تناظر الفئة الرباعية .



الشكل(17.1): بعض عناصر تناظر الفئة ا كعبة .

ثوابت خلية الوحدة الاصطلاحية	ركزة الأوجه Face centrée	ركزة ا سم Corps centrée	ركزة القاعدة Base centrée	بسيطة Simple	الفئة البلورية
$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq \pi/2$					ثلاثية ا يل Triclinique
$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = \pi/2 \neq \beta$					أحادية ا يل Monocliniqu e
$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$					ا عينية ا ستقيمة Orthorhombi que
$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$					الرباعية Quadratique
$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$					ا كعبة Cubique
$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma$ $\neq \pi/2, < 120^\circ$					ثلاثية متساوية الأحرف Rhomboédriq ue
$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \pi/2, \gamma = 120^\circ$					السداسية Hexagonal

ا دول(1.1): تصنيف شبكات برا .

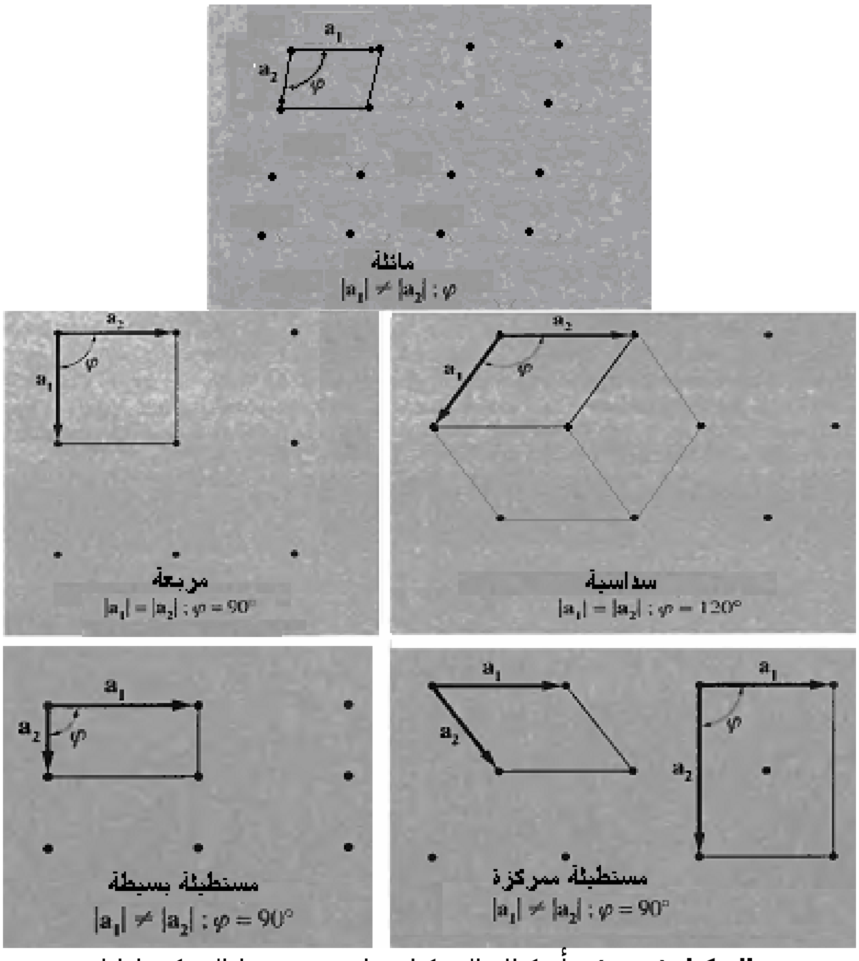
الفئة البلورية	تناظر الفئة البلورية		عناصر التناظر ا ميزة للفئة	عدد أنواع شبكات برا
ثلاثية ا يل Triclinique	$\bar{1}$	c	لا يوجد	1
أحادية ا يل Monoclinique	$\frac{2}{m}$	$\frac{A_2}{m}c$	ور تناظر ثنائي A_2	2
ا عينية ا ستقيمة Orthorhombique	$\frac{2}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	$\frac{A_2}{m}\frac{A_2}{m}\frac{A_2}{m}c$	ثلاثة اور تناظر ثنائية متعامدة	4
الرباعية Quadratique	$\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	$\frac{A_4}{m}\frac{2A_2}{2m}\frac{2A_2}{2m}c$	ور تناظر رباعي	2
ا كعبة **Cubique**	$\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$	$\frac{3A_4}{m}4A_3\frac{6A_2}{6m}c$	أربعة اور ثلاثية تنطبق على أقطار ا كعب	3
ثلاثية متساوية الأحرف Rhomboédrique	$\bar{3}\frac{2}{m}$	$A_3\frac{3A_2}{3m}c$	ور تناظر ثلاثي التكافؤ	1
السداسية Hexagonal	$\frac{6}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	$\frac{A_6}{m}\frac{3A_2}{3m}\frac{3A_2}{3m}c$	ور تناظر سداسي	1

ا دول(2.1): جدل يوضح تناظر الفئات البلورية السبعة.

9-1 تصنيف الشبكات البلورية المستوية :

تكمن أ ية الشبكات ا ستوية فهم ا واص الفيزيائية لسطوح ا واد الصلبة، و لتصنيفها تار من الشبكة البلوريـة خلية وحدة اصطلاحية ويتم التصنيف على أساسها، تكون هذه ا لية بشكل متوازي أضـلاع، مركـزه (c) و أحرفـه هي a ، b صران زاوية φ أي أن $\varphi=(\vec{a},\vec{b})$. كن يل أشكال الشبكات ا ستوية ا مكنة وذلك حـسب أطـوال a ، b والزاوية ا صورة بينهما.

الشكل العام للشبكة ا ستوية متوازي أضلاع وهو ا سمى بالشبكة ا ائلة والـ تتميز بكو ا مستقلة عن الانـسحاب ومستقلة عن الدورانات بزوايا π و 2π حول أي عقدة من عقد الشبكة، مثلا استقلال الشبكة عن الدوران $\frac{2\pi}{4}$ يتطلب أن تكون الشبكة مربعة. و عن الدوران $\frac{2\pi}{3}$ و $\frac{2\pi}{6}$ يتطلب أن تكون الشبكة سداسية وهكذا. يوجد بالإضافة إ الشبكة ا ائلة أربع أنواع من الشبكات ا ستوية هي ا ربعة تناظرها $4mm$,وا ستطيلة تناظرها $2mm$,و ا ستطيلة ا ركزية تناظرها $2mm$, والسداسية تناظرها $6mm$ (أنظر الشكل(16.1)).



الشكل(18.1): أشكال الشبكات ا ستوية عدا الشبكة ا ائلة .

10-1 التعريف ببعض خصائص الشبكات البلورية:

1-10-1 تحديد مواضع و متجهات المستويات البلورية:

ح نستطيع وصف ا الة الفيزيائية للجسم الصلب ا تبلور يلزم ديد مواضع وا اهات ا ستويات البلورية.ذا ـك لأن خواص البلورات ليست موحدة- كث من الأحيان- ميع الا اهات.

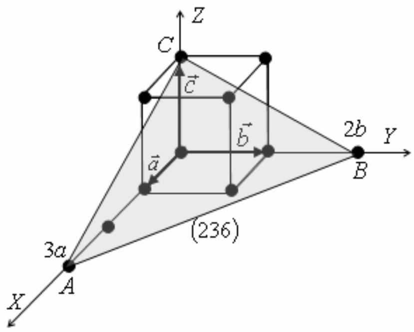
إن موضع وا اه أي مستو بلوري يتحدد بواسطة ثلاث عقد (قواعد) ليست على استقامة واحدة.فإذا وقعت كل عقدة من هذه اعقد على ور بلوري فإن موضع ا ستوي البلوري كن أن يتحدد عرفة إحداثيات العقد السابقة علـى طـول ا اور البلورية مقدرة بوحدات ثوابت الشبكة c, b, a على كل ور من ا اور البلورية.

يتم ديد مواضع ا ستويات البلورية باستخدام قرائن تدعى قرائن ميلر " Miller" طبقا للخطوات التالية:

- **أولاً:** تار لة اور إحداثية (X,Y,Z) تنطبق وتتفق الا اه مع متجهات أضلاع خلية الوحـدة الاصـطلاحية $\vec{c}, \vec{b}, \vec{a}$ يث يقع مبدأ هذه ا اور على إحدى عقد الشبكة البلورية حيث تتقاطع أضلاع ا لية.

- **ثانياً:** أمسك البلورة وضع ثابت و ء الأطوال ال يقطعها ا ستوى من ا اور الأساسية (X,Y,Z) بدلالة ثوابـت الشبكة a,b,c .
- **ثالثا:** خذ مقلوب هذه الأطوال واختز ا إ أعداد صحيحة بشرط ألا يكون بينها أي قاسم مـشترك غـ الواحـد الصحيح (أي أ ا أولية ما بينها) ، الأعداد الصحيحة النا ة حينئذ هي قرائن ميلر للمستوى ا طلوب ديد موضعه، وتكتب على الصورة: (hkl) . وإذا قطع ا ستوى أحد ا اور الناحية السالبة فان الطول ا قطوع يكـون سـالبا وتوضع علامة (-) فوق القرينة ا ناظرة. وإذا كان أحد الأطوال ا قطوعة لا ائياً طوله، أي أن ا ستوى يوازي أحد ا اور فإن قرينة ميلر ا ناظرة تساوي صفرا.

على سبيل ا ثال ، ا ستوى ABC الشكل(19.1) يقطع ا اور (X,Y,Z) بنسب $(3a:2b:1c)$ على الترتيـب. فنحصل على مقلوب الأعداد بالشكل$(1,\frac{1}{2},\frac{1}{3})$ وبتوحيد ا قامات حيث ا قام ا شترك (6) ـد $(\frac{6}{6},\frac{3}{6},\frac{2}{6})$ تز ا حسب القاعدة إ أعداد صحيحة فنحصل على قرائن ميلـر h=2,k=3,l=6 ونكتـب (236). وبـديهي أن كـل ا ستويات ا وازية ذا ا ستوى الشبكة وتقطع ا اور الثلاثة مضاعفات أجزاء ا ستوى الأول يكون ا نفس القرائن.



الشكل(19.1): قرائن ميلر للمستوي ABC.

تسمى موعة ا ستويات ا تكافئة التناظر بالعائلة، ويرمز ا -على سبيل الاختصار- بالرمز $\{hkl\}$. ففي الفئة ا كعبة تضم موعة ا ستويات $\{001\}$ كل أوجه ا كعب$(001),(010),(100),(00\bar{1}),(0\bar{1}0),(\bar{1}00)$ ، ونلاحظ الشكل(20.1) قرائن ميلر لبعض ا ستويات البلورية الفئة ا كعبة .

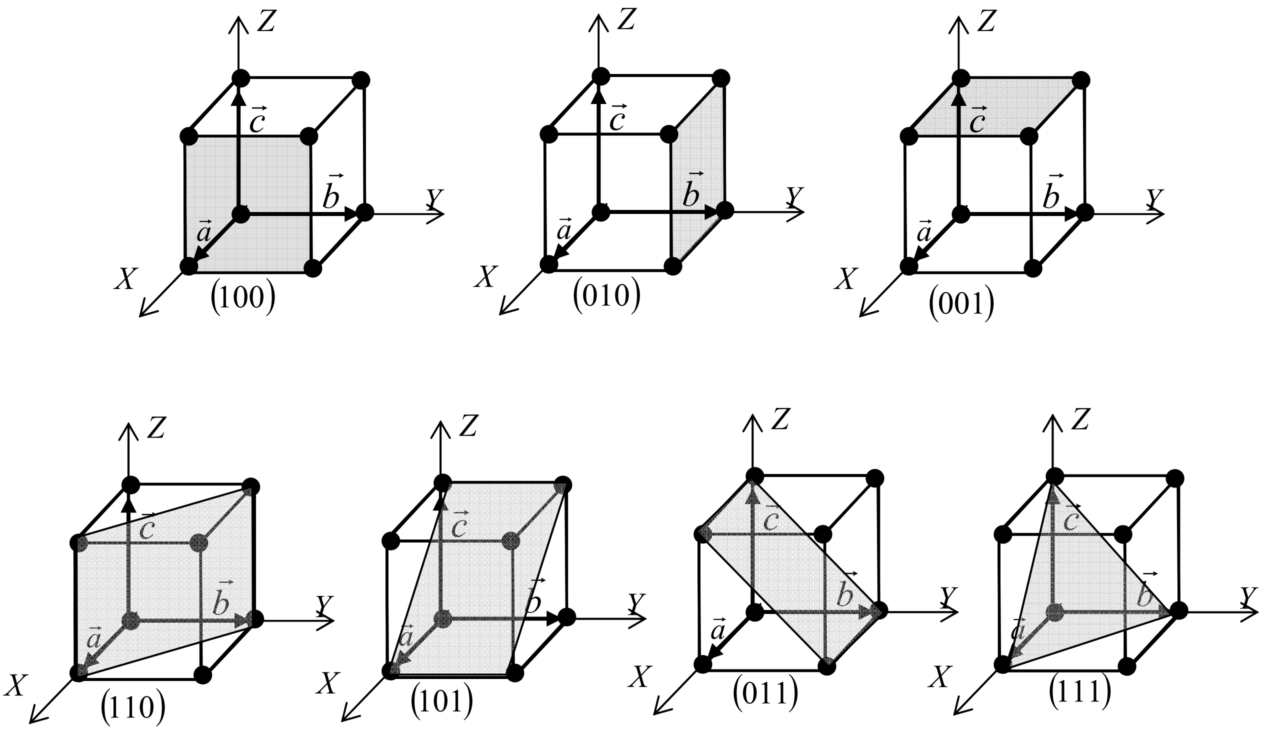
من ناحية أخرى تستخدم قرائن اثله لقرائن ميلر لتحديد الا اهات داخل البلورة و تدعى قرائن فيس، وهـي أيـضا أعداد صحيحة أولية فيما بينها (لا يوجد بينها قاسم مشترك غ الواحد الصحيح) ، وتتناسب مع ا ركبات الأساسية تجه له الا اه ا طلوب، وتكتب بـ قوس مربع على الصورة $[uvw]$. فالا اه ا وجب للمحور(X) هـو $[100]$ ، والا ـاه ا وجب للمحور (Y) هو $[010]$. والا اه ا وجب للمحور (Z) هو $[001]$ (أنظر الـشكل(21.1)): ويرمـز موعـة الا اهات ا تكافئة على الصورة$\langle uvw\rangle$، فمجموعة الا اهات ا تكافئة$\langle 110\rangle$ تضم الا اهات:

$$[110],[\bar{1}10],[1\bar{1}0],[\bar{1}\bar{1}0],[101],[\bar{1}01],[10\bar{1}],[\bar{1}0\bar{1}],[011],[0\bar{1}1],[01\bar{1}],[0\bar{1}\bar{1}]$$

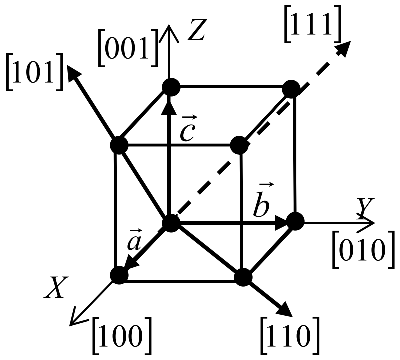
و بلورات الفئة ا كعبة يكون الا اه $[uvw]$ عمودياً على ا ستوى(hkl)عندما يكون $h=u,k=v,l=w$ ، فالا اه

[100] عمودي على ا ستوى (100) ، و الا اه [110] عمودي على ا ستوى (110).

أما مواضع النقط داخل خلية الوحدة فيتم ديدها بدلالة إحداثيات الشبكة، وتؤخذ نقطة الأصل عند ركن خلية الوحدة . ويع عن ا وضع بالإحداثيات(xyz)، فإحداثيات النقطة ال تتوسط جسم خلية الوحدة هي: $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$، وإحداثيات مراكز الأوجه هي : $(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}),(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0),(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})$.



الشكل(20.1): قرائن ميلر لبعض ا ستويات ا همة الفئة ا كعبة

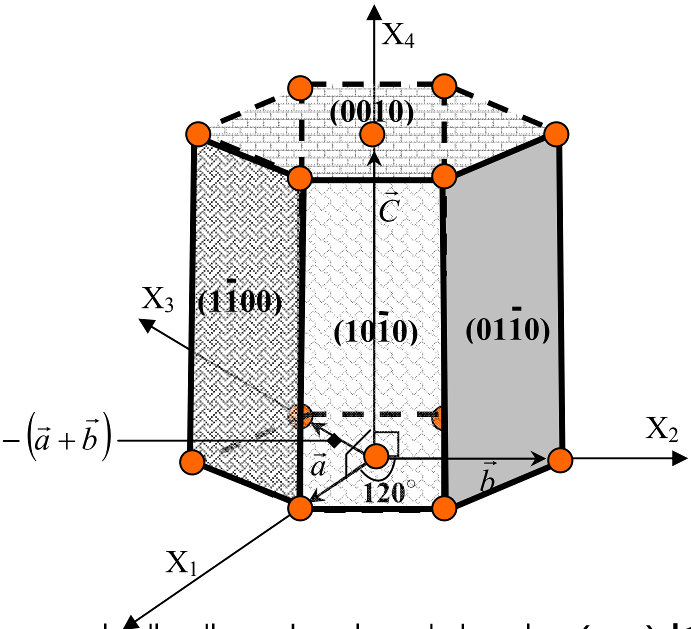


الشكل(21.1): قرائن ميلر لبعض ا تجهات ا همة الفئة ا كعبة.

2-10-1 قرائن ميلر - برافي للفئة السداسية:

توصف الشبكة هذه ا الة بأربعة اور إحداثية هي (X1,X2,X3,X4) حيث ا ـاور X_1,X_2,X_3 تقـع مستوي قاعدة السداسي و تشكل فيما بينها زاوية 120° أما ا ور X_4 فهو عمودي على ا ستوي السابق كمـا هـو موضح الشكل(22.1)، وتعطى القرائن بالشكل $(hkil)$ و تسمى هذه ا الة بقرائن ميلر- بـرا ، وهـي قـق الشرط $(h+k+i=0)$ دوما.

نستخدم ساب قرائن ميلر- برا الأسلوب نفسه استخدم حساب قرائن ميلر، فإذا قطـع مـستو ا ـاور (X1,X2,X3,X4) ا واضع $(2,2,-1,3)$ مقاسة بوحدات ثوابت الشبكة البلورية،فإن ا عاملات هي: (1/2:1/2:-1:1/3) و أصغر مقام مشترك هو: 6 ومنه د $(hkil)=(3,3,\bar{6},2)$.



الشكل(22.1): قرائن ميلر لبعض ا تجهات الفئة السداسية.

3-10-1 المسافة الفاصلة بين المستويات البلورية المتوازية:

تفصل ب ا ستويات ا توازية البلورة مسافات متساوية و تلف باختلاف معاملات ا ستوى ونوع البلورة .

ويلاحظ أن هناك علاقة ب هذه ا سافة الفاصلة ب ا ستويات d_{hkl} وب ثوابت الشبكة و تلف صورة هذه العلاقة باختلاف الفئة البلورية، فإذا أخذنا الفئة ا كعبة مثلاً وكان ثابت الشبكة ا هو a فإن ا سافة الفاصلة ب ا ستويات داخل البلورة ا كعبة ترتبط بقيم القرائن h,k,l وترتبط بثابت الشبكة a بالعلاقة:

$$d_{hkl}=\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \qquad (7\text{-}1)$$

بفرض أننا أخذنا ا ستويات (100) ، (110) ، (111) البلورة ا كعبة.

$$d_{100}=\frac{a}{\sqrt{1+0+0}}=a \qquad (8\text{-}1)$$

أي أن ا سافة الفاصلة ب كل مستوي متوازي ينتميان للعائلة $\{100\}$ هي ثابت الشبيكة a.

$$d_{110}=\frac{a}{\sqrt{1+1+0}}=\frac{a}{\sqrt{2}}=\frac{a}{1.4} \qquad (9\text{-}1)$$

أي أن ا سافة الفاصلة ب كل مستوي متوازي ينتميان للعائلة $\{110\}$ قلت عن ا سافة ب عائلة ا ستويات $\{100\}$.

$$d_{111}=\frac{a}{\sqrt{1+1+1}}=\frac{a}{\sqrt{3}}=\frac{a}{1.7} \qquad (10\text{-}1)$$

أيضا ا سافة الفاصلة ب كل مستوي متوازي ينتميان للعائلة $\{111\}$ قلت عن ا سافة ب عائلة ا ستويات $\{110\}$

ملاحظة: الفصل القادم نعرف العلاقة العامة للمسافة الفاصلة ب ا ستويات البلورية ا توازية d_{hkl}.

4-10-1 كثافة المستويات البلورية:

هي أك نسبه مساحية كن أن تشغلها الذرات ا وجودة مستو (hkl) معـ من خليـة الوحـدة ونرمـز ـا بالرمز σ_{hkl}. وتعطى بالعلاقة:

$$\sigma_{hkl}=\sum_i \frac{n^i_{hkl}s^i_a}{s_{hkl}} \qquad (11\text{-}1)$$

حيث: n^i_{hkl}: عدد ذرات النوع i ا ستوي (hkl) من ا لية, s^i_a: مساحة مسقط الذرة i, S_{hkl}: مساحة ا ستوي (hkl) ا لية.

5-10-1 معادلة مستوي بلوري:

تعطى معادلة ا ستوي عموما بالشكل: $Ax+By+Cz=D$ حيث D,C,B,A ثوابت.

لدينا النقاط $p_1\left(\frac{a_1}{h},0,0\right)$ و $p_2\left(0,\frac{a_2}{k},0\right)$ و $p_3\left(0,0,\frac{a_3}{l}\right)$ تنتمي للمستوي (hkl) (أنظر الشكل(23.1)) ومنه فهي قق معادلته وعليه نعوض معادلة ا ستوي العامة لإ اد معادلة ا ستوي (hkl) ونكتب:

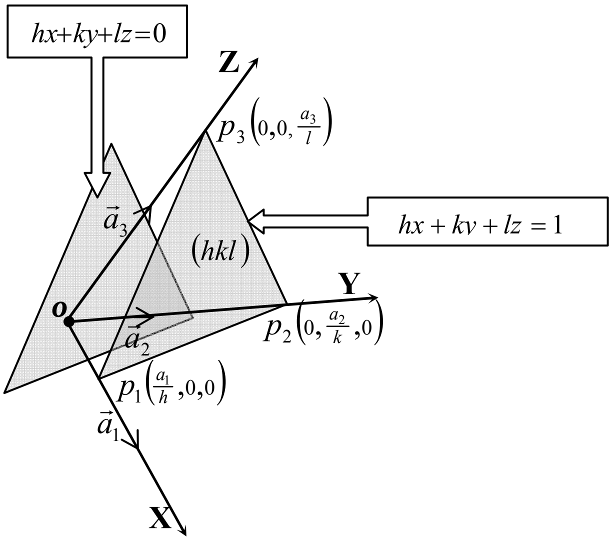
$$\begin{Bmatrix} A\times\frac{a_1}{h}=D \\ B\times\frac{a_2}{k}=D \\ C\times\frac{a_3}{l}=D \end{Bmatrix} \Rightarrow \begin{Bmatrix} A=\frac{h}{a_1}D \\ B=\frac{k}{a_2}D \\ C=\frac{l}{a_3}D \end{Bmatrix} \Rightarrow \frac{h}{a_1}Dx+\frac{k}{a_2}Dy+\frac{l}{a_3}Dz=D \Rightarrow$$

$$\frac{h}{a_1}x+\frac{k}{a_2}y+\frac{l}{a_3}z=1 \qquad (12\text{-}1)$$

بفرض أن الإحداثيات z,y,x مقاسة بالثوابت a_3,a_2,a_1 على الترتيب فإن ا عادلة (12-1) تكتب من الشكل:

$$hx+ky+lz=1 \qquad (13\text{-}1)$$

ا عادلة(13-1) هي معادلة ا ستوي (hkl).



الشكل(23.1): ثيل ا ستوي ا توازي ا ستوي ذو $hx+ky+lz=1$ ا ستوي ذو $hx+ky+lz=0$.

ا الة العامة تكتب معادلة ا ستويات ا توازية ذات القرائن (hkl) بالشكل:

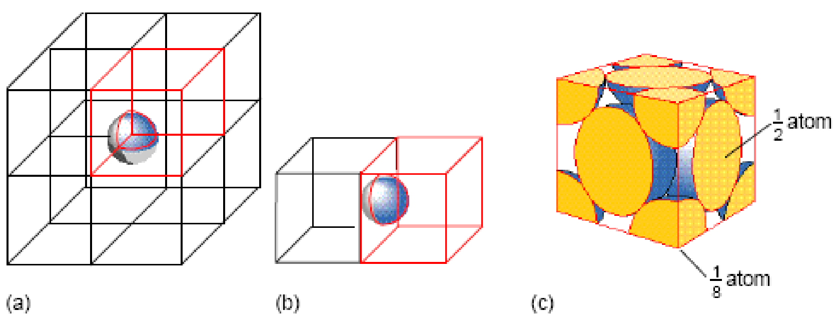
$$hx+ky+lz=m \qquad (14\text{-}1)$$

m: عدد صحيح يع عن رتبة ا ستوي $(m=0,\pm1,\pm2.....)$

فمثلا $(m=0)$ من أجل ا ستوي الذي ر با بدأ و $(m=\pm1)$ ا ستوي الذي يليه مباشرة وهكذا(أنظر الشكل(23.1)).

6-10-1 عدد عقد خلية الوحدة n_a:

هو موع أجزاء العقد(الذرات) ا شاركة ا لية فقط. مثلا: الشكل(24.1) هناك انية عقد رأسية كل عقـدة تشارك بثمنها وعليه عددها هو: $\left(1=8\times\frac{1}{8}\right)$ عقدة واحدة، و ستته عقد مراكز الأوجه تشارك كل منها بالنصف وعليه عددها هو: $\left(3=6\times\frac{1}{2}\right)$ ثلاث عقد و منه العدد الكلي للعقد خلية الوحدة هذه هـو: $\left(4=3+1=3\times\frac{1}{2}+8\times\frac{1}{8}\right)$ أربعة عقد.



الشكل(24.1): مشاركة العقد خلية الوحدة.

7-10-1 عدد الجوار الأول(عدد التناسق) Z :

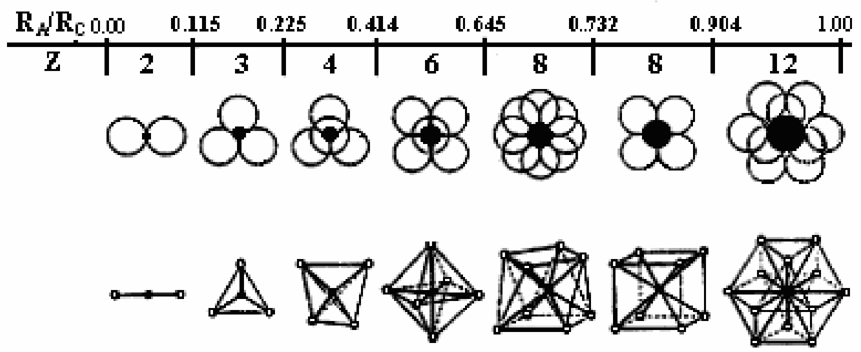
هو عدد الذرات ا يطة مباشرة بكل ذرة الشبكة البلورية ويعرف أيضا بعدد أقرب ا ان (ا وار الأقرب) لـذرة مـا، حيث تار ذرة من الشبكة سب عدد أقرب الذرات ا يطة ا. أنظر الشكل(25.1). ونسمي البعد ب عقدة أو ذرة متجاورة جوارا أقربا بعد ا وار الأقرب R_Z . الذرات ا يطة بذرات ا وار الأول والأقرب للذرة ا ختارة تدعى ذرات ا وار الثا تليها ذرات ا وار الثالث وهكذا دواليك.

تنبيه: أغلب الأحيان لا تكفي خلية وحدة واحدة عرفة عدد عقد ا وار الأقرب لدى ب رسم عدة خلايا مترابطة.

عدد التناسق هو:6 **عدد التناسق هو:**4

الشكل(25.1): عدد التناسق(ا وار الأول) للشبكتا ا ستويتا الرباعية والسداسية.

يب الشكل(26.1) تزايدا عدد التناسق ا مكن الشبكات الفضائية والذي يضمن استقرار البنية البلورية تعددات الوجوه الناشئة حسب تزايد النسبة القطرية (أيون سالب/ أيون موجب)أو (كاتيون/أنيون) R_A/R_C.



الشكل(26.1): ال استقرار متعددات الوجوه بعدد تناسقي مع حسب النسبة R_A/R_C.

8-10-1 عامل التعبئة (الرص) F_R :

يعرف عامل التعبئة بأنه أكا نسبه من ا جم الذي كـن أن تـشغله الـذرات ا وجودة خلية الوحدة.ويعطى بالعلاقة:

$$F_R = \sum_i \frac{n_a^i v_a^i}{V} \qquad (15\text{-}1)$$

حيث: ا مع يتم أنواع الذرات ا وجودة ا لية الاصطلاحية.

n_a^i:عدد الذرات من النوع i خلية الوحدة. v_a^i:حجم ذرة من النوع i. V: حجم خلية الوحدة.

ملاحظة: كن إعطاء عبارة الكتلة ا جمية ρ انطلاقا من العلاقة(15-1)بتغي حجم الذرة v_i بكتلتها m_i و صل علـى العلاقة التالية:

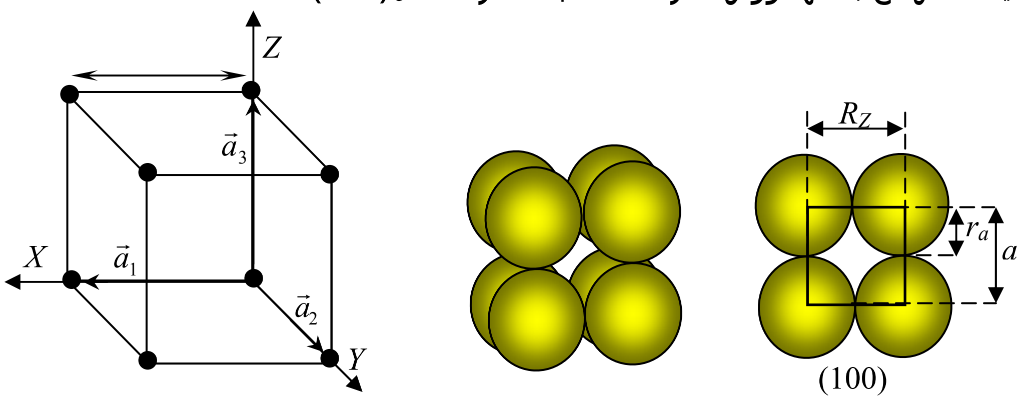
$$\rho = \sum_i \frac{n_a^i m_a^i}{V} \qquad (16\text{-}1)$$

11-1 دراسة شبكات الفئة المكعبة:

ذه الفئة خلية وحدة اصطلاحية مكعبة و وي ثلاثة أنواع من الشبكات: الشبكة ا كعبة البسيطة وا كعبة ا مركزة وا كعبة ا مركزة الأوجه.

1. الشبكة المكعبة البسيطة(CS) :

هذه الشبكة تنطبق خلية الوحدة الاصطلاحية على الوحدة الأولية، و ا عبارة عن مكعب به عقد (قواعد) عند زواياه الركنية الثمانية تتماس مع بعضها ووفق أحرف ا كعب. أنظر للشكل(27.1).



الشكل(27.1): خلية الوحدة الاصطلاحية للشبكة ا كعبة البسيطة.

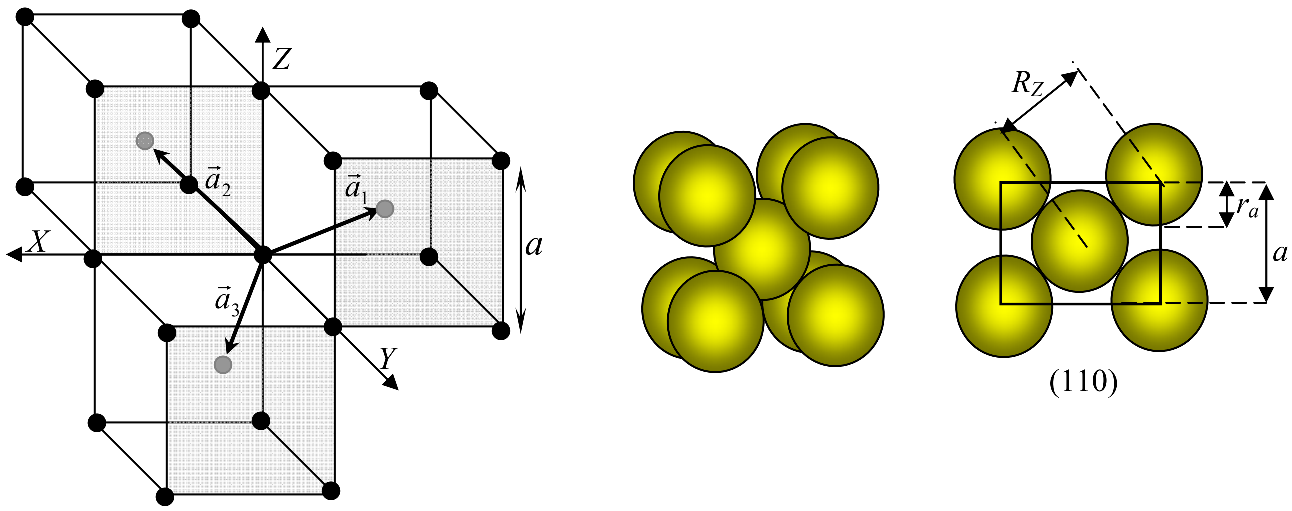
- خصائص الشبكة المكعبة البسيطة:

1. أشعة الانسحاب الأولية: $\vec{a}_1 = a\vec{i}, \vec{a}_2 = a\vec{j}, \vec{a}_1 = a\vec{k}$
2. شعاع الانسحاب الأساسي: $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 = n_1 a\vec{i} + n_2 a\vec{j} + n_3 a\vec{k}$
3. حجم خلية الوحدة الأولية: $V_e = \vec{a}_1.(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = a\vec{i}.(a\vec{j} \times a\vec{k}) = a^3$ و هو نفسه حجم خلية الوحدة الاصطلاحية.
4. عدد عقد لية الوحدة الاصطلاحية: $n_a = \frac{1}{8} \times 8 = 1$ إحداثيا ا $(0,0,0)$.
5. عدد ا وار الأول: $z = 6$
6. بعد ا وار الأول: $R_z = 2r_a = a$ حيث: r_a:نصف قطر الذرة.
7. معامل التعبئة: $F_R^{CS} = \frac{n_a v_a}{V} = \frac{1 \times \frac{4}{3}\pi r_a^3}{a^3} = \frac{\frac{4}{3}\pi\left(\frac{a}{2}\right)^3}{a^3} = \frac{\pi}{6} = 0.52$

8. ا ستويات الأكثر كثافة هي ا ستويات $\{100\}$: $\sigma_{hkl}=\frac{n_{hkl}s_a}{s_{hkl}}=\frac{\left(4\times\frac{1}{4}\right)\pi r_a^2}{a^2}=\frac{\pi\left(\frac{a}{2}\right)^2}{a^2}=\frac{\pi}{4}=0.78$

2. الشبكة المكعبة المركزة (CC):

خلية الوحدة الاصطلاحية هذه الشبكة عبارة عن مكعب به انية عقد أو ذرات عند زواياه الركنية وعقـدة أو ذرة مركزية تتماس مع بعضها وفق القطر ا سمي للمكعب. أنظر الشكل(27.1).



الشكل(28.1): خلية الوحدة الاصطلاحية للشبكة ا كعبة ا ركزة.

- **خصائص الشبكة المكعبة المركزة:**

1. أشعة الانسحاب الأولية: $\vec{a}_1=\frac{a}{2}\left(-\vec{i}+\vec{j}+\vec{k}\right)$، $\vec{a}_2=\frac{a}{2}\left(\vec{i}-\vec{j}+\vec{k}\right)$، $\vec{a}_3=\frac{a}{2}\left(\vec{i}+\vec{j}-\vec{k}\right)$
2. خلية الوحدة الأولية : ا شكل ثلاثيـة متـساوية الأحـرف ـددها أشـعة الانـسحاب الأوليـة حيـث:

$$a_1=a_2=a_3=\tfrac{\sqrt{3}}{2}a,\ \ \gamma=\beta=\alpha=\arccos\left(\frac{\vec{a}_1.\vec{a}_2}{\|\vec{a}_1\|.\|\vec{a}_{21}\|}\right)=\arccos\left(-\tfrac{1}{3}\right)=109.47^{\circ}$$

3. شعاع الانسحاب الأساسي:

$$\vec{R}=n_1\vec{a}_1+n_2\vec{a}_2+n_3\vec{a}_3=\frac{a}{2}\left(\left(-n_1+n_2+n_3\right)\vec{i}+\left(n-n_2+n_3\right)\vec{j}+\left(n_1+n_2-n_3\right)\vec{k}\right)$$

4. حجم خلية الوحدة الأولية: $V_e=\vec{a}_1.(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)=a^3/2$ بينما حجم خلية الوحدة الاصطلاحية هو a^3.
5. عدد عقد لية الوحدة الاصطلاحية: $n_a=\frac{1}{8}\times 8+1=2$ إحداثيا ا $(0,0,0)$ و $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$.
6. عدد ا وار الأول: $z=8$

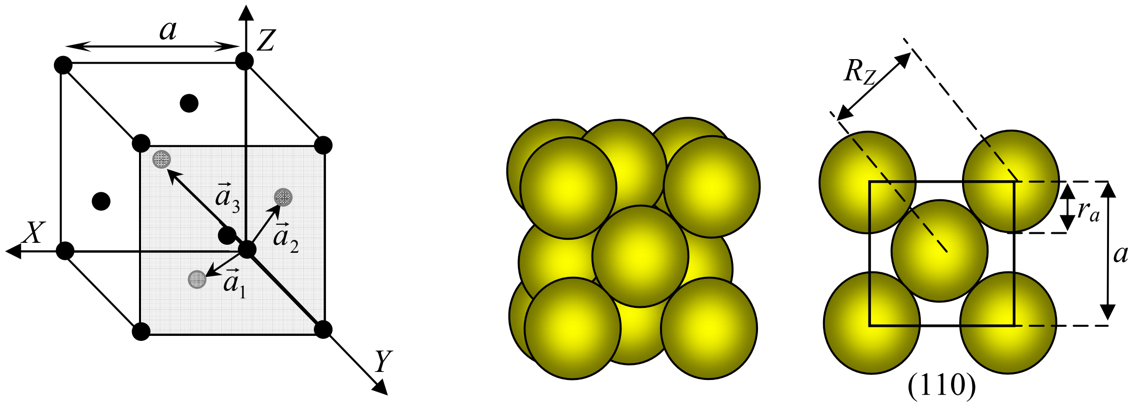
7. بعد الجوار الأول: $R_z = 2r_a = \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2} = \frac{\sqrt{3}}{2}a$ حيث: r_a: نصف قطر الذرة.

8. معامل التعبئة: $F_R^{CC} = \frac{n_a v_a}{V} = \frac{2\times\frac{4}{3}\pi r_a^3}{a^3} = \frac{\frac{8}{3}\pi\left(\frac{\sqrt{3}}{4}a\right)^3}{a^3} = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} = 0.68$

9. المستويات الأكثر كثافة هي المستويات $\{110\}$: $\sigma_{hkl} = \frac{n_{hkl}s_a}{s_{hkl}} = \frac{\left(4\times\frac{1}{4}+1\right)\pi r_a^2}{\sqrt{2}a^2} = \frac{2\pi\left(\frac{\sqrt{3}}{4}a\right)^2}{\sqrt{2}a^2} = \frac{3\pi}{8\sqrt{2}} = 0.83$

3. الشبكة المكعبة الممركزة الأوجه (CFC):

خلية الوحدة الاصطلاحية لهذه الشبكة عبارة عن مكعب به ثمانية عقد أو ذرات عند زواياه الركنية و ستة عقد أو ذرات في مراكز الأوجه تتماس مع بعضها وفق أقطار أوجه المكعب. أنظر الشكل(29.1).



الشكل(29.1): خلية الوحدة الاصطلاحية للشبكة المكعبة الممركزة الأوجه.

- خصائص الشبكة المكعبة الممركزة الأوجه:

1. أشعة الانسحاب الأولية: $\vec{a}_1 = \frac{a}{2}\left(\vec{j}+\vec{k}\right)$، $\vec{a}_2 = \frac{a}{2}\left(\vec{i}+\vec{k}\right)$، $\vec{a}_3 = \frac{a}{2}\left(\vec{i}+\vec{j}\right)$

2. خلية الوحدة الأولية : لها شكل ثلاثية متساوية الأحرف تحددها أشعة الانسحاب الأولية حيث:

$$a_1 = a_2 = a_3 = \frac{\sqrt{2}}{2}a\,,\quad \gamma = \beta = \alpha = \arccos\left(\frac{\vec{a}_1.\vec{a}_2}{\|\vec{a}_1\|.\|\vec{a}_{21}\|}\right) = \arccos\left(\tfrac{1}{2}\right) = 60^o$$

3. شعاع الانسحاب الأساسي:

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 = \frac{a}{2}\left((n_2+n_3)\vec{i} + (n_1+n_3)\vec{j} + (n_1+n_2)\vec{k}\right)$$

4. حجم خلية الوحدة الأولية: $V_e = \vec{a}_1.(\vec{a}_2\times\vec{a}_3) = a^3/4$ بينما حجم خلية الوحدة الاصطلاحية هو a^3.

5. عدد عقد خلية الوحدة الاصطلاحية: $n_a = \frac{1}{8}\times 8 + \frac{1}{2}\times 6 = 4$ إحداثياتها $(0,0,0)$، $\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$، $\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right)$،

. $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$

6. عدد ا وار الأول: $z=12$

7. بعد ا وار الأول: $\frac{\sqrt{2}}{2}a = \sqrt{\left(\frac{a}{2}\right)^2+\left(\frac{a}{2}\right)^2} = R_z = 2r_a$ حيث: r_a: نصف قطر الذرة.

8. معامل التعبئة: $F_R^{CFC} = \frac{n_a v_a}{V} = \frac{4\times\frac{4}{3}\pi r_a^{\ 3}}{a^3} = \frac{\frac{16}{3}\pi\left(\frac{\sqrt{3}}{4}a\right)^3}{a^3} = \frac{\pi\sqrt{2}}{6} = 0.74$

9. المستويات الأكثر كثافة هي المستويات $\{111\}$:

$$\sigma_{hkl} = \frac{n_{hkl}s_a}{s_{hkl}} = \frac{\left(4\times\frac{1}{4}+1\right)\pi r_a^2}{\frac{\sqrt{3}a^2}{2}} = \frac{4\pi\left(\frac{\sqrt{2}}{4}a\right)^2}{\sqrt{3}a^2} = \frac{\pi}{2\sqrt{3}} = 0.9$$

ا اصية	(CS)	(CC)	(CFC)
*حجم خلية الوحدة(a:طول الضلع) .	a^3	a^3	a^3
*عدد نقاط الشبكة لكل خلية وحدة .	1	2	4
*عدد نقط الشبكة لكل وحدة حجم .	$1/a^3$	$2/a^3$	$4/a^3$
*عدد ا وار الأول.	6	8	12
* بعد ا وار الأول.	a	$a\sqrt{3}/2$	$a\sqrt{2}/2$
*عدد ا وار الثا .	12	6	6
* بعد ا وار الثا .	$a\sqrt{2}$	a	a
* ا ستويات الأكثر كثافة.	$\{100\}$	$\{110\}$	$\{111\}$

ا دول(3.1): جدول يبـ بعض خصائص شبكات الفئة ا كعبة.

يبـ ا دول(4.1) بعض العناصر ا تتبلور شبكات الفئة ا كعبة

(CS)		(CC)		(CFC)	
العنصر	ثابت الشبكة $a(\mathring{A})$	العنصر	ثابت الشبكة $a(\mathring{A})$	العنصر	ثابت الشبكة $a(\mathring{A})$
هناك عددقليل جدا من العناصر الـ تتبلور شكل شبكة مكعبة بسيطة، فمن العناصر الكيميائية الـ الـ تتبلور الظروف الطبيعية هذه الـشبكة البولونيوم *Po* الطور(α)		*Ar*	5.26	*Mo*	3.15
		Al	4.5	*Fe*	2.87
		Ca	5.58	*Ba*	5.2
		Ac	5.30	*Ta*	3.31
		Pb	4.95	*V*	3.2
		Pt	3.92	*W*	3.16

ا دول(4.1): بعض العناصر الـ تتبلور شبكات الفئة الـ كعبة.

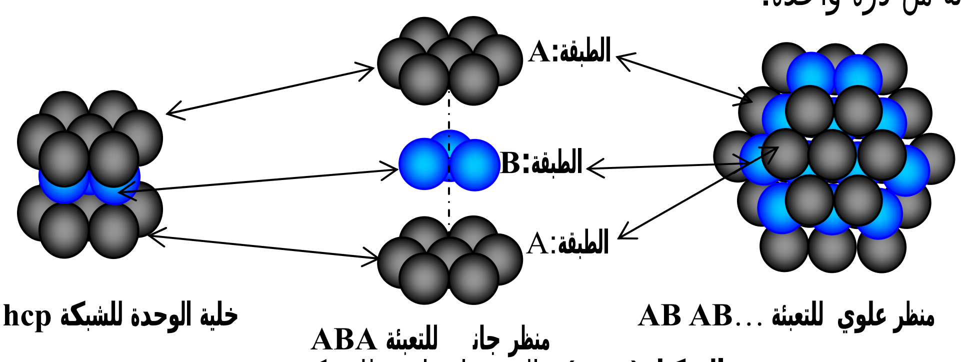
12-1 التعبئة المتراصة:

إذا اعـ نا الذرات كرات صلبة متماثلة ومتمركزة حول نقطة الشبكة،فإنه توجد طريقتان لتنضيدها يث يكـون حجم الفراغات الـ صورة بينها أقل ما كن . و كلتا الطريقة نبدأ برص الطبقة الأو A يث تلامس كل ذرة (كرة) ست ذرات أخرى يط ا، توضع الطبقة الثانية B فوق الأو بنفس الكيفية، بشرط أن تلامس أي ذرة فيها ثـلاث ذرات الطبقة الأو ، أي تكون كل ذرة الطبقة B فوق أحد الفجوات الطبقة A.

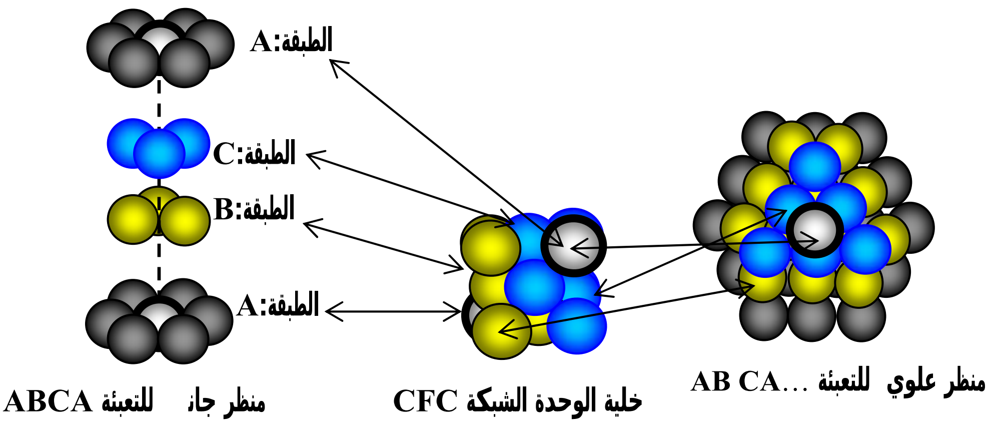
والآن، لإضافة الطبقة الثالثة د أن هناك احتما .

أولاً :توضع ذرات الطبقة الثالثة C فوق ذرات الطبقة الثانية B وفق شاقول ذرات الطبقة A (أي أن مواضع ذرات الطبقة C اثل مواضع ذرات الطبقة A) الشكل(30.1)، فيكون الترتيب الطبقي للذرات على الـ يئة ...AB AB و هذا يعطي تركيب الشبكة السداسية الـ تراصة(hcp) بعدد تناسق 12 و بقاعدة مكونة من ذرة واحدة.

ثانيا: توضع ذرات الطبقة الثالثة C فوق ذرات الطبقة الثانية B وفق شاقول الفجوات البينية لذرات الطبقة A الظاهرة للناظر من الأعلى توضع الطبقة الرابعة D وفق شاقول ذرات الطبقة A الشكل(31.1)، فيكون الترتيب الطبقي للذرات على الـ يئة ...ABC ABC ، وهذا ما يعطي إ التركيب الـ كعب متمركز الأوجه (CFC) وعليه فإن هذا الأخ متراص بعدد تناسق 12 وبقاعدة مكونة من ذرة واحدة.



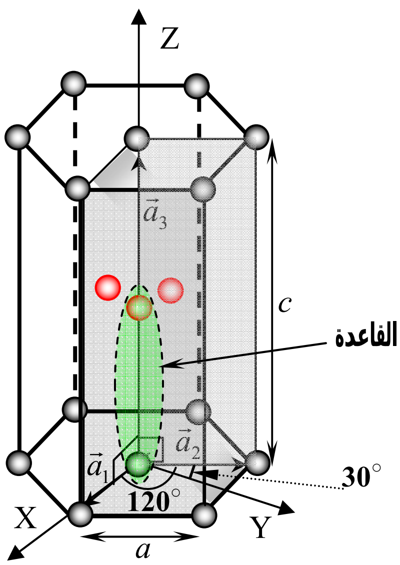
الشكل(30.1): التعبئة الـ تراصة للشبكة hcp



الشكل(31.1): التعبئة ا تراصة للشبكة CFC

13-1 الشبكة السداسية المتراصة (hpc):

خلية الوحدة الاصطلاحية هذه الشبكة عبارة عن موشور سداسي له ستة أوجه مستطيلة و قاعـدة وسـطح بشكل مضلع سداسي منتظم، الشبكة السداسية ا تراصة ليست شبكة برافية لكن يمكن اعتبارها شبكة سداسـية بـسيطة بقاعدة مكونة من ذرتين إحـداثياتهما $(0,0,0)$ و $(\frac{2}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{2})$ الشكل(32.1). تحوي خلية الوحدة الاصطلاحية على ذرات عنـد زوايا الموشور الاثني عشر و ذرتين مركزا كل من القاعدة والسطح وثلاثة ذرات داخله بالإحداثيات التالية: $(\frac{2}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{2})$، $(\frac{2}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{2})$، $(\frac{2}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{2})$.



الشكل(32.1): خلية الوحدة الاصطلاحية للشبكة السداسية ا تراصة.

خصائص الشبكة السداسية المتراصة (hcp) :

1. أشعة الانسحاب الأولية: $\vec{a}_1 = a\,\vec{i}\,, \vec{a}_2 = \frac{\sqrt{3}}{2} a\,\vec{j} - \frac{1}{2} a\,\vec{i}\,, \vec{a}_1 = c\,\vec{k}$
2. خلية الوحدة الأولية: ا شـكل شـبكة سداسـية بـسيطة ـددها أشـعة الانـسحاب الأوليـة حيـث: $a_1 = a_2 = a,\;\; a_3 = c,\;\; \beta = \alpha = 90^o, \gamma = 120^o$
3. شعاع الانسحاب الأساسي: $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 = n_1 \frac{a}{2}(2n_1 - n_2)\vec{i} + \frac{\sqrt{3}}{2} n_2 a\,\vec{j} + n_3 c\,\vec{k}$
4. النسبة c/a : كن ال هان أن: $\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1.63$
5. حجم خلية الوحدة الأولية: $V_e = \vec{a}_1.(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c = \sqrt{2}\, a^3$ بينما حجم خلية الوحـدة الاصـطلاحية هو: $\frac{3\sqrt{3}}{2} a^2 c = 3\sqrt{2}\, a^3$.
6. عدد عقد لية الوحدة الاصطلاحية: $n_a = \frac{1}{6} \times 12 + \frac{1}{2} \times 2 + 3 = 6$.بينما ا لية الأولية هو:2
7. عدد ا وار الأول: $z = 12$
8. بعد ا وار الأول: $R_z = 2r_a = a$ حيث: r_a :نصف قطر الذرة.
9. معامل التعبئة: $F_R^{hcp} = \frac{n_a v_a}{V} = \frac{6 \times \frac{4}{3}\pi r_a^{\,3}}{3\sqrt{2}\; a^3} = \frac{\pi\sqrt{2}}{6} = 0.74$

يبـ ا دول(5.1) الشكل بعض العناصر ا تتبلور الشبكة السداسية ا تراصة

البنية: hcp					
العنصر	**ثابت الشبكة** $a(\overset{o}{A})$	**ثابت الشبكة** $c(\overset{o}{A})$	**العنصر**	**ثابت الشبكة** $a(\overset{o}{A})$	**ثابت الشبكة** $c(\overset{o}{A})$
Be	2.29	3.58	*La*	3.75	6.07
Cd	2.98	5.62	*Mg*	3.21	5.21
Er	3.56	5.59	*Sc*	3.31	5.27
Gd	3.64	5.78	*Y*	3.65	5.73
He	3.57	5.83	*Tb*	3.60	5.69
Ho	3.58	5.62	*Zn*	2.66	4.95

ا دول(5.1): بعض العناصر ا تتبلور الشبكة السداسية ا تراصة.

14-1 خلية ويغنر- زايتس(wigner - seitz):

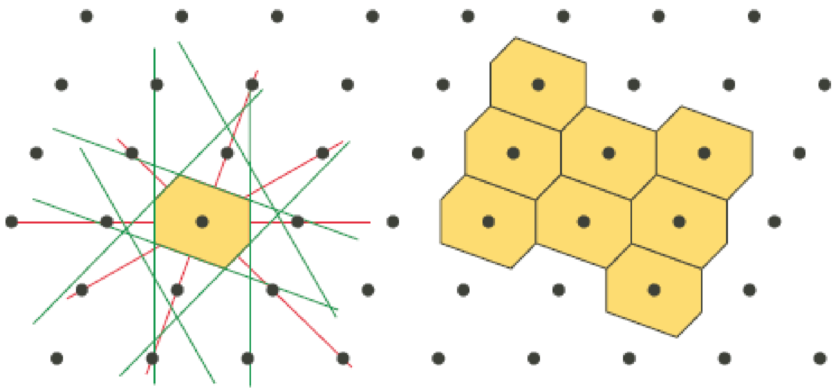
وهي خلية بشكل متعدد وجوه (حالة شبكة فضائية) أو مضلع (حالة الشبكة ا ستوية) حجمها يساوي إ حجم خلية الوحدة الأساسية أي أ ا وي عقدة (قاعدة) واحدة فقط، و افظ على التناظر الانـسحا و النقطـي للشبكة البلورية ويتم ديدها وفقا ا يلي:

1. تار عقدة ما من عقد الشبكة البلورية نصل بـ هذه العقدة و يع عقد الشبكة البلورية ا اورة ا بقطع

مستقيمة(أنظر للشكل(33.1)).

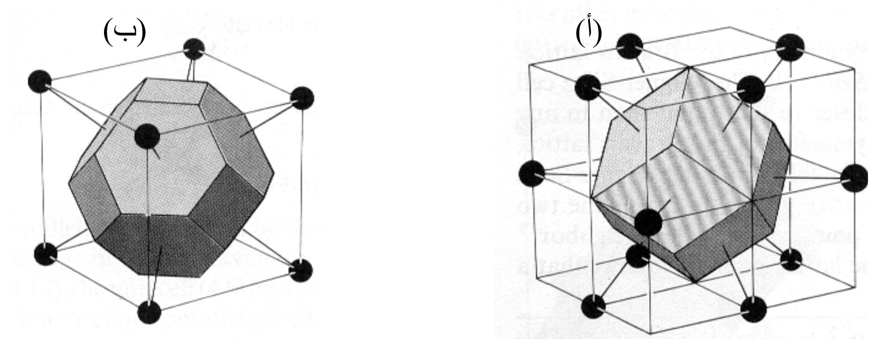
2. نرسم من منتصفات هذه ا طوط مستويات(حالة شبكة فضائية) أو مستقيمات(حالة الشبكة ا ستوية) عمودية عليها .

3. يكون أصغر حجم صره هذه ا ستويات ا نصفة(حالة شبكة فضائية) أو أصغر مضلع صره ا ستقيمات ا نصفة (حالة الشبكة ا ستوية) هو خلية ويغنر - زايتس.



الشكل(33.1): خلية ويغنر - زايتس لشبكة مستوية مائلة.

يظهر الشكل(34.1) خلية ويغنر - زايتس للشبكة ا كعبة ا مركزة الأوجه *CFC* وهي عبارة عن شكل معـ ي اثـ عشري أي له اثنا عشرة سطحا بشكل مع ينتج من اثنا عشرة مستويا منصفا لاثنا عشرة قطعة مستقيمة تصل الـ ذرة ا ركزية بذرات ا ور الأقرب الاثنا عشر وحجمها يساوي حجم خلية الوحدة الأولية لـ *CFC*. و خليـ ة ويغنـ ر-زايتس للشبكة ا كعبة ا مركزة *CC* و هي عبارة عن ا وجوه مشذب(مقطوع) له انية أوجه سداسية منتظمة تنتج من انية مستويات منصفة للقطع ا ستقيمة الرابطة ب الذرة ا ركزية وذرات ا وار الأول الثمانية و ستة أوجه مربعـ ة تنتج من ستة مستويات منصفة للقطع ا ستقيمة الرابطة ب الذرة ا ركزية وذرات ا وار الثا الستة وحجمها يساوي حجم خلية الوحدة الأولية لـ *CC*.

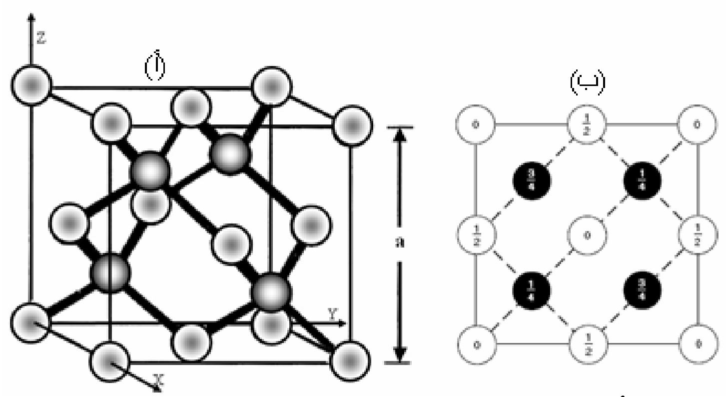


الشكل(34.1): خلية ويغنر - زايتس للشبكة ا كعبة ا مركزة الأوجه *CFC* (أ) و ا مركزة *CC* (ب)

14-1 بعض البنى البلورية المشهورة:

1-14-1 بنية الماس:

ا اس هو كربون متبلور تنتمي بلورته إ الفئة ا كعبة متمركزة الأوجه بقاعدة مرافقة لكل نقطة الشبكة ا كعبة متمركزة الأوجه، تتكون هذه القاعدة من ذر كربون إحداثيا ما هي: $(0,0,0)$، $\left(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4}\right)$. يبدو شكل خلية الوحدة الاصطلاحية مكعبا، تشكل ذرات الكربون رؤوسه ومراكز وجوهه قا ة إياه إ انية مكعبات صغ ة حيث تل أربع ذرات كربون أخرى مراكز أربعة منها و هذه ا الة اط كل ذرة كربون بأربع ذرات اورة $(z=4)$ حيث بعد ا وار الأقرب هو $R_z = 2r_c = \frac{\sqrt{3}}{4}a$ (انظر الشكل لبنية ا اس). و وي خلية الوحدة الاصطلاحية ا ذرات حقيقية إحداثيا ا $(0,0,0)$، $\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$، $\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right)$، $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$، $\left(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4}\right)$، $\left(\frac{1}{4},\frac{3}{4},\frac{3}{4}\right)$، $\left(\frac{3}{4},\frac{1}{4},\frac{3}{4}\right)$، $\left(\frac{3}{4},\frac{3}{4},\frac{1}{4}\right)$.



الشكل(35.1): (أ)خلية الوحدة الاصطلاحية للماس (ب) مسقطها وفق ا ور Z .

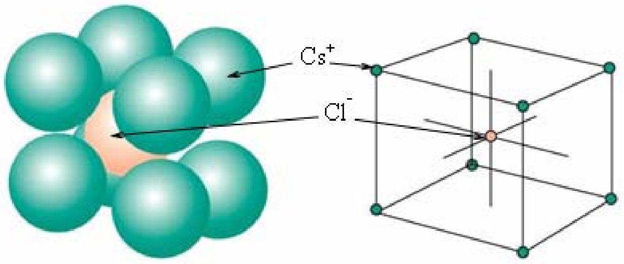
ويعت التركيب ا اسي فارغاً نسبياً ذلك أن معامل التعبئة يقدر بنسبة 34 % أي $(F=0.34)$ و كـ ن اعتبـ ار التركيب ا اسي مكوناً من شبكت فرعيت من نوع ا كعب متمركز الأوجه، تداخلت هاتان الشبكتان الفرعيتـ ان وفق القطر ا سيمي للمكعب بإزاحة مقدارها ربع قطر ا كعب.

ثل الشكل(35.1) مسقط الذرات على ا ستوي (X,Y) وفق ا ور Z حيث تب الأرقام إحداثيات الذرات وفـ ق ا ور Z.

2-14-1 بنية كلوريد السيزيوم CsCl:

لبلورة كلوريد السيزيوم شبكة مكعبة بسيطة بقاعدة مرافقة لكل نقطة شبكة, تتكون هذه القاعدة من أيون السيزيوم Cs^+ إحداثياته $(0,0,0)$، وأيون الكلور Cl^- إحداثياته $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$. و وي خلية الوحدة الاصطلاحية جزيئا واحدا CsCl،

يط بكل أيون Cs^+ أو Cl^- ا أيونات اورة من النوع الآخر$(z=8)$ حيث بعد ا وار الأول هو $R_z = r_{Cl^-} + r_{Cs^+} = \frac{\sqrt{3}}{2}a$. كن اعتبار الشبكة البلورية لكلوريد السيزيوم مكونة من شبكة فرعية من نوع ا كعب البسيط لكل من أيونات السيزيوم وأيونات الكلور، أز ت هاتان الشبيكتان بالنسبة لبعضهما البعض على طول قطر ا كعب قدار نصف ذلك القطر.



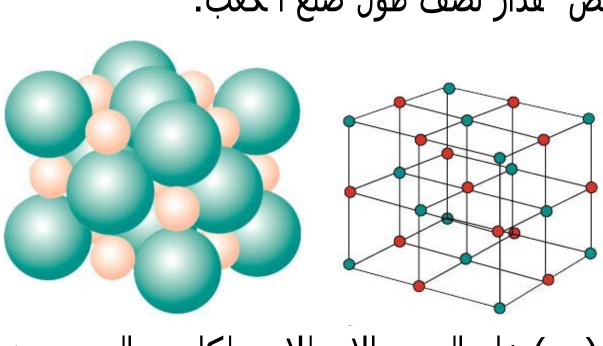
الشكل(3.1) خلية الوحدة الاصطلاحية لكلوريد السيزيوم CsCl.

3-14-1 بنية كلوريد الصوديوم NaCl:

لبلورة كلوريد الصوديوم (ملح الطعام) شبكة مكعبة متمركزة الأوجه بقاعدة مرافقة لكل نقطة شبكة تتكـون هذه القاعدة من أيون الصوديوم (Na^+) إحداثياته $(0,0,0)$، وأيون الكلور (Cl^-) إحداثياته $\left(\frac{1}{2},0,0\right)$. حيث تتواجد أيونات الكلور (Cl^-) رؤوس ا كعب ومراكز وجوهه بينما أيونات الصوديوم (Na^+) تتواجد منتصفات الأحرف ومركز ا كعب أو العكس. وي خلية الوحدة الاصطلاحية أربعة جزيئات حقيقية NaCl إحداثيات أيونا ا هي:

Cl^-: $(0,0,0)$، $\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$، $\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right)$، $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$ وNa^+ : $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$، $\left(\frac{1}{2},0,0\right)$، $\left(0,\frac{1}{2},0\right)$، $\left(0,0,\frac{1}{2}\right)$.

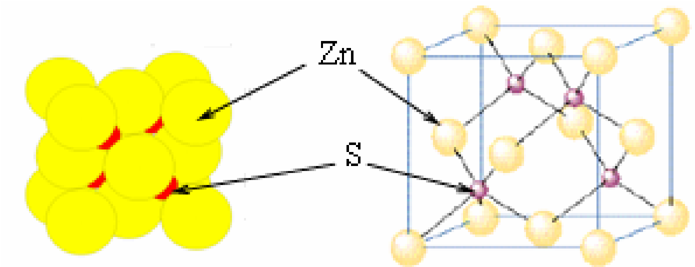
يط بكل أيون Na^+ أو Cl^- ستة أيونات اورة من النوع الآخر$(z=6)$ حيـث بعـد ا ـوار الأول هـو: $R_z = r_{Cl^-} + r_{Na^+} = \frac{a}{2}$. و كن اعتبار التركيب البلوري لكلوريد الصوديوم مكوناً من شبكة فرعية متداخلة من نوع ا كعب متمركز الأوجه، إحدا ا لأيونات الصوديوم والأخرى لأيونات الكلور، أز ت هاتان الـشبكتان الفرعيتان بالنسبة لبعضهما البعض قدار نصف طول ضلع ا كعب.



الشكل(3.1) خلية الوحدة الاصطلاحية لكلوريد الصوديوم NaCl .

4-14-1 بنية كبريت الزنك ZnS:

إن بنية بلورة ك يت الزنك تشابه اما بنية بلورة ا اس، تنتمي بلورته إ الفئة ا كعبة متمركزة الأوجه بقاعدة مكونة من أيون , أيون الزنك (Zn^+) و أيون الك يت (S^-) إحداثيا ما على الترتيب هـي: $(0,0,0)$، $\left(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4}\right)$. تـ شغل ذرات الزنـك ا واضـع: $(0,0,0)$، $\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$، $\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right)$، $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$، و تـشغل ذرات الك يـت ا واضـع $\left(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4}\right)$، $\left(\frac{1}{4},\frac{3}{4},\frac{3}{4}\right)$، $\left(\frac{3}{4},\frac{1}{4},\frac{3}{4}\right)$، $\left(\frac{3}{4},\frac{3}{4},\frac{1}{4}\right)$، وكلا ا يشكل شبكة مكعبة ركزة الأوجه، يط بكل أيون (Zn^+) أو أيـون (S^-) أربعـة أيونـات ـاورة مـن النـوع الآخـر($z=4$) حيـث بعـد ا ـوار الأقـرب هو $R_z = r_{Zn} + r_S = \frac{\sqrt{3}}{4}a$، و كن اعتبار التركيب البلوري لك يت الزنك مكوناً من شبكة فرعية متـداخلة من نوع ا كعب متمركز الأوجه، إحدا ا لذرات الزنك والأخرى لذرات الك يت، أز ـت هاتـان الـشبكتان الفرعيتان بالنسبة لبعضهما البعض قدار ربع طول قطر ا كعب.



الشكل(3.1) خلية الوحدة الاصطلاحية لك يت الزنكZnS.

ا دول(6.1) نصنف بعض العناصر وا ركبات البلورية ا ا ب بلورية اثلة للب البلورية ا دروسة سابقا:

ZnS		**NaCl**		**CsCl**		ا ـ ـ ـ ـ ـ ـ اس	
$a(\mathring{A})$ **ثابت الشبكة**	**العنصر**	$a(\mathring{A})$ **ثابت الشبكة**	**العنصر**	$a(\mathring{A})$ **ثابت الشبكة**	**العنصر**	$a(\mathring{A})$ **ثابت الشبكة**	**العنصر**
5.41	ZnS	5.64	NaCl	4.12	*CsCl*	3.57	*C*
6.09	ZnTe	5.35	KF	4.29	*CsBr*	5.43	*Si*
5.82	CdS	5.91	CaSe	4.57	*CsI*	5.66	*Ge*
6.08	HgSe	5.55	AgCl	3.83	*TlCl*	6.49	(α)-*Sn*
5.62	AlSb	4.21	MgO	3.97	*TlBr*		

ا دول(6.1): تصنيف بعض العناصر وا ركبات البلورية

الفصل الثاني

انعراج الأشعة السينية والشبكة المعكوسة

1-2 مقدمة:

يتم التعامل مع ا سيمات ا ادية وفق فرضية دوبري على أ ا ذات طبيعة ثنائية(موجة-جسيم) ويتحدد طول ا وجة λ ا رافقة للجسيم بدلالة ثابت بلانك h واندفاع ا سيم P وفق العلاقة التالية:

$$\lambda = \frac{h}{p} \qquad (1\text{-}2)$$

إن شرط انعراج الأمواج أثناء اختراقها للبنية البلورية أن تكون أطوال أمواجها من مرتبة ا سافة ب الذرات البلورة أي من مرتبة أطوال أشعة الانسحاب الأولية $\vec{a},\vec{b},\vec{c}$ ،عندها كننا أن د حزما موجية يد با اهات تلفة عن ا اه ا زمة الداخلة إ البلورة ومن خلال ذلك نستطيع ديد التركيب البلور ، ومن ا صول على ا سافة الوسطية ب الذرات و موعات التناظر وخصائص أخرى متعددة سنتطرق إ أ ها. تصل ا سافة البينية للذرات لبضعة أنغسترومات وأنسب ا وجات ذا الاستخدام هي موجات الأشعة السينية وا وجات ا صاحبة للالكترونات والنيترونات، وا صول على تفاصيل جيدة عن الشبكة البلورية يقتضى أن يكون التفاعل ب ا وجات و الذرات ضعيفا لدرجة تسمح بأن تنفذ ا وجات لعدة مستويات داخل البلورة يث يتاح ا أن تتداخل تداخلا بناء.

2-2 انعراج النيترونات:

يعطي انعراج النيترونات معلومات هائلة عن البنية البلورية وخصوصا تلك ا غناطيسية، و عرفة طول ا وجة للنيترون حيث يتحقق شرط الانعراج نستخدم علاقة دوبري (1-2) ونستنتج كمية ا ركة (p) من الطاقة ا ركية للنيترون وهي:

$$E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m_n\lambda_n^2} \quad \Rightarrow \lambda_n = \frac{h}{\sqrt{2m_n E_n}} \qquad (2\text{-}2)$$

نبدل قيم الثوابت العلاقة(2-2) حيث($m_n=1.675\times10^{-27}\,Kg$) والتعب عن قيم الطاقة بالإلكترون فولت وطول ا وجة بالأنغستروم د أن :

$$\lambda_n \approx \frac{0.28}{\sqrt{E_n}}\ \overset{o}{\mathrm{A}} \qquad (3\text{-}2)$$

حـ يكون طول موجة النيترون من مرتبة الأنغستروم ب أن تكون الطاقة للنيترون من مرتبة ($E_n = 0.08\ ev$) وهذه الطاقة من مرتبة الطاقة ا رارية KT درجة حرارة ا خت وال تساوي $0.025\ ev$ و ذا السبب تدعى بالنيترونات ا رارية وهي تتحرك بسرعة من رتبة $4000\ m/s$.و ا أن النيترونات لك عزوما مغناطيسية فإن ا دورا مهما الكشف عن البلورات ا غناطيسية بالإضافة إ الكشف عن الأبعاد ب الذرات البلورة.

3-2 انعراج الإلكترونات:

ذه الدراسة دور مهم الكشف عن الطبيعة ا وجية للإلكترونات من ناحية ودراسة الانعراج من ناحية أخرى حيث أن الآلية ا سؤولة عن انعراج الإلكترونات البلورات هو ا ال الكهربائي ا تولد الذرات(النوى ذات الشحنات ا وجبة والإلكترونات ذات الشحنة السالبة) داخل ا سم الصلب والذي يكون شديدا كلما اقتربنا من مركز الذرة أي أن الالكترونات تتبادل التأث بشدة مع الذرات بسب شحنتها وبالتا فهي لا تستطيع اختراق البلورات إلا سافات صغ ة نسبيا ا يفيد دراسة ا واص السطحية للأجسام الصلبة.

تأخذ العلاقة الرياضية ب طول موجة الإلكترون وطاقته علاقة شبيهة بعلاقة النيترونات مع استبدال كتلة النيترون العلاقة (2-2) بكتلة الإلكترون($m_e = 9.1\times10^{-31}\ Kg$) وتصبح كما يلي:

$$\lambda_e = \frac{12.25}{\sqrt{E_e}}\ \mathring{A} \qquad (4\text{-}2)$$

أي أن الالكترونات ال أطوال أمواجها من مرتبة الأنغستروم تلك طاقة قريبة من مرتبة $150\ ev$.

4-2 الأشعة السينية المستعملة في تحليل البنية البلورية:

الأشعة السينية هي أشعة كهرومغناطيسية ذات تردد عال، و تعت ا صدر الرئيس للمعلومات عن الب البلورية وذلك لتمتعها بطيف واسع من الأطوال ا وجية يتناسب اما مع كافة الأبعاد الذرية ا واد الصلبة. والأطوال ا وجية ا ستعملة تكون صورة-عادة- ا ال $\left(1 \rightarrow 10\ \mathring{A}\right)$.

وكما هو معلوم انعراج الضوء فان زاوية الانعراج تتعلق بشكل رئيس بتغ البنية البلورية وبطول موجة ا زمة الضوئية الساقطة (حزمة الورود) على البلورة، و عرفة طول موجة ا زمة ب أن تكون طاقة الأشعة ذات أطوال موجية من مرتبة ا سافة ب الذرات البلورة ويتم معرفة ذلك وفقا للمعا ة الرياضية التالية:

تعطى طاقة الفوتون من خلال العلاقة التالية:

$$E = \hbar\omega = h\upsilon = h\frac{c}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{hc}{E} \qquad (5\text{-}2)$$

تب العلاقة (5-2) أن طول ا وجة دالة لطاقة الأشعة السينية لأن hc = 1240 ev.nm , و ساب طول ا وجة بالأنقستروم $\left(1\overset{o}{A} = 10^{-10}m\right)$ تؤخذ الطاقة بالكيلو إلكترون فولت (Kev) حيث ($1ev = 1.602\times10^{-19}$) ومنه تصبح العلاقة:

$$\lambda = \frac{1240}{E}\frac{[ev.nm]}{[Kev]} = \frac{12.4}{E}\overset{o}{A} \qquad (6\text{-}2)$$

إذا كانت ا سافة بـ الذرات من مرتبة مضاعفات الأنقستروم وأجزاءه فان طاقة الفوتون ب أن تكون مـ ابـ ($10\text{-}50Kev$) ، وهو طيف الطاقة اللازم لإجراء التجارب بالأشعة السينية على البلورات ويعتـ طيف واسع يتناسب مـع كافة الأبعاد البلورية و كننا من ليل الصورة النا ة عن الانعراج و ديد توزع الذرات البلورة.

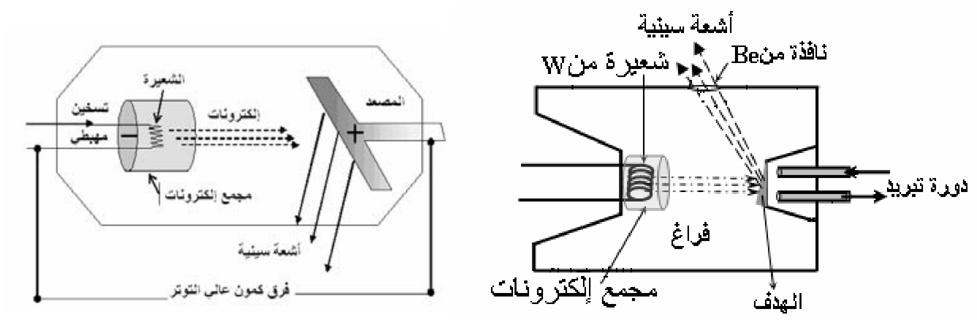
5-2 إنتاج الأشعة السينية:

إن مبدأ إنتاج الأشعة السينية يعتمد على قصف مصعد مصنوع من معدن ذي عدد ذري كبـ زمة من الإلكترونات مسرعة الفراغ و ت جهد عال (أنظر الشكل (1.2)) ، فينتج جراء ذلك نوعان من الأشـعة، الأو تـسمى أشـعة الاستيقاف وهي أشعة ذات طيف مستمر تنبعث كفقد طاقوي ناتج عن كبح حزمة الإلكترونات ا ـسرعة جـراء القـوة الكولومية الـ تؤثر ا أنوية ذرات ا صعد عليها(أنظر الشكل (2.2)) ، أما الثانية فتسمى بالأشعة ا ميزة لـذرات ا عـدن وهي ذات طيف متقطع , حيث تثار ذرات ا عدن إ مستويات أعلى نتيجة تفاعل الإلكترونات ا سرعة مع إلكتروناته و عند عودة الذرات ا ثارة إ ا الة الأساسية تشع أشعة سينية طاقتها تساوي الفرق الطاقوي بـ ا الـ ا ثارة و الأساسية وهي يز بالضرورة ذرات هذا ا عدن (أنظر الشكل(3.2)) .

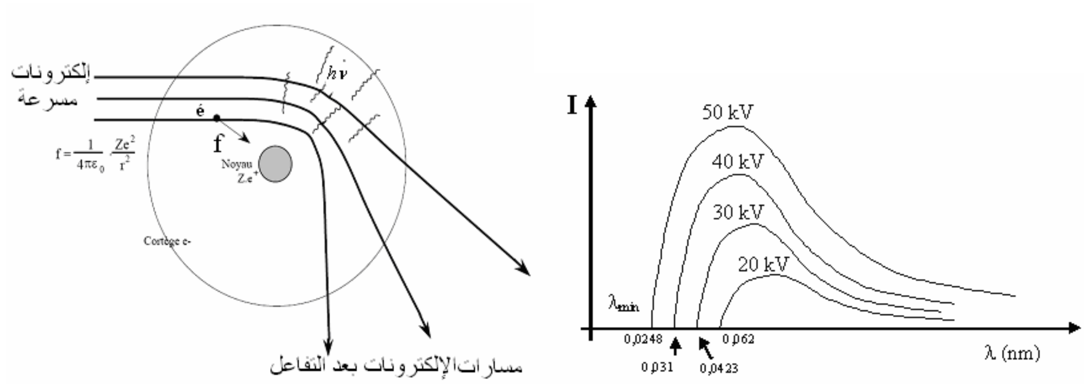
توسم الأشعة ا ميزة لذرات معدن معـ نحها نفس الرمز ا اص بالطبقة (ا دار الرئيسي) الـ تنتقل إليها الإلكترونات عند عودة الذرات إ ا الة الأساسية و تضاف الرموز α و β و γ حسب فارق رتبة الطبقتـ الـ ينتقل منها الإلكتـرون والـ ينتقل إليها, فـ مز بـ α إذا كان الفارق بـ الرتبتـ 1,و β و γ إذا كان الفارق بـ الرتبتـ 2 و3 علـى الترتيـب. فمثلا عند انتقال إلكترون من الطبقة L إ الطبقةK يرمز للأشعة ا نبعثة بالرمز K_α. و عند انتقال إلكترون من الطبقـة M إ الطبقةK يرمز للأشعة ا نبعثة بالرمز K_β.

ثل الشكل(1.2) ر ا طيطيا مبسطا هاز إنتاج الأشعة السينية فهو مركب أساسا مـن شـعـ ة مـصنوعة مـن التنغسـ W، عند توصيل هذه الأخـ ة بتيار كهربائي فإ ا تسخن تشع إلكترونات عن طريق الإشعاع الكهروحـراري،

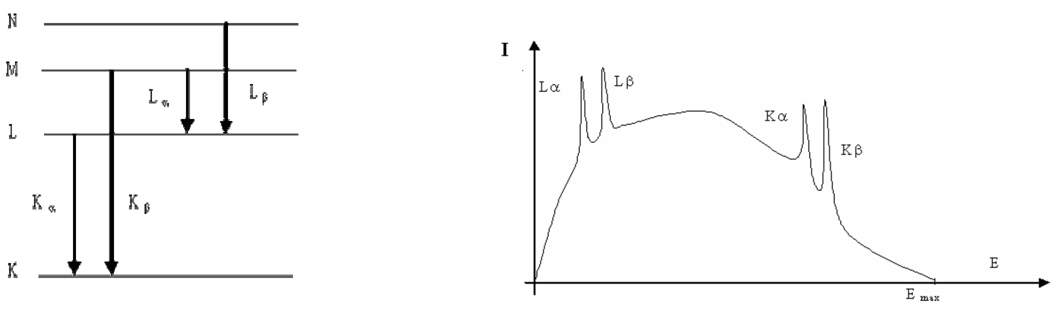
تسرع هذه الإلكترونات ت تأث فرق كمون عا التوتر با اه ا صعد مركزة بواسطة مع للإلكترونات، حيث يكـون كل من ا هبط و ا صعد ا مع داخل غرفة مفرغة من ا واء ا نافذة مصنوعة من ال يليوم Be تـسمح ـروج الأشـعة السينية، وتستعمل فيه دورة ت يد فض درجة ا رارة ا رتفعة بفعل التأث الكهروحراري.



الشكل(1.2): ثيل مبسط هاز توليد الأشعة السينية.



الشكل(2.2): طيف أشعة الاستيقاف



الشكل(3.2): طيف الأشعة ا ميزة لذرات ا ادة.

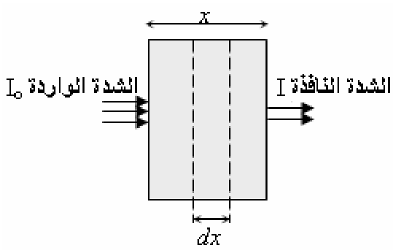
6-2 إمتصاص الأشعة السينية:

يوصف امتصاص ا واد للأشعة عامل امتصاص μ يعتمد هذا ا عامل على نوع ا ادة ا اصة وطول ا وجة ا م ـ تص (λ).عند ورود حزمة من الأشعة السينية شد ا (I_o) على معدن ما فإن جزءا منها يعا امتصاصا ح ينفذ جزءا آخر يسمى ا زمة النافذة و تعطى شد ا (I) كما يلي(أنظر الشكل(4.2)):

$$I - I_o = dI = -\mu I\, dx \Rightarrow \int_{I_o}^{I} \frac{dI}{I} = \int_0^x \mu\, dx \Rightarrow I = I_o e^{-\mu x}$$

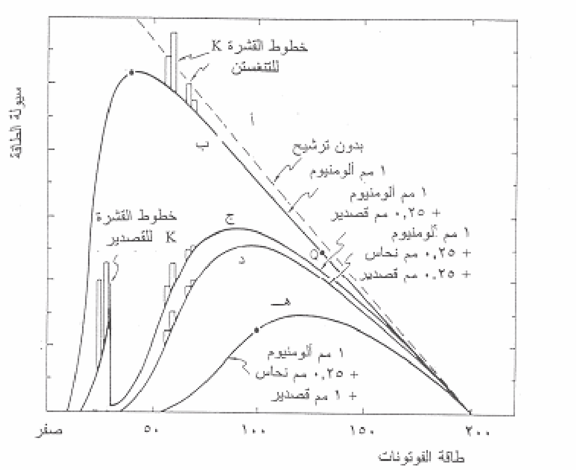
(7-2)

حيث: x : ك العينة.



الشكل(4.2): ثيل مبسط لعملية الامتصاص.

تستغل ظاهرة امتصاص ا عادن للأشعة السينية صناعة ا رشحات حيث تار ا ادة ر شحة حسب حافات امتصاصها للأشعة(أنظر الشكل(5.2)) .



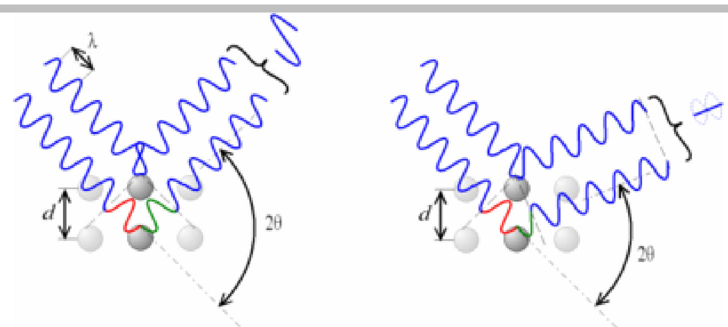
الشكل(5.2):ترشيح طيف الأشعة السينية ببعض ا واد ذوات أ اك تلفة.

7-2 علاقة براغ في انعراج الأشعة السينية :

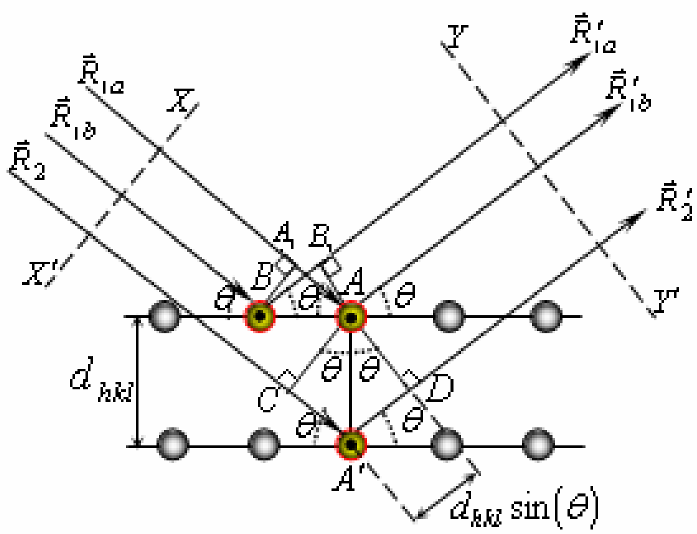
يعتـ الانعراج البلورات ظاهرة استطارة ذرية. حيث تستطار الأشعة من الذرات و كل الا اهات بعدما تكون قد وردت إليها وتفاعلت معها و ا اه معـ تكون يع ا وجات ا ستطارة طور واحد لذلك كن ا أن تقوي بعـضها بعضا حيث تنتج ا زمة ا نعرجة.

عام 1913م وضع براغ الشروط ا ندسية لانعراج حزمة وحيدة الطول ا وجي من الأشعة السينية وقد افترض مـا يلي:

- أ- إن حزمة الأشعة الساقطة على البلورة تنعكس مثلما تنعكس الأشعة العادية عن مرآة مستوية(زاويـة الـسقوط تساوي زاوية الانعكاس)بالنسبة ختلف ا ستويات الذرية البلورة ،و إن الربط بـ زاوية الـسقوط وطـول ا وجة للضوء ا ستعمل وا سافة بـ مستويات الانعكاس شرط أساسي للانعكاس ا يد.
- ب- عند ورود أشعة سينية بشكل حزمة متوازية على ا ستويات الذرية فإ ا ترق الطبقات ا ختلفة للبلورة وتتبادل التأثـ مع كافة ا ستويات الذرية حـ العميقة منها، حيث أن ا ستويات الذرية تعكس(تعرج) كسرا دا من الأشعة والباقي ينفذ إ ا ستويات الأخرى(أنظر الشكل(5.2))
- ت- تتفاعل الذرات مع الأشعة تفاعلا مرنا(أي أن هناك ا فاظا الطاقة وكمية ا ركة وبذلك) يكـون طـول ا وجة الواردة وا نعكسة(ا نعرجة) متساويان.
- ث- ا ستويات الذرية ا ختلفة تتفاعل مع الأشعة السينية وكأ ا شبكات انعراج مستوية فيؤدي ذلك إ انعراجـات من رتب تلفة اعتبارا من ا ستوي الأول إ الثا إ الثالث ...ا .
- **ج-** يؤدي ولوج الأشعة السينية لأعماق البلورة إ ظهور كم هائل من الأشعة ا نعرجة النا ة عن آلاف ا ستويات الذرية ولكن القسم الأكـ منها تضعف شدته نتيجة لعملية التداخل ا دام (أنظر الشكل(6.2)) بينمـا القـسم الأخر تزداد شدته نتيجة للتداخل البناء .



الشكل(6.2): صورة من صور التداخل ا دام والتداخل البناء ناتج عن مستوي ذري .



الشكل(7.2): طيط هندسي لعملية الانعراج.

يـ من الشكل(7.2) مقطعا من بلورة مكونة من مستويات متوازية قرائنها (hkl) وفاصلتها البلورية(ا سافة البينية) (d_{hkl}) لنفترض الآن لأن حزمة أشعة سينية أحادية الطول ا وجي (λ) أسقطت على البلورة بزاوية (θ) (θ) ثل الزاويـة ا صورة بـ أحد ا ستويات الذرية وا زمة الساقطة) ولنرى فيما إذا كانت ا زمة الساقطة ستنعرج و ت أي شرط.

لنأخذ الشعاع $\vec{R}_{1a}$ و $\vec{R}_{1b}$ من ا زمة الساقطة عل البلورة اللذان يتفاعلان مع الذرتـ A و B ا ستوي الأول من البلورة. إن هذين الشعاع سيستطاران يع الا اهات ونستطيع أن نـرى أن الاسـتطارة ا مثلـة بالـشعاع $\vec{R}'_{1a}$ و $\vec{R}'_{1b}$ مساوية لبعضها الطور و دث ذلك لأن فرق ا سـ ذين الشعاع بـ جبـهـ ا وجـة XX' و YY' معـدوم و سب كما يلي:

$$AA_1 - BB_1 = AB\cos(\theta) - AB\cos(\theta) = 0 \qquad (8\text{-}2)$$

وبالطريقة نفسها فإن بقية الأشعة ا نعرجة ا ستطارة من ذرات ا ستوي الأول كافة و ا اه موازٍ لا اه $\vec{R}'_{1a}$ تكـون

طور واحد وتقوي بعضها مثـ مثـ , و تضاف إ ا زمة ا نعرجة, وهذا يكون صحيحا ميع ا ستويات الأخرى. بقـي الآن أن نبحث عن الشرط اللازم الذي وجبه تكون الأشعة ا نعرجة ا ستطارة من ذرات مستويات تلفة مقوية لبعـضها البعض. من الشكل(7.2) نلاحظ أيضا أن فرق ا سـ بـ الشعاع $\vec{R}'_{1a}$ و $\vec{R}'_2$ اللذان قد استط ا من الذرة A ا ستوي الأول و A' ا ستوي الثا بـ جبهـ ا وجة XX' و YY' هو: $(CA'+A'D)$. لقد بـ براغ أن الشعاع $\vec{R}'_{1a}$ و $\vec{R}'_2$ متوافقة الطور عندما يكون فرق ا سـ بينهما مساويا لعدد صحيح من طول موجة الأشعة السينية الساقطة. ومنه إ ـاد ما يلي:

$$CA' + A'D = 2CA' = n\lambda$$

$$\sin(\theta) = \frac{CA'}{d_{hkl}} \Rightarrow CA' = d_{hkl}\sin(\theta)$$

$$2CA' = 2d_{hkl}\sin(\theta) = n\lambda$$

$$2d_{hkl}\sin(\theta) = n\lambda \qquad (9\text{-}2)$$

حيث: n عدد صحيح يعـ عن رتبة الانعراج, θ : ثل زاوية سقوط الأشعة السينية, λ :الطول ا وجي للأشعة الساقطة

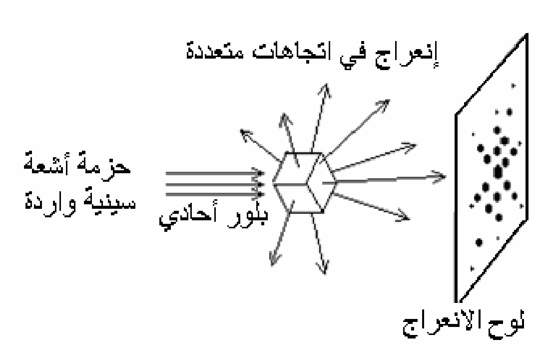
تسمى العلاقة (9-2) علاقة (أو قانون) براغ وهي تفيد إ اد ا سافة بـ ا ستويات الذرية d_{hkl}، وأبعاد خلية الوحدة للشبكة البلورية و بالتا ا صول على تصور فضائي للبلورة . و در الإشارة إ أنه استنتاجها علـى أسـاس الترتيب الدوري للتركيب البلوري دون اعتبار لنوع الذرات العقد أو ترتيبها ا ستويات العاكسة و ا عاملان يؤثران شدة الانعكاس ا ناظرة لقيم n ا ختلفة.

8-2 الطرق التجريبية لانعراج الأشعة (الأمواج) السينية على البلورات:

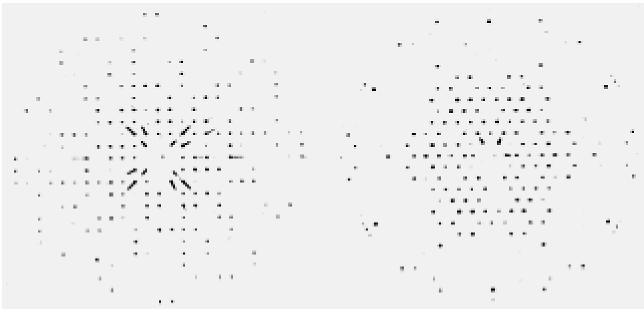
تعتـ طرق انعراج الأشعة السينية بواسطة البلورات من أهم الطرق ا ستخدمة لتعيـ خـصائص و يـزات التركيـب البلوري للأجسام الصلبة، وتعتمد هذه الطرق على تطبيق قانون براغ $(2d\sin\theta = n\lambda)$، حيث ب أن يتوفر مدى متصل من قيم (θ) أو(λ)، و ا كان بالإمكان تعيـ قيم الطول ا وجي (λ) للأشعة السينية ا ستخدمة بطريقة مستقلة وقيـاس (θ) مباشرة من التجربة حيث أ ا تساوي نصف الزاوية بـ الأشعة ا نعرجة والساقطة فإنه كن تطبيق علاقة براغ ساب ا سافة العمودية بـ موعة ا ستويات ا توازية$\{hkl\}$ومن حساب ثوابت الشبكة البلورية عرفة هندستها الفراغية. و كن أيضا تعيـ عدد الذرات خلية الوحدة قارنة شدة الانعكاس للمستويات ا ختلفة, ذالك أن ا ـستويات ذات الكثافـة الذرية الأكـ تعطي شدة انعكاس أكـ .

2-8-1 طريقة فون لاوي (von Laue):

وفيها تسقط حزمة من الأشعة السينية البيضاء بطيف مستمر يتراوح ماب $\left(0.2-3\,\overset{o}{A}\right)$ على بلورة أحاديـة ثابتـة، تنتقي البلورة الأطوال ا وجية (λ) ال تسقط بزاوية (θ) معينة و قق تداخلا بناءًا للأشعة ا نعكسة من ا ستويات البلوريـة ذات ا سافة الذرية البينية (d_{hkl}) طبقا لعلاقة براغ(أنظر الشكل(9.2)). وتستعمل هذه الطريقة لتحديد تنـاظر البلـور أو توجيهه أو كشف العيوب البلورية. و تكون صورة الانعراج هذه الطريقة على شكل لطخات علـى لـوح الانعـراج (الفيلم)(أنظر الشكل(9.2)).



الشكل(8.2): شكل طيطي يب الانعراج طريقة لاوي.

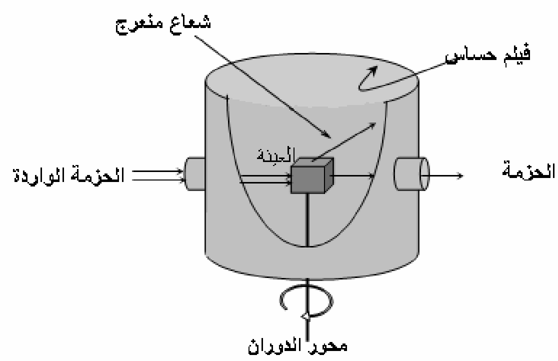


الشكل(9.2): صورة الانعراج طريقة لاوي.

2-8-2 طريقة البلورة الدوارة:

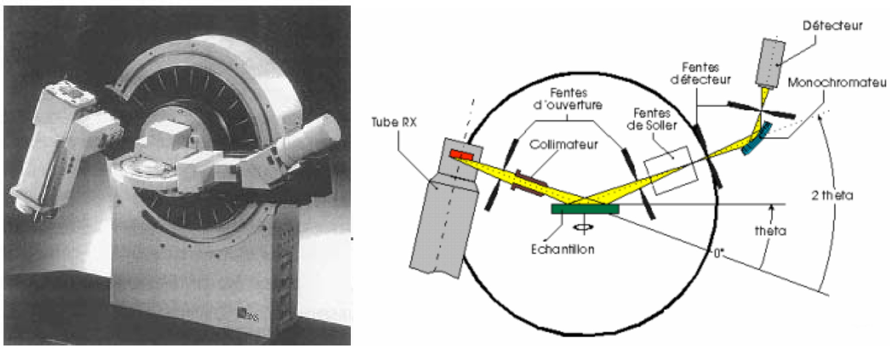
يتم فيها تعريض البلورة إ حزمة من الأشعة السينية أحادية الطول ا وجي حيث تكون البلورة مثبته على ور كن تدويرها حوله كي يتس لنا ا صول على مدى متصل من زوايا السقوط (θ) على ا ستويات البلورية ا ختلفة مسافا ا البينية, يدرس الانعكاس على لة معينة من ا ستويات ا توازية وذلك عند تدوير البلورة، ووفق قانون براغ يلاحظ الانعكاس من أجل زوايا سقوط معينة قق شرط الانعراج ويتم من خلا ا التعرف على (d_{hkl}) ملة ا ستويات

ا توازية، وغالبا ما يستعاض عن تدوير البلورة بتغير زوايا سقوط الأشعة الواردة على البلورة و صل على نفس النتائج(أنظر الشكل(10.2)). و تكون صورة الانعراج هذه الطريقة على شكل لطخات على لوح الانعراج (الفيلم).

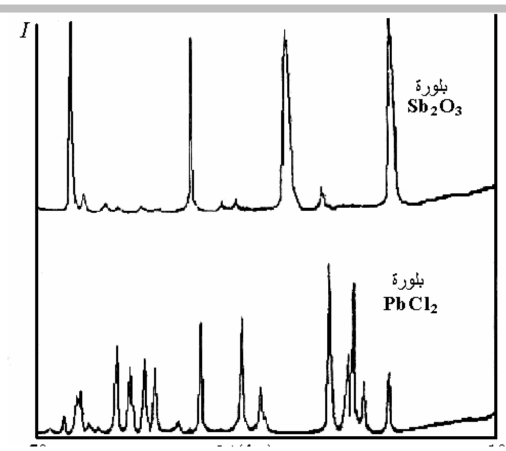


الشكل(10.2): شكل طيطي يب الانعراج طريقة البلورة الدوارة.

وتستخدم كواشف أخرى غ الفيلم لتعطينا نتائج قابله للمقارنة الكمية ا باشرة مثال ذلك "مقياس الانعراج" (أنظر الشكل(11.2)).الذي يعطينا اذج كا بينة بالشكل(12.2) حيث يتضح الفارق ب وذجي انعراج للأشعة السينية بواسطة البلورت **Sb_2O_3** و **$PbCl_2$**.



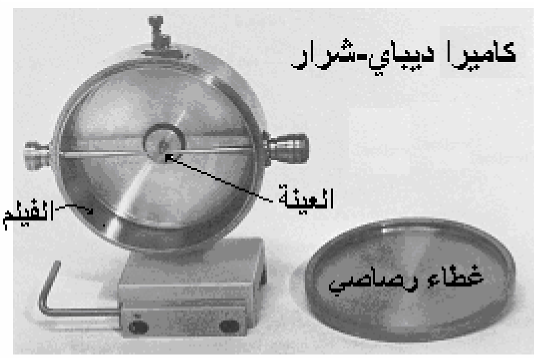
الشكل(11.2): صورة و طيط قياس الانعراج ا ستعمل طريقة البلورة الدوارة.

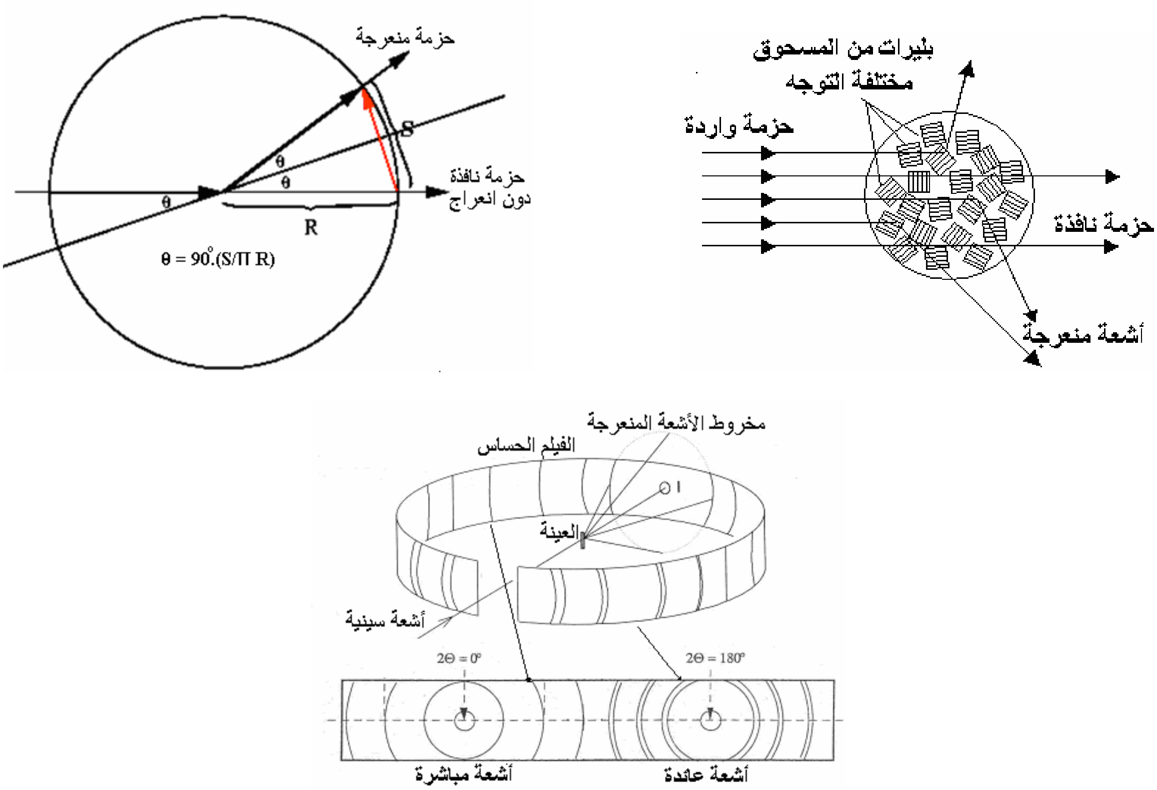


الشكل(12.2)**:**إنعراج الأشعة السينية بلوري Sb_2O_3 و $PbCl_2$.

2-8-3 طريقة المسحوق أو طريقة ديباي- شرر Debye-scherrer :

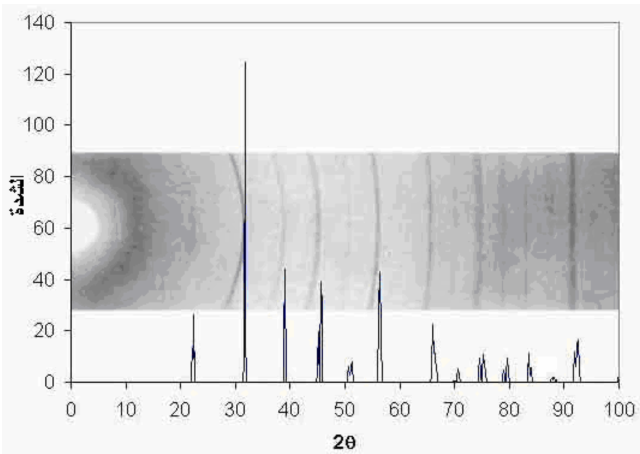
وهي طريقة مناسبة للدراسات التطبيقية حيث أ ا لا تشترط أن تكون البلورة أحادية ، وفيها تسقط حزمة من الأشعة السينية أحادية الطول ا وجي على مسحوق مادة متبلورة ، اا يكون توزيع ا تجهات بيبات (بلا ات) مسحوقها مدى مستمر تقريبا أي توفر مدى متصل من قيم (θ)، لذلك يتحقق قانون براغ لبعضها. و كن من خلال هذه الطريقة تعـين نوع و ثوابت الشبكة البلورية. و كن أن تستخدم فيها تقنية الأفلام اا تصور كافة ا الات اا يتحقـق فيهـا شـرط الانعراج ومن ا صول على نتائج جيدة حول الأبعاد البلورية(أنظر الشكل(13.2)). و تكون صورة الانعراج هـذه الطريقة على شكل دوائر متمركزة على لوح الانعراج (الفيلم) تر ها اريط الأشعة ا نعرجة واا تنتج من وجود عـدد كبير من بلا ات ا سحوق ا ختلفة التوجه واا قق قانون براغ ستويات معينة أي ا نفس زاوية الانعراج وبالتا يكون للأشعة ا نعرجة تناظرا دورانيا حول ا زمة النافذة دون انعراج وبذلك ترسم روطا الفراغ. ويستخدم أيـضا مقيـاس الانعراج الذي يعطينا نتائج قابله للمقارنه الكمية ا باشرة كا بينة سابقا بالشكل(12.2).





الشكل(**13.2**)**:** صور و أشكال تشرح و تب   طريقة ا سحوق.

يب   الشكل(14.2) مطابقة حقيقية ب   الفلم وتظهر عليه ا طوط الداكنة وب   البيان ا صل عليه من مقياس الانعراج وتظهر عليه قمم شدات الانعراج والزوايا ا   ققة لشرط براغ ا وافقة ا.



الشكل(**14.2**)**:** مطابقة ب   الفيلم والبيان ا صل عليه من مقياس الانعراج.

2-9 الشبكة المعكوسة (المقلوبة):

تبـ نظرية الانعراج أن الشبكة البلورية والأمواج (الكترونات،بروتونات،فوتونات...) يتفاعلان مع بعـضهما بـنفس طريقة تفاعل الأمواج مع بعضها البعض. ومن ا فيد أن نفكر بالشبكة البلورية كاضطراب شبه موجي ،وأن نستخدم فضاء متجه ا وجة بدلا من طول ا وجة الـ لا تلك خواص ا تجه، وبالتحديد جهة انتشار ا وجة حيث أن ا تجه كن ليله إ مركباته الفضائية.و ا أن قيمة متجه ا وجة تعطى بالعلاقة $K = \frac{2\pi}{\lambda}$ والـ تبـ أن أبعاده مقلوب طول، فنحن ملزم وفقا للتصور ا ديد أن ننتقل من فضاء الشبكة العادية إ فضاء متجه ا وجة $\vec{K}$، أو ما يسمى بفضاء فورييه ، وهـذا الفـضاء كننا من تعريف الشبكة ا عكوسة (ا قلوبة).

2-9-1 مفهوم الشبكة المعكوسة :

إن مفهوم الشبكة ا عكوسة قد أدخل علم البلورات ليؤدي وظائف تفسـ ية عديدة، وخاصة عند دراسة الانعـراج البلورات. وقد وجد أن هذا ا فهوم يوجز ا واص ا ميزة للبلورات ويعـ عن شروط انعراج الأشعة الـسينية بطريقـة مبسطة.

لتعريف الشبكة ا عكوسة نبدأ بكتابة قانون براغ على الصورة :($\sin\theta_{hkl} = n\lambda/2d_{hkl}$) وهنا نلاحظ مباشرة العلاقـة العكسية (ا قلوبة) بـ قيم(d_{hkl}) البلورة وقيم جيب زاوية براغ ($\sin(\theta_{hkl})$) الـ دد مواقع انعكاسات براغ اذج انعراج الأشعة السينية من موعات ا ستويات ا ختلفة البلورة. وهكذا تكون " الشبكة ا عكوسة " أبسط تعريفا ا عبارة عن قيم($\sin(\theta_{hkl})$) الـ قق قانون براغ, و كن إنشاء هذه الشبكة من نقط تقاطع ا ـستويات ا توازيـة ا مثلـة للمواضع الـ ددها انعكاسات براغ, فكل نقطة الشبكة ا عكوسة تناظر انعكاسا كنا من البلورة حسب قانون براغ, و ارب الانعراج طبقا ذا التصور تعطينا نقاط الشبكة ا قلوبة الـ نعيد منها إنشاء الشبكة البلورية ا قيقيـة الفـضاء ا باشر.

2-9-2 خصائص الشبكة المعكوسة:

ا أن الأيونات البلورة تكون مرتبة بشكل دوري وخصوصا عند الانتقال من مستوي بلوري إ آخر, فإنه كـن اعتبار ا هد الدوري للأيونات كموجة ساكنة (موقوفة) طول موجتها يساوي إ ا سافة بـ ا ستويات البلوريـة(d_{hkl})، ومتجه ا وجة ا وقوفة يكون- هذه ا ال- عموديا على ا ستويات البلورية وطويلته تساوي $\frac{2\pi}{d_{hkl}}$ و من الطبيعي فإن هذا ا تجه بشكله العام مل الكثـ من خصائص الشبكة ا عكوسة وفيما يلي نذكر أ ها:

أ- الشبكة البلورية ا باشرة هي شبكة الفضاء ا قيقي،بينما الشبكة ا عكوسة هي شبكة فضاء فورييه و بعبارة

أوضح الفضاء $(\vec{K})$ وهكذا يتضح أن لكل بلورة شبكتين ترافقا ا و ا شبكة مباشرة وشبكة معكوسة, فعندما نستقبل الأشعة السينية بعد انعراجها ء البلورة ، فإننا صل على صورة تعتبر مسحا للشبكة ا معكوسة وخصائصها . ويعتبر وذج الانعراج خريطة معكوس الشبكة لبلورة ما ، أما الصورة ال صل عليها با يكروسكوب فهي خريطة التركيب البلوري ا قيقي .

ب- نسمي ا تجه $\vec{G}_{g_1g_2g_3}$ تجه(شعاع) الانسحاب الأساسي للشبكة ا معكوسة ويعرف بدلالة متجهات الانسحاب الأولية للشبكة ا معكوسة با عادلة التالية:

$$\vec{G} = \vec{A}_1 g_1 + \vec{A}_2 g_2 + \vec{A}_3 g_3 \qquad (8\text{-}2)$$

حيث $\vec{A}_1, \vec{A}_2, \vec{A}_3$ متجهات الانسحاب الأولية للشبكة ا معكوسة و g_1, g_2, g_3 أعداد صحيحة تارة.

ت- ترتبط متجهات الانسحاب الأولية للشبكة ا معكوسة $\vec{A}_1, \vec{A}_2, \vec{A}_3$ تجهات الانسحاب الأولية للشبكة ا باشرة(العادية) $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ با عادلات التالية:

$$\begin{array}{lll} \vec{A}_1.\vec{a}_1 = 2\pi & \vec{A}_1.\vec{a}_2 = 0 & \vec{A}_1.\vec{a}_3 = 0 \\ \vec{A}_2\vec{a}_2 = 2\pi & \vec{A}_2.\vec{a}_1 = 0 & \vec{A}_2.\vec{a}_3 = 0 \\ \vec{A}_3.\vec{a}_3 = 2\pi & \vec{A}_3.\vec{a}_1 = 0 & \vec{A}_3.\vec{a}_2 = 0 \end{array} \qquad (9\text{-}2)$$

ويلاحظ من خلال هذه العلاقات أن ا تجه $\vec{A}_1$ عمودي على ا ستوي ذي الناظم $\frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\|\vec{a}_2 \times \vec{a}_3\|}$،وكذلك ا تجه $\vec{A}_2$ عمودي على ا ستوي ذي الناظم $\frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\|\vec{a}_3 \times \vec{a}_1\|}$، وأن ا تجهة $\vec{A}_3$ عمودية على ا ستوي ذي الناظم $\frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2\|}$. كن أن صل على متجهات الشبكة ا معكوسة بدلالة متجهات الشبكة ا باشرة وذلك بضرب ا موعة الأو العلاقة (9-2)بـ: $(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3 / \vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$ وا موعة الثانية بـ: $(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1 / \vec{a}_3 \times \vec{a}_1)$ وا موعة الثالثة ب$(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2 / \vec{a}_1 \times \vec{a}_2)$ فنجد ا عادلات التالية:

$$\begin{aligned} \vec{A}_1.\vec{a}_1 &= 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3} \Rightarrow \vec{A}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1.(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \\ \vec{A}_3.\vec{a}_3 &= 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2} \Rightarrow \vec{A}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_3.(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)} \\ \vec{A}_2.\vec{a}_2 &= 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1} \Rightarrow \vec{A}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_2.(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)} \end{aligned} \qquad (10\text{-}2)$$

واضح من ا عادلات (10-2) أن أبعاد $(\vec{A}_1, \vec{A}_2, \vec{A}_3)$ أبعاد مقلوب طول ا قادير $\vec{a}_3(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)$ ، $\vec{a}_2(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)$ ، $\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$ متساوية وهي تعبر عن حجم خلية الوحدة الأولية للشبكة ا باشرة أي:

$$V_e = \vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \vec{a}_2(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) = \vec{a}_3(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) \qquad (11\text{-}2)$$

ث- يدعى متوازي السطوح الناشئ من ا تجهات$(\vec{A}_1, \vec{A}_2, \vec{A}_3)$ لية الوحدة الأولية للشبكة ا معكوسة. وتدعى الشبكة

ا تولدة من التكرار الانسحا (وفق $\vec{G}$) ذه ا لية الفضاء ا عكوس $(\vec{K})$ بالشبكة ا عكوسة.

- **ج-** لكل شبكة برا مباشرة شبكة برا معكوسة والعكس.
- **ح-** عند تدوير البلورة بزاوية ما فإن كلا الشبكت تدوران معا بنفس الزاوية.
- **خ-** تعطى علاقة حجم خلية الوحدة الأولية الشبكة ا عكوسة V_e^* بدلالة حجم خلية الوحدة الأولية الشبكة ا باشرة V_e باستعمال ا عادلات (2-10) بالشكل:

$$V_e^* V_e = \left(\vec{A}.(\vec{A}_2 \times \vec{A}_3)\right)\left(\vec{a}_1.(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)\right) = \begin{vmatrix} \vec{A}_1.\vec{a}_1 & \vec{A}_1.\vec{a}_2 & \vec{A}_1.\vec{a}_3 \\ \vec{A}_2.\vec{a}_1 & \vec{A}_2.\vec{a}_2 & \vec{A}_2.\vec{a}_3 \\ \vec{A}_3.\vec{a}_1 & \vec{A}_3.\vec{a}_2 & \vec{A}_3.\vec{a}_3 \end{vmatrix} = (2\pi)^3 \qquad (12\text{-}2)$$

- **د-** جداء شعاع الانسحاب الأساسي للشبكة ا عكوسة $\vec{G}$ بشعاع الانسحاب الأساسي للشبكة ا باشرة $\vec{R}$ هو:

$$\begin{aligned} \vec{G}.\vec{R} &= \left(\vec{A}_1 g_1 + \vec{A}_2 g_2 + \vec{A}_3 g_3\right).\left(n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3\right) \\ &= 2\pi\left(g_1 n_1 + g_2 n_2 + g_3 n_3\right) \\ &= 2\pi m \end{aligned} \qquad (13\text{-}2)$$

حيث: m عدد صحيح .

- **ذ-** يكون شعاع الشبكة ا عكوسة $\vec{G}_{hkl}$ ا دد بالأعداد الصحيحة h,k,l عموديا دائما على لة ا ستويات ا توازية $\{hkl\}$ أي: $(hkl) \perp \vec{G}_{hkl}$. و ما يلي ا هان على ذلك:

ا تجه $\vec{G}_{hkl}$ معرف الفضاء ا عكوس با ركبات h,k,l أي أن: $\vec{G}_{hkl} = h\vec{A}_1 + k\vec{A}_2 + l\vec{A}_3$ ا ستوي (hkl) معرف الفضاء ا باشر(الفضاء العادي) وا دد بالشعاء ا ستقل خطيا(أنظر الشكل(15.2)):

$$\overrightarrow{p_1p_2} = \left(\frac{\vec{a}_2}{k}\right) - \left(\frac{\vec{a}_1}{h}\right) \quad و \quad \overrightarrow{p_1p_3} = \left(\frac{\vec{a}_3}{l}\right) - \left(\frac{\vec{a}_1}{h}\right)$$

$$\vec{G}_{hkl}.\overrightarrow{p_1p_2} = \left(h\vec{A}_1 + k\vec{A}_2 + l\vec{A}_3\right).\left(\left(\frac{\vec{a}_2}{k}\right) - \left(\frac{\vec{a}_1}{h}\right)\right) = -2\pi + 2\pi = 0 \Rightarrow \vec{G}_{hkl} \perp \overrightarrow{p_1p_2}$$

$$\vec{G}_{hkl}.\overrightarrow{p_1p_3} = \left(h\vec{A}_1 + k\vec{A}_2 + l\vec{A}_3\right).\left(\left(\frac{\vec{a}_3}{l}\right) - \left(\frac{\vec{a}_1}{h}\right)\right) = -2\pi + 2\pi = 0 \Rightarrow \vec{G}_{hkl} \perp \overrightarrow{p_1p_3}$$

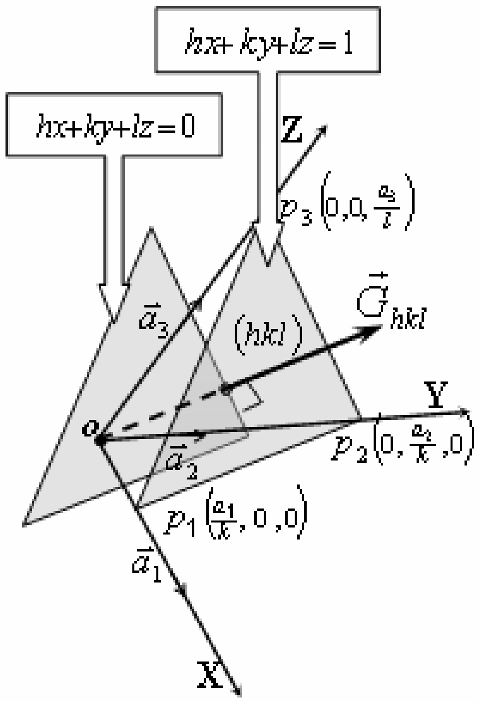
ا أن: $\vec{G}_{hkl} \perp \overrightarrow{p_1p_3}$ و $\vec{G}_{hkl} \perp \overrightarrow{p_1p_2}$ فإن: $\boxed{(hkl) \perp \vec{G}_{hkl}}$ (14-2)

- **ر-** طويلة ا تجه $\vec{G}_{hkl}$ تتناسب عكسا مع مقلوب أصغر مسافة ب ا ستويات البلورية ا توازية العمودية عليه d_{hkl}، و تلف هذه ا سافة باختلاف ا ستويات البلورية: من الشكل(15.2) لدينا: $\|\overrightarrow{OP}\| = d_{hkl}$

من جهة لدينا: $\vec{G}_{hkl}.\overrightarrow{Op_1} = \left(h\vec{A}_1 + k\vec{A}_2 + l\vec{A}_3\right)\left(\frac{\vec{a}_1}{h}\right) = 2\pi$

ومن جهة أخرى: $\vec{G}_{hkl}.\overrightarrow{Op_1} = \|\vec{G}_{hkl}\|\|\overrightarrow{Op_1}\| \cos\left(\vec{G}_{hkl}, \overrightarrow{Op_1}\right) = \|\vec{G}_{hkl}\|\|\overrightarrow{OP}\| = \|\vec{G}_{hkl}\| d_{hkl}$

ومنه: $\left\|\vec{G}_{hkl}\right\| d_{hkl} = 2\pi \Rightarrow \left\|\vec{G}_{hkl}\right\| = \dfrac{2\pi}{d_{hkl}}$ (15-2)



الشكل(15.2)**:** شكل توضيحي يبـ أن الشعاع h,k,l عموديا على ا ستوي (hkl).

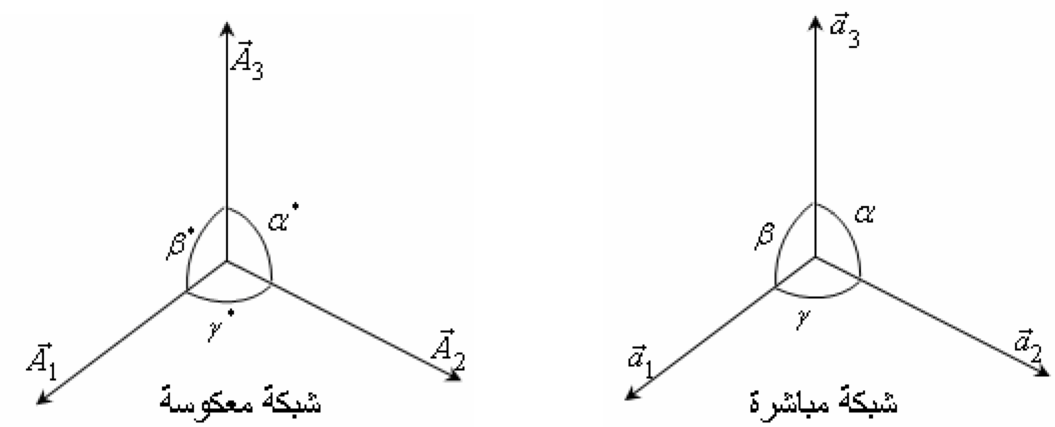
3-9-2 حساب القيم المعكوسة(المقلوبة):

لتكن شبكة برا ا باشرة ا عرفة تجهات الانسحاب الأولية: $\vec{a}_1,\vec{a}_2,\vec{a}_3$ و الزوايا بينـها هـي: $\alpha=(\vec{a}_2,\vec{a}_3)$ و $\beta=(\vec{a}_3,\vec{a}_1)$ و $\gamma=(\vec{a}_1,\vec{a}_2)$. وشبكتها ا عكوسة معرفة بالأشعة $\vec{A}_1,\vec{A}_2,\vec{A}_3$ و الزوايا بينها هي: $\alpha^*=(\vec{A}_2,\vec{A}_3)$ و $\beta^*=(\vec{A}_3,\vec{A}_1)$ و $\gamma^*=(\vec{A}_1,\vec{A}_2)$. نقوم الآن بإ اد علاقة بـ أطوال متجهات انسحاب الـ شبكة ا عكوسـة و الزوايا ا صورة بينها بدلالة أطوال متجهات انسحاب الـ شبكة ا باشـرة و الزوايـا ا ـ صورة بينـها(أنظـر الشكل(15.2)):

- **حساب الزوايا المعكوسة:**

ا أن : $V_e=\vec{a}_1(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)=\vec{a}_2(\vec{a}_3\times\vec{a}_1)=\vec{a}_3(\vec{a}_1\times\vec{a}_2)$ كن كتابة العلاقات(10-2) كما يلي :

$$\vec{A}_1=2\pi\frac{\vec{a}_2\times\vec{a}_3}{V_e}\ ,\quad \vec{A}_3=2\pi\frac{\vec{a}_1\times\vec{a}_2}{V_e}\ ,\quad \vec{A}_2=2\pi\frac{\vec{a}_3\times\vec{a}_1}{V_e} \qquad (16\text{-}2)$$



الشكل(15.2): رسم يوضح متجهات الانسحاب الأولية والزوايا ا صورة بينها الشبكة ا باشرة و ا عكوسة.

نقوم ساب ا داء السلمي $(\vec{A}_1 . \vec{A}_2)$ بطريقة :

$$\vec{A}_1 . \vec{A}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{V_e} . 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{V_e} = \frac{4\pi^2}{V_e^2} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) . (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \qquad (17\text{-}2)$$

من قوان ليل ا تجهات لدينا:

$$(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) . (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) = (\vec{a}_2 . \vec{a}_3)(\vec{a}_3 . \vec{a}_1) - (\vec{a}_2 \times \vec{a}_1) . a_3^2 = a_2 a_3^2 a_1 (\cos(\alpha)\cos(\beta) - \cos(\gamma)) \qquad (18\text{-}2)$$

ومنه كن كتابة العلاقة (17-2) كما يلي:

$$\vec{A}_1 . \vec{A}_2 = \frac{4\pi^2}{V_e^2} a_1 a_2 a_3^2 (\cos(\alpha)\cos(\beta) - \cos(\gamma)) \qquad (19\text{-}2)$$

ومن جهة أخرى :

$$\vec{A}_1 . \vec{A}_2 = \|\vec{A}_1\| \|\vec{A}_2\| \cos(\gamma^*) = \frac{4\pi^2}{V_e^2} \|\vec{a}_2 \times \vec{a}_3\| \|\vec{a}_3 \times \vec{a}_1\| \cos(\gamma^*)$$

$$\vec{A}_1 . \vec{A}_2 = \frac{4\pi^2}{V_e^2} a_1 a_2 a_3^2 \sin(\alpha)\sin(\beta)\cos(\gamma^*) \qquad (20\text{-}2)$$

با قارنة ب العلاقة (19-2) و (20-2) د:

$$\cos(\gamma^*) = \frac{\cos(\alpha)\cos(\beta) - \cos(\gamma)}{\sin(\alpha)\sin(\beta)} \qquad (21\text{-}2)$$

بنفس الطريقة كن أن د $\cos(\alpha^*)$ و $\cos(\beta^*)$:

$$\cos(\alpha^*) = \frac{\cos(\beta)\cos(\gamma) - \cos(\alpha)}{\sin(\beta)\sin(\gamma)} \qquad (22\text{-}2)$$

$$\cos(\beta^*) = \frac{\cos(\gamma)\cos(\alpha) - \cos(\beta)}{\sin(\lambda)\sin(\alpha)} \qquad (23\text{-}2)$$

- **حساب الثوابت المعكوسة :**

نقوم أولا ساب حجم خلية الوحدة الأولية:

$$V_e^2 = [\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)]^2 = \begin{vmatrix} \vec{a}_1.\vec{a}_1 & \vec{a}_1.\vec{a}_2 & \vec{a}_1.\vec{a}_3 \\ \vec{a}_2.\vec{a}_1 & \vec{a}_2.\vec{a}_2 & \vec{a}_2.\vec{a}_3 \\ \vec{a}_3.\vec{a}_1 & \vec{a}_3.\vec{a}_2 & \vec{a}_3.\vec{a}_3 \end{vmatrix} \Rightarrow$$

$$V_e^2 = (a_1a_2a_3)^2\left(1+2\cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma)-\cos^2(\alpha)-\cos^2(\beta)-\cos^2(\gamma)\right) \qquad (24\text{-}2)$$

حساب قيمة $\|\vec{A}_1\|^2$:

$$\|\vec{A}_1\|^2 = \frac{4\pi^2}{V_e^2}\|\vec{a}_2 \times \vec{a}_3\|^2$$

$$\|\vec{A}_1\|^2 = \frac{4\pi^2}{(a_1a_2a_3)^2\left(1+2\cos\alpha\cos\beta co\gamma-(\cos\alpha\ )^2-(\cos\beta)^2-(\cos\gamma)^2\right)}(a_2a_3)^2(\sin(\alpha))^2$$

$$\|\vec{A}_1\|^2 = \frac{(\sin(\alpha))^2}{\left(1+2\cos\alpha\cos\beta co\gamma-\cos^2(\alpha)-\cos^2(\beta)-\cos^2(\gamma)\right)}\left(\frac{2\pi}{a_1}\right)^2 \qquad (25\text{-}2)$$

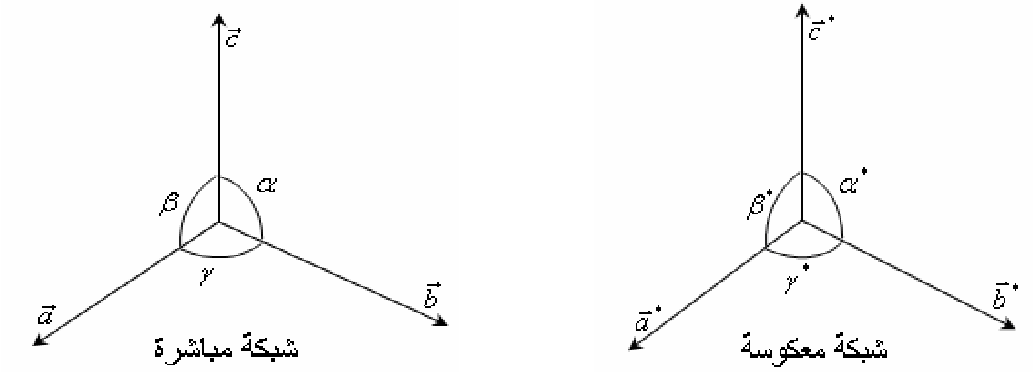
بنفس الطريقة كن أن د $\|\vec{A}_2\|^2$ و $\|\vec{A}_3\|^2$:

$$\|\vec{A}_2\|^2 = \frac{(\sin(\beta))^2}{\left(1+2\cos\alpha\cos\beta co\gamma-\cos^2(\alpha)-\cos^2(\beta)-\cos^2(\gamma)\right)}\left(\frac{2\pi}{a_2}\right)^2 \qquad (26\text{-}2)$$

$$\|\vec{A}_1\|^2 = \frac{(\sin(\gamma))^2}{\left(1+2\cos\alpha\cos\beta co\gamma-\cos^2(\alpha)-\cos^2(\beta)-\cos^2(\gamma)\right)}\left(\frac{2\pi}{a_3}\right)^2 \qquad (27\text{-}2)$$

4-9-2 العلاقة العامة للمسافة الفاصلة بين المستويات البلورية المتوازية (d_{hkl}) :

لقد أشرنا الفصل السابق إ أن ا ستويات ا توازية البلورة تفصل بينها مسافات متـساوية تلـف بـاختلاف معاملات ا ستوى ونوع البلورة. حيث أن هناك علاقة بـ هذه ا سافة الفاصلة بـ ا ستويات d_{hkl} وبـ ثوابت الـشبكة و تلف هذه العلاقة باختلاف الفئة البلورية (لا باختلاف الشبكة البلورية نفس الفئة). لذلك سوف تار لة ا ـاور الإحداثية(X,Y,Z) تنطبق وتتفق الا اه مع متجهات أضلاع خلية الوحدة الاصطلاحية للفئة ا ختارة (أو تار متجهـات الانسحاب الأولية للشبكة البسيطة الفئة ا ختارة), حيث تكون أضلاع خلية الوحدة الاصطلاحية هذه ا ـال هـي $\vec{c},\vec{b},\vec{a}$ و الزوايا بينها هي: $\alpha=(\vec{b},\vec{c})$ و $\beta=(\vec{c},\vec{a})$ و $\gamma=(\vec{a},\vec{b})$, نقوم أيضا بالعمل نفسه الشبكة ا عكوسة حيث تكون أضلاع خلية الوحدة الاصطلاحية الشبكة ا عكوسة هي: $\vec{c}^*,\vec{b}^*,\vec{a}^*$ والزوايا بينها هي: $(\alpha^*=(\vec{b}^*,\vec{c}^*)$ و $\beta^*=(\vec{c}^*,\vec{a}^*)$ و $\gamma^*=(\vec{a}^*,\vec{b}^*)$ (أنظر الشكل(16.2)).



الشكل(16.2): رسم يوضح متجهات الانسحاب الأولية للشبكة البسيطة فئة ما والزوايا ا صورة بينها الشبكة ا باشرة و ا عكوسة.

كن إ اد علاقة الفاصلة البلورية (d_{hkl}) من أجل الفئة ثلاثية ا يل- حيث أ ا ثل ا الة العامة- ومنها كن استنتاج علاقة الفاصلة البلورية للفئات الستة ا تبقية:

لدينا من أجل الفئة ثلاثية ا يل: $a \neq b \neq c$ و $\alpha \neq \beta \neq \gamma$.

$$\left\|\vec{G}_{hkl}\right\| = \frac{2\pi}{d_{hkl}} \Rightarrow \frac{1}{(d_{hkl})^2} = \frac{\left\|\vec{G}_{hkl}\right\|^2}{(2\pi)^2} \Rightarrow \frac{1}{(d_{hkl})^2} = \frac{\vec{G}_{hkl}.\vec{G}_{hkl}}{(2\pi)^2}$$

$$\vec{G}_{hkl}.\vec{G}_{hkl} = \left(h\vec{a}_1^* + k\vec{a}_2^* + l\vec{a}_3^*\right)\left(h\vec{a}_1^* + k\vec{a}_2^* + l\vec{a}_3^*\right)$$

$$\vec{G}_{hkl}.\vec{G} = h^2\left\|\vec{a}_1^*\right\|^2 + k^2\left\|\vec{a}_2^*\right\|^2 + l^2\left\|\vec{a}_3^*\right\|^2 + 2\left\|\vec{a}_1^*\right\|\left\|\vec{a}_2^*\right\|\cos\gamma^* + 2\left\|\vec{a}_2^*\right\|\left\|\vec{a}_3^*\right\|\cos\alpha^* + 2\left\|\vec{a}_3^*\right\|\left\|\vec{a}_1^*\right\|\cos\beta^* \quad (28\text{-}2)$$

كن استعمال العلاقات (21-2) و (22-2) و (23-2) و (25-2) و (26-2) و (27-2) وتعويضها العلاقة(2-28) دون إشكال إذ لا فرق ا سابات الرياضية ب ا الت ذلك أن الفرق فيزيائي ض -كما أشرنا بداية الفقـرة- طبعا مع مراعاة اختلاف الرموز وبذلك صل على علاقة الفاصلة البلورية للفئة ثلاثية ا يل:

$$\frac{1}{(d_{hkl})^2} = \frac{a^2b^2c^2}{v^2}\left(\begin{array}{l}\frac{h^2\sin^2(\alpha)}{a^2} + \frac{k^2\sin^2(\beta)}{b^2} + \frac{l^2\sin^2(\gamma)}{c^2} + \frac{2hk}{ab}\left(\cos(\alpha)\cos(\beta) - \cos(\gamma)\right) \\ + \frac{2kl}{bc}\left(\cos(\beta)\cos(\gamma) - \cos(\alpha)\right) + \frac{2hl}{ac}\left(\cos(\gamma)\cos(\alpha) - \cos(\beta)\right)\end{array}\right) \quad (29\text{-}2)$$

حيث:

$$v^2 = (abc)^2\left(1 + 2\cos(\alpha)\cos(\beta)\cos(\gamma) - \cos^2(\alpha) - \cos^2(\beta) - \cos^2(\gamma)\right) \quad (30\text{-}2)$$

نقوم الآن باستنتاج علاقة الفاصلة البلورية من أجل الفئات الست ا تبقية:

1. من أجل الفئة أحادية ا يل:. $a \neq b \neq c$ و $\alpha = \gamma = \frac{\pi}{2} \neq \beta$

$$\frac{1}{(d_{hkl})^2}=\frac{1}{\sin^2(\beta)}\left(\frac{h^2}{a^2}+\frac{k^2\sin^2(\beta)}{b^2}+\frac{l^2}{c^2}-\frac{2hl}{a\,c}(\cos(\beta))\right)\qquad (31\text{-}2)$$

2. من أجل الفئة ا عينية ا ستقيمة: $a\neq b\neq c$ و $\alpha=\gamma=\beta=\frac{\pi}{2}$

$$\frac{1}{(d_{hkl})^2}=\left(\frac{h^2}{a^2}+\frac{k^2}{b^2}+\frac{l^2}{c^2}\right)\qquad (32\text{-}2)$$

3. من أجل الفئة الرباعية:. $a=b\neq c$ و $\alpha=\gamma=\beta=\frac{\pi}{2}$

$$\frac{1}{(d_{hkl})^2}=\left(\frac{h^2+k^2}{a^2}+\frac{l^2}{c^2}\right)\qquad (33\text{-}2)$$

4. من أجل الفئة ا كعبة: $a=b=c$ و $\alpha=\gamma=\beta=\frac{\pi}{2}$.

$$\frac{1}{(d_{hkl})^2}=\left(\frac{h^2+k^2+l^2}{a^2}\right)\qquad (34\text{-}2)$$

5. من أجل الفئة الثلاثية متساوية الأحرف: $a=b=c$ و $\alpha=\gamma=\beta\neq\frac{\pi}{2}<120^o$.

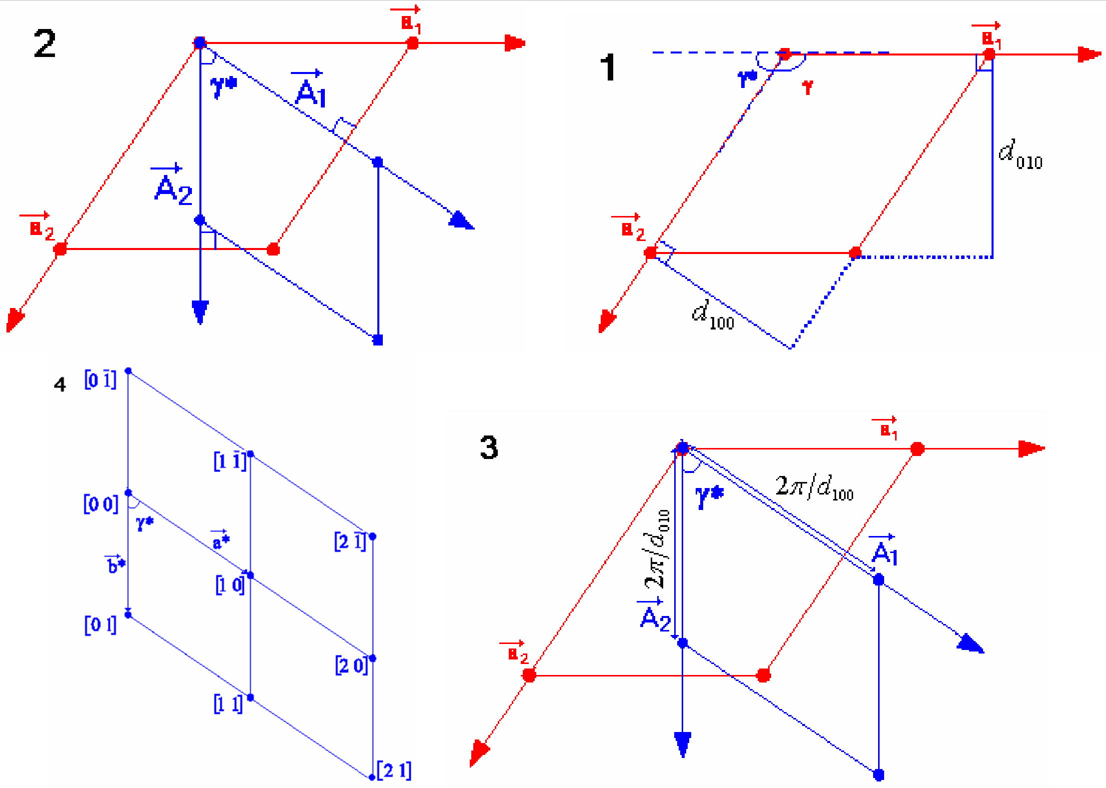
$$\frac{1}{(d_{hkl})^2}=\frac{(h^2+k^2+l^2)\sin^2(\alpha)+2(hk+kl+hl)(\cos^2(\alpha)-\cos(\alpha))}{a^2(1+2\cos^3(\alpha)-3\cos^2(\alpha))}\qquad (35\text{-}2)$$

6. من أجل الفئة السداسية: $a=b\neq c$ و $\alpha=\beta=\frac{\pi}{2},\gamma=120^o$.

$$\frac{1}{(d_{hkl})^2}=\frac{4}{3}\left(\frac{(h^2+hk+k^2)}{a^2}\right)+\frac{l^2}{c^2}\qquad (36\text{-}2)$$

5-9-2 إنشاء شبكة مستوية معكوسة لشبكة مستوية مباشرة:

1. تار خلية وحدة مباشرة البعد الثنائي متجها الانسحاب الأولي ا $\vec{a}_1,\vec{a}_2$ والزاوية بينهما γ والأبعاد ب ا ستويات البلورية ا توازية (100) و(010) هي على الترتيب d_{100} و d_{010} موضحة على الشكل(17.2).
2. ننشئ عمود على $\vec{a}_1$ عمود على $\vec{a}_2$ فنحصل على خلية الوحدة ا قلوبة با تجهات $\vec{A}_1,\vec{A}_2$ والزاوية بينهما γ^*.
3. دد أطوال $\vec{A}_1,\vec{A}_2$ للشبكة ا عكوسة بدلالة مقلوب d_{hkl} لكل منهما حيث $\|\vec{A}_2\|=2\pi/d_{010}$, $\|\vec{A}_1\|=2\pi/d_{100}$
4. أخ ا صل على الشكل العام للشبكة ا عكوسة ا ستوية النا ة وتظهر عليها ا تجهات $\vec{G}_{hk}=h\vec{A}_1+k\vec{A}_2$.

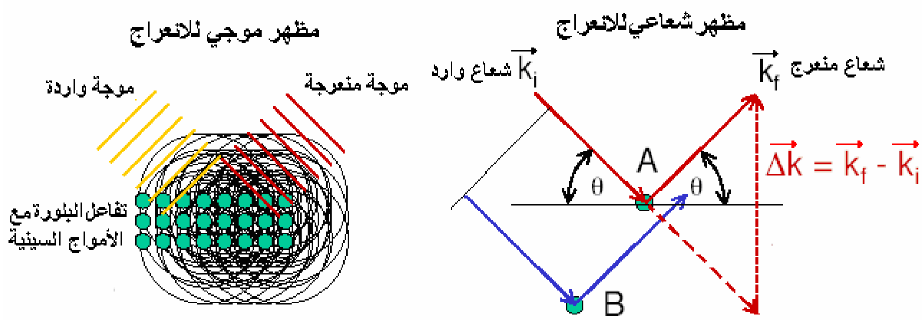


الشكل(17.2)**:** مراحل إنشاء شبكة مستوية معكوسة لشبكة مستوية مباشرة.

6-9-2 شروط فون لاوي للانعراج:

لقد رأينا الشروط ا ندسية لانعراج براغ الشبكة ا باشرة أن الذرات تتفاعل مع الأشعة تفاعلا مرنا أي أن هناك ا فاظا الطاقة وكمية ا ركة وبذلك يكون طول ا وجة الواردة (λ_i) وا نعكسة (λ_f) متساويان ا يع أن طويلتا شعاع ا وجة الوارد $(\|\vec{K}_i\|=2\pi/\lambda_i)$ وا نعكس $(\|\vec{K}_f\|=2\pi/\lambda_f)$ متساويتان.أي أن هناك ا فظا القيمة العددية لشعاع ا وجة $\vec{K}$، حيث أنه لا يتغ الانعراج إلا ا اه $\vec{K}$ فقط ووفق نظام ع ا تجاهات ا د من خلال الشكل(18.2).العلاقة التالية:

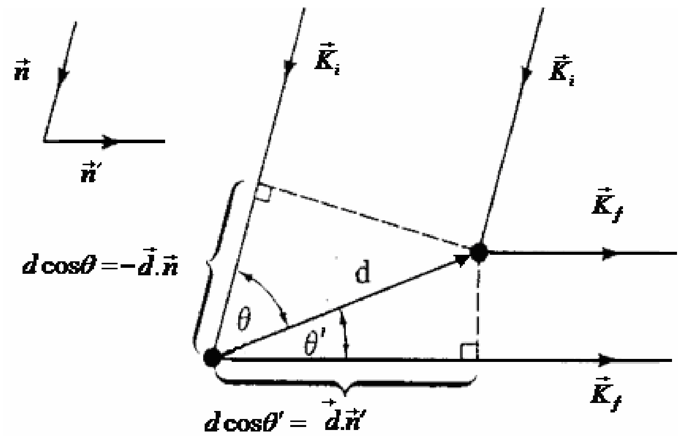
$$\Delta\vec{K} = \vec{K}_f - \vec{K}_i \qquad (37\text{-}2)$$



الشكل(18.2): مظهر الانعراج الشعاعي و ا وجي.

عندما تسقط حزمة من الأشعة السينية ذات متجه موجة $\vec{K}_i$ با اه $\vec{n}$ على ذرت من الشبكة البعد بينهما d إحدى أبعاد متجهات الانسحاب الأولية للشبكة ا باشرة أي: $\vec{d} = \vec{a}_i (i = 1, 2, 3)$, تعا انعكاسا تجه موجة $\vec{K}_f$ با اه $\vec{n}'$ كما يب الشكل(19.2) ومن هندسته د العلاقة أدناه لفرق ا سا ب الأشعة الواردة وا نعكسة بإتباع ا داء القياسي للمتجهات .حيث: $\vec{n}$ و $\vec{n}'$ على الشكل متجها الوحدة كل على حد:

$$d\cos\theta + d\cos\theta' = \vec{d}.(\vec{n}' - \vec{n}) \qquad (38\text{-}2)$$



ووفقا لشرط التداخل البناء فإن فرق ا سا ب أن يساوي عدد صحيح من طول ا وجة أي:

$$\vec{d}.(\vec{n}' - \vec{n}) = m\lambda \qquad (39\text{-}2)$$

بضرب طر العلاقة (39-2) بـ $\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)$ صل على العلاقة التالية:

$$\vec{d}\,.\left[\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right).\vec{n}\,' - \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right).\vec{n}\right] = 2\pi m$$

$$\vec{d}\,.(\vec{K}_f - \vec{K}_i) = 2\pi m$$

$$\vec{d}\,.(\Delta\vec{k}) = 2\pi m \qquad (40\text{-}2)$$

وحيث أن: $\vec{d} = \vec{a}_i\,(i = 1, 2, 3)$ يمكن أن نجد المعادلات التالية:

$$\vec{a}_1.(\Delta\vec{k}) = 2\pi m_1 \qquad (41\text{-}2)$$

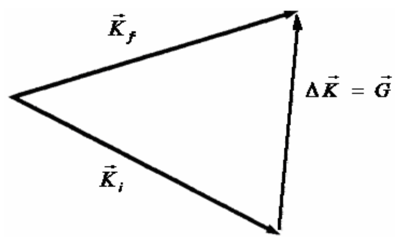
$$\vec{a}_2.(\Delta\vec{k}) = 2\pi m_2 \qquad (42\text{-}2)$$

$$\vec{a}_3.(\Delta\vec{k}) = 2\pi m_3 \qquad (43\text{-}2)$$

تدعى العلاقات (2-41) و (2-42) و (2-43) شروط فون لاوي للانعراج, حيث نلاحظ أن قيمة $(\overrightarrow{\Delta K})$ تمثل مقلوب طول, و بالاستعانة بالعلاقة (2-13) يمكن أن نجد أن $(\overrightarrow{\Delta K})$ هذا ما هو إلا قيمة من قيم شعاع الانسحاب الأساسي للشبكة المعكوسة $\vec{G}$ و عليه يمكن صياغة شرط الانعراج(أنظر الشكل(20.2)) كما يلي:

$$\Delta\vec{k} = \vec{G} \qquad (44\text{-}2)$$

$$\vec{K}_f = \vec{K}_i + \vec{G} \qquad (45\text{-}2)$$



الشكل(20.2): **الانعراج في الشبكة المعكوسة**

نربع طرفي العلاقة (2-45) فنجد :

$$K_f^2 = K_i^2 + G^2 + 2\vec{K}_i.\vec{G} \qquad (46\text{-}2)$$

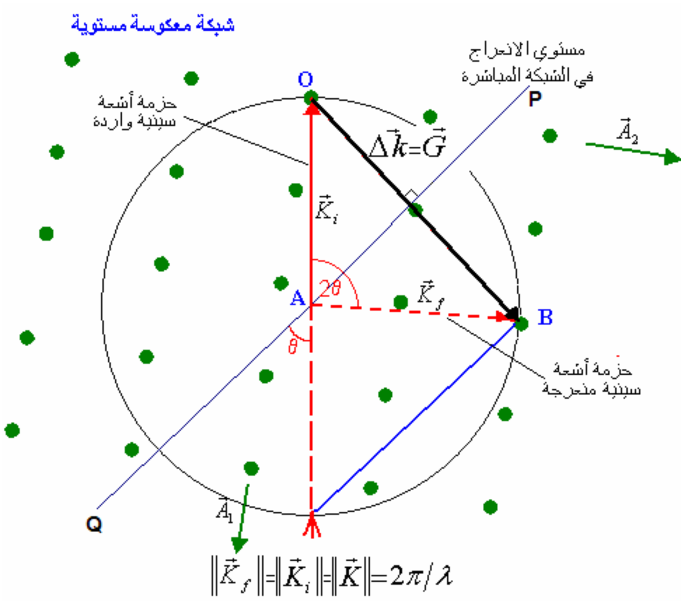
و ا سبق شرحه فإن $\|\vec{K}_f\| = \|\vec{K}_i\| = \|\vec{K}\| = k$ ومنه تصبح العلاقة(2-46) بالشكل:

$$G^2 + 2\vec{K}.\vec{G} = 0 \qquad (47\text{-}2)$$

العلاقة (2-47) ثل شرط الانعراج قي الشبكة ا عكوسة أو معادلة براغ   الشبكة ا عكوسة.

7-9-2 إنشاء إيوالد (Ewald):

إنشاء إيوالد هو ثيل هندسي ي لنا أن شرط برا غ للانعراج هو نفسه سواء كان   الشبكة ا باشرة أو ا عكوسة وذلك وفقا للتمثيل ا ندسي التا (سوف يكون التمثيل   ا ستوي فقط و مكافئ للتمثيل الفضائي من حيث ا فاهيم ا قدمة) :



الشكل(21.2): إنشاء إيوالد.

ننشئ شبكة معكوسة مستوية   تار نقطة كيفية من الشبكة ولنسمها A , نرسم ا تجه $\overrightarrow{AO} = \vec{K}_i$ الذي طوله $\|\overrightarrow{AO}\| = \|\vec{K}_i\| = k = 2\pi/\lambda$ و يربط ب A و إحدى عقد الشبكة ا عكوسة O يث يكون ثلا لا اه حزمة الأشعة السينية الساقطة ذات الطول ا وجي λ، فإذا ر نا   الشبكة ا عكوسة دائرة مركزها A ونصف قطرها $\|\overrightarrow{AO}\|$ نلاحظ أ ا تقطع بعض عقد الشبكة على يطها(أنظر الشكل(21.2)), تار إحداها ونرسم ا تجه $\overrightarrow{AB}$ الذي يربط ب A و العقدة ا ختارة B فيكون ا تجه $(\overrightarrow{AB} = \vec{K}_f)$ ثلا للأشعة ا نعكسة) ع أنه دث انعكاس براغ يث أن أحد أنصاف الأقطار ثل الشعاع الوارد $\vec{K}_i$ و النصف الأخر ثل ا تجهة ا نعكسة $\vec{K}_f$). نلاحظ أن ا تجه $\overrightarrow{OB}$ الذي مبدأه النقطة O (ولتكن هي نقطة الأصل (ا بدأ)   الشبكة ا عكوسة) ثل شعاعا من أشعة الشبكة ا عكوسة وعليه كن أن

نكتب $\overrightarrow{OB}=\vec{G}=\overrightarrow{\Delta k}$.نقوم الآن برسم مستقيم عمودي منصف لـ $\|\vec{G}\|$ ر من مركز الدائرة (A) وليكن (PQ)، دد لنا هذا ا ط مستويا بلوريا فضاء الشبكة ا باشرة إذ كن أن نلاحظ النقطة(A) سقوط شعاع الأشعة السينية على ا ستوي بزاوية θ ينعكس عليه انعكاسا مرآتيا (أي بنفس الزاوية). وحيث أن ا سافة ب مستوي ذري تعطى بالعلاقة:

$$\|\vec{G}\|=\|\overrightarrow{\Delta k}\|=\frac{2\pi}{d}\Rightarrow d=\frac{2\pi}{\|\vec{G}\|} \qquad (48\text{-}2)$$

من الشكل(21.2) د أن :

$$\sin\theta=\frac{\frac{1}{2}\|\vec{G}\|}{\|\vec{K}\|}\Rightarrow\|\vec{G}\|=2\|\vec{K}\|\sin\theta\Rightarrow\frac{2\pi}{d}=2.\frac{2\pi}{\lambda}\sin\theta\Rightarrow$$

$$\lambda=2d\sin\theta \qquad (49\text{-}2)$$

العلاقة (2-49) ثل علاقة براغ الشبكة ا باشرة من أجل ($n=1$)، ومن أجل الرتبة (n) د:

$$n\lambda=2d\sin\theta \qquad (50\text{-}2)$$

ومن الشكل(21.2) أيضا نرى أن :

$$\Delta\vec{k}=\vec{G}=\vec{K}_f-\vec{K}_i\Rightarrow\vec{K}_f=\vec{K}_i+\vec{G} \qquad (51\text{-}2)$$

من العلاقة (2-51) د:

$$K_f^2=K_i^2+G^2+2\vec{K}_i.\vec{G} \qquad (52\text{-}2)$$

من الشكل(21.2) نلاحظ أن: $\|\vec{K}_f\|=\|\vec{K}_i\|=\|\vec{K}\|=k$ ومنه تصبح العلاقة(2-52) بالشكل:

$$G^2+2\vec{K}.\vec{G}=0 \qquad (53\text{-}2)$$

و العلاقة (2-53) ثل علاقة براغ الشبكة ا عكوسة.

2-9-8 مناطق بريلوان (Brillouin):

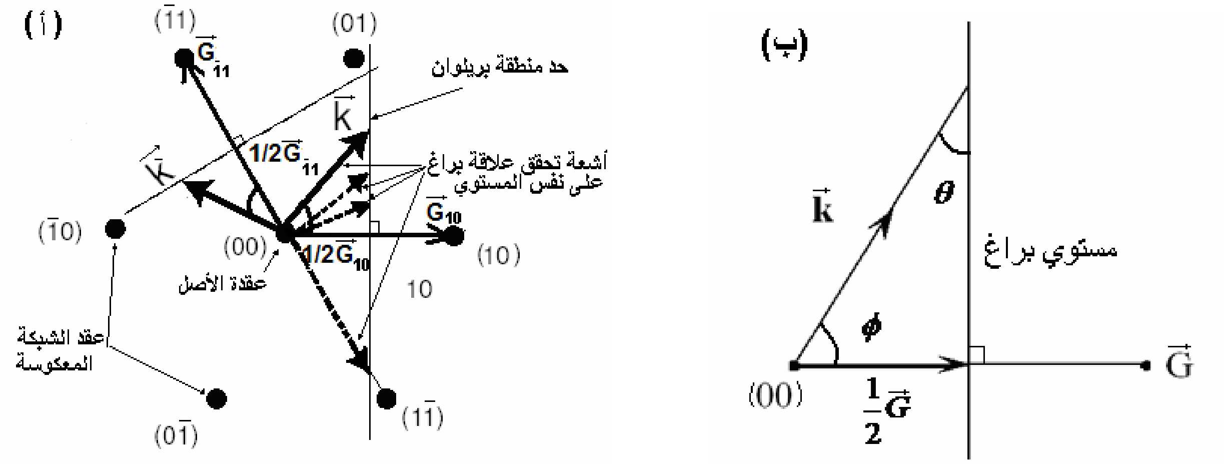
هي بالتعريف خلية ويغنر – زايتس (Wigner-Seitz) الشبكة ا عكوسة، وهذا التعريف كن أن يفسر لنا شرط الانعراج هندسيا من العلاقة(2-47)، والا لابد من الرجوع إليها ثانية لفهم حقيقة مناطق بريلوان و ا أن كل من $\vec{G}$ و $-\vec{G}$ متجهان الشبكة ا عكوسة كن أن نكتب العلاقة(2-47) بعد استبدال $\vec{G}$ بـ $-\vec{G}$:

$$2\vec{k}.\vec{G}=G^2 \Rightarrow \vec{K}.\vec{G}=\frac{1}{2}G^2 \Rightarrow \left\|\vec{K}\right\|.\left\|\vec{G}\right\|\cos\phi=\frac{1}{2}G^2 \Rightarrow$$

$$\left\|\vec{K}\right\|\cos\phi=\frac{1}{2}\left\|\vec{G}\right\| \quad (54\text{-}2)$$

والعلاقة (2-54) هي الشكل الآخر عادلة براغ حيث ϕ الزاوية ب $\vec{G}$ و $\vec{K}$، ولتحقيق العلاقة (2-54) نأخـذ شبكة معكوسة ننشئ ا ستوي العمودي على منتصف ا تجه $\vec{G}$، فيكون مسقط أي متجه $\vec{K}$ مرسومة من مبدأ الشبكة ا عكوسة(عقدة الأصل) إ ا ستوي العمودي ا نشأ على $\vec{G}$ قق للعلاقة (2-54) (أنظر الشكل(22.2)(أ))، وا ستوي ذاك ثل حدا من حدود إحدى مناطق بريلوان ،ويظهر من الشكل (22.2) (ب) أن ($\cos\phi=\sin\theta$) ومنـه كـن نلاحظ من جديد علاقة براغ:

$$K\cos\phi=K\sin\theta=\frac{1}{2}G \Rightarrow \frac{2\pi}{\lambda}\sin\theta=\frac{1}{2}.\frac{2\pi}{d} \Rightarrow$$
$$\lambda=2d\sin\theta \quad (55\text{-}2)$$

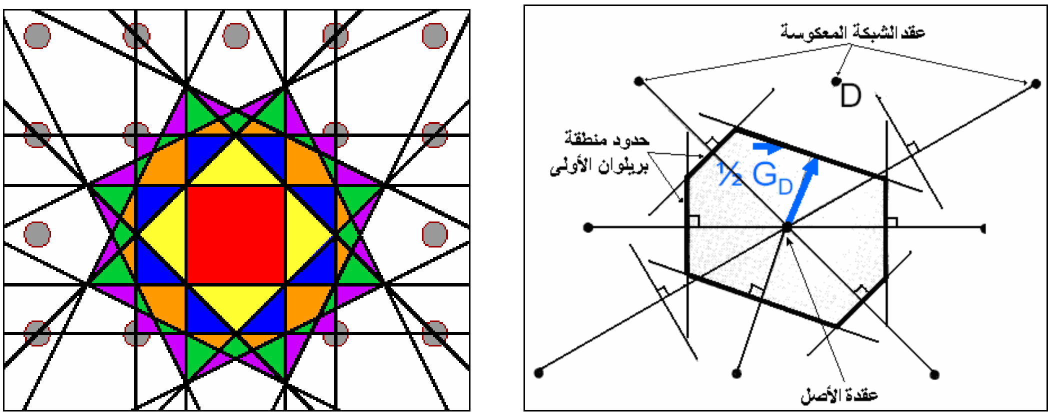


الشكل(22.2): قيق علاقة براغ على حدود مناطق بريلوان.

تسمى ا ستويات تلك ا تعامد تلف متجهات الشبكة العكسية منتصفا ا دود مناطق بريلوان و ذه ا دود أ ية بالغة تكمن أن كل ا تجهات ا وجية ا ترد من داخل إحدى مناطق بريلوان لتسقط على حدودها سوف قق شرط براغ الانعراج (حال التفاعل ا رن) و دث تداخلا بناء وجا ا ا نعكسة عند هذه ا دود علما بأن ا وجات الساقطة قد تكون أشعة سينية أو ا وجات ا رافقة للإلكترونات أو للنيترونات. وسوف تتضح أ ية مناطق بريلوان عند دراسة حركة الإلكترونات ا رة داخل البلورة والتعرض لنظرية عصابات الطاقة.

ولإنشاء مناطق بريلوان نتبع الأسلوب التا :

نرسم أقصر ا تجهات $\vec{G}$ من عقدة الأصل الشبكة ا عكوسة إ أقرب العقد ا اورة ا (الأبعاد الثلاثة) نرسم ا ستويات العمودية ا نصفة ذه ا تجهات فنحصل على منطقة يط بعقدة الأصل . هذه ا نطقة تسمى منطقة بريلوان الأو وهي ثل أقل حجم يط به ا ستويات العمودية ا نصفة للمتجهات ا ذكورة . تلي هذه ا نطقة منطقة أخرى تعرف نطقة بريلوان الثانية و كن ا صول عليها برسم ا ستويات العمودية ا نصفة تجهات الشبكة ا عكوسة ا توصل عقدة الأصل بالعقد ا تلي عقد ا نطقة الأو , منطقة بريلوان الثالثة ا تكتمل بأخذ العقد ا تلي عقد ا نطقة الثانية بعدها عن عقدة الأصل ورسم ا ستويات العمودية ا نصفة للمتجهات . وهكذا كن رسم كل مناطق بريلوان (أنظر الشكل(23.2)).



الشكل(23.2): الرسم على اليم ثل منطقة بريلوان الأو لشبكة معكوسة مائلة بينما **الرسم** علىاليسار يب مناطق بريلوان الست لشبكة معكوسة مربعة.

- بعض خصائص مناطق بريلوان:

1. يع مناطق بريلوان متساوية ا جم وحجمها يساوي حجم خلية الوحدة الأولية للشبكة ا عكوسة.
2. مناطق بريلوان افظ على التناظر النقطي للشبكة ا عكوسة.
3. كل منطقة من مناطق بريلوان تواة كليا ا نطقة ا تليها أي أن: ا نطقة الأو تواة الثانية والثانية تواة الثالثة وهكذا دواليك.

2-9-9 معكوس شبكات الفئة المكعبة :

نقوم هذا العنصر بإ اد معكوس شبكات الفئة مكعبة وهي: ا كعبة البسيطة وا كعبة ا مركزة وا كعبة ا مركزة الأوجه.

1. معكوس الشبكة المكعبة البسيطة(CS):

أشعة الانسحاب الأولية للشبكة ا كعبة البسيطة ا باشرة هي: $\vec{a}_1 = a\,\vec{i} \;,\; \vec{a}_2 = a\,\vec{j} \;,\; \vec{a}_3 = a\,\vec{k}$

سب أشعة الانسحاب الأولية عكوس الشبكة ا كعبة البسيطة كما يلي:

$$\vec{A}_1 = 2\pi\frac{\vec{a}_2\times\vec{a}_3}{\vec{a}_1.(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)} = 2\pi\frac{a^2}{a^3}\left(\vec{j}\times\vec{k}\right) = \frac{2\pi}{a}\vec{i}$$

$$\vec{A}_2 = 2\pi\frac{\vec{a}_3\times\vec{a}_1}{\vec{a}_1.(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)} = 2\pi\frac{a^2}{a^3}\left(\vec{k}\times\vec{i}\right) = \frac{2\pi}{a}\vec{j}$$

$$\vec{A}_3 = 2\pi\frac{\vec{a}_1\times\vec{a}_2}{\vec{a}_1.(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)} = 2\pi\frac{a^2}{a^3}\left(\vec{i}\times\vec{j}\right) = \frac{2\pi}{a}\vec{k}$$

نلاحظ أن الأشعة $\vec{A}_1,\vec{A}_2,\vec{A}_3$ اثل من حيث الشكل أشعة الانسحاب الأولية للشبكة ا كعبة البسيطة ا باشرة لذلك فإن معكوس الشبكة ا كعبة البسيطة هو شبكة مكعبة بسيطة ثابتها $2\pi/a$.

أما منطقة بريلوان الأو فهي عبارة عن مكعب طول ضلعه $2\pi/a$ دد وجوهـه الـستة با ـستويات ا نـصفة للمتجهات التالية: $\pm\vec{A}_1 = \pm\frac{2\pi}{a}\vec{i}, \pm\vec{A}_2 = \pm\frac{2\pi}{a}\vec{j}, \pm\vec{A}_3 = \pm\frac{2\pi}{a}\vec{k}$.حجمها: $V_{SB}^{CS} = \vec{A}_1.(\vec{A}_2\times\vec{A}_3) = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$

2. معكوس الشبكة المكعبة المركزة (CC):

1. أشعة الانسحاب الأولية للشبكة ا كعبة ا مركزة ا باشرة هي:

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}\left(\vec{i}+\vec{j}-\vec{k}\right) \text{ ، } \vec{a}_2 = \frac{a}{2}\left(\vec{i}-\vec{j}+\vec{k}\right) \text{ ، } \vec{a}_1 = \frac{a}{2}\left(-\vec{i}+\vec{j}+\vec{k}\right)$$

نقوم ساب أشعة الانسحاب الأولية عكوس الشبكة ا كعبة ا مركزة كما يلي:

$$\vec{A}_1 = 2\pi\frac{\vec{a}_2\times\vec{a}_3}{\vec{a}_1.(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)} = 2\pi\frac{\left(a^2/4\right)}{\left(a^3/2\right)}\left(\left(\vec{i}-\vec{j}+\vec{k}\right)\times\left(\vec{i}+\vec{j}-\vec{k}\right)\right) = \frac{\pi}{a}\left(\vec{k}+\vec{j}+\vec{k}+\vec{i}+\vec{j}-\vec{i}\right) \quad (56\text{-}2)$$

$$= \frac{2\pi}{a}\left(\vec{k}+\vec{j}\right)$$

بنفس الطريقة د:

(57-2) $$\vec{A}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1.(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} = \frac{2\pi}{a}\left(\vec{i} + \vec{k}\right)$$

(58-2) $$\vec{A}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1.(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} = \frac{2\pi}{a}\left(\vec{j} + \vec{i}\right)$$

نلاحظ أن الأشعة $\vec{A}_1, \vec{A}_2, \vec{A}_3$ تماثل من حيث الشكل أشعة الانسحاب الأولية للشبكة المكعبة الممركزة الأوجه CFC لذلك فإن معكوس الشبكة المكعبة الممركزة هو شبكة مكعبة ممركزة الأوجه ثابتها $4\pi/a$ (طول ضلع خلية الوحدة الاصطلاحية في الشبكة المعكوسة).

أما منطقة بريلوان الأولى فهي تماثل من حيث الشكل خلية ويغنر - زايتس للشبكة المكعبة الممركزة الأوجه المباشرة وهي عبارة عن شكل معين اثني عشري أي له اثنا عشرة سطحا بشكل معين (أنظر الشكل(24.2)) ينتج من من اثني عشرة مستويا منصفا للمتجهات الاثني عشرة التالية: $\frac{2\pi}{a}\left(\pm\vec{k} \pm \vec{j}\right)$, $\frac{2\pi}{a}\left(\pm\vec{i} \pm \vec{k}\right)$, $\frac{2\pi}{a}\left(\pm\vec{j} \pm \vec{i}\right)$. و حجمها هو:

$V_{SB}^{CC} = \vec{A}_1.\left(\vec{A}_2 \times \vec{A}_3\right) = 2\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$.

3. معكوس الشبكة المكعبة الممركزة الأوجه (CFC):

أشعة الانسحاب الأولية للشبكة المكعبة الممركزة الأوجه المباشرة هي:

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}\left(\vec{i} + \vec{j}\right) \quad ، \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}\left(\vec{i} + \vec{k}\right) \quad ، \quad \vec{a}_1 = \frac{a}{2}\left(\vec{j} + \vec{k}\right)$$

نحسب أشعة الانسحاب الأولية لمعكوس الشبكة المكعبة الممركزة الأوجه كما يلي:

(59-2) $$\vec{A}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1.(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} = 2\pi \frac{\left(a^2/4\right)}{\left(a^3/4\right)}\left(\left(\vec{i} + \vec{k}\right) \times \left(\vec{i} + \vec{j}\right)\right) = \frac{2\pi}{a}\left(\vec{k} + \vec{j} - \vec{i}\right) = \frac{2\pi}{a}\left(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}\right)$$

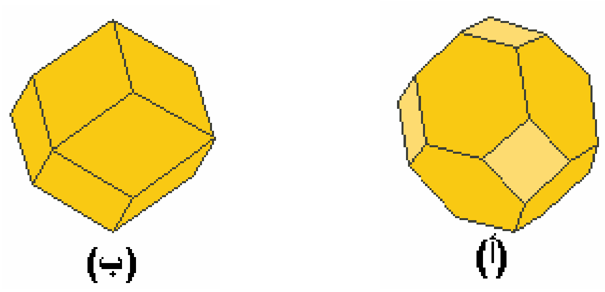
بنفس الطريقة نجد:

(60-2) $$\vec{A}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1.(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} = \frac{2\pi}{a}\left(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}\right)$$

(61-2) $$\vec{A}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1.(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} = \frac{2\pi}{a}\left(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}\right)$$

نلاحظ أن الأشعة $\vec{A}_1,\vec{A}_2,\vec{A}_3$ اثل من حيث الشكل أشعة الانسحاب الأولية للشبكة ا كعبة ا ركزة CC لذلك فـإن معكوس الشبكة ا كعبة ا مركزة الأوجه هو شبكة مكعبة ركزة ثابتها $4\pi/a$.

أما منطقة بريلوان فهي اثل من حيث الشكل خلية ويغنر - زايتس للشبكة ا كعبة ا مركزة ا باشرة CC وهي عبارة عن ا وجوه مشذب(مقطوع)(أنظر الشكل(24.2)) له انية أوجه سداسية منتظمة تنتج من انية مـستويات منـصفة للمتجهات الثمانية التالية: $\frac{2\pi}{a}\left(\pm\vec{i}\pm\vec{k}\pm\vec{j}\right)$ و ستة أوجه مربعة تنتج من ستة مـستويات منـصفة للمتجهـات الـستة التالية: $\pm\frac{4\pi}{a}\vec{i}$, $\pm\frac{4\pi}{a}\vec{j}$, $\pm\frac{4\pi}{a}\vec{K}$ و حجمها هو: $V_{SB}^{CFC}=\vec{A}_1.\left(\vec{A}_2\times\vec{A}_3\right)=4\left(\frac{2\pi}{a}\right)^3$.



الشكل(24.2): منطقة بريلوان الأو للشبكة ا كعبة ا مركزة الأوجه CFC (أ) و ا مركزة CC (ب) .

10-2 عامل البنية :

سبق دراستنا للانعراج ولغرض السهولة أن اعت نا أن البلورة متكونة من عقد الشبكة البلورية ال تعمل كمراكـز للاستطارة, و تم إن كانت هذه العقد عبارة عن قواعد ذرية حيث أ ا كن أن وي ذرة واحدة كما كن أن ـوي عدد كب من الذرات. إن شدة حزمة الأشعة ا نعرجة تعتمد على تويات مركز الاستطارة (القواعد) أي على عدد الذرات ا وجودة القاعدة ومواضع تواجدها.لدى سوف نعمد هذا البند إ اد العبارة الرياضية لعامل البنية.

لنعت خلية وحدة اصطلاحية من شبكة بلوية ما، ولتكن وي عقدة واحدة موزعة على رؤوسها فقط أي أننا اعت نـا الشبكة من النوع البسيط, وإذا كانت الشبكة ليست بسيطة(أي أن خليتها الاصطلاحية وي ذرات أخـرى مواضـع تلفة عن الرؤوس إضافة إ ذرات الرؤوس) كن أن نعت ها بسيطة بقاعدة تارة مناسبة, تعرف ذرة معينة (j) من ذرات هذه القاعدة ا ختارة داخل ا لية تجهات من الشكل: $\left(\vec{r}_j=x_j\vec{a}+y_j\vec{b}+z_j\vec{c}\right)$.حيـث أن ا تجهـات $\vec{a},\vec{b},\vec{c}$ هـي متجهات أضلاع خلية الوحدة الاصطلاحية.و ا تجه $\vec{r}_j$ معرف بالنسبة لعقدة ما من الـشبكة البلوريـة معطـاة با تجـه: $\left(\vec{R}_{m,n,p}=m\vec{a}+n\vec{b}+p\vec{c}\right)$ ا عرف من عقدة الأصل(ا بدأ) ذات متجه ا وضع $\vec{R}_{0,0,0}$. حيث: كن اعتبار $\left(\vec{R}_{m,n,p}\right)$ متجه انسحاب أساسي يربط عقد الأصل ميع عقد(قواعد)البلور. وبالتا يعطى متجه الذرة ا عرفة با تجه $\vec{r}_j$ بالنسبة للقاعدة

ا اوية ا ا عرفة با تجه $\left(\vec{R}_{m,n,p}\right)$ با تجه: $\left(\vec{r}_j+\vec{R}_{m,n,p}\right)$(أنظر الشكل(25.2)).

من ا علوم أن الإلكترونات الذرة لا تقبع نقطة واحدة بل تتوزع بشكل مع حول النواة.تعطى كثافـة توزيـع الإلكترونات C_j عند نقطة معينة من ذرة (j) ا لية الاصطلاحية على الشكل:

$$C_j\left(\vec{R}-\left(\vec{r}_j+\vec{R}_{m,n,p}\right)\right) \qquad (62\text{-}2)$$

حيث: $\vec{R}$ متجه يصل مركز نقطة الأصل بنقطة معينة من السحابة الإلكترونية.

يع عن توزيع الإلكترونات البلور بتراكب دوال توزيع الذرية C_j, لدى كن كتابة التركيز الكلي للإلكترونات ا لية الاصطلاحية كما يلي :

$$N(\vec{r}\,')=\sum_{j=1}^{S}C_j\left(\vec{R}-\left(\vec{r}_j+\vec{R}_{m,n,p}\right)\right) \qquad (63\text{-}2)$$

حيث أن: $\vec{r}\,'=\vec{R}-\left(\vec{r}_j+\vec{R}_{m,n,p}\right)$ و ا مع على (j)يتم على ذرات القاعدة وال عددها S .

تعطى سعة ا وجة الكلية ا ستطارة (سعة ا وجة الكلية النا ة من التداخل البناء للأمواج ا نعرجة) $\vec{\Omega}$ بالنسبة للبلـور بالصورة:

$$\Omega=\sum_{mnp}^{M^3}\int_{\text{خلية}}N(\vec{r}\,')e^{i\vec{R}.\overrightarrow{\Delta k}}dv \qquad (64\text{-}2)$$

حيث : ا مع على $(m\ n\ p)$يتم على يع عقد(قواعد أو خلايا) الشبكة البلورية و ا عددها M^3 .

كن كتابة ا عادلة(64-2) على الصورة:

$$\Omega=\sum_{mnp}^{M^3}\sum_{j}^{S}\int_{\text{خلية}}C_j(\vec{r}\,')dv\, e^{i\left(\vec{r}\,'+\vec{R}_{m,n,p}+\vec{r}_j\right).\overrightarrow{\Delta k}}$$

$$\Omega=\sum_{mnp}^{M^3}\sum_{j}^{S}f_j\, e^{i\left(\vec{R}_{m,n,p}+\vec{r}_j\right).\overrightarrow{\Delta k}} \qquad (65\text{-}2)$$

حيث:

$$f_j = \int_{خلية} C_j(\vec{r}')\, dv\, e^{i\vec{r}'.\overrightarrow{\Delta k}} \qquad (66\text{-}2)$$

يعرف f_j بعامل الشكل للذرة ذات الرتبة (j) وهو معامل ليس له وحدة.

نعلم من شروط لاو للتداخل البناء أن : $\overrightarrow{\Delta k} = \vec{G}$ وعليه كن كتابة ا عادلة (65-2) كما يلي:

$$\Omega = M^3 \sum_j^S f_j\, e^{i\vec{r}_j.\vec{G}} e^{i\vec{R}_{m,n,p}.\vec{G}} = M^3 \sum_j^S f_j\, e^{i\vec{r}_j.\vec{G}}$$

حيث: $\left(e^{i\vec{R}_{m,n,p}.\vec{G}} = 1\right)$.

بوضع $\Omega = M^3 F$ ننجد أن :

$$F = \sum_j^S f_j\, e^{i\vec{r}_j.\vec{G}} \qquad (67\text{-}2)$$

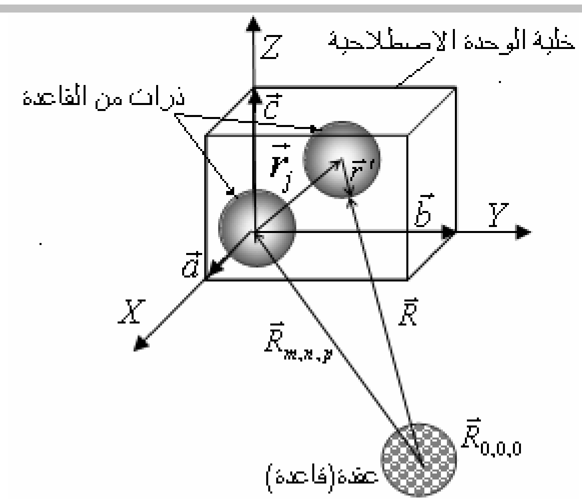
نسمي F بعامل البنية.من خصائص الشبكة ا عكوسة كن أن حصل على مايلي:

$$\vec{r}_j.\vec{G} = \left(x_j\vec{a} + y_j\vec{b} + z_j\vec{c}\right)\left(h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*\right)$$
$$= 2\pi\left(x_j h + y_j k + z_j l\right)$$

نستطيع كتابة العبارة الرياضية لعامل البنية بصيغتها الأخ ة على الشكل:

$$F_{hkl} = \sum_j^S f_j\, e^{i2\pi\left(x_j h + y_j k + z_j l\right)} \qquad (68\text{-}2)$$

واضح من العلاقة أنه أن عامل البنية F_{hkl} قد يكون عددا مركبا كما قد يكون حقيقيا لدى يتعامل كث من الأحيان مع طويلته.لعامل البنية علاقة صر ة حتويات هذه ا لية(عدد ذرا ا وأماكن وضعها) وليس له علاقة بشكل أو حجـم ا لية. وحيث أنه يتناسب مع سعة ا وجة الكلية ا ستطارة فإن انعدامه يع انعدامها وبالتا لاتظهر ا ستويات (hkl) شدة منعرجة.بينما لو اختلف عامل البنية عن الصفر فإن ا ستويات (hkl) تظهر شدة منعرجة.



الشكل(25.2): موضع ذرة ما خلية من الشبكة البلورية.

11-2 حساب عامل البنية لبعض البنى البلورية:

نقوم هذا البند بتطبيق العلاقة (2-68) ساب عامل بنية بعض البـ البلورية:

- **بنية المكعب البسيط** (CS): خلية الوحدة الاصطلاحية هذه البنية مكعبة وي ذرة واحدة فقط رؤوس ا ليـة احداثيا ا: $(0,0,0)$ و عليه كن حساب عامل البنية كما يلي:

$$F_{hkl} = f\, e^{i2\pi(0h+0k+0l)} = f$$

نلاحظ أن $(F_{hkl} \neq 0)$ أي أن قيمة F_{hkl} لاتعتمد على قيم h,k,l ا يع أن يع ا ستويات (hkl) تظهر شدة منعرجة.

- **بنية المكعب المركز** (CC): خلية الوحدة الاصطلاحية هذه البنية مكعبة وي ذرت ((حيث نعتـ الـشبكة (CC) هي عبارة عن (CS) بقاعدة مكونة من ذرت)) واحدة رؤوس ا لية احداثيا ا: $(0,0,0)$ و أخـرى مركزهـا احداثيا ا: $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$ و عليه كن حساب عامل البنية كما يلي:

$$F_{hkl} = f + f\, e^{i2\pi\left(h/2+k/2+l/2\right)} = f\left(1+e^{i\pi(h+k+l)}\right)$$

نلاحظ أن قيمة F_{hkl} تعتمد على قيم h,k,l لدى سوف نناقش قيمته حسب قيم هذه الأخ ة.

إذا كان ا موع $h+k+l$ عددا زوجيا أي: $h+k+l=2n$ فإن $(F_{hkl}=2f \neq 0)$ وبالتا تظهر شدة منعرجة.

بينما إذا كان ا موع $h+k+l$ عددا فرديا أي: $h+k+l=2n+1$ فإن $(F_{hkl}=0)$ وبالتا لا تظهر شدة منعرجة.

- **بنية المكعب المركز الأوجه** (CFC)**:** خلية الوحدة الاصطلاحية هذه البنية مكعبة , وي أربع ذرات((حيث نعت الشبكة (CFC) هي عبارة عن (CS) بقاعدة مكونة من أربع ذرات)) واحدة رؤوس ا لميـة احـداثيا ا: $(0,0,0)$ و ثلاثة ذرات مراكز وجوهها احداثيا ا: $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$ ، $\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right)$، $\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$ و عليه كن حساب عامل البنية كما يلي:

$$F_{hkl} = f\left(1+e^{i\pi(h+k)}+e^{i\pi(h+l)}+e^{i\pi(k+l)}\right)$$

مناقشة قيمة F_{hkl} حسب قيم القرائن h,k,l:

إذا كانـت القـرائن h,k,l مـن نفـس الزوجيـة أي يعهـا أعـدادا زوجيـة أو يعهـا أعـدادا فرديـة فـإن $(F_{hkl} = 4f \neq 0)$ وبالتا تظهر شدة منعرجة.

بينما إذا كانت القرائن h,k,l ليست من نفس الزوجية فإن $(F_{hkl} = 0)$ وبالتا لا تظهر شدة منعرجة.

- **بنية كلوريد السيزيوم** $(CsCl)$**:** خلية الوحدة الاصطلاحية هذه البنية مكعبة وي أيون ((حيث نعت شـبكة البنية $(CsCl)$ عبارة عن (Cs^{+}) بقاعدة مكونة من أيون (Cl^{-}) و أيون (Cs^{+}))) أيون (Cs^{+}) رؤوس ا لمية إحداثياتـه: $(0,0,0)$ و أيون (Cl^{-}) مركزها إحداثياته: $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$ و عليه كن حساب عامل البنية كما يلي:

$$F_{hkl} = f_{Cs^{+}} + f_{Cl^{-}}\, e^{i\pi(h+k+l)}$$

مناقشة قيمة F_{hkl} حسب قيم القرائن h,k,l:

إذا كان ا موع $h+k+l$ عددا زوجيا فإن $(F_{hkl} = f_{Cs^{+}} + f_{Cl^{-}} \neq 0)$ وبالتا تظهر شدة منعرجة.

بينما إذا كان ا موع $h+k+l$ عددا فرديا فإن $(F_{hkl} = 0)$ وبالتا لا تظهر شدة منعرجة.

- **بنية كلوريد الصوديوم** $(NaCl)$**:** خلية الوحدة الاصطلاحية مكعبة وي انية أيونات((حيث نعتـ شـبكة البنية $(NaCl)$ عبارة عن شبكة (CS) بقاعدة مكونة من أربـع أيونـات (Cl^{-}) و أربـع أيونـات (Na^{+}) بـدلا مـن اعتبارها (CFC) بقاعدة مكونة من أيون لأن هذا لا يفي بالشرط الذي وضع طليعة هذا البند)) أربعة أيونات (Cl^{-}) رؤوس ا لمكعب ومراكز وجوهه وأربعة أيونات (Na^{+}) تتواجد منتصفات الأحرف ومركز ا لمكعب و إحداثيا ا هي:

Na^{+}: $(0,0,0)$، $\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$، $\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right)$، $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right)$ و Cl^{-}: $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$، $\left(\frac{1}{2},0,0\right)$، $\left(0,\frac{1}{2},0\right)$، $\left(0,0,\frac{1}{2}\right)$.

كننا حساب عامل البنية كما يلي:

$$F_{hkl} = f_{Na^+}\left(1+e^{i\pi(h+k)}+e^{i\pi(h+l)}+e^{i\pi(k+l)}\right) + f_{Cl^-}\left(e^{i\pi(h+k+l)}+e^{i\pi h}+e^{i\pi k}+e^{i\pi l}\right)$$

مناقشة قيمة F_{hkl} حسب قيم القرائن h,k,l:

إذا كانت القرائن h,k,l ليست من نفس الزوجية $(F_{hkl}=0)$ وبالتا لا تظهر شدة منعرجة.

إذا كانت القرائن h,k,l كلها أعداد زوجية فإن $(F_{hkl}=4f_{Na^+}+4f_{Cl^-})$ وبالتا تظهر شدة منعرجة.

بينما إذا كانت القرائن h,k,l يعها أعداد فردية فإن $(F_{hkl}=4f_{Na^+}-4f_{Cl^-})$ وبالتا تظهر شدة منعرجة.

نب ا دول (26.2) أمثلة لبعض ا ستويات الا كن أن تظهر شدة منعرجة و يزها بالإشارة (+) و ال لا كن أن تظهر شدة منعرجة و يزها بالإشارة (-) بالنسبة للب البلورية ا دروسة أعلاه.

NaCl	CsCl	CFC	CC	Cs	$N^2=h^2+k^2+l^2$	ا ستوي (hkl)
-	+	-	-	+	1	(100)
-	+	-	+	+	2	(110)
+	+	+	-	+	3	(111)
+	+	+	+	+	4	(200)
-	+	-	-	+	5	(210)
-	+	-	+	+	6	(211)
+	+	+	+	+	8	(220)
-	+	-	-	+	9	(300) - (221)

ا دول(2.2): أمثلة لبعض ا ستويات البلورية ال تظهر وال لا تظهر شدة منعرجة ب تلفة.

الفصل الثالث

الروابط البلورية والخصائص المرونية

الروابط البلورية
الخصائص المرونية

1-3 مقدمة:

عندما تتجمع الذرات ا ـرة سواء كانت من نوع واحد أو أكثر فإ ا ترتبط فيما بينها ـت تأث قوى ـتلفة طبيعتها و قو ا وهذا الارتباط هو الذي يكون ا ادة حالا ا ا ختلفة , و حالة ا واد الصلبة ـد عددا من انواع الارتباط يسود أكثر من غ ه ويؤدي ذلك إ ظهور ـموعات من ا واد ذات ا ـصائص ا تشا ة, و ـكن تصنيف الروابط ا واد الصلبة إ صنف : روابط أساسية و روابط ثانوية أما الأساسية فهي الرابطة الأيونية و الرابطة التسا ية و الرابطة ا عدنية و الثانوية هي رابطة فان درفالس والرابطة ا يدروجينية.

إن قوى التأث ا تبادلة داخليا بـ ذرات أو أيونات ا واد الصلبة ـب أن تكون ذات طبيعت : **اذبيه** (قوى اذب) لكي تقرب الذرات أو الأيونات من بعضها البعض، و **تدافعيه** (قوى التنافر) لكي ـنعها من الاندماج بعضها الـ بعض و ـكن توضيح ما سبق بيانه من قوى كالتا :

1. **قوى التجاذب :** و هي الغالب ذات أصل كهربائي و تشمل القوى التالية:

1. قوى كولوم وتنتج عن اذب الشحنات الكهربائية ا تعاكسة.

2. قوى تبادلية وتنشأ عن الارتباط الكيميائي واشتراك إلكترون بـ ذرتـ .

3. قوى فان درفالس (Van DerWaals) وتنتج عن اذب ثنائيات القطب الكهربائية.

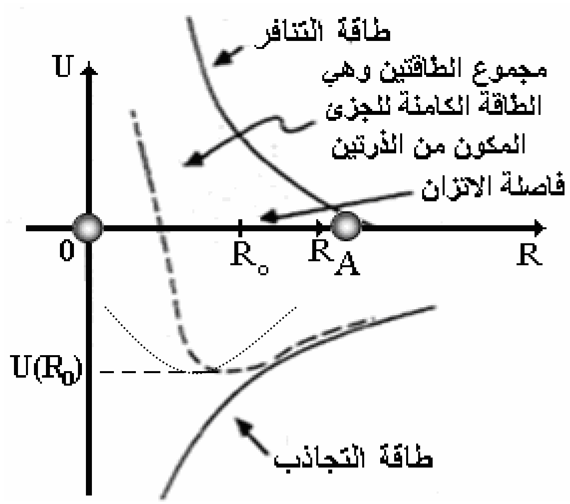
2. **قوى التنافر:** وهي من نوع قوى كولوم وتنشأ من تنافر السحب الإلكترونية يث يلعب مبدأ باو كأساس لوصف وجود قوى تنافر بـ الذرات أو الأيونات ا تقاربة من بعضها البعض- بدرجة كبـ ة- يث تتراكـب سحبها الإلكترونية.

2-3 طاقة الترابط :

تعرف طاقة الترابط بأ ا الطاقة اللازمة لتفكيك البلورة إ ـموعة من الذرات ا ـرة (أو ـموعة من ا ـزيئات ا ـرة إذا كان التركيب البلوري جزيئيا).

تتشكل البلورة ا ستقرة بالاعتماد على عدة شروط أ ـها وجود قوى اذب بـ الذرات تكافئ قوى التنافر. والشكل(1.3) أدناه يبـ ا الات ا ـمكنة للتأث ا تبادل بـ ذرتـ وضعت الأو مبدأ الإحداثيات O والثانية

A كنها ا ركة على ا ور r ، وبالتا فان الطاقة الكامنة (ا هد،الوضع) للجملة تساوي إ العمل ا بذول بفعل قوة كولوم F ب الذرت وبشكل رياضي:



الشكل(1.3): الشكل العام للطاقة الكامنة زيء مكون من ذرت .

$$\vec{F} = -\frac{dU}{dR}\frac{\vec{R}}{R} \qquad (1.3)$$

تكمن أ ية العلاقة(1.3) إعطاء تصور مبدئي للوضع ب الذرت وذلك عندما $\frac{dU}{dR} > 0$ (موجب) فان ا اه القوة $\vec{F}$ ستيكون بعكس الا اه $\vec{R}$ أي أن هناك اذب ب الذرت وعندما $\frac{dU}{dR} < 0$ فان ا اه القوة $\vec{F}$ سيكون با اه $\vec{R}$ أي أن هناك قوى تنافر(تدافع). لاحظ الشكل(1.3) أن ا نحـ العلوي يـ حالة التدافع مهما كانت قيمة $\vec{R}$، والأسفل حالة قوى التجاذب، وا نقط ثل ا الت معا فمن أجل $R > R_0$ فان الذرات تتجاذب لأن $\frac{dU}{dR} > 0$ (طاقة ربط) ، ومن أجل $R < R_0$ هناك تدافع ب الذرات $\frac{dU}{dR} < 0$ ، و حال $R = R_0$ فان $\frac{dU}{dR} = 0$ أي أن $(F)_{R_0} = 0$ وهذه ا الة تسمى حالة الاستقرار لان طاقة الوضع تكون أقل ما كن أي حالة النهاية الصغرى

كننا كتابة طاقة التأث ا تبادل ب ذرت وال ثلها ا نحـ السابق با عادلة العامة التالية:

$$U(R) = \frac{a}{R^m} - \frac{b}{R^n} \tag{2.3}$$

حيث: n, m, b, a وسائط موجبة، و ثل ا د الأول a/R^m قوى التنافر وا د الثا $-b/R^n$ قوى التجـاذب. و كـ ي تكون زيادة قوى التنافر أسرع من تناقص قوى التجاذب أي: $\left(\frac{d^2U}{dR^2}\right)_{R_0} = \beta > 0$

ب أن يكون $m>n$. من جهة أخرى تعطي مكانيكا الكم لقوى التنافر بـ الذرات العبارة: $\lambda \exp(-R/\rho)$ حيـث: ρ, λ وسيط موجب وهذه العبارة لا تلف عن العبارة a/R^m إلا قليلا عند القيم الكبـ ة لـ m.

العلاقة (2.3) شرط النهاية الصغرى دد لنا قيمة R_0 أصغر مسافة بـ الذرتـ لتكون ا ملة حالة الاستقرار وفقا للمعا ة الرياضية التالية:

$$F(R_0) = \left(-\frac{du}{dr}\right)_{R=R_0} = 0 \tag{3.3}$$

ولذلك نفاضل العلاقة (2.3) وفقا لشرط ا عادلة(3.3) عند $R = R_0$ فنجد:

$$-\left(\frac{bnR_0^{n-1}}{R_0^{2n}} - \frac{amR_0^{m-1}}{R_0^{2m}}\right) = 0 \tag{4.3}$$

وبإعادة ترتيب العلاقة (4.3) د:

$$R_0 = \left(\frac{am}{bn}\right)^{\frac{1}{m-n}} \tag{5.3}$$

نعوض العلاقة (5.3) (2.3) (عند $R = R_0$) فنجد عبارة الطاقة الكامنة للذرتـ وضع الاستقرار:

$$U(R_0) = \frac{bnR_0^{m-n}}{mR_0^m} - \frac{b}{R_0^n} = \frac{bn}{m} R_0^{-n} - \frac{b}{R_0^n} = -bR_0^{-n}\left(1 - \frac{n}{m}\right) \tag{6.3}$$

من العلاقة(6.3) واضح أن $U(R_0)$ سالبة الإشارة حيث أن $m > n$ ا يعـ أ ا تعـ عن طاقة اذب.

عموما تسود قوى التجاذب بين الذرات عند $R > R_0$ وتسود قوى التنافر عند $R < R_0$، وتتعادل هذه القوى عند $R = R_0$ وضع الاستقرار. ودراسة الربط بين الذرات لتشكيل البلورات تعتمد على المبدأ نفسه.

3-3 الرابطة الأيونية :

تنشا الرابطة الأيونية عن التفاعل الكهربائي الساكن بين أيونات متعاكسة الشحنة (تجاذب كولومي). فعند تكوين البلورة الأيونية يحدث الترابط بين الذرات المختلفة حيث تفقد بعضها شحنات سالبة (إلكترونات) وتصبح أيونات موجبة الشحنة ، وتكتسب الذرات الأخرى شحنات سالبة فتصبح أيونات سالبة الشحنة، فتنشأ قوى كهربائية ساكنة بين الأيونات متعاكسة الشحنة تعمل على جذب بعضها لبعض, لكن عندما تتقارب الأيونات إلى مسافات معينه فإنه تنشأ قوى تنافر نتيجة لتداخل الغمامات الإلكترونية للأيونات تحد من هذا التقارب. و تحدد القوتان المذكورتان بعد كل أيون عن الآخر والشكل النهائي الذي تترتب عليه الأيونات (لقد أهملنا التفاعلات بين الأيونات المتشابهة الشحنة وهي تفاعلات قوى تنافر وتكون على امتداد البلورة ولكنها أضعف من قوى التجاذب والتنافر الذكورتان آنفا)، وهذا النوع من الارتباط هو الذي يربط ذرات الصوديوم و الكلور في بلورة كلوريد الصوديوم($NaCl$)، وكذلك في بلورة كلوريد السيزيوم ($CsCl$)، ويتميز هذا الارتباط بأنه يؤدي في الغالب إلى بلورات على درجة عالية من الانتظام ويؤدي إلى تمركز الإلكترونات في المادة الجامدة، أي أن الإلكترونات تصبح محدودة الحركة مما يجعل المادة عازلة وضعيفة التفاعل مع المجالات الكهرومغناطيسية.

والآن لنعتبر بلورة أيونية مؤلفة من نوعين مختلفين من الأيونات عددها جميعا $2N$ أيونا ولنحسب الطاقة الكامنة الكلية لهذه البلورة, تعطى الطاقة الكامنة بين أيونين بشكلها العام بالعلاقة(2.3) وعلى ضوئها يمكننا صياغة الطاقة الكامنة للتأثير المتبادل بين الأيونين i و j على الشكل التالي :

$$U_{ij} = \frac{a}{r_{ij}^{\ m}} \pm K\frac{q^2}{r_{ij}} \qquad (7.3)$$

حيث: r_{ij} البعد بين الأيونين i و j . لقد وضعنا هنا $b = Kq^2$ و $n = 1$ وفق قانون كولوم و $\left(K = 1/4\pi\varepsilon_0 = 9\times 10^9\ Nm^2/C^2\right)$ هو ثابت كولوم والإشارة السالبة(-) تدل على أن الأيونين مختلفين وبالتالي هناك تجاذب أما الإشارة الموجبة(+) فتعني أن الأيونين من نفس النوع وبالتالي هناك تنافر. وقد افترضنا للأيونين نفس الشحنة بالقيمة المطلقة. لنضع الآن $r_{ij} = R\,p_{ij}$ حيث: R هي فاصلة الجوار الأول أما p_{ij} فهي مقدار ليس له أبعاد يقيس المسافة بين الأيونين i و j بالوحدة R وبناء عليه يمكن كتابة العلاقة (7.3) على الشكل التالي :

$$U_{ij} = \frac{a}{R^m}\left(\frac{1}{p_{ij}}\right) - K\frac{q^2}{R}\left(\frac{\mp 1}{p_{ij}}\right) \quad (8.3)$$

تبـ العلاقة(8.3) أن الطاقة الكامنة تتناقص بسرعة مع ازدياد ا سافة بـ الأيونـ , و كن أن صل على طاقة التأثـ ا تبادل بـ الأيون i و يع الأيونات الأخرى با مع على الدليل j العلاقة(8.3) فنجد:

$$U_i = \sum_{j(j\neq i)} U_{ij} = \frac{a}{R^m} A_n - |\alpha| K\frac{q^2}{R} \quad (9.3)$$

حيث:

$$A_n = \sum_{j(j\neq i)} \left(\frac{1}{p_{ij}}\right)^n \quad (10.3)$$

$$\alpha = \sum_{j(j\neq i)} \left(\frac{\mp 1}{p_{ij}}\right) \quad (11.3)$$

يتناقص ا قدار A_n بسرعة بسبب كـ القيمة m أما ا قدار α فيدعى بثابت مادلونغ (Madelung) ويتمتع بأ ية خاصة نظرية البلورات الأيونية كونه مقدار يز لنوع البلورة.

الطاقة الكامنة الكلية للبلورة ا ؤلفة من $2N$ أيون تساوي:

$$U_{tot}(R) = \left(\frac{1}{2}\right) 2NU_i = N\left(\frac{a}{R^m} A_n - |\alpha|\frac{Kq^2}{R}\right) \quad (12.3)$$

لقد ضربنا العدد $1/2$ كي لا نعتـ طاقة كل زوج مرتـ .

وضع الاستقرار(عند التوازن) فإن الطاقة الكامنة تبلغ قيمتها الدنيا وعليه نطبق شرط النهاية الصغرى دد لنا قيمـة R_0 فاصلة ا وار الأول حـ الاتزان وفقا للمعا ة الرياضية التالية:

$$\left(\frac{dU_{tot}(R)}{dR}\right)_{R_0}=0 \qquad (13.3)$$

$$N\left(\frac{-m\,a}{R_0^{\ m+1}}A_n+|\alpha|\frac{Kq^2}{R_0^{\ 2}}\right)=0$$

$$R_0=\left(\frac{m\,aA_n}{|\alpha|Kq^2}\right)^{\frac{1}{m-1}} \qquad (14.3)$$

نعوض العلاقة (14.3) (12.3) (عند $R=R_0$) فنجد عبارة الطاقة الكامنة للبلورة وضع الاستقرار:

$$U_{tot}(R_0)=-|\alpha|\frac{NKq^2}{R_0}\left(1-\frac{1}{m}\right) \qquad (15.3)$$

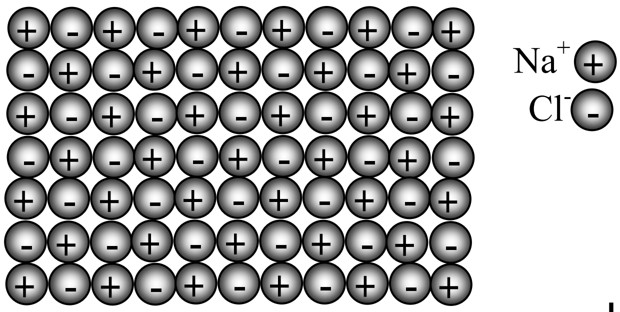
يدعى ا قدار $\left(-|\alpha|\frac{NKq^2}{R_0}\right)$ بطاقة مادلونغ كما يدعى ا قدار $\frac{U_{tot}(R_0)}{N}=-|\alpha|\frac{Kq^2}{R_0}\left(1-\frac{1}{m}\right)$ بطاقة الالتحـام (أو الربط وهي نفسها طاقة التفكك) البلورات الأيونية. بضرب طاقة الالتحام بـ عدد أفوقادرو N_a صل عليها بوحـدة ا ول على ا ول $(J/mole)$.

ويوضح ا دول التا على سبيل ا ثال القيم التجريبية لطاقة الالتحام لبعض البلورات الأيونية.

البلورة	طاقة الالتحام $(mole/\ KJ)$	البلورة	طاقة الالتحام $(mole/\ KJ)$
كلوريد الصوديوم $NaCl$	752	بروميد الروبيديوم $RbBr$	635
أيوديد البوتاسيوم KI	650	أيوديد السيزيوم CsI	595

الجدول(1.3): طاقة الالتحام لبعض البلورات الأيونية.

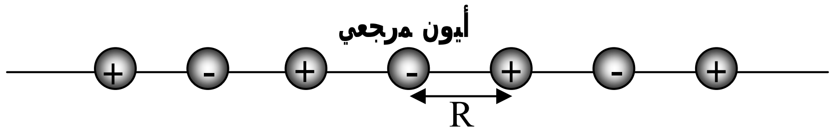
و ثل الشكل التا   وذج للرابطة الأيونية   كلوريد الصوديوم حيث يوضح الشكل أحد مستويات العائلة $\langle 100 \rangle$:



الجدول

الشكل(2.3): وذج الرابطة الأيونية   كلوريد الصوديوم.

مثال: حساب ثابت مادلونغ لسلسلة أيونات لا   ائية متناوبة الشحنة.



الشكل(3.3): سلسلة أيونات لا   ائية متناوبة الشحنة.

$$|\alpha| = \left| \sum_{j(j\neq i)} \left(\frac{\mp 1}{p_{ij}} \right) \right| = \left| \sum_{j(j\neq i)} \left(\frac{\mp 1}{\left(\frac{r_{ij}}{R} \right)} \right) \right| = \left| \sum_{j(j\neq i)} \left(\frac{\mp R}{r_{ij}} \right) \right| \qquad (16.3)$$

$$|\alpha| = \left| \sum_{j(j\neq i)} \left(\frac{\mp 1}{p_{ij}} \right) \right| = 2\left(1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \frac{1}{5} - .... \right)$$

نعلم أن نشر الدالة $\ln(1+x)$ وار 0 هو:

$$\ln(1+x) = \left(x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \frac{x^5}{5} - .... \right)$$

$$\ln(1+1) = \ln(2) = \left(1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \frac{1}{5} - .... \right)$$

ومنه د:

$$|\alpha| = |2(\ln(2))| = 1.3863 \qquad (17.3)$$

يع البلورات ال ا البنية البلورية نفسها ا قيمة واحدة لثابت مادلونغ يزها ويعطي ا دول قيم ثابت مادلونغ النظرية لبعض الب البلورية:

البنية البلورية الشبكة	CC	CFC	NaCl	CsCl	ZnS
ثابت مادلونغ	1.792	1.792	1.747	1.762	1.638

الجدول **(2.3)**:ثابت مادلوغ لبعض الب البلورية

4-3 الرابطة التساهمية:

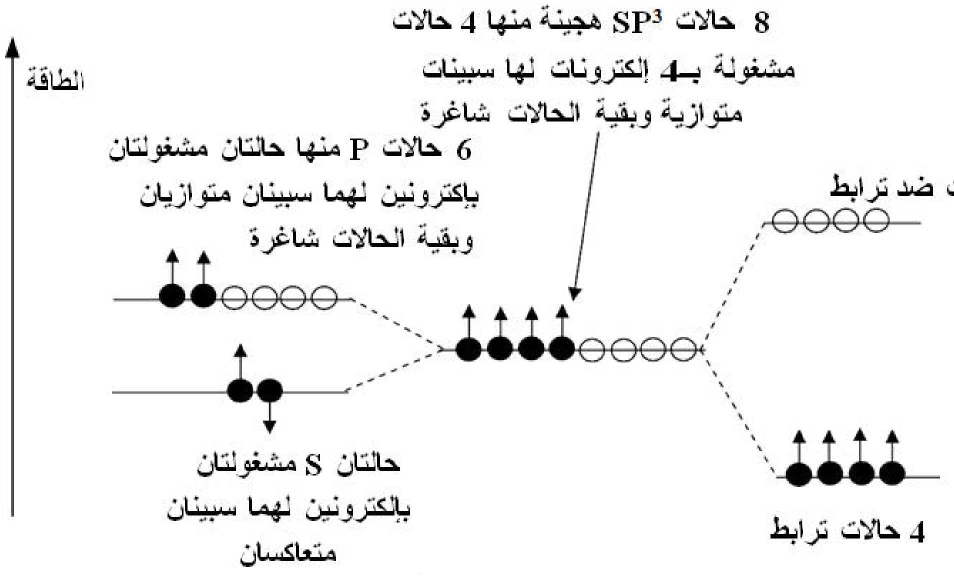
تتمتع هذه الرابطة بأ ية خاصة الكيمياء وعلم البلورات، وتنشأ من التشارك بالالكترونات ب الذرات ا تجاورة حيث أن كل ذرة تساهم بإلكترون أو أكثر عملية الربط يث تكون الالكترونات مشتركة ب الذرات ا سا ة, وبذلك تستو الطبقات ا ارجية للذرات العدد اللازم من الإلكترونات(أي تستكمل الطبقة ا ارجية عدد الإلكترونات الذي ينقصها كي يصبح ا انية إلكترونات حسب قاعدة كوسل و لويس) فتحقق تركيبا إلكترونيا مستقرا(أي تستكمل الطبقة ا ارجية عدد الإلكترونات الذي ينقصها كي يصبح ا انية إلكترونات حسب قاعدة كوسل و لويس) ، ويتميز هذا الارتباط بأن ا واد ا كونة بواسطته تتخذ أشكالاً بلورية تلفة من ا ادة نفسها, ويشكل ا يدروج والكربون والسيلكون و ا رمانيوم و الأ اس أمثلة عن هذا النوع من الترابط.

ولتوضيح الارتباط بلورة السيلكون(ا بنية ا اس) مثلا, نعلم أن ذرة السيليكون ($_{14}SI^{28}$) االتركيب الإلكترو ($1S^2\ 2S^2\ 2P^6\ 3S^2\ 3P^2$) و ثل $3S^2\ 3P^2$ التركيب الإلكترو لطبقة ا ارجية ونلاحظ أ ـا تـوي أربعـة إلكترونات. تتكون الرابطة التسا ية ب ذرات بواسطة التغ مستويات الطاقة لإلكترونات الطبقـة ا ارجيـة لـذرة السيلكون كما يتضح الشكل(4.3) ا دار حيث أن ا دار 3S مشغول اما بإلكترون متعاكـس بالـسب بينمـا ا دار3P وي إلكترون بالسبين متوازي (متوافقة الا اه) مع أربع فجوات, عندما تقترب ذرات السيلكون من

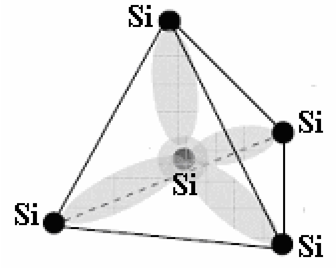
بعضها قربا كافيا تتكون مدارات هجينة من النوع SP^3 (كن أن عل الارتباط الذري وضع أقـل طاقـة) يتكون الواحد منها من انية حالات هجينة أربعة حالات منها ا أربعة إلكترونات بسبينات متوازية وهي تكون مايـسمى الات الترابط وأربع أخرى شاغرة وهي تكون مايسمى الات ضد الترابط, وحسب قاعدة لويس كي تستكمل الطبقـة ا ارجية عدد الإلكترونات الذي ينقصها كي يصبح ا انية إلكترونات يلزمها أن ترتبط بأربع ذرات اورة فتتحد ذرات السيليكون مع بعضها بواسطة أربع روابط مشكلة رباعي وجوه هرمي(يفرض هذا الشكل ا دار ا جـ SP^3 الذي تلك شكل رباعي وجوه هرمي الفضاء) حيث تتوزع أربع ذرات على رؤوسه وا امسة تتوسطهم مركزه, وهو ما يوضحه الشكل(5.3)، وتصبح بذلك يع ذرات السيلكون وكأن بطبقتها ا ارجية ا إلكترونات وهذا وضع مستقر تنشأ عنه قوى ترابط غاية القوة. وتسمى قوة التجاذب الا تظهر بـ الذرات هذا النوع من الترابط ، باسم القوى التبادلية.

و الواقع لا كن فهم هذا الترابط فهما عميقا إلا عن طريق ميكانيكا الكم ونظرية الاضطراب. وعلى العموم تتـشكل الرابطة التسا ية عندما يتحقق ما يلي:

1. ب أن توي الذرات على الكترونات تستطيع أن تشكل عند اقتراب هذه الذرات من بعضها البعض أزواجا من الالكترونات ذات سبينات متعاكسة.
2. البعد بـ الذرات صغ نسبيا يث تظهر ا واص الكمية ا شتركة



الشكل(4.3): التغ مستويات الطاقة لإلكترونات الطبقة ا ارجية ذرة السيلكون.



الشكل: رباعي الوجوه ا رمي الذي تشكله الرابطة التسا ية السيلكون.

ويعطى ا دول(3.3) قيماً لطاقة التحام و درجة انصهار بعض البلورات ذوات الروابط التسا ية.

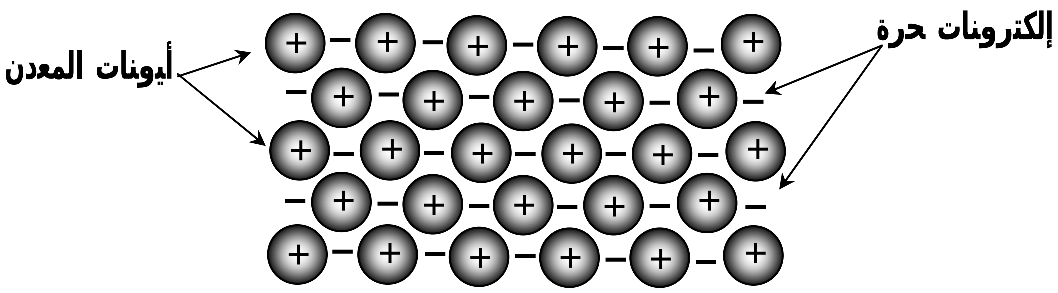
البلورة	طاقة الالتحام $(KJ/mole)$	درجة حرارة الانصهار (^{o}C)
الماس C	713	1410
سيلكون Si	450	>3550
جرمانيوم Ge	3.5	-

الجدول(3.3): طاقة الالتحام و درجة الانصهار لبعض البلورات ذوات الروابطالتسا ية.

5-3 الرابطة المعدنية:

عند تكوين البلورة ا عدنية تتحرر إلكترونات التكافؤ لذرات ا عدن فينتج ما يسمى بالغاز الإلكترو , الذي كنـه أن يتفاعل مع يع الأيونات ا وجبة, حيث تعمل الإلكترونات ا رة ا ركة وا شحونة سلبا على تعديل قوى التنافر ا وجودة ب الأيونات ا شحونة إ ابا يث ها على الاقتراب من بعضها وحيث تصغر ا سافة ب الأيونات ترتفع كثافـة الغـاز الإلكترو ا يؤدي إ زيادة القوى ا ذب الأيونات إ بعضها أكثر فأكثر. من جهة أخرى تبدأ قوى التـدافع أو التنافر تسعى لإبعاد الأيونات عن بعضها البعض وعندما تصبح ا سافة ب الأيونات مناسبة يث تصبح قـوى التجـاذب مساوية ومعاكسة لقوى التنافر تتشكل الشبكة البلورية ا ستقرة(أنظر الشكل(6.3)). ويسمى هذا النوع مـن الارتبـاط بالارتباط ا عد . لأنه يز ا واد ا عدنية ا ترجع مقدر ا العالية توصيل الكهرباء وا رارة إ وجود أعداد كب ة مـن الالكترونات ا رة. وتتميز الرابطة ا عدنية بأ ا مطاطة نظراً لعدم وجود ربط مباشر ب الذرات كما هو ا ال الرابطـة الأيونية و التسا ية.و تعتمد قوة الرابطة ا عدنية على عدد إلكترونات التكافؤ ذرة ا عدن حيث تزداد قوة الربط كلما زاد عدد إلكترونات التكافؤ ذرة ا عدن ا عل البلورة أكثر صلابة و أعلى درجة الانصهار فعلى سبيل ا ثال معدن

الصوديوم أحادي التكافؤ يكون لينا ودرجة انصهاره $98\ ^oC$ ويكون معدن ا اغنيزيوم ثنـائي التكـافؤ طريـا ودرجـة انصهاره $650\ ^oC$ ح يكون الأ نيوم ثلاثي التكافؤ صلب ودرجة انصهاره $660\ ^oC$.



الشكل(6.3): مخطط مبسط للرابطة المعدنية.

ويعطى ا دول(4.3) قيماً لطاقة التحام و درجة انصهار بعض البلورات ذوات الروابط الأيونية.

درجة حرارة الانصهار طاقة الالتحام **بلورة**

بلورة	طاقة الالتحام $(KJ\ /\ mole)$	درجة حرارة الانصهار (^oC)
الألمنيوم Al	324	660
الحديد Fe	406	1538
التنغستن W	849	3410

الجدول(4.3): طاقة الالتحام و درجة الانصهار لبعض البلورات ذوات الروابط ا عدنية.

6-3 رابطة فان درفالس (Van Der Waals) أو الرابطة الجزيئية:

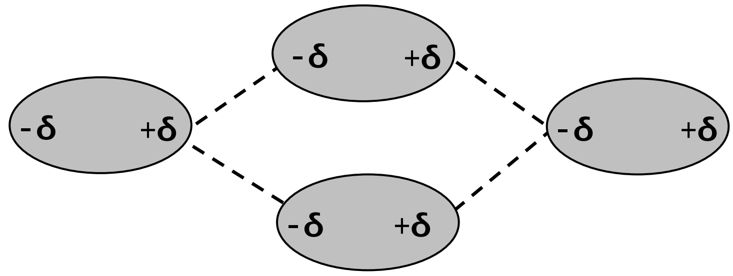
كث من الذرات ترتبط فيما بينها ارتباطاً ضعيفاً وذلك لعدم وجود أي من أنواع الارتباط ا ذكورة سابقاً ، كما هو ا ال الغازات ا املة. لقد اقترح فاندرفالس أن هذا الارتباط هو من رتبة 0.2ev ب أن دد بواسطة معادلة الغازات ا قيقية كتقريب أفضل من قانون الغازات الكاملة. و عام 1930 استطاع العا لندن (London) شرح طبيعة هذا الارتباط حيث ب أن للذرات أو ا زيئات ا عتدلة كهربائيا بصورة عامة عزم ثنائي قطب كهربائي معدوم، إلا

أن الاهتزازات الصفرية النا ة عن مبدأ الارتياب ايزن غ(Heisenberg) ول الذرات ا عتدلة كهربائيا إ ثنائيات أقطاب كهربائية تتغ عزومها بسرعة بالقيمة والا اه (يتشكل ثنائي القطب الكهربائي عندما يكون مركز ثقل الغمامة

الالكترونية للذرة لا ينطبق على مركز ثقل النواة). وعليه كن أن يوجد هذا النوع من الارتباط البلورات نتيجة تفاعل ثنائيات القطب الكهربائية الذرية أو ا زيئية(أنظر الشكل(7.3)), حيث تكون يع الذرات أو ا زيئات متشا ة وتظهر

عليها شحن جزيئية موجبة طرف و سالبة الطرف الآخر متساوية القيمة. وتترتب هذه الثنائيات يث تكون الشحنات ا تعاكسة أقرب ما كن دائماً ، وتكون القوى الكهربائية ا صلة هي الفرق ب قوى التجاذب والتنافر ب الشحنات ا تعاكسة وا تشا ة على الترتيب .

ويكون ا ذب أك قليلاً وذلك لقرب الشحنات ا تعاكسة من بعضها البعض ، و ا واد ال تتميز ثل هذا النوع من الارتباط تكون درجة الانصهار منخفضة، وكذلك تكون رديئة التوصيل للحرارة والكهرباء. ويلاحظ ذلك مادة ا رافيت ، وب الأسطح ا ختلفة ادة ا ايكا و بلورات الغازات ا املة (يع بلورات الغازات ا املة جزيئية ا التركيب CFC عدا غاز ا يليوم بدرجات حرراة منخفضة جدا وهي كالآ $Ne(-249^oC)$ و$Ar(-189^oC)$ و$Kr(-156^oC)$ و$Xe(-112^oC)$).ويوضح الشكل التا وذج لترتيب ا زيئات هذا النوع من الارتباط .



الشكل(7.3): طط مبسط لارتباط ثنائيات القطب لرابطة فاندرفالس.

البلورة	طاقة الالتحام $(KJ / mole)$	درجة حرارة الانصهار $(^{\circ} C)$
الأرغون Ar	7.7	-189
CL_2	31	-101
NH_3	35	-78

الجدول(5.3):طاقة الالتحام و درجة الانصهار لبعض البلورات ا زيئية.

ضع طاقة التفاعل ب ذرت i و j البعد بينهما r_{ij} البلورات ا زيئية ذوات روابط فاندرفالس إ كمون ليونارد-جونس **(Lennard-Jones)** التا :

$$U_{ij}(r_{ij}) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{6}\right] \tag{18.3}$$

حيث: σ و ε ثوابت ريبية.

وهي توافق العلاقة(2.3) حيث $a = 4\varepsilon\sigma^{12}$ و $b = 4\varepsilon\sigma^{6}$.

ومن أجل بلورة متكونة من N ذرة (درجت ا رارة ا نخفضة) الطاقة الكامنة الكلية هي:

$$U_{tot}(R) = \frac{N}{2}\sum_{j(j\neq i)} U_{ij}(r_{ij}) = 2N\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} A_{12} - \left(\frac{\sigma}{R}\right)^{6} A_{6}\right] \tag{19.3}$$

حيث: $A_n = \sum_{i\neq j}\left(\frac{1}{p_{ij}}\right)^{n}$ و $p_{ij} = \frac{r_{ij}}{R}$ ، R : فاصلة ا وار الأول.

وضع الاستقرار كن أن نع قيمة R_0 فاصلة ا وار الأول ح الاتزان كما يلي:

$$\left(\frac{dU_{tot}(R)}{dR}\right)_{R_0} = 0 \Rightarrow R_0 = \sigma\left(\frac{2A_{12}}{A_6}\right)^{\frac{1}{6}} \qquad (20.3)$$

نعوض العلاقة (20.3) (19.3) (عند $R = R_0$) فنجد عبارة الطاقة الكامنة للبلورة وضع الاستقرار:

$$U_{tot}(R_0) = -\frac{2N\varepsilon\sigma^6 A_6}{2} R_0^{-6} = \frac{N\varepsilon A_6^2}{2A_{12}} \qquad (21.3)$$

يدعى ا قدار ا قدار $\frac{U_{tot}(R_0)}{N} = \frac{\varepsilon A_6^2}{2A_{12}}$ بطاقة الالتحام البلورات ا زيئية.

يبـ ا دول(6.3) بعض القيم لـ A_{12} وA_6 لبـ مكعبة تلفة حيث نلاحظ أن هذه القيم تزداد وفق زيادة معامل التعبئة و $A_{12} < A_6$ دوما.

A_n	المكعبة البسيطة CS	المكعبة المركزة CC	المكعبة المركزة الأوجه CFC
A_6	8.40	12.25	14.45
A_{12}	6.20	9.11	12.13

الجدول(6.3): بعض القيم لـ A_{12} وA_6 لبـ مكعبة تلفة.

تطبيق:

أحسب معامل الانضغاط ا جمي لبلورة غاز خامل له بنية CFC بلورته متكونة من N ذرة ثابتها a وفاصلة ا ـورا الأول R عند الاستقرار.

يعرف معامل الانضغاط ا جمي بثبوت درجة ا رارة وعند التوازن(الاستقرار) بالشكل التا :

$$B = V_0\left(\frac{d^2U_{tot}}{dV^2}\right)_{T,V_0} = \left(V\frac{d^2U_{tot}}{dR^2}\left(\frac{dR}{dV}\right)^2\right)_{T,R_0} \qquad (22.3)$$

حيث: V_0 حجم البلور عند التوازن.

حالة البنية CFC لدينا حجم البلور هو: $V=\frac{a^3}{4}N$ وفاصلة ا وار الأول $R=a/\sqrt{2}$ و وفاصـلة ا ـوار الأول عند التوازن R_0 هي:

$$R_0 = \sigma\left(\frac{2A_{12}}{A_6}\right)^{\frac{1}{6}} = 1.09\sigma \qquad (23.3)$$

$$V = \frac{a^3}{4}N = \frac{N}{\sqrt{2}}R^3 \qquad (24.3)$$

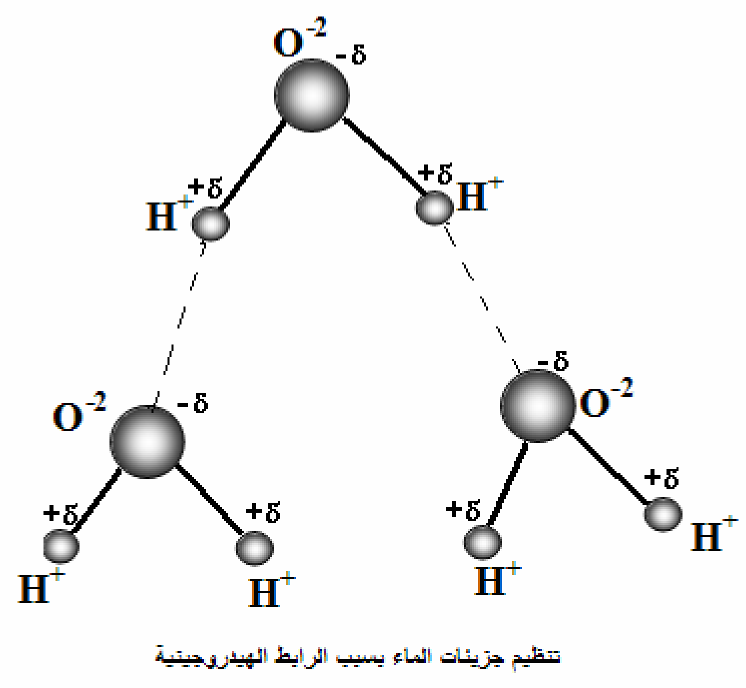
من خلال العلاقات (22.3) و(19.3) و(23.3) و(24.3) د:

$$B \approx 75\,\varepsilon/\sigma^3 \qquad (25.3)$$

6-3 الرابطة الهيدروجينية:

عندما تتحد ذرتان متماثلتان مثل ذر جزيء ا يدروج د أن الذر متساوي الكهرسالبية وأن لكل ذرة نفس القدرة على جلب زوج الإلكترو الرابطة التسا ية لدى فإن الذرتان تتقا ان زمن مكوث الزوج الإلكترو حو ما مناصفة.فتبدو كل ذرة متعادلة كهربائيا. ولكن إذا اختلفت الكهرسالبية لذر متصلت برابطة تسا ية فإن الإلكترونات الرابطة تقضي وقتا أكـ حول الذرة الأكثر كهروسالبية وتكتسب بذالك شحنة جزيئية سالبة ح تكتسب الذرة الأقل كهروسالبية شحنة جزيئية موجبة. فعند ارتباط ذرات ا يدروج وإحدى الذرات شديدة الكهرسالبية أمثال ذرات الأوكسج أو الفلور أو النتروج أ و الكلور فإنه تظهر شحنة جزيئية موجبة على ذرات ا يدروج و شحنة جزيئية

سالبة على ذرات الأوكسجين أو الفلور أو النتروجين أو الكلور وبذالك تتشكل ثنائيات قطب جزيئية يمكن أن تتفاعل مع بعضها كلوميا لتشكل ما يسمى بالروابط الهيدروجينية و يمثل الشكل(8.3) نموذجاً للرابطة الهيدروجينية بين جزيئات الماء بعضها ببعض .



الشكل(8.3): الرابطة الهيدروجينية بين جزيئات الماء.

إن الرابطة (O---H) بين ذرة الأوكسجين في جزئ الماء الأول وذرة الهيدروجين في جزئ الماء الثاني ، تسلك كأنها ثنائية قطب صغيرة مؤلفة من الشحنة (-δ) على ذرة الأوكسجين والشحنة (+δ) على ذرة الهيدروجين ، وإن قوى التجاذب بين هاتين الشحنتين هي السبب في تشكل الرابطة الهيدروجينية الموضحة بالخطوط المنقطة في الشكل السابق .

و يحسن عملية التجاذب تلك الأبعاد الصغيرة التي تتميز بها ذرة الهيدروجين حيث إن هذا يساعدها على الاقتراب من الذرة شديدة الكهرسالبية. وعلى الرغم من هذا فلا يزال طول الرابطة الهيدروجينية يساوي ($R_{O....H} = 2.76\ \overset{o}{A}$) أكبر بكثير من طول الرابطة التساهمية في جزئ الماء والتي تساوي ($R_{O-H} = 0.96\ \overset{o}{A}$). ويعتبر هذا شيئاً طبيعياً حيث إن طاقة الرابطة التساهمية أعلى رتبة من الرابطة الهيدروجينية .

ملاحظة عامة:

إن اسك ا ادة أغلب الأحيان يرجع إ وجود أكثر من نوع واحد من الارتباط فعلى سبيل ا ثال يرجع اسك ا ديد إ وجود الرابطة ا عدنية والتسا ية أما روابط ا ركبات ا عدنية فيمكن أن تكون خليطا ب الـ روابط ا عدنيـ ة والأيونية خاصة عند وجود فارق كهروسالبية كب لعناصر ا ركـ ب.فمـ ثلا حالـ ة ا ركـ ب Al_3Li كهروسـ البية الليثيوم Li هي1 بينما الأ نيوم Al هي 1.5 فإنه يتوقع وجود الرابطة ا عدنية والأيونية معا داخل ا ركب Al_3Li . لكـ ن حالة ا ركب Al_3V حيث كهروسالبية الفنديوم V هي1.5 فإنه يتوقع وجود الرابطة ا عدنية فقط.وقد لوحظ عموما وجود نسبة مئوية لأيونية أو تسا ية الرابطة معتمدة على طاق التأين والألفة الإلكترونية أو الكهروسالبية للـ ذرات ا ـ سا ة الرابطة.

3-9 الخصائص المرونية:

إن ا رونة هي خاصية تلكها الأجسام الصلبة كنها من العودة إ هيئتها وأشكا ا الأصلية بعد توقف تأث القوى ال أدت إ التغي أشكا ا.

عندما تتعرض بلورة إ قوة شد(سحب) خارجية تزداد ا سافة ب الذرات وتزاح عن مواضع اتزا ا الأصلية وهذا

يؤدي بالضرورة إ الاخلال الة اتزان قوى التجاذب والتنافر ب الذرات ا يؤدي إ توليد قوى داخلية يل إ إعادة الذرات إ مواضعها الأصلية ويطلق على قيمة تلك القوى لكل وحدة مساحة مقطع من البلورة اسم **الإجهاد**.

3-9-1 قانون هوك(Hooke):

نعود إ الشكل(1.3) عند إزاحة الذرة A عن وضع توازن ا إزاحة صغ ة كننا أن ننشر التابع $U(R)$ على شكل سلسلة حيث نكتفي با د من الرتبة الثالثة (هذا لصغر الإزاحة حيث مل ا دود الاخرى) فنجد:

$$U(R)=U(R_0)+\left(\frac{dU}{dR}\right)_{R_0}(R-R_0)+\frac{1}{2}\left(\frac{d^2U}{dR^2}\right)_{R_0}(R-R_0)^2+\frac{1}{6}\left(\frac{d^3U}{dR^3}\right)_{R_0}(R-R_0)^3+... \quad (26.3)$$

من الشكل(1.3) كننا وضع $\left(\frac{d^2U}{dR^2}\right)_{R_0}=\beta>0$ و نلاحظ أيضا أن ازدياد قوى التدافع يتم بسرعة أك من تناقص قوى التجاذب وار $R=R_0$ وعليه نضع: $\left(\frac{d^3U}{dR^3}\right)_{R_0}=-2\gamma<0$ حيث γ مقدار موجب.والآن ندخل الرمـوز التاليـة:

$U(X)=U(R)-U(R_0)\,,(R-R_0)=X$ و نعيد كتابة العلاقة(26.3) على الشكل التا :

$$U(X)=\frac{1}{2}\beta X^2+\frac{1}{3}\gamma X^3 \quad (27.3)$$

فإذا افترضنا أن الإزاحة صغ ة بكفاية عل $X^2>>X^3$ نستطيع كتابة العلاقة(27.3) كما يلي:

$$U(X)=\frac{1}{2}\beta X^2 \quad (28.3)$$

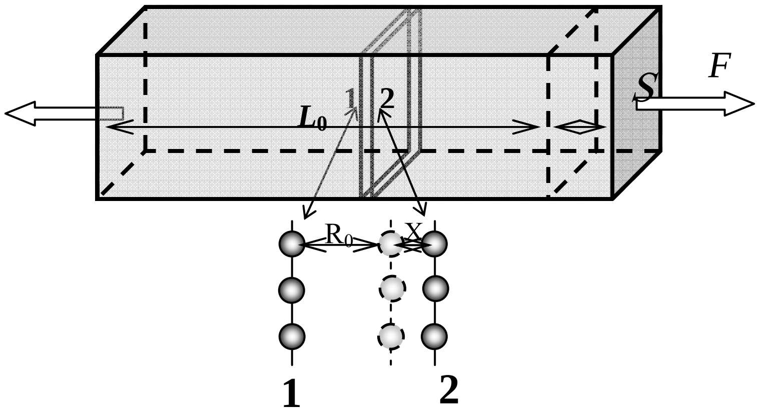
وتع القوة ا ؤثرة على الذرة A ا زاحة عن وضع تواز ا ا ستقر إزاحة صغ ة كما يلي:

$$f=-\frac{dU(X)}{dX}=-\beta X \quad (29.3)$$

ومن هذه العلاقة نتب أن القوة تتغ خطيا بتغ X وهي قوة إرجاعية موجهة و موضع الاتزان(يـدل علـى ذالـك الإشارة السالبة) وكما هو معروف فإن كل جسم يتأثر ثل هذه القوة يتذبدب توافقيا ويطلق على مثل هذه القوة قوة

توافقية ويطلق على العلاقة(28.3) التقريبية بالتقريب التوافقي ويظهر هذا الأخ الشكل(1.3) ا زء السفلي مـن ا نحـ وار $U(R_0)$ يئة قطع مكافئ.

وإذا تصورنا أن هناك قوة شد F تؤثر على قضيب معد مساحة مقطعه S وطوله L_0 تتسبب هذه القوة تغـ ي ا سافة ب الذرات ا تجاورة وفق الطول L وينتج عن ذلك استطالة القضيب مقدارها $\Delta L = \sum X$ حيث: X يعـ عن مقدار الإزاحة الذرية ب ذرت متجاورت أو مستوي متجاورين وليكونا ا ستوي 1 و2 ا بينان الشكل(9.3).



الشكل(9.3): قضيب معد خاضع لقوة شد.

ستتزن قوة الشد ا طبقة مع قوى داخلية F_{int} وتساوي عدديا ا قدار:

$$F_{\text{int}} = fN = N\beta X \qquad (30.3)$$

حيث N عدد الذرات طبقة ذرية مساحتها S .

وستكون الإجهادات ال تظهر القضيب بعد استطالته هي:

$$\sigma = \frac{F_{\text{int}}}{S} = \frac{N\beta X}{S} = CX \qquad (31.3)$$

حيث: $C = \frac{N\beta}{S}$.

كن كتابة ا عادلة(31.3) بدلالة ثابت الشبكة(فاصلة ا وار الأقرب عند الاتزان) R_0 على الصورة:

$$\sigma = R_o C \frac{X}{R_o} = \frac{R_0 N\beta}{S}\left(\frac{X}{R_0}\right) \qquad (32.3)$$

بوضع : $E = \frac{R_0 N\beta}{S}, \varepsilon' = \frac{X}{R_0}$ تصبح ا عادلة(32.3)كما يلي:

$$\sigma = E\varepsilon' \quad (33.3)$$

يعرف الثابت E عامل ا رونة أو معامل يونغ. ح ثل ε' الانفعال أو التشوه النس (وهو استجابة ا سم النـسبية للإجهاد ا ؤثر) للفاصلة R_0 ا اه القوة ا ارجية F

لنفرض أن $N'+1$ هو عدد ا ستويات الذرية طول العينة L_0 فإن الانفعال ε' يع كما يلي:

$$\varepsilon' = \frac{N'X}{N'R_0} = \frac{\Delta L}{L_0} = \varepsilon \quad (34.3)$$

ا عادلة(34.3) تع عن الانفعال الطو ا اكروسكو والذي كن قياسه مباشرة. ونكتب عبارة الإجهاد الكلـي الـذي يعانيه القضيب كما ا عادلة(33.3) بالشكل:

$$\sigma = E\varepsilon \quad (35.3)$$

تسمى ا عادلة(35.3) بقانون هوك(Hooke) ويبقى هذا القانون صحيحا طا ا بقي التقريب التوافقي صـحيحا. مـن خلال ا عادلة(35.3) عند $\varepsilon = 1$ فإن $\sigma = E$ وعليه كن تعريف معامل يونغ بأنه الإجهاد اللازم لسحب العينة قدر طو ا.

يب ا دول(7.3) قيم معامل يونغ لبعض ا عادن الا اهات ال يبلغ فيها ايته الصغرى أو ايته العظمى, ا يدل على عدم اثل ا واص مثل هذه البلورات.

ويتوقف معامل يونغ فقط على طبيعة الذرات أو ا زيئات ا كونة للجسم الصلب وطبيعة ارتباطها وترتيبها فيه.لدى كن أن تتغ قيمة معامل يونغ بتغ البنية البلورية للجسم الصلب.

المادة	$E\,(10^9\,N\,m^2)$	
	النهاية العظمى	النهاية الصغرى
Al	77	64
Cu	194	68
Fe	290	135
Mg	514	437
W	400	400

الشكل(7.3):معامل يونغ لبعض المعادن.

3-9-2 منحنى الإجهاد والانفعال:

عند تطبيق قوة شد على عينة معدنية نلاحظ أ ا ر بثلاث الات تلفة تلفة كما هو مبـ الشكل(10.3).

المجال OA: مع زيادة قيمة الإجهاد بالتدريج من الصفر تستجيب ا ادة بانفعال مرن (عكوس) إذ يكـون الإجهـاد متناسبا مع الانفعال $(\sigma \propto \varepsilon)$. إ أن تصل إ إجهاد حد ا رونة σ_e فإجهاد ا ضوع الذي بعده لا تعود العينـة إ حالتها الأصلية ومن البيان كن أن نكتب:

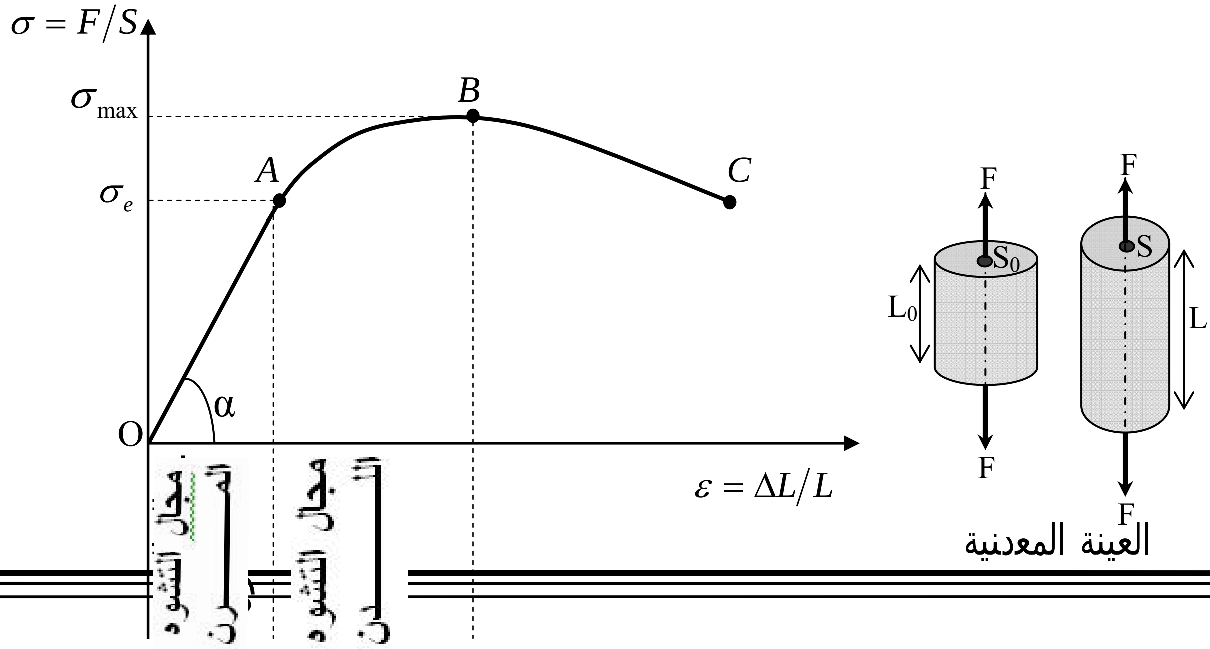
$$\begin{aligned} &\sigma = 0 \Rightarrow \varepsilon = 0 \\ &\sigma \neq 0 \Rightarrow \sigma = \tan(\alpha)\varepsilon \Rightarrow E = \tan(\alpha) \end{aligned} \tag{36.3}$$

المجال AB: عندما تتعدى زيادة قيمة الإجهاد إجهاد ا ضوع $\sigma > \sigma_e$ فإن العينة لن تعود إ وضعها الأصلي حيث يكون الانفعال لدنا أو بلاستيكيا وهو انفعال غ عكوس لكنه منتظم ,حيث ضع العينة كلها إ نفس الانفعال, و كن وصف النتائج من حساب النسبة بـ الإجهاد والانفعال و هذا ا ال كن أن نكتب:

$$\sigma = \Gamma \varepsilon^{m} \qquad (37.3)$$

حيث: Γ ثابت يعرف عامل ا تانة و m : يعرف بأس انفعال التقسية (التصليد) ويعت مقياسا عدل تقسية ا ادة نتيجة الانفعال اللدن.

المجال **BC:** عندما يصل الإجهاد إ القيمة $\sigma_{\max}$ تل انتظام الانفعال ويتولد عنق وسط العينة (ينقص قطر القضيب وسطه أكثر من ا واضع الأخرى) يدعى عنق الكسر بعده تزل أثر قوة الشد حيث يتقلص قطر العنق أكثر فأكثر إ أن تنقطع العينة عند النقطة **C**.



الشكل (10.3): المنحنى الاسمي إجهاد - انفعال.

3-9-3 معامل بواسون والانفعال الحجمي:

إذا طبق على جسم صلب إجهادا ا اه مع فلن دث انفعالا طو هذا الا اه فحسب بل تظهر هناك انفعالات أخرى الا اهات ا ستعرضة تسمى انفعالات مستعرضة.

لنختار عينة على هيئة متوازي مستطيلات أحرفه منطبقة على ا اور (XYZ) كما الشكل(11.3) ونطبق عليها إجهادا شد σ_y الا اه Y فإن العينة ستعا انفعالا طوليا ε_y الا اه Y (يزيد من طول العينة) وآخران

مستعرضان ε_x و ε_Z الا اه X و Z على الترتيب(ينقصان من عرضيها). كننا كتابة هذه التشوهات وفقا للعلاقة(34.3) كما يلي:

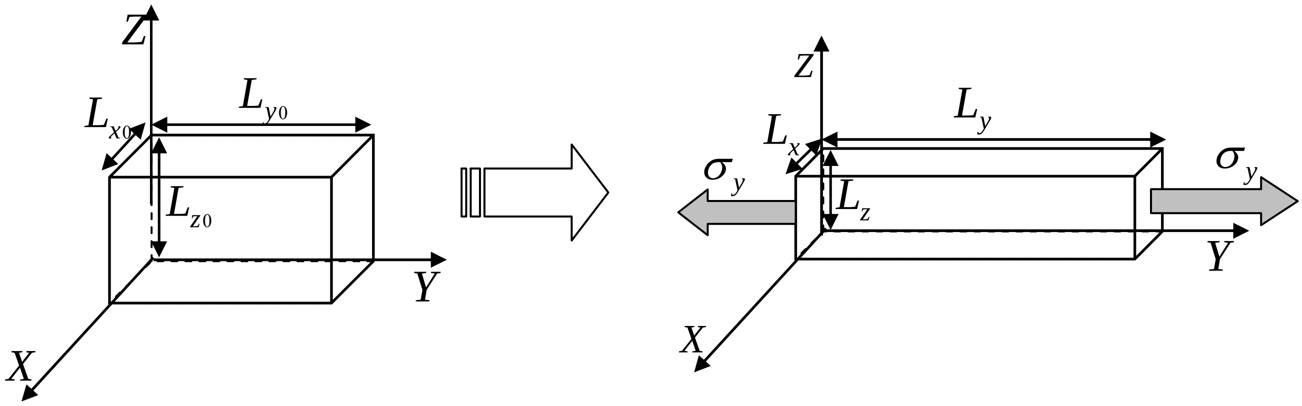
$$\varepsilon_y = \frac{\Delta L_y}{L_{y0}} = \frac{L_y - L_{y0}}{L_{y0}} > 0 \qquad (38.3)$$

$$\varepsilon_x = \frac{\Delta L_x}{L_{x0}} = \frac{L_x - L_{x0}}{L_{x0}} < 0 \qquad (39.3)$$

$$\varepsilon_y = \frac{\Delta L_z}{L_{z0}} = \frac{L_z - L_{z0}}{L_{z0}} < 0 \qquad (40.3)$$

يعرف معامل بواسون بأنه سالب النسبة ب الانفعال ا ستعرض إ الانفعال الطو ويرمز له بـ ν و كن أن نكتب حالة بلورة موحدة ا واص:

$$\nu = -\frac{\varepsilon_x}{\varepsilon_y} = -\frac{\varepsilon_Z}{\varepsilon_y} \qquad (41.3)$$



الشكل(11.3):الانفعال الطو وا ستعرض.

يبـ ا ـدول(8.3) قيم معامل بواسون لبعض ا واد.

المادة	الفولاذ	النحاس	المطاط
معامل بواسون	0.25	0.36	0.5

الجدول(8.3): قيم معامل بواسون لبعض ا واد.

حساب الانفعال ا جمي(التغ النسـ ا جم) $\frac{\Delta V}{V_0}$:

$$V_0 = L_{x0} \times L_{y0} \times L_{z0} \text{ و } V = L_x \times L_y \times L_z \quad (42.3)$$

$$\varepsilon_x = \frac{L_x - L_{x0}}{L_{x0}} \Rightarrow L_x = L_{x0}(1 + \varepsilon_x) \quad (43.3)$$

بنفس الطريقة ـد:

$$L_y = L_{y0}(1 + \varepsilon_y) \quad (44.3)$$

$$L_z = L_{z0}(1 + \varepsilon_z) \quad (45.3)$$

ومنه د:

$$V = L_{x0}(1+\varepsilon_x)\times L_{y0}(1+\varepsilon_y)\times L_{z0}(1+\varepsilon_z) = V_0\left((1+\varepsilon_x)\times(1+\varepsilon_y)\times(1+\varepsilon_z)\right)$$

$$\frac{\Delta V}{V_0} = \frac{V - V_0}{V_0} = \left((1+\varepsilon_x)\times(1+\varepsilon_y)\times(1+\varepsilon_z) - 1\right)$$

$$\frac{\Delta V}{V_0} = \varepsilon_x + \varepsilon_y + \varepsilon_z = \sum_{i=1}^{3}\varepsilon_i \qquad (46.3)$$

حيث أ لمنا ا دود الأخرى لصغر الانفعال أي: $\varepsilon_x\varepsilon_y \approx \varepsilon_x\varepsilon_z \approx \varepsilon_y\varepsilon_z \approx \varepsilon_x\varepsilon_y\varepsilon_z \approx 0$

بتعويض العلاقة(41.3) العلاقة(46.3) د:

$$\frac{\Delta V}{V_0} = \varepsilon_y(1-2\nu) \qquad (47.3)$$

إذا كانت العينة عبارة عن اسطوانة طو ا L ونصف قطرها r يعطى معامل بواسون بالشكل التا :

$$\nu = -\frac{\varepsilon_r}{\varepsilon_L} = -\frac{\Delta r/r_0}{\Delta L/L_0} \qquad (48.3)$$

لدينا:

$$V = L\pi r^2 \Rightarrow \frac{\Delta V}{V_0} = \frac{\Delta L}{L_0} + 2\frac{\Delta r}{r_0}$$

ومنه د:

$$\frac{\Delta V}{V_0} = \varepsilon_L(1-2\nu) \qquad (49.3)$$

3-9-3 معامل القص:

نعت عينة على هيئة متوازي مستطيلات ونطبق عليها إجهادا اسيا نرمز له بالرمز τ على أحد وجوهها فـإن العينـة سوف تعا تشوها نسبيا مشكلة زاوية معينة ولنرمز ا بـ θ كما الشكل(12.3).يسمي الإجهاد ا طبق τ بإجهاد القص حـ يسمي التشوه الناتج بالانفعال الزاوي γ ويتم تعيينه كما يلي:

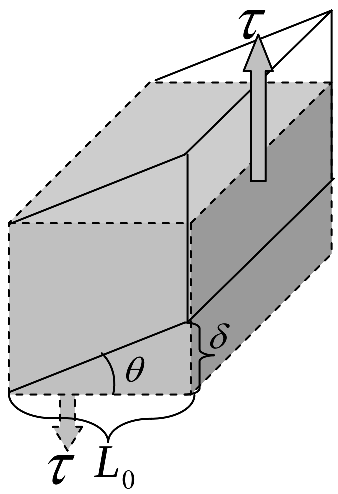
$$\gamma = \tan(\theta) = \frac{\delta}{L_0} \quad (50.3)$$

ال ا رونة تكون θ صغ ة نسبيا و $\tau \propto \gamma$ وعليه كن أن نكتب ما يلي:

$$\gamma \cong \theta(radian) \cong \frac{\delta}{L_0} \quad (51.3)$$

$$\tau = G\gamma \quad (52.3)$$

حيث: ثابت التناسب G يسمى معامل القص ويعطى بوحدة الإجهاد حيث γ بدون وحدة.



الشكل(12.3): تأثير إجهاد القص

يبـ ا دول(9.3) قيم معامل القص لبعض ا عادن الا اهات ال يبلغ فيها ايته الصغرى أو ايته العظمى.

المادة	E (10^9 Nm^2)	
	النهاية العظمى	النهاية الصغرى
Al	29	25
Cu	77	31
Fe	180	61
Mg	184	171
W	155	155

الجدول(9.3): معامل القص لبعض ا عادن.

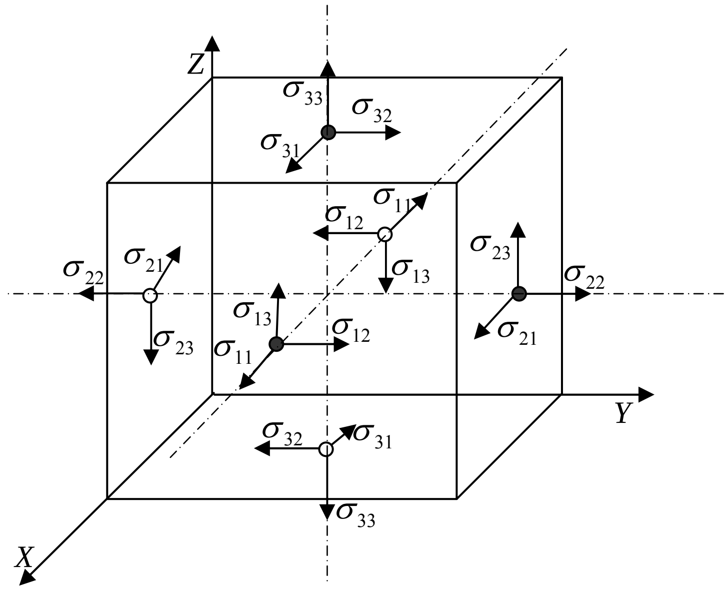
ملاحظة: حالة الوسط ا تماثل ا ناحي يرتبط معامل القص ومعامل بوسون ومعامل يونغ بالعلاقة:

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)} \tag{53.3}$$

3-9-5 ممتد الإجهاد:

توصف ا الة الإجهادية سم صلب ما ميكانيكا الأوساط ا ستمرة متد من الدرجة الثانية $[\sigma_{ij}]$ يتكـون مـن $3^2=9$ عنصرا, قيمها هذه العناصر تعتمد على لة الإحداثيات ا ختارة (أنظر الشكل(13.3)). الدليل الأول i يعـ عن ا ور العمود على ا ستوي الذي طبق عليه الإجهاد بنما الدليل الثا j فيعـ عن ا ور الذي طبق ا اهه الإجهاد و كن كتابة تد الإجهاد بالصورة ا صفوفية التالية:

$$[\sigma_{ij}] = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \tag{54.3}$$



الشكل(13.3): ثيل تد الإجهاد حالة عامة.

1. خصائص ممتد الإجهاد:

- الإجهادات σ_{ii} حيث $(i=j)$ هي إجهادات ناظمية إذا كان $\sigma_{ii}>0$ فإن الإجهاد ا طبق هو إجهاد سحب الا اه i و إذا كان $\sigma_{ii}<0$ فإن الإجهاد ا طبق هو إجهاد كبس الا اه i.
- تد الإجهاد متناظر $\sigma_{ij}=\sigma_{ji}$ حيث $(i\neq j)$ وعليه يصبح تد الإجهاد وي 6 عناصر مستقلة فقط بـدل 9 عناصر و بالتا يصبح تد الإجهاد بالشكل:

$$[\sigma_{ij}]=\begin{pmatrix}\sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13}\\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & \sigma_{23}\\ \sigma_{13} & \sigma_{23} & \sigma_{33}\end{pmatrix} \quad (55.3)$$

- بالإمكان دوما إختيار لة اور إحداثيات تسمى اور رئيسية عل تد الإجهـاد قطريـا عناصـره تـسمى بالإجهادات الرئيسية.

$$\det\left(\left[\sigma_{ij}\right]-\mu \mathrm{I}\right)=\begin{vmatrix}\sigma_{11}-\mu & \sigma_{12} & \sigma_{13}\\ \sigma_{21} & \sigma_{22}-\mu & \sigma_{23}\\ \sigma_{13} & \sigma_{23} & \sigma_{33}-\mu\end{vmatrix}=0 \qquad (56.3)$$

ساب ا دد صل على معادلة من الدرجة الثالثة لها د ثلاثة جدور ا الـة العامـة μ_3,μ_2,μ_1 نـسميها إجهادات رئيسية ويرمز ا عادة بـ $\sigma_3,\sigma_2,\sigma_1$ على الترتيب ويكتب تد الإجهاد لة ا اور الرئيسية بالشكل:

$$\left[\sigma\right]=\begin{pmatrix}\sigma_1 & 0 & 0\\ 0 & \sigma_2 & 0\\ 0 & 0 & \sigma_3\end{pmatrix} \qquad (57.3)$$

- عند الانتقال من لة إحداثيات $\sum\left(O,x_1,x_2,x_3\right)$ إ لة إحداثيات أخرى $\sum^{-}\left(O',x_1',x_2',x_3'\right)$ فإن عناصر تد الإجهاد تتغ حسب العلاقة:

$$\sigma_{ij}=\sum_{k,l=1}^{3}a_{ik}a_{jl}\sigma_{kl} \qquad i,j=1,2,3 \qquad (58.3)$$

حيـث: a_{ik},a_{jl} : هـي جيـوب ـام توجيـه ـاور الإحـداثيات $\left(O,x_1,x_2,x_3\right)\sum$ بالنـسبة ـاور الإحداثيات $\sum^{-}\left(O',x_1',x_2',x_3'\right)$.

2. حساب شعاع الإجهاد الكلي $\vec{T}\left(M,\vec{n}\right)$:

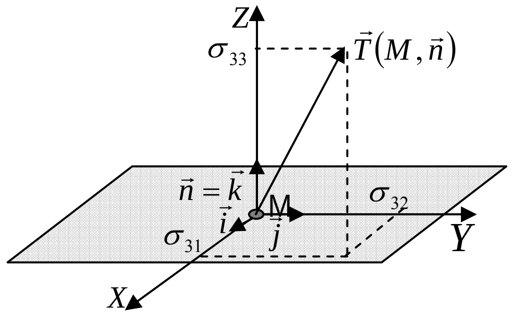
نسمي شعاع الإجهاد الكلي $\vec{T}\left(M,\vec{n}\right)$ ا طبق النقطة M على ا ستوي ذو الناظم $\vec{n}$ حاصل ضرب تد الإجهاد بالناظم $\vec{n}$ ونكتب.

$$\vec{T}\left(M,\vec{n}\right)=\left[\sigma_{ij}\right].\,\vec{n} \qquad (59.3)$$

وإذا أردنا تعي ا ركبة الناظمية T_n وا اسية T_t لشعاع الإجهاد نستعمل العلاقات التالية

$$T_n = \vec{T}\left(M,\vec{k}\right).\ \vec{n}$$
$$T_t = \sqrt{\left(\vec{T}\left(M,\vec{k}\right)\right)^2 - \left(T_n\right)^2} \qquad (60.3)$$

مثال: مركبات شعاع الإجهاد على الوجه الذي ناظمه شعاع الوحدة $\vec{k}$ موضحة وهي موضحة الشكل(14.3):



الشكل(14.3): تمثيل شعاع الإجهاد على الوجه ذي الناظم $\vec{k}$.

من الشكل وحيث أن $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ $(i \neq j)$ يمكن أن نجد:

$$\vec{T}\left(M,\vec{k}\right) = \sigma_{31}\,\vec{i} + \sigma_{32}\,\vec{j} + \sigma_{33}\,\vec{k} = \sigma_{13}\,\vec{i} + \sigma_{23}\,\vec{j} + \sigma_{33}\,\vec{k}$$

$$\vec{T}\left(M,\vec{k}\right) = \left[\sigma_{ij}\right].\ \vec{k} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{13} & \sigma_{23} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{13} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{33} \end{pmatrix} = \sigma_{13}\,\vec{i} + \sigma_{23}\,\vec{j} + \sigma_{33}\,\vec{k}$$

تعيين المركبة الناظمية T_n والمماسية T_t:

$$T_n = \vec{T}\left(M,\vec{k}\right).\ \vec{k} = \sigma_{33} \qquad (61.3)$$

$$T_t = \sqrt{\left(\vec{T}\left(M,\vec{k}\right)\right)^2 - \left(T_n\right)^2} = \sqrt{\left(\sigma_{13}^2 + \sigma_{23}^2 + \sigma_{33}^2\right) - \sigma_{33}^2} = \sqrt{\sigma_{13}^2 + \sigma_{23}^2} \qquad (62.3)$$

6-9-3 معامل الانضغاط الحجمي:

توجد الاجسام عادة تحت تأثير الضغط الجوي P_0 و بالتالي فإن أبعاد هذه الاجسام تكون مقاسة تحت تأثير الضغط الجوي, و لكن إذا أثرنا بقوة منتظمة F على جسم مساحته A_0 فإنه سوف ينشأ زيادة في الضغط مقدارها Δp و يصبح

الضغط الواقع على ا سم هذه ا الة $P_0+\Delta p$ ا دث تغ ا أبعاد ا سم. هذه ا الة يكون ا سم واقعا ـ ت تأث إجهاد مساو للفرق $-\Delta p$.

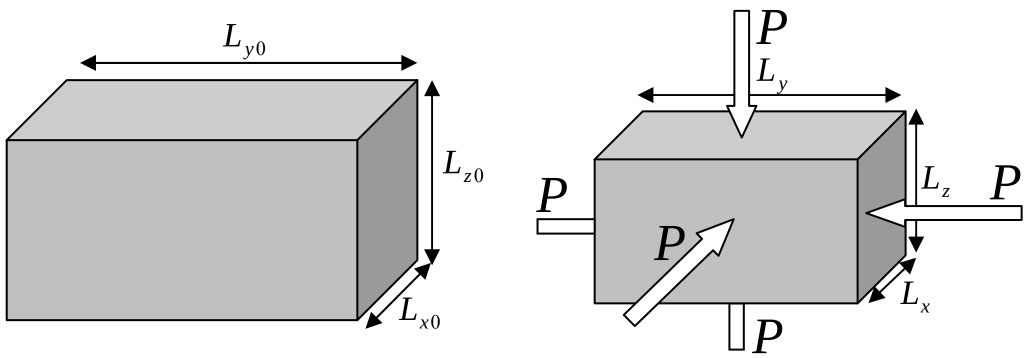
لنعت عينة من مادة متماثلة ا ناحي يئة متوازي مستطيلات كما هو موضـح بالـشكل(15.3) ـضع إ ضـغط هيدروستاتيكي كن أن نصفه متد إجهاد عناصره تعطى بالشكل التا :

$$\sigma_{ij} = -\Delta p\, \delta_{ij} \tag{63.3}$$

حيث: δ_{ij} دلتا كرونيكر.

يرتبط الانفعال ا جمي $\frac{\Delta V}{V_0}$ بالتغ الضغط ΔP عامل يسمى معامل الانضغاط ا جمي B الذي يعطى بالعلاقة التالية:

$$\mathrm{B} = -\frac{\Delta p}{\left(\frac{\Delta V}{V}\right)} \tag{64.3}$$



الشكل(15.3):الانضغاط ا يدروستاتيكي.

ومعلوم لدينا أن معامل الانضغاط ا جمي هو مقلوب الانضغاطية χ :

$$\chi = \frac{1}{\mathrm{B}} = -V_0 \frac{\Delta V}{\Delta P} \tag{65.3}$$

3-9-7 ممتد الانفعال:

كل انفعال صغ يوصف ممتد, فإذا كانت x_i و x'_i إحداثيات نقطة ما من ا سم ا دروس قبل وبعـد التـشوه علـى الترتيب فإن مركبات شعاع الانتقال ذه النقطة تعرف بالشكل:

$$u_i = x'_i - x_i = \sum_{j=1}^{3} \zeta_{ij} x_j \quad i = 1,2,3 \qquad (66.3)$$

ا متد $[\zeta_{ij}]$ هو تد ثنائي الرتبة ويسمى تد الانزياحات الصغ ة , ويكتب بشكله ا صفو كما يلي:

$$[\zeta_{ij}] = \begin{pmatrix} \zeta_{11} & \zeta_{12} & \zeta_{13} \\ \zeta_{21} & \zeta_{22} & \zeta_{23} \\ \zeta_{31} & \zeta_{32} & \zeta_{33} \end{pmatrix} \qquad (67.3)$$

وتعرف عناصره بالشكل التا :

العناصر غ القطرية للممتد $[\zeta_{ij}]$ تع بالعلاقة $\zeta_{ij} = \partial u_i / \partial x_j$ حيث $(i \neq j)$ وهي ثل زاوية الدوران حول ور ox_k وى وفق متجه ا ور ox_i ستقيم يوازي ox_j. أما العناصر القطرية للممتد فـتع بالعلاقـة $\zeta_{ii} = \partial u_i / \partial x_i$, وهي تصف ا متد النوعي (لوحدة الطول) وازاة ox_i

بناء على ماسبق كننا إعادة كتابة الشكل ا صفو كما يلي.

$$[\zeta_{ij}] = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial u_1}{\partial x_1} & \dfrac{\partial u_1}{\partial x_2} & \dfrac{\partial u_1}{\partial x_3} \\ \dfrac{\partial u_2}{\partial x_1} & \dfrac{\partial u_2}{\partial x_2} & \dfrac{\partial u_2}{\partial x_3} \\ \dfrac{\partial u_3}{\partial x_1} & \dfrac{\partial u_3}{\partial x_2} & \dfrac{\partial u_3}{\partial x_3} \end{pmatrix} \qquad (68.3)$$

ا متد [ζ_{ij}]ليس متناظرا لكنه يتكون من موع تدين الأول ضد متناظر والثا متناظر وعليه كننـا كتابـة عناصـره بالشكل:

$$\zeta_{ij} = \varpi_{ij} + \varepsilon_{ij} \qquad i, j = 1,2,3 \tag{69.3}$$

ا متد [ω_{ij}] تد من الرتبة الثانية وهو تد ضد متناظر وهو يصف عملية دوران ظ لنقاط ا سم حول ور ر من النقطة O وتعطى عناصره بالشكل:

$$\varpi_{ij} = \frac{1}{2}\left(\zeta_{ij} - \zeta_{ji}\right) = -\frac{1}{2}\left(\zeta_{ji} - \zeta_{ij}\right) = -\varpi_{ji} \qquad i, j = 1,2,3 \tag{70.3}$$

ويكتب[ω_{ij}] بشكله ا صفو كما يلي:

$$\left[\varpi_{ij}\right] = \begin{pmatrix} 0 & \varpi_{12} & \varpi_{13} \\ -\varpi_{12} & 0 & \varpi_{23} \\ -\varpi_{13} & -\varpi_{23} & 0 \end{pmatrix} \tag{71.3}$$

$$\left[\varpi_{ij}\right] = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} - \frac{\partial u_2}{\partial x_1}\right) & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} - \frac{\partial u_3}{\partial x_1}\right) \\ -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} - \frac{\partial u_2}{\partial x_1}\right) & 0 & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_2}{\partial x_3} - \frac{\partial u_3}{\partial x_2}\right) \\ -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} - \frac{\partial u_3}{\partial x_1}\right) & -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_2}{\partial x_3} - \frac{\partial u_3}{\partial x_2}\right) & 0 \end{pmatrix} \tag{72.3}$$

ا متد [ε_{ij}] تد من الرتبة الثانية و يسمى **متد الانفعال** وهو تد متناظر وبالتا يكون من 6 عناصر مستقلة وتعطـى بالشكل التا :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}\left(\zeta_{ij} + \zeta_{ji}\right) = \frac{1}{2}\left(\zeta_{ji} + \zeta_{ij}\right) = \varepsilon_{ji} \qquad i, j = 1,2,3 \tag{73.3}$$

ويكتب $[\varepsilon_{ij}]$ بشكله ا صفو كما يلي:

$$[\varepsilon_{ij}] = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{12} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{13} & \varepsilon_{23} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix}$$

$$[\varepsilon_{ij}] = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1}\right) & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1}\right) \\ \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1}\right) & \frac{\partial u_2}{\partial x_2} & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2}\right) \\ \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1}\right) & \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2}\right) & \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \end{pmatrix} \qquad (74.3)$$

العناصر القطرية للممتد $[\varepsilon_{ij}]$ ثل الاستطالة ا طية على طول اور الإحداثيات وهي نفسها العناصر القطرية للممتد $[\zeta_{ij}]$. أما العناصر غ القطرية فهي عبارة عن انفعالات زاوية ثل أنصاف تغ ات الزوايا القائمة مبدئيا من ا هة ا وازية ـ اور الإحداثيات.

3-9-7 قانون هوك المعمم:

1) حالة المواد موحدة الخواص (متماثلة المناحي):

كن صياغة قانون هوك ا عمم حالة ا واد موحدة ا واص بالصورة التالية:

يتولد عن كل إجهاد من الإجهادات الناظمية σ_{ii} انفعالا طوليا و آخرين مستعرض , وعليه فكـل انفعـال مـن الانفعالات ا ستطالة (الاستطالات ا طية) ينتج من ثلاثة إجهادات ناظمية, أي أن كل عنصر من العناصر القطرية متد الانفعال (وال هي عبارة عن استطالات خطية) ينتج من إجهاد طو على نفس ور الاستطالة وآخرين مستعرض على ا ورين العمودي على هذا ا ور. فإذا كان معامل يونغ للمادة E ومعامل بواسون ν فيمكن كتابـة العناصـر القطرية متد الانفعال بدلالة الإجهادات الناظمية بالاستعانة بالعلاقة(35.3) كما يلي:

لدينا:

$$\sigma = E\varepsilon \Rightarrow \varepsilon = \frac{\sigma}{E} \qquad (75.3)$$

لنقوم بتعيـ ε_{11}:

$$\varepsilon_{11}=\frac{\sigma_{11}}{E}-\nu\frac{\sigma_{22}}{E}-\nu\frac{\sigma_{33}}{E}$$
$$\varepsilon_{11}=\frac{1}{E}\left(\sigma_{11}-\nu\left(\sigma_{22}+\sigma_{33}\right)\right) \quad (76.3)$$

بنفس الطريقة نعـ ε_{22} , ε_{33}:

$$\varepsilon_{22}=\frac{1}{E}\left(\sigma_{22}-\nu\left(\sigma_{11}+\sigma_{33}\right)\right) \quad (77.3)$$

$$\varepsilon_{33}=\frac{1}{E}\left(\sigma_{33}-\nu\left(\sigma_{11}+\sigma_{22}\right)\right) \quad (78.3)$$

وبناء على العلاقات(76.3), (77.3), (78.3) ـكن نكتب الصيغة العامة التالية:

$$\varepsilon_{ii}=\frac{1}{E}\left(\sigma_{ii}-\nu\sigma_{11}-\nu\sigma_{22}-\nu\sigma_{33}+\nu\sigma_{ii}\right) \qquad i=1,2,3 \quad (79.3)$$

$$\varepsilon_{ii}=\frac{1}{E}\left(\left(1+\nu\right)\sigma_{ii}-\nu\, trac\left[\sigma_{ij}\right]\right) \qquad i=1,2,3 \quad (80.3)$$

حيث: $trac\left[\sigma_{ij}\right]=\sigma_{11}+\sigma_{22}+\sigma_{33}$.

من جهة أخرى يتولد عن كل إجهاد من إجهادات القص $\tau_{ij}=\sigma_{ij}\,(i\neq j)$ انفعالا زاويا $\gamma_{ij}=2\varepsilon_{ij}\,(i\neq j)$ (ذلك أن الانفعالات الزاوية ـثل أنصاف تغـ ات الزوايا γ_{ij}) ـكن تعينه كما يلي:

من العلاقة(52.3) ـكن أن نكتب:

$$\sigma_{ij}=G\gamma_{ij}=2G\varepsilon_{ij}\Rightarrow\varepsilon_{ij}=\frac{1}{2G}\sigma_{ij} \qquad i,j=1,2,3 \quad (81.3)$$

بتعويض العلاقة(53.3) العلاقة(81.3) د:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2\left(E/2(1+\nu)\right)}\sigma_{ij} = \frac{1+\nu}{E}\sigma_{ij} \qquad i,j=1,2,3 \tag{82.3}$$

ومنه كن كتابة قانون هوك ا عمم حالة ا واد موحدة ا واص انطلاقا من العلاقة (80.3)و(82.3) كما يلي:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{E}\left((1+\nu)\sigma_{ij} - \nu\, trac[\sigma_{ij}]\delta_{ij}\right) \qquad i,j=1,2,3 \tag{83.3}$$

حيث: δ_{ij} دلتا كرونيكر.

كن كتابة قانون هوك ا عمم حالة ا واد موحدة ا واص بصيغة أخرى كن اشتقاقها من الصيغة الأو كما يلي:

$$\sigma_{ij} = \frac{E}{1+\nu}\left(\varepsilon_{ij} + \frac{\nu}{1-2\nu}trac[\sigma_{ij}]\delta_{ij}\right) \qquad i=1,2,3 \tag{84.3}$$

و كن كذلك كتابة علاقة(38.3) بدلالة معاملات لامي λ, μ كما يلي:

$$\sigma_{ij} = 2\mu\varepsilon_{ij} + \lambda trac[\sigma_{ij}]\delta_{ij} \qquad i=1,2,3 \tag{85.3}$$

من العلاقة (84.3) و(85.3) كن أن نستنتج أن:

$$2\mu = \frac{E}{1+\nu} \tag{86.3}$$

$$\lambda = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \tag{87.3}$$

تطبيق:أوجد العلاقة ب ا عاملات التالية: معامل الانضغاط ا جمي B معامل القص G ومعامـل يونـغ E ومعامـل بواسون ν عند تطبيق ضغط هيدروستاتيكي على عينة يئة متوازي مستطيلات دة متماثلة ا ناحي:

سب معامل الانضغاط ا جمي من العلاقة

$$B=-\frac{\Delta p}{\left(\frac{\Delta V}{V}\right)}=-\frac{\Delta p}{\left(\sum_{i=1}^{3}\varepsilon_{ii}\right)} \tag{88.3}$$

حيث استعملنا العلاقة (46.3)و(64.3).

من العلاقة(83.3) و(84.3) د:

$$\varepsilon_{ii}=\frac{1}{E}\left((1+\nu)\sigma_{ii}-\nu\sigma_{11}-\nu\sigma_{22}-\nu\sigma_{33}\right) \qquad i=1,2,3 \tag{89.3}$$

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{3}\varepsilon_{ii}&=\sum_{i=1}^{3}\frac{1}{E}\left((1+\nu)\sigma_{ii}-\nu\sigma_{11}-\nu\sigma_{22}-\nu\sigma_{33}\right) \qquad i=1,2,3\\ &=\frac{1}{E}\left((1-2\nu)(\sigma_{11}+\sigma_{22}+\sigma_{33})\right)\end{aligned} \tag{90.3}$$

لدينا حالة الضغط ا يدروستاتيكي على العينة ا ذكورة تعطى عناصر تد الإجهاد بالعلاقة:

$$\begin{aligned}\sigma_{ij}&=-\Delta p\,\delta_{ij} \qquad i,j=1,2,3\\ \sigma_{ii}&=-\Delta p \qquad i=1,2,3\end{aligned} \tag{91.3}$$

وبتعويض العلاقة(91.3) العلاقة(90.3) د:

$$\sum_{i=1}^{3}\varepsilon_{ii}=\frac{-3\Delta p}{E}(1-2\nu) \qquad i=1,2,3 \tag{92.3}$$

بالتعويض العلاقة(88.3) د:

$$B=\frac{E}{3(1-2\nu)} \tag{93.3}$$

بتعويض قيمة معامل بواسون ν من العلاقة(53.3) العلاقة(93.3) د:

$$B=\frac{GE}{3(3G-E)} \tag{94.3}$$

2) حالة ا واد غ ا وحدة ا واص(متباينة ا ناحي):

أما حالة ا واد غ موحدة ا واص وحيث أن تد الإجهاد و تد التشوه كلا ا يتكون من 9 عناصر(بغض النظـر عن ا ستقلة منها) فإن الربط بـ ا متدين يتطلب تدا من الدرجة الرابعة يتكون من$\left(3^4 = 9\times 9 = 81\right)$عنصرا وسـيطا. تع هذه الوسائط عن ثوابت أو معاملات للمرونة و عليه فإن التشوه النسـ العكوس(أي ضمن حدود ا رونة) أو الانفعال ضع لقانون يعطى بالصيغة التالية:

$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l=1}^{3} C_{ijkl}\varepsilon_{kl} \qquad i,j=1,2,3 \tag{95.3}$$

$$\varepsilon_{ij} = \sum_{k,l=1}^{3} S_{ijkl}\sigma_{kl} \qquad i,j=1,2,3 \tag{96.3}$$

ثل العلاقة (95.3)و(96.3) قانون هوك ا عمم حالة ا واد غ موحدة ا واص أي ا الة العامة وهي تشمل ضـمنيا حالة ا واد موحدة ا واص.

تسمى الوسائط C_{ijkl} بثوابت ا رونة أما الوسائط S_{ijkl} فتسمى عاملات ا رونة وكلا الوسائط تشكل تدا بـ ـ 81 عنصرا, لكن تناظر تدا الإجهاد والانفعال(حيث يتكون كل منهما من 6 عناصر مستقلة فقط بدل 9) يجعل تدا ثوابت ا رونة أو معاملات ا رونة متناظران أيضا, وبذلك يصبح عدد الوسائط ا ستقلة كل منهما $(36 = 6\times 6)$, وباستخدام طاقة ا رونة وقوان الديناميكا ا رارية كن تبيان أن: $C_{ijkl} = C_{klij}$ أو $S_{ijkl} = S_{klij}$ وبذلك ينقص عدد الوسـائط ا ستقلة إ 21 عنصرا وينقص هذا العدد أكثر فأكثر اعتمادا على تناظر البلور لأن تد ثوابت أو معاملات ا رونة (الـذي يعت خاصية فيزيائية يز ا ادة) قق قاعدة نيمان ((تنص قاعدة نيمان على أن فئة تناظر أية خاصية فيزيائية تتضمن داخلها فئة التناظر النقطي لتلك البلورة)) وهذا يع إذا كان لبلورة ما ور تناظر من الدرجة الثانية مثلا فإن دورا ا حـول هـذا ا ور بزاوية مقدارها$180°$ لن يغ تد وسائط ا رونة بل سيبقى صامدا.

عند الانتقال من لة إحداثيات إ لة إحداثيات أخرى تتغ ثوابت أو معاملات ا رونة تبعا لتغ تد الإجهـاد و تـد الانفعال. كن إ اد الثوابت أو ا عاملات ا ديدة وفقا للمعادلات التالية:

$$C'_{ijkl}=\sum_{m,n,p,q=1}^{3}a_{im}a_{jn}a_{kp}a_{lq}\,C_{mnpq}\qquad i,j,k,l=1,2,3 \tag{97.3}$$

$$S'_{ijkl}=\sum_{m,n,p,q=1}^{3}a_{im}a_{jn}a_{kp}a_{lq}\,S_{mnpq}\qquad i,j,k,l=1,2,3 \tag{98.3}$$

حيث a_{hr} جيب ام ا ور x'_h بالنسبة للمحاور x_r .

بناء على العلاقة(98.3) كن حساب معامل يونغ E الا اه الاختياري x'_3 من ا عادلة $y=S'_{3333}$.

طبقا اصية التبديل $(i\leftrightarrow j)$ و $(k\leftrightarrow l)$ يتم التعامل مع القرائن الثنائية بدلا من القرائن الرباعية طبقا للتغي التا :

$(11\rightarrow 1)$ $(23,32\rightarrow 4)$

$(22\rightarrow 2)$ $(13,31\rightarrow 5)$

$(33\rightarrow 3)$ $(12,21\rightarrow 6)$

وبالتا يأخذ قانون هوك ا عمم الصيغة التالية:

$$\sigma_p=\sum_{g=1}^{6}C_{pg}\,\varepsilon_g\qquad g=1,\dots,6 \tag{99.3}$$

$$\varepsilon_p=\sum_{g=1}^{6}S_{pg}\,\sigma_g\qquad g=1,\dots,6 \tag{100.3}$$

كن كتابة العلاقة(99.3) (أو العلاقة(100.3)) بالشكل ا صفو بعد اعتبار $C_{pg}=C_{gp}$ لأن $C_{ijkl}=C_{klij}$ كمـا يلي:

$$
\begin{pmatrix}\sigma_1\\ \sigma_2\\ \sigma_3\\ \sigma_4\\ \sigma_5\\ \sigma_6\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16}\\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26}\\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36}\\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} & C_{46}\\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56}\\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66}\end{pmatrix}\times\begin{pmatrix}\varepsilon_1\\ \varepsilon_2\\ \varepsilon_3\\ \varepsilon_4\\ \varepsilon_5\\ \varepsilon_6\end{pmatrix} \tag{101.3}
$$

تطبيق:أوجد علاقة معامل الانضغاط ا جمي B بدلالة معاملات ا رونة عند تطبيق ضغط هيدروستاتيكي على عينة يئة متوازي مستطيلات ادة متباينة ا ناحي.

كن حساب معامل الانضغاط ا جمي من العلاقة التالية:

$$
\mathrm{B}=-\frac{\Delta p}{\left(\frac{\Delta V}{V}\right)}=-\frac{\Delta p}{\left(\sum_{i=1}^{3}\varepsilon_{ii}\right)} \tag{102.3}
$$

$$
\sum_{i=1}^{3}\varepsilon_{ii}=\sum_{i=1}^{3}\sum_{k,l=1}^{3}S_{iikl}\sigma_{kl} \tag{103.3}
$$

باستخدام العلاقة(91.3) و العلاقة(103.3) د:

$$
\begin{aligned}\sum_{i=1}^{3}\varepsilon_{ii}&=\sum_{i=1}^{3}\sum_{k=1}^{3}S_{iikk}\sigma_{kk}\\ &=-\Delta p\sum_{i,k=1}^{3}S_{iikk}\end{aligned} \tag{104.3}
$$

بتعويض العلاقة(104.3) العلاقة(102.3) د:

$$
\mathrm{B}=\left(\sum_{i,k=1}^{3}S_{iikk}\right)^{-1} \tag{105.3}
$$

- تحديد عناصر ممتد ثوابت أو معاملات المرونة:

لقد بينا الفصل الأول من هذا الكتاب أن البلورات تصنف سبعة فئات حسب تناظرها النقطي أقل هذه البلورات تناظرا هي الفئة ثلاثية ا يل.إن عدد عناصر تدا ثوابت أو معاملات ا رونة ا ستقلة ـذه الفئـة هـو 21 عنـصرا .ذالـك أن تناظرها(الفئة ثلاثية ا يل لملك مركز التناظر فقط) متضمن تدا ثوابت أو معاملات ا رونة. لكن عند الانتقال إ الفئات الأخرى حيث يزداد التناظر فإن عدد العناصر ا ستقلة للممتدين سوف يقل تبعا للتناظر ا ميز للفئة البلوريـة كمـا يبينـه ا دول(10.3).

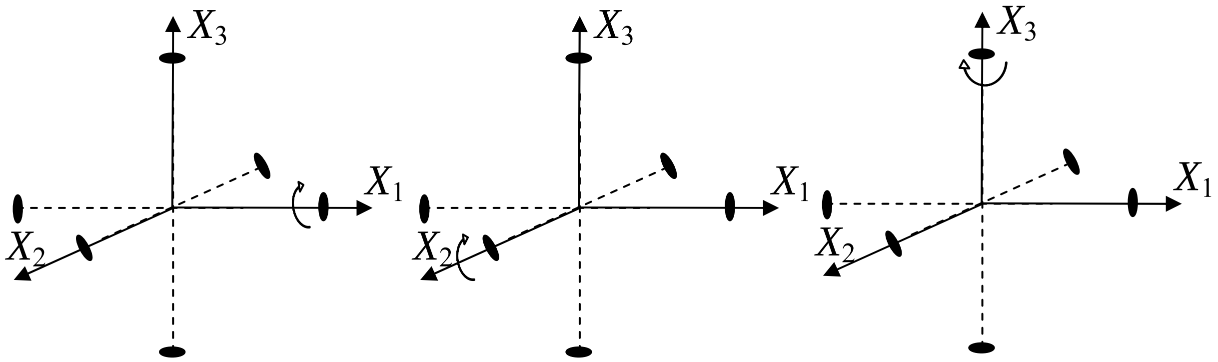
عدد العناصر المستقلة S_{pg} أو C_{pg}	الفئة البلورية
21	ثلاثية الميل
31	أحادية الميل
09	المعينية المستقيمة
6	ثلاثية متساوية الأحرف
5	السداسية
3	المكعبة
2	المواد موحدة الخواص

الجدول(10.3): عدد العناصر ا ستقلة لممتدات ثوابت أو معاملات ا رونة.

لتعي تد ثوابت ا رونة لفئة بلورية معينة يتم استعمال قاعدة معينة تسمى قاعدة الاختبار ا باشر, يتم هذه القاعدة تعي ا اور بعد تطبيق عملية التناظر بدلالة ا اور نفسها القد ة قبل عملية التناظر , حيث يشترط أن تتم عملية التنـاظر هـذه بتناسب ا اور بأعداد صحيحة قبل وبعد العملية التناظرية. ونش أن هذه القاعدة كنة ال هان لكننـا نأجـل ذالـك إ الأعمال ا وجهة. وفيما يلي مثال لتع تد معاملات ا رونة للفئة ا عنية ا ستقية يوضح هذه القاعدة:

الفئة ا عينية ا ستقيمة ا التناظر $\frac{2}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$ ا يع وجود ثلاثة اور ثنائية التناظر متعامدة وعمودية على ثلاث مستويات تناظر.

سوف ري ا سابات على اور التناظر الثنائية فقط حيث أ ا كافية لتعطينا ا متد النهائي ذه الفئة, وعلية فعمليـات التناظر هي عبارة عن دورانات حول ا اور الثنائية بزاوية 180^o:



$$\begin{array}{l} X_1 \to -X_1 (1 \to \bar{1}) \\ X_2 \to -X_2 (2 \to \bar{2}) \\ X_3 \to X_3 (3 \to 3) \\ \{O_1\} \end{array}$$

$$\begin{array}{l} X_1 \to -X_1 (1 \to \bar{1}) \\ X_2 \to X_2 (2 \to 2) \\ X_3 \to -X_3 (3 \to \bar{3}) \\ \{O_2\} \end{array}$$

$$\begin{array}{l} X_1 \to X_1 (1 \to 1) \\ X_2 \to -X_2 (2 \to \bar{2}) \\ X_3 \to -X_3 (3 \to \bar{3}) \\ \{O_3\} \end{array}$$

نكتب تد ثوابت ا رونة $[C_{ijkl}]$ بالصورة $ijkl$ وحيث أن ا متد متناظر فإننا سوف نتعامل مع ا زء العلوي منها فقط:

$$[A] = \begin{pmatrix} 1111 & 1122 & 1133 & 1123 & 1131 & 1112 \\ & 2222 & 2233 & 2223 & 2231 & 2212 \\ & & 3333 & 3323 & 3331 & 3312 \\ & & & 2323 & 2331 & 2312 \\ & & & & 3131 & 3112 \\ & & & & & 1212 \end{pmatrix}$$

نطبق على عناصر ا متد $[A]$ عملية التناظر $\{O_1\}$ لنجد ا متد $[B]$. وإليك بعض الأمثلة عن طريقـة حـساب عناصـر ا متد $[B]$:

$$3323 \xrightarrow{O_1} 33\bar{2}\bar{3} = -3323$$

$$3131 \xrightarrow{O_1} 3\bar{1}3\bar{1} = 3131$$

$$2223 \xrightarrow{O_1} \bar{2}\bar{2}\bar{2}3 = -2223$$

$$1112 \xrightarrow{O_1} \bar{1}\,\bar{1}\,\bar{1}\,\bar{2} = 1112$$

$$3333 \xrightarrow{O_1} 3333$$

الأمثلة أعلاه تضرب إشارت الأرقام ببعضها.

$$[B] = \begin{pmatrix} 1111 & 1122 & 1133 & -1123 & -1131 & 1112 \\ & 2222 & 2233 & -2223 & -2231 & 2212 \\ & & 3333 & -3323 & -3331 & 3312 \\ & & & 2323 & 2331 & -2312 \\ & & & & 3131 & -3112 \\ & & & & & 1212 \end{pmatrix}$$

ا العملية ا راة تناظرية ب أن لا تتغ قيم عناصر ا ممتد أي أن $[B]=[A]$ مما يع أن يـع عناصـر ا متـدين $[A],[B]$ متـساوية وبـذلك تنعـدم العناصـر الـ ا إشـارة سـالبة. مـثلا: $(3331 \to -3331 \Leftrightarrow C_{3331} \to -C_{3331} \Rightarrow C_{3331} = 0)$ بعد وضع أصـفار لكـل العناصـر الـسالبة ا متد $[B]$ صل على ا متد $[D]$.

$$[D]=\begin{pmatrix} 1111 & 1122 & 1133 & 0 & 0 & 1112 \\ & 2222 & 2233 & 0 & 0 & 2212 \\ & & 3333 & 0 & 0 & 3312 \\ & & & 2323 & 2331 & 0 \\ & & & & 3131 & 0 \\ & & & & & 1212 \end{pmatrix}$$

ري على ا متد $[D]$ عملية التناظر O_2 فنجد بالطريقة السابقة نفسها ا متد $[E]$:

$$[E]=\begin{pmatrix} 1111 & 1122 & 1133 & 0 & 0 & -1112 \\ & 2222 & 2233 & 0 & 0 & -2212 \\ & & 3333 & 0 & 0 & -3312 \\ & & & 2323 & -2331 & 0 \\ & & & & 3131 & 0 \\ & & & & & 1212 \end{pmatrix}$$

ولنفس الأسباب السابقة نضع صفرا مكان العناصر السالبة. ونش إ أن تطبيق العملية O_3 لا يؤدي إ ظهور معلومات جديدة .عندئذ ول عناصر ا متد $[E]$ بعد تصف العناصر السالبة إ القرائن الثنائية وأخ ا كن أن صل على تد ثوابت ا رونة للفئة ا عينية ا ستقيمة ا كون من تسعة عناصر مستقلة:

$$[C_{ij}]=\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix} \quad (106.3)$$

وبنفس الطريقة لكن بعمليات تناظر أخرى كن تعي تدات الفئات الأخرى وإليك بعضها:

1) الفئة ا كعبة: هناك ثلاثة قيم مستقلة هي C_{44}, C_{12}, C_{11} .

$$\left[C_{ij}\right]=\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \qquad (107.3)$$

2) الفئة السداسية: هناك س قيم مستقلة هي $C_{44}, C_{12}, C_{13}, C_{33}, C_{11}$.

$$\left[C_{ij}\right]=\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}\left(C_{11}-C_{12}\right) \end{pmatrix} \qquad (108.3)$$

3) ا واد متماثلة ا ناحي: هناك قيمتان مستقلتان ا C_{12}, C_{11} .

$$\left[C_{ij}\right]=\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}\left(C_{11}-C_{12}\right) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}\left(C_{11}-C_{12}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}\left(C_{11}-C_{12}\right) \end{pmatrix} \qquad (109.3)$$

الفصل الرابع

اهتزازات الشبكة البلورية والخصائص الحرارية

1-4 مقدمة

عند دراستنا لطاقة الترابط بـ الذرات استعرضنا حالة الشبكة وضع التوازن حيث تكون كـل ذرة سـاكنة و متموضعة على موضعها الشبكي اما، ولكن ا قيقة أن الذرة أو أيو ا الشبكة ليسا ساكن مكا ما حـ عند الصفر ا طلق كما تش دراسات ميكانيكا الكم، فالذرات أو أيونا ا تز حول مواضع تواز ا ت تأث قوى مرونية (قق قانون هوك) اول أن تعيدها إ وضع تواز ا دوما، ا يؤدي إ اهتزاز الشبكة البلورية بسبب التفاعل بـ الذرات, حيـث أن الروابط الفعالة تنقل فوراً الإهتزازات من إحدى ذرات البلورة إ الذرات ا اورة الأخرى، فيتولد سيل من ا وجات داخل البلورة تعرف بالأمواج ا رنة شريطة أن يكون طول ا وجه أكـ بكث من الثوابت البلورية . والنتيجة حركة اعية متزامنة للذرات (أيونات الذرات) على شكل موجات مرنة موقوفة تشمل كل ذرات أو أيونات البلورة. وتعرف هـذه ا ركـة ا وجية ا ماعية بالنمط الطبيعي لاهتزازات الشبكة.

عرفة مدى استجابة ا واد الصلبة للقوى ا ارجية ا ـؤثرة عليهـا مثـل ا وجـات الـصوتية والإشـعاعات الكهرومغناطيسية يلزم معرفة أ اط اهتزاز شبكتها البلورية . وتتاول هذه الأ اط بالدراسة ر ع مراحـل تتـدرج مـن البساطة إ الصعوبة . وسوف نتعرض هذا ا قرر إ ثلاثة اذج بدءا من وذج خط ذري متجانس أشبه بوتر مشدود إ وذج شبكة أحادية الذرات بعد واحد وذج شبكة ثنائية الذرات وأيضاً بعد فراغي واحد نطبق ذلـك حالة الشبكة الفضائية أي ثلاثة أبعاد.

2-4 الخط الذري المتجانس أو الوتر المشدود

للتعرف على أ اط الاهتزاز ، نفرض وذجاً ادة صلبة بعد واحد على هيئة سلسلة خطية متصلة تتألف من جسيمات نقطية متماثلة تفصل بـ كل منها مسافة بينية a . هذه السلسلة ا تصلة كن اعتبارها وترا مشدودا مثبتا عند طرفيه. إذا سرت الوتر اهتزازة ا طول موجي $\lambda > a$ فإن هذا النموذج يصبح خطا متجانساً تتولد فيه موجات موقوفة، كما الشكل(1.4).

يوضح ا نحـ 1 الشكل(1.4) أن السلسلة تز بأقل تردد زاوي $(\omega_{\min} = 2\pi v_S/\lambda_{\max})$ وهو التردد الأساسي وجة موقوغة تتكون من عقدتينعند الطرف وبطن بينهما.بينما ا نحـ 2 فيمثل موجة موقوفة ترددها انية أمثال التردد الأساسي و ا أقل طول موجي كن حيث يكون أقل طول موجي مثل هذه السلاسل مساويا إ ضعف ا سافة بـ جـسيمتـ متاثلتـ أي $(\lambda_{\min} = 2a)$, وعليه فالتررد الأعظمي ا ناظر هو: $(\omega_{\max} = 2\pi v_S/\lambda_{\min} = \pi v_S/a)$.

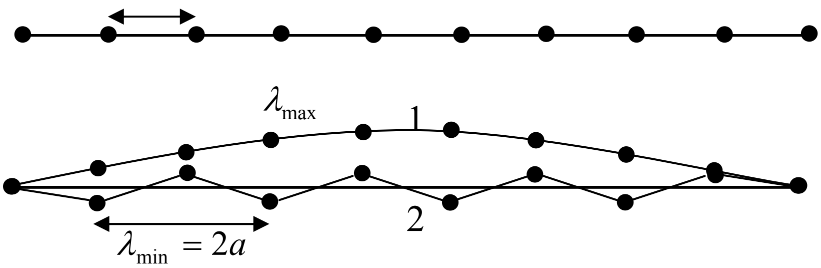
إذا كانت الإزاحة النقطية u فإن سرعة انتشار ا وجه v_S تتحدد من ا عادلة ا وجيه :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{v_S^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \qquad (1.4)$$

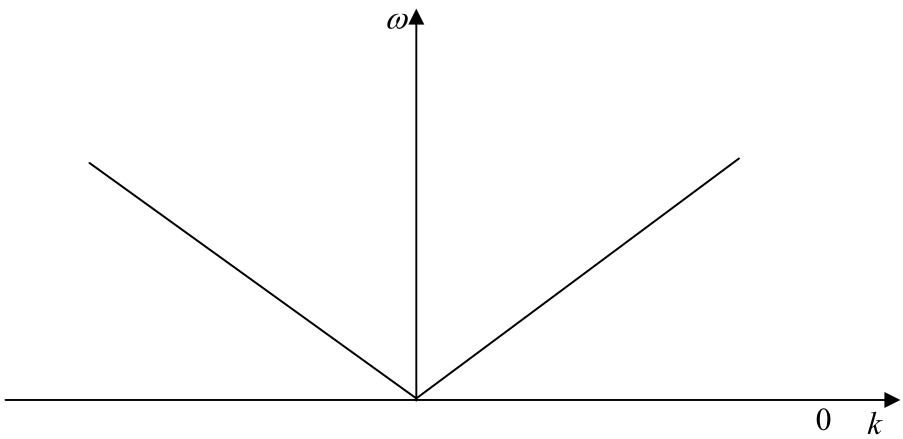
حيث: $\left(v_S = \sqrt{E/\rho}\right)$ ثل E ثابت ا رونة الطو ادة الوتر، وρ الكثافة الطولية ا. وا ل العام ذه ا عادلة هو:

$$u = u_0 \exp\left(i(\omega t \pm k x)\right) \qquad (2.4)$$

حيث أن : $\omega = v_S k$ تسمى هذه العلاقة بعلاقة التبدد(التفريق, التشتت) وهي تربط التردد الزاوي ω بالعدد ا وجي k و ثل نح يسمى منح التبدد كما الشكل(2.4). $v_p = v_S$ هذا النموذج تتساوي سرعة الطور v_p مع سرعة ا موعة v_g . وهذا يع أن سرعة انتشار ا وجة الوسط ا ستمر لا تعتمد على طول ا وجه .



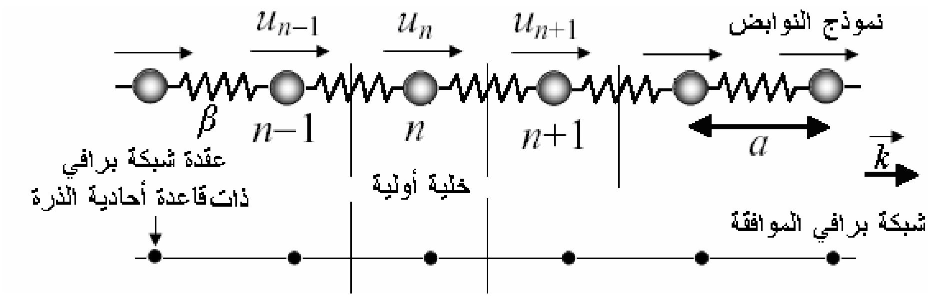
الشكل (1.4): سلسلة متجانسة من جسيمات متشا ة على هيئة وتر مشدود.



الشكل (3.4): منح التبدد ط متجانس من ا سيمات

3-4 أنماط الاهتزاز الطبيعية للشبكة البلورية الخطية المؤلفة من ذرة واحدة في الخلية الأولية (شبكة برافي الخطية أحادية الذرة)

هذا النموذج تتم الدراسة من خلال سلسلة خطية مؤلفة من ذرة واحدة ا لية الأولية و ثل هذه ا الة كلاسيكيا بكتل متماثلة تل عقد الشبكة البلورية, كتلة كل منها (m) ومسافات بينية (a) ، ويب الشكل (3.4) كما لو كانت تلك الكتل متصلة مع بعضها البعض بنوابض مرنة مهملة الكتلة ثابت مرونتها β، وللتبسيط يؤخذ التفاعل ب ذرات ا وار الأول فقط. ويفرض أن ذرات ا وار الثا والثالث والرابع ....تأث ها مهمل على الذرة الأصل(n)



الشكل (3.4): وذج السلسلة خطية مؤلفة من ذرة واحدة ا لية الأولية.

ومن أجل الإزاحات الصغ ة حول وضع التوازن نعت التقريب التوافقي (أي أن الإزاحة ضع لقانون هوك) وبالتا فان القوة ا ؤثرة على الذرة (n) الشكل (3.4) هي عبارة عن صلة قوت ومن خلال تطبيق قانون هوك حيث الرموز $(...u_{n-1},u_n,u_{n+1}...)$ ثل الانزياح ا وافق وضع الذرة...$n+1$, n, n-1 ... د:

القوة ا ؤثرة على الذرة n من قبل الذرة n+1 الا اه ا وجب تعطى بالعلاقة:

$$F_1 = -\beta(u_n - u_{n+1}) \quad (3.4)$$

والقوة الثانية ا ؤثرة على الذرة n من قبل الذرة n-1 الا اه السالب تعطى بالعلاقة:

$$F_2 = \beta(u_n - u_{n-1}) \quad (4.4)$$

و صلة القوى ا ؤثرة على الذرة n هي ا موع ا ي للقوت السابقة :

$$F_n = F_1 - F_2 = -\beta(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) \qquad (5.4)$$

وبتطبيق قانون نيوتن الثا للحركة د من العلاقة (3):

$$F_n = m\frac{d^2u_n}{dt^2} = m\ddot{u}_n = -\beta(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1})$$

$$m\ddot{u}_n + \beta(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) = 0 \qquad (6.4)$$

ثل ا عادلة (6.4) معادلة تفاضلية من ا رتبة الثانية ،و ب الانتباه إ أن كل ذرة من ذرات الشبكة ا ا عادلة (6.4) فإذا كان عدد الذرات N ذرة فيكون لدينا N معادلة تفاضلية مرتبطة من ا رتبة الثانية اجة إ حل متزامن . و ل هذا العدد اللكب جدا من ا عادلات ب أن نأخذ با سبان أن معادلة ا ل ب أن لا تتبدل عند ا واضع $x_n= na$ حيث a ثابتة الشبكة البلورية (شرط الدورية) و ذا الغرض نبحث عن حل من شكل أمواج مستوية منتشرة طولية (وهذا طبقا لنموذج النوابض ا الشكل(3.4) حيث يكون اهتزاز الذرات طوليا على السلسلة ولكن النتائج تبقى صحيحة من أجل الأمواج ا ستعرضة حيث يكفي اعتبار اهتزاز الذرات مستعرضا أي عموديا على طول السلسلة طبعا بثوابت مرونة أخرى) حيث كل الذرات تز بنفس التردد ω وبنفس السعة u و ا العدد ا وجي k وذلك لأن شرط متجه الانسحاب لشبكة برا قق.

$$u_n = u\exp\left(i\left(kx_n - \omega t\right)\right) = u\exp\left(i\left(nka - \omega t\right)\right) \qquad (7.4)$$

نعوض ا عادلة (7.4) ا عادلة (6.4) مع الانتباه أثناء الاشتقاق مرتـ ووضع $x_{n+1}=a(n+1)$ وكـ ـ ـ ـذلك $x_{n-1}=a(n-1)$ و صل على ا عادلة التالية:

$$m\omega^2 = \beta(2 - e^{ika} - e^{-ika})$$

إذا اعتـ نا أن $\theta = ka$ وبالاستفادة من العلاقة ا ثلثية التالية $\cos\theta = \frac{1}{2}(e^{i\theta} + e^{-i\theta})$ د:

$$\omega^2 = \frac{2\beta}{m}(1-\cos ka) = \frac{4\beta}{m}\sin^2\frac{ka}{2}$$

$$\omega = \pm 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}\left|\sin\frac{ka}{2}\right| \qquad (8.4)$$

$$\omega = \pm\,\omega_{\max}\left|\sin\frac{ka}{2}\right|$$

حيث $\omega_{\max} = 2\sqrt{\beta/m}$ وهي أكـ قيمة للتردد الزاوي.

العلاقة (8.4) هي علاقة التبدد أو التشتت للشبكة البلورية ا طية ا ؤلفة من ذرة واحدة ا لية الأولية . أما الإشـارتان ا وجبة والسالبة فتوافق انتشار الأمواج من اليسار إ اليم أو العكس.

1-3-4 خصائص علاقة التبدد

يلاحظ أن الدالة $\omega(k)$ زوجية حيث $\omega(-k)=\omega(k)$ و تغ ها تابع لتغ قـيم الدالـة $|\sin ka/2|$ وللدالـة الأخ ة دور يساوي الزاوية ($n'\pi$)حيث n' عدد صحيح, فإذا كان k' دور الدالة $\omega(k)$ فيمكن أن د مايلي:

$$\omega(k) = \omega(k+k') \Rightarrow$$

$$|\sin(ka/2)| = |\sin((k+k')a/2)| = |\sin((ka/2)+n'\pi)| \Rightarrow \qquad (9.4)$$

$$\frac{k'a}{2} = n'\pi \Rightarrow k' = \frac{2\pi n'}{a}$$

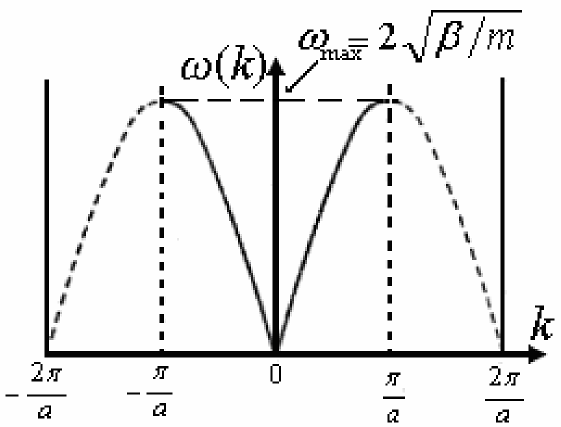
وهذا يع أننا إذا استبدلنا k بـ $k+2\pi n/a$ العلاقة(7.4) و(8.4) فلن تتبدل ا ـول و تكـون متطابقـة فيزيائيا، وبالتا فان ا لول يعها متطابقة ا ناطق ال قق الشرط $k+2\pi n/a$ ، لذلك نكتفي بالدراسـة ا نطقـة الأو أي حالة $n=1$. ويكون k صورا ا ال من $-\pi/a$ إلى $+\pi/a$ وال ثل منطقة بريلوان الأو وهذا مـا يوضحه الشكل(4.4). عندما تكون k موجبة فان ا وجة تنتشر الشبكة الا اه ا وجب ،وعندما تكون k سالبة فإن ا وجة تنتشر الا اه السالب.

لاحظ أن اك تردد $\omega_{\max}$ يتوافق مع أكـ قيمة للعدد ا وجي ($k_{max}= \pi/a$) ومع اصغر طول موجي $\lambda_{\min} = 2\pi/k_{\max} = 2a$ أي أنه لا يوجد أطوال موجية أصغر من 2a. وهذا يتوافق مع معادلة براغ للحيود $2d\sin\theta = n_1\lambda$ ، فعندما $\theta = \pi/2$ و $d=a$ و $k=2\pi/\lambda$ و $n_1=1$ د أن $\lambda=2a$.

وعلى حدود منطقة بريلوان ($k_{max}=\pm\pi/a$) فان ا عادلة (7.4) سوف لن ثل موجة منتشرة هذه ا ال بل ستصبح موجة موقوفة ا الشكل التا :

$$u_n = u\exp(\pm in\pi - i\omega t) = (-1)^n u\exp(-i\omega t) \tag{10.4}$$

وتش هذه العلاقة إ أن الذرات ا تجاورة تز على التعاكس الا اه وذلك حسب قيم n الزوجية والفردية ا يؤدي إ نشوء ا وجة ا وقوفة، والسبب ذلك انعكاس الأمواج الواردة إ حدود منطقة بريلوان قفة شرط براغ الانعراج ا يؤدي إ تداخل الأمواج الواردة والأمواج ا نعكسة فتتشكل أمواج موقوفة (مستقرة) و ع أخر عندما لا تستطيع ا وجة الانتشار الشبكة إلا من خلال الانعكاسات ا تتالية ذهابا وإيابا على حدود منطقة بريلوان عندئذ تنشأ ا وجة ا وقوفة (الأمواج لا تتحرك لا و اليم ولا و اليسار ، بل تشكل مغازلا(بطونا) وعقدا كما حالة الوتر ا شدود.



الشكل (4.4) منحنى التبدد للشبكة البلورية ا طية ا ؤلفة من ذرة واحدة ا لية الأولية

سرعة الطور وسرعة المجموعة

تعطى علاقة سرعة الطور وال ثل سرعة انتشار ا وجة ا ستوية بالعلاقة التالية:

$$V_p = \frac{\omega}{k} \tag{11.4}$$

بتعويض العلاقة (8.4) (11.4) وضرب البسط وا قام بـ a وقسمة البسط وا قام على 2 د سرعة الطور:

$$V_p = \frac{\omega}{k} = \frac{2\sqrt{\frac{\beta}{m}}\left|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right|}{k} = \sqrt{\frac{\beta a^2}{m}}.\left|\frac{\sin\left(\frac{ka}{2}\right)}{\frac{ka}{2}}\right| \tag{12.4}$$

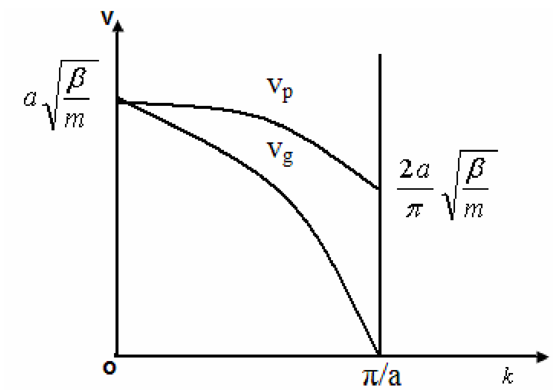
وتعطى سرعة ا موعة وال ثل سرعة حزمة ا وجة وهي سرعة انتشار الطاقة الوسط بالعلاقة التالية:

$$V_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} \qquad (13.4)$$

وباشتقاق العلاقة (8.4) بالنسبة لـ k د سرعة ا موعة:

$$V_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \sqrt{\frac{\beta a^2}{m}} . \left| \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \right| \qquad (14.4)$$

تش العلاقة (14.4) أنه على حدود منطقة بريلوان $k = \pm\pi/a$ فان سرعة ا موعة تساوي الصفر وعليه لا يتم انتـشار للطاقة على ا دود. بينماالعلاقة (12.4) تنتهي إ القيمة $\left((2\pi/a)\sqrt{\beta/m}\right)$. وتش كلتا العلاقت السابقت أنه من أجل الأمواج الطويلة جدا حيث العدد ا وجي ينتهي إ الصفر($k=(2\pi/\lambda)\rightarrow 0$) فإن سرعة الطور v_p وسرعة ا موعة v_g يكون ما نفس القيمة ($a\sqrt{\beta/m}$) وهذا ما يعادل سرعة الصوت انظر الشكل(5.4).



الشكل(5.4): تغ ب سرعة الطور وسرعة ا موعة بدلالة العدد ا وجي.

- حالة الأمواج الطويلة حيث ($\lambda >> a$) أو ($ka << 1$) فإننا ننشر ا يب وفق ما يلي:

$$\sin\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{ka}{2} - \frac{(ka)^3}{3!} + \frac{(ka)^5}{5!} - .... \approx \frac{ka}{2} \qquad (15.4)$$

نعوض العلاقة (15.4) (8.4) فنجد:

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \approx 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \frac{ka}{2} = \sqrt{\frac{\beta a^2}{m}} k \qquad (16.4)$$

تش العلاقة (16.4) أن التردد يتناسب طردا مع العدد ا وجي حال الأمواج الطويلة و بذلك تكون سرعة ا موعـة مساوية لسرعة الطور و يساويان سرعة الصوت ا ستقلة عن التردد عند تلك ا دود ونكون حالة أشـبه الـة الـوتر ا شدود.

$$v_p = v_g = a\sqrt{\frac{\beta}{m}} = v_S \qquad (17.4)$$

- **الشروط الحدية الدورية لبورن– فون كارمن(Born-von Karmann)**

إن ا الة ا ثالية غ ققه لأننا نتعامل مع بلورة ذات حدود وللتغلب على هذه ا الة نأخذ عدد ضخم N من ا واقـع (وهو يقابل عدد ا لايا الأولية أو عدد القواعد الذرية) يوضع على دائرة ذات قطر ضخم، يث لا تلف فيزيائيا عـن سلسلة طويلة جدا، و من خلال أن الذرة الأو والذرة ذات الرقم N تقعان نفس حالة الاستقرار يتحقق الشرط:

$$u_{n\pm N} = u_n \qquad (17.4)$$

تسمى العلاقات من شكل العلاقة بالشروط ا دية الدورية لبورن– فون كارمن و هذه ا الة فان العدد ا وجي سـيأخذ قيم متقطعة أو منفصلة($discrete$)، بتعويض العلاقة (7.4) العلاقة(17.4) د أن:

$$u\,e^{i(kan\pm kaN-\omega t)} = u\,e^{i(kan-\omega t)} \Rightarrow$$

$$\exp(\pm ikaN) = 1 \Rightarrow kaN = 2\pi h \Rightarrow$$

$$k = \frac{2\pi}{aN}h = 0, \pm\frac{2\pi}{aN}, \pm\frac{4\pi}{aN}, \pm\frac{6\pi}{aN}......... , \pm\frac{N\pi}{aN} = \pm\frac{\pi}{a} \qquad (18.4)$$

$$-\frac{\pi}{a} \le k \le +\frac{\pi}{a}\ ,\ -\frac{N}{2} \le h \le +\frac{N}{2} \qquad (19.4)$$

حيث h عدد صحيح .

تش العلاقتان (18.4) و(19.4) إ أن العدد ا وجي يأخذ N قيمة منفصلة الفاصل ($\pm\pi/a$) الشبكة ا طيـة

ال ثابتتها a.

وهناك شرط حدي آخر يرتبط بكون الذرات الشبكة البلورية منفصلة (غ مستمرة) لشرح هذا الشرط سنـضيف إ العدد ا وجي k ا قدار التا $(G=(2\pi/a)n_g)$ (ا قدار يع عن شعاع الشبكة ا عكوسة للشبكة ا طية ا باشرة ال ثابتتها a) ونكتب:

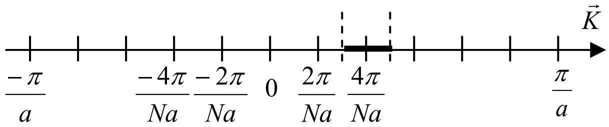
$$k' = k + G = k + \frac{2\pi}{a} n_g \qquad (20.4)$$

وإذا تعويض العلاقة (20.4) بالعلاقة (7.4) سنحصل على الشرط (18.4) نفسه، والذي يش إ تكـافؤ ا ـالات وتكفي الدراسة منطقة بريلوان الأو .

2-3-4 كثافة الأنماط الاهتزازية

من الشرط ا فروض على k (ا عادلة) ينتج وجود قيمة واحـدة مـسموحة لـ ـ k عنـصر الطـول للفـضاء $\vec{k}$ مقدارها $(2\pi/aN)$. ذا فعدد القيم ا سموحة لـ k وحدة الطول للفضاء $\vec{k}$ (كثافة القيم k) يساوي:

$$g(k)=\frac{1}{\left(\frac{2\pi}{aN}\right)}=\frac{aN}{2\pi}, \quad -\frac{\pi}{a}\le k\le+\frac{\pi}{a} \qquad (21.4)$$



الشكل (6.4): عنصر الطول الفضاء $\vec{k}$

وعدد قيم العدد ا وجي k الواقعة ب القيمت k و $k+dk$ يساوي:

$$g(k)dk=\frac{aN}{2\pi}dk, \quad -\frac{\pi}{a}\le k\le+\frac{\pi}{a} \qquad (22.4)$$

ولو أخذنا الاعتبار قيم k ا وجبة فقط فإن عددها يصبح:

$$g(|k|)dk = 2\frac{aN}{2\pi}dk \qquad (23.4)$$

عدد أ اط الاهتزاز ا ال ω و $\omega+d\omega$ هو نفسه عدد قيم العدد ا وجي k الواقعة ب القيمت $|k|$ و $|k+dk|$ أي:

$$D(\omega)d\omega = g(|k|)dk$$

(24.4) $$D(\omega)d\omega = g(|k|)dk = 2\frac{aN}{2\pi}dk$$

وعليه كثافة الأ اط $D(\omega)$ أو عدد الأ اط لوحدة طول ال التردد تساوي:

(25.4) $$D(\omega) = \frac{aN}{\pi}\frac{dk}{d\omega}$$

ولدينا من علاقة التبدد الا نعيد كتابتها بالشكل:

$$\omega = \omega_{\max}\left|\sin\left(\frac{|k|a}{2}\right)\right|$$

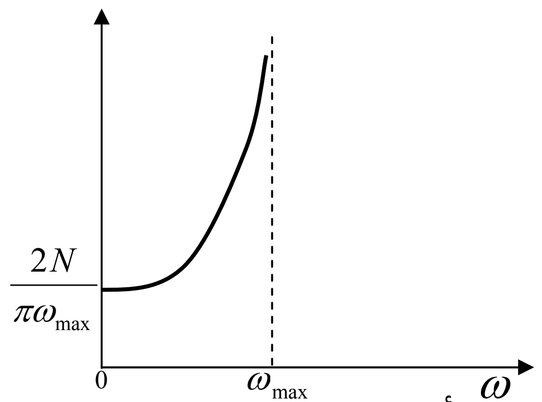
$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{a\omega_{\max}}{2}\left|\cos\left(\frac{ka}{2}\right)\right| = \frac{a\omega_{\max}}{2}\left(1-\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$= \frac{a}{2}\left(\omega_{\max}^2 - \omega^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

ومنه د علاقة كثافة الأ اط كما يلي:

(26.4) $$D(\omega) = \frac{2N}{\pi}\left(\omega_{\max}^2 - \omega^2\right)^{-\frac{1}{2}} = \frac{2N}{\pi\omega_{\max}}\left(1-\frac{\omega^2}{\omega_{\max}^2}\right)^{-\frac{1}{2}}$$

يد الشكل(7.4) هذه العلاقة.



الشكل (7.4): كثافة الأ اط للشبكة ا ؤلفة من ذرة واحدة ا لية الأولية

ساب عدد أ اط الاهتزاز نقوم ساب عدد قيم التردد ω ا ال $[\omega,\omega_{\max}]$ أو حساب قيم k ا ـستقلة وهـي يعها متواجدة منطقة بريلوان الأو و نكتب مايلي:

$$\int_0^{\omega_{\max}} D(\omega)d\omega = \frac{2N}{\pi}\int_0^{\omega_{\max}} \left(\omega_{\max}^2-\omega^2\right)^{-\frac{1}{2}} d\omega = \frac{2N}{\pi}\left[\arcsin\left(\frac{\omega}{\omega_{\max}}\right)\right]_0^{\omega_{\max}} = \frac{2N}{\pi}\left[\frac{\pi}{2}\right] = N$$

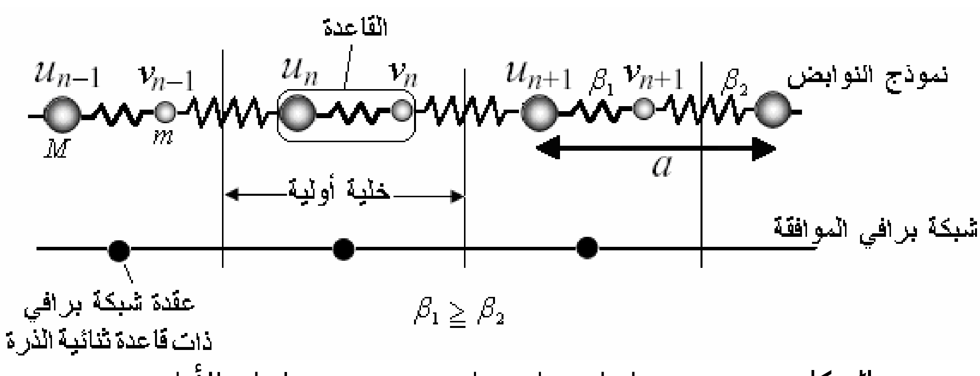
$$\int_0^{\omega_{\max}} D(\omega)d\omega = \int_0^{\pi/a} g(|k|)dk = \int_0^{\pi/a} \frac{aN}{\pi}dk = \frac{aN}{\pi}\left[\frac{\pi}{a}\right] = N \qquad (27.4)$$

N: ثل عدد أ اط الاهتزاز و عدد درجات ا رية لـ N ذرة.

4-4 أنماط الاهتزاز الطبيعية للشبكة البلورية الخطية المؤلفة من ذرتين في الخلية الأولية (شبكة برافي الخطية ثنائية الذرة)

عا نا النموذج السابق اهتزاز الذرات أبسط شكل للشبكة ا طية حيث كانت ا لية الأولية لا وي سوى ذرة واحدة. و تشكل ا عادن أمثلة على الشبكات الفراغية ا تبلورة ب مكعبة ركزة أو ركزة الأوجه وي خلاياها الأولية على ذرة واحدة. أما هذا النموذج ا سمى أعلاه ندرس اهتزازات الشبكة ا طية ا ركبة حيث يفترض أن ا لية الأولية وي ذرت تلفت إما من حيث كتلتهيما مثل البلورات الأيونية $NaCl$, $CsCl$....أو من حيث نوعية ارتباطهما مثل البلورات Si, Ge....أو كلا ا.

تتم الدراسة هذا النموذج عموما من خلال سلسلة خطية مؤلفة من ذرت تلفت كتلتا ـا m و M ا ليـة الأولية ثلان ذرتا قاعد التركيب البلوري, حيث تبدو هاتان الذرتان وكأ ما متصلاتان بنابض ثابته β_1 وتبدو يع القواعد الذرية متصلة مع بعضها بنوابض متماثلة ثابتها β_2 يث $\beta_2 \le \beta_1$. والبعد ب ذرت متماثلة من قاعدت متالية ثابت الشبكة a وهو طول ا لية الأولية أيضا. ونرمز لإزاحات الذرات M بالرموز $(...u_{n-1},u_n,u_{n+1}...)$ ونرمـز لإزاحـات الذرات m بالرموز $(...v_{n-1},v_n,v_{n+1}...)$ كما هو مب الشكل(8.4).



الشكل(8.4): وذج سلسلة خطية مؤلفة من ذرت ا لية الأولية.

ومن أجل الإزاحات الصغ ة حول وضع التوازن وباعتبار أن التفاعل يتم ب ذرات ا وار الأول فقط وبناء على ما سبق كن أن نكتب معادل ا ركة كما يلي:

(28.4) $$M\,\ddot{u}_n = -\beta_1(u_n - v_n) - \beta_2(u_n - v_{n-1})$$

(29.4) $$m\,\ddot{v}_n = -\beta_1(v_n - u_n) - \beta_2(v_n - u_{n+1})$$

نقترح ا ل على شكل أمواج طولية(وهذا طبقا لنموذج النوابض ا ب الشكل(8.4) حيث يكون اهتزاز الذرات طوليا السلسلة ولكن النتائج تبقى صحيحة من أجل الأمواج ا ستعرضة حيث يكفي اعتبار اهتزاز الذرات مستعرضا أي عموديا على طول السلسلة طبعا بثوابت مرونة أخرى) منتشرة ترددها ω وعددها ا وجي k بسعات تلفة تبعا نوع الذرات.

(30.4) $$u_n = u\exp\left(i(nka - \omega t)\right)$$

(31.4) $$v_n = v\exp\left(i(nka - \omega t)\right)$$

العلاقت ا معادلتا ط واحد يزبتردد ω وعدد موجي k ويربط الانزياحات u_n مع بعضها و الانزياحات v_n مع بعضها.

وعند تطبيق الشروط ا دية الدورية كن ديد ال الدراسة كما يلي:

نضع $u_n = u_{n+N}$ و $v_n = v_{n+N}$ د كلتا ا الت : $\exp(iNka) = 1$ ومنه د:

$$k = \frac{2\pi}{aN}h = 0, \pm\frac{2\pi}{aN}, \pm\frac{4\pi}{aN}, \pm\frac{6\pi}{aN}\,\ldots\ldots\ldots, \pm\frac{N\pi}{aN} = \pm\frac{\pi}{a}$$

$$-\frac{\pi}{a} \le k \le +\frac{\pi}{a}\ ,\ -\frac{N}{2} \le h \le +\frac{N}{2}$$

حيث: h عدد صحيح و N : هو عدد ا لايا الأولية أو عدد القواعد الذرية(أو الأيونية) وهو مساو لعدد قيم k ا ستقلة الواقعة منطقة بريلوان الأو لدى كن اقتصار الدراسة منطقة بريلوان الأو فقط.

نعود الآن إ حل ا عادلت (28.4) و(29.4) بتعويض(30.4) و(31.4) (28.4) و(29.4) د لة ا عـادات التالية:

(32.4) $$\left(M\omega^2 - (\beta_1 + \beta_2)\right)u + \left(\beta_1 + \beta_2\exp(ika)\right)v$$

(33.4) $$\left(\beta_1 + \beta_2\exp(ika)\right)u + \left(m\omega^2 - (\beta_1 + \beta_2)\right)v$$

ل هات ا عادلت ا تجانست يشترط أن يكون دد ا عاملات u و v معدوما ومنه:

$$\begin{vmatrix} M\omega^2-(\beta_1+\beta_2) & \beta_1+\beta_2\exp(ika) \\ \beta_1+\beta_2\exp(ika) & m\omega^2-(\beta_1+\beta_2) \end{vmatrix}=0 \qquad (34.4)$$

وبعد التبسيط صل على معادلة من الدرجة الرابعة:

$$\omega^4-\frac{\beta_1+\beta_2}{\mu}\omega^2+\frac{4\beta_1\beta_2}{Mm}\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)=0 \qquad (35.4)$$

حيث: $\mu = Mm/(M+m)$ الكتلة ا ختزلة للكتلة M و m.

ا عادلة(35.4) تقبل جدران من أجل ا تغ ا ω^2:

$$\omega_1^2=\frac{\beta_1+\beta_2}{2\mu}\left(1-\sqrt{1-\alpha\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)}\right) \qquad (36.4)$$

$$\omega_2^2=\frac{\beta_1+\beta_2}{2\mu}\left(1+\sqrt{1-\alpha\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)}\right) \qquad (37.4)$$

حيث:

$$\alpha=16\frac{\beta_1\beta_2}{(\beta_1+\beta_2)^2}\left(\frac{\mu}{M+m}\right)\le 1 \qquad (38.4)$$

تب العلاقة أن ا قدار α يبلغ قيمته العظمى عندما يكون $\beta_1=\beta_2$ و $M=m$ ومنه د أن ا قدار: $1-\alpha\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)$ موجب دوما وهو ما يضمن أن الترددين ω_2,ω_1 حقيقيـ دوما.

ا أن كل قيمة لـ k تقبل حل ا ω_2,ω_1 وحيث أن عدد قيم k ا ستقلة يساوي N وبالتا يكون لدينا $2N$ ط طبيعي للاهتزاز وهو مساو لدرجة حرية ا موعة ا تكونة من $2N$ ذرة أو أيون مهتزة بعد واحد. والعلاقـتان(37.4) و(38.4) ثلان فرعان للتبد.

والآن نبسط ا لول:

1. أولا ندرس ا عادلة (37.4) و(38.4) حالة الأمواج الطويلة $(\lambda \gg a)$ أو $(ka \ll 1)$ حيث يـصح التقريب $(\sin(ka/2)\approx(ka/2))$:

$$\omega_1^2=\frac{\beta_1+\beta_2}{2\mu}\left(1-\sqrt{1-\alpha\left(\frac{ka}{2}\right)^2}\right)\approx\frac{\beta_1+\beta_2}{2\mu}\left(1-\left(1-\alpha\left(\frac{1}{2}\right)\frac{k^2a^2}{4}\right)\right)\Rightarrow$$

$$\omega_1 = \frac{\sqrt{\alpha(\beta_1 + \beta_2)}}{4\sqrt{\mu}} ak \tag{39.4}$$

$$\omega_2^2 = \frac{\beta_1 + \beta_2}{2\mu}\left(1 + \sqrt{1 - \alpha\left(\frac{ka}{2}\right)^2}\right) \approx \frac{\beta_1 + \beta_2}{2\mu}\left(1 + \left(1 - \alpha\frac{k^2a^2}{8}\right)\right) \Rightarrow$$

$$\omega_2 = \frac{\sqrt{\beta_1 + \beta_2}}{\sqrt{\mu}}\left(1 - \frac{\alpha a^2}{32}k^2\right) \tag{40.4}$$

نلاحظ من العلاقة(39.4) أن $\omega_1(k)$ عند قيم k الصغ ة هي من النوع $\omega = C\,k$ وهذه العلاقة الأخيرة اثل علاقة التبدد للأمواج الصوتية ا رنة لدى ي فرع التبدد هذا بالفرع الصو ونرمز لـ ω_1 من هنا فصاعدا بـ ـ ω_{ac}. أمـا العلاقة(40.4) فتب نقصان $\omega_2(k)$ بزيادة k ويسمى فرع التبدد هذا بالفرع الضوئي.ومن أسباب تسميته ذا الاسم هو أن ا وجات الطويلة للفرع الضوئي البلورات الأيونية عموما هي ال تتفاعل مع الأمواج الكهرومغناطيـسية , ونرمـز لـ ω_2 من هنا فصاعدا بـ ω_{op}

2. ثانيا ندرس ا عادلت عند حدود منطقة بريلوان الأو $k = \pm\frac{\pi}{a}$:

$$\omega_{ac}\left(\pm\frac{\pi}{a}\right) = \omega_{ac}^{\max} = \frac{\beta_1 + \beta_2}{2\mu}\left(1 - \sqrt{1-\alpha}\right) \tag{41.4}$$

$$\omega_{op}\left(\pm\frac{\pi}{a}\right) = \omega_{op}^{\min} = \sqrt{\frac{\beta_1 + \beta_2}{2\mu}\left(1 + \sqrt{1-\alpha}\right)} \tag{42.4}$$

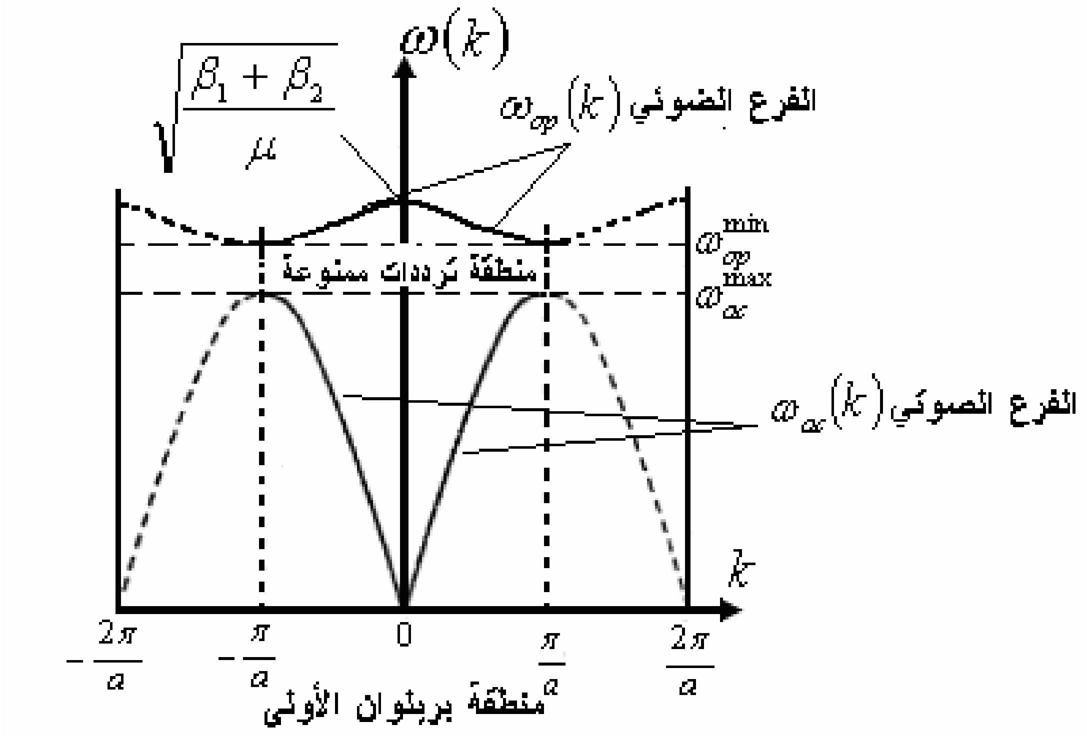
عند حدود منطقة بريلوان الأو نلاحظ أن $\omega_{ac}^{\max} = \omega_{op}^{\min}$ عند $\alpha = 1$ (أي: $m = M$ و $\beta_1 = \beta_2$) وبذلك يكـون $\omega_{ac}^{\max} = \omega_{op}^{\min} = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}$ وهذه ا الة توافق وذج الاهتزاز السابق حيث يوجد ذرة واحـدة ا ليـة الأوليـة لكـن عند $\alpha \neq 1$ (أي: $m \neq M$ أو $\beta_1 \neq \beta_2$) فإن $\omega_{ac} \neq \omega_{op}$.

لدينا عند مركز منطقة بريلوان:

$$\omega_{ac}(k = 0) = 0 \tag{43.4}$$

$$\omega_{op}(k = 0) = \sqrt{\frac{\beta_1 + \beta_2}{\mu}} \tag{44.4}$$

على أساس ا عادلات نقوم برسم منح التبدد منطقة بريلوان الأو وبالتناظر منطقة بريلوان الثانية.



الشكل(9.4):منحـ التبدد للشبكة البلورية ا طية ا ؤلفة من ذرتـ ا لية الأولية.

يتضح من الشكل وجود منطقة ترددات نوعة بـ الترددين $\omega_{ac}^{\max}$, $\omega_{op}^{\min}$ وهذه خاصية أساسية لانتشار امواج ا رونـة البلورات ذوات القاعدة التركيب البلوري .مع هذا أن أية موجة يقع ترددها بـ الترددين تسقط على البلورة سوف لاتنتشر فيها بل تص بشدة.

- طبيعة اهتزاز الذرات في الفرعين الصوتي و البصري

يظهر الاختلاف طبيعة اهتزاز الذرات الفرع الصو والضوئي جليا حالة الأمواج الطويلة أي عند مركز منطقـة بريلوان و حالة الأمواج القصـ ة أي عند حدود منطقة بريلوان.

أ- حالة الأمواج الطويلة $(k \approx 0)$.

$$\omega_{ac}(k=0)=0 \tag{45.4}$$

$$\omega_{op}(k=0)=\sqrt{\frac{\beta_1+\beta_2}{\mu}} \tag{46.4}$$

من العلاقات(30.4) و(31.4) و(32.4) و(33.4) و العلاقة(45.4) للفرع الصو د:

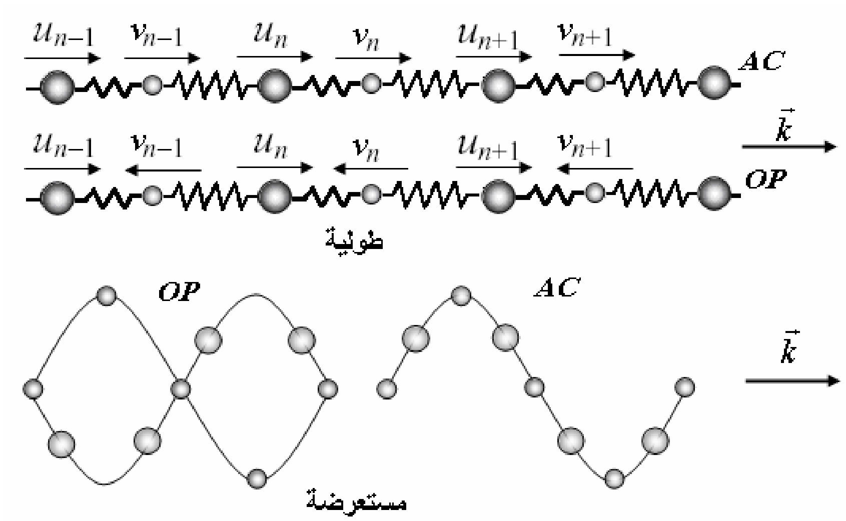
$$\frac{u_n}{v_n}=\frac{u}{v}=\frac{\beta_1+\beta_2\exp(ika)}{\beta_1+\beta_2-M\omega_{ac}^2(k=0)}=\frac{\beta_1+\beta_2}{\beta_1+\beta_2}=1 \tag{47.4}$$

من العلاقات(30.4) و(31.4) و(32.4) و(33.4) و العلاقة(46.4) للفرع الضوئي د:

$$\frac{u_n}{v_n}=\frac{u}{v}=\frac{\beta_1+\beta_2\exp(ika)}{\beta_1+\beta_2-M\omega_{op}^2(k=0)}=\frac{\beta_1+\beta_2}{\beta_1+\beta_2-M\sqrt{\dfrac{\beta_1+\beta_2}{\mu}}}=-\frac{M}{m} \qquad (48.4)$$

وهكذا نستنتج من أجل الأمواج الطويلة جدا يكون اهتزاز الذرات الفرع الصو متواقتا أي بتوافق الطور وسعة اهتزاز الذرات m تساوي سعة اهتزاز الذرات M أي أن يع الانزياحات الذرية اللحظية متـساوية و هـذا موضـح الشكل(10.4) للأمواج الطولية أو ا ستعرضة.

أما بالنسبة للفرع الضوئي فإن الـذرات تـز بـأطوار متعاكـسة يـث يبقـى مركـز ثقـل ذرتـا القاعـدة ساكنا $Mu_n+mu_n=0$ كما الشكل(10.4). وإذا كانت ا لية الأولية وي أيون متعاكس الشحنة كبلورات ا لوجينات القلوية فإن اهتزاز هذا النوع من البلورات س افقه تغ عزم ثنائي الأقطاب الكهربائي وهذا غالبا ما يرافقـه امتصاص أو إصدار أشعة ت راء وهذا سبب آخر لتسمية هذا الفرع بالفرع الضوئي.



الشكل(10.4) : الأمواج الطولية وا ستعرضة الفرع البصري والصو شبكة خطية ثنائية الذرة تب الشكل الاهتزازي للذرات.

ب- حالة الأمواج القص ة $\left(k=\pm\frac{\pi}{a}\right)$.

$$\omega_{ac}\left(\pm\frac{\pi}{a}\right)=\omega_{ac}^{\max}=\frac{\beta_1+\beta_2}{2\mu}\left(1-\sqrt{1-\alpha}\right) \quad (49.4)$$

$$\omega_{op}\left(\pm\frac{\pi}{a}\right)=\omega_{op}^{\min}=\sqrt{\frac{\beta_1+\beta_2}{2\mu}\left(1+\sqrt{1-\alpha}\right)} \quad (50.4)$$

من العلاقات(30.4) و(31.4) و(32.4) و(33.4) و العلاقة(49.4) للفرع الصو د:

$$\frac{u_n}{v_n}=\frac{u}{v}=\frac{\beta_1+\beta_2\exp(ika)}{\beta_1+\beta_2-M\omega_{ac}^2(k=\pm\pi/a)}=\frac{\dfrac{\beta_1-\beta_2}{\beta_1+\beta_2}}{1-\dfrac{M+m}{2m}\left(1-\sqrt{1-\alpha}\right)} \quad (51.4)$$

من العلاقات(30.4) و(31.4) و(32.4) و(33.4) و العلاقة(50.4) للفرع الضوئي د:

$$\frac{u_n}{v_n}=\frac{u}{v}=\frac{\beta_1+\beta_2\exp(ika)}{\beta_1+\beta_2-M\omega_{op}^2(k=\pm\pi/a)}=\frac{\dfrac{\beta_1-\beta_2}{\beta_1+\beta_2}}{1-\dfrac{M+m}{2m}\left(1+\sqrt{1-\alpha}\right)} \quad (52.4)$$

لناقش الآن بعض ا الات ا امة:

1. عند اعتبار $\beta_1=\beta_2$ و $m\neq M$:

- بالنسبة للفرع الصو بتعويض قيمة α العلاقة(51.4) د:

$$\frac{u_n}{v_n}=\frac{\dfrac{\beta_1-\beta_2}{\beta_1+\beta_2}}{1-\dfrac{M+m}{2m}\left(1-\dfrac{|M-m|}{M+m}\right)} \quad (53.4)$$

إذا كان $m>M$ يكون $\frac{u_n}{v_n}=\frac{0}{(m-M)/m}=0$ أي: $u_n=0$ و $v_n\neq 0$

وهذا يع أنه بالنسبة للفرع الصو و ا الة ا دية ا ا وافقة لأقصر طول موجي فإن الذرات الساكنة هي الـ ذرات ا فيفة M بينما الذرات ا تحركة هي الذرات الثقيلة m.

- بالنسبة للفرع الضوئي بتعويض قيمة α العلاقة(52.4) د:

$$\frac{u_n}{v_n} = \frac{\dfrac{\beta_1 - \beta_2}{\beta_1 + \beta_2}}{1 - \dfrac{M+m}{2m}\left(1 + \dfrac{|M-m|}{M+m}\right)} \qquad (54.4)$$

إذا كان $M > m$ يكون $\frac{u_n}{v_n} = \frac{0}{(m-M)/m} = 0$ أي $u_n = 0$ و $v_n \neq 0$

وهذا يع أنه بالنسبة للفرع الضوئي و ا الة ا دية ال ا وافقة لأقصر طول موجي فإن الذرات الساكنة هي الـذرات الثقيلة بينما الذرات ا تحركة هي الذرات ا فيفة.

2. عند اعتبار $m = M$ و $\beta_1 > \beta_2$:

- بالنسبة للفرع الصو بتعويض قيمة α العلاقة(51.4) د:

$$\frac{u_n}{v_n} = \frac{\dfrac{\beta_1 - \beta_2}{\beta_1 + \beta_2}}{1 - \left(1 - \dfrac{\beta_1 - \beta_2}{\beta_1 + \beta_2}\right)} = 1 \qquad (55.4)$$

وهذا يع أن الذرات M و الذرات m تز بنفس الطور الفرع الصو .

- بالنسبة للفرع الضوئي بتعويض قيمة α العلاقة(52.4) د:

$$\frac{u_n}{v_n} = \frac{\dfrac{\beta_1 - \beta_2}{\beta_1 + \beta_2}}{1 - \left(1 + \dfrac{\beta_1 - \beta_2}{\beta_1 + \beta_2}\right)} = -1 \qquad (56.4)$$

وهذا يع أن الذرات M و الذرات m تز على تعاكس الطور الفرع الضوئي.

5-4 الأنماط الطبيعية لشبكة برافي ثلاثية الأبعاد

لقد درسنا البندين السابقة وذج من الشبكات ا طية يث ينتسب للخلية الأولية من شبكة برا ذرة ذرتان. هذان النموذجان تصح نتائجهما بالنسبة للموجات ا نتشرة ا اهات معينة (أو ا اهات ذات تناظر عـال). لكن عند دراسة أ اط الاهتزاز الشبكة البلورية الفراغية حيث تنتشر ا وجات الا اهات الثلاثة تتعقـد الدراسـة نوعا ما لدى سوف ندرس بشكل تصر أ اط الاهتزاز شبكة برا ثلاثية الأبعاد وسف يز حالتـ :

1. ا لية الأولية لشبكة برا وي ذرة واحدة.

لنعت بلورة مؤلفة من عدد كب جدا مساو لـ N من ا لايا الأولية وكل خلية منـشأة علـى أشـعة الانـسحاب

الأولية $\vec{a}_3, \vec{a}_2, \vec{a}_1$ لشبكة برا ا باشرة, و لنعت كل خلية توي ذرة واحدة. يتحدد الوضع ا ستقر للخلية الأولية بواسطة شعاع ا وضع $\vec{r}$ والذي ثل الوقت نفسه موقع عقدة واحدة من شبكة برا .

نبحث عن حلول عادلة ا ركة بشكل موجة مستوية بسيطة:

$$\vec{u}(\vec{r},t)=\vec{\varepsilon}\exp\left(i\left(\vec{k}.\vec{r}-\omega t\right)\right) \qquad (57.4)$$

حيث $\vec{u}(\vec{r},t)$: شعاع انزياح الذرة (ضمن ا ركة ا ماعية للنمط) ذات ا وضع $\vec{r}$ اللحظة t. و $\vec{\varepsilon}$: شعاع يصف الا اه الذي تز فيه أيونات معينة ويعرف باسم شعاع الاستقطاب للنمط الطبيعي و$\vec{k}$: شعاع ا وجة وقيمتـه وقيمـة التردد $\omega = f(k)$ ددان طا معينا.

بتطبيق الشروط ا دودية الدورية الـ تصاغ بالشكل التا :

$$\vec{u}(\vec{r},t)=\vec{u}(\vec{r}+N_i\vec{a}_i,t) \qquad (58.4)$$

$\vec{a}_i\,(i=1,2,3)$: هي أشعة الانسحاب الأساسية و$N_i\,(i=1,2,3)$ هي ثلاثـة أرقـام صـحيحة كـبـ ة جـدا يـث $N=N_1N_2N_3$ عدد ا لايا الأولية ا ساوي لعدد الذرات أو الأيونات وبتعويض العلاقة(22) العلاقة(23) د:

$$\exp\left(iN_i\vec{k}.\vec{a}_i\right)=1 \qquad i=1,2,3 \qquad (59.4)$$

وهذا يع أن $\vec{k}$ هو شعاع من أشعة الشبكة ا عكوسة و كن كتابته من الشكل:

$$\vec{k}=\sum_{i=1}^{3}\frac{n_i}{N_i}\vec{A}_i \qquad i=1,2,3 \qquad (60.4)$$

$n_i\,(i=1,2,3)$ أعداد صحيحة.و$A_i=\dfrac{2\pi}{a_i}\,(i=1,2,3)$ هي أطوال أشعة الانسحاب الأساسية للشبكة ا عكوسـة ا ققـة للعلاقة:

$$\vec{a}_i.\vec{A}_j=2\pi\delta_{ij} \qquad i,j=1,2,3 \qquad (61.4)$$

ولو أضفنا أي شعاع من أشعة الشبكة ا عكوسة $\vec{G}$ إ الشعاع العلاقـة فلـن يـتغ انزيـاح الأيونـات لأن: $\exp\left(i\vec{k}.\vec{R}\right)=1$ لذلك فإن قيم $\vec{k}$ ا ستقلة دد داخل منطقة بريلوان الأو (و هي تساوي من حيث ا جـم أيـة خلية أولية للشبكة ا عكوسة).فكل قيمة لـ $\vec{k}'$ خارج تكون مسؤولة عن نفس النمط $\vec{u}(\vec{r},t)$ ا دد بالقيمة $\vec{k}$ حيث $\vec{k}'=\vec{k}+\vec{G}$, لذلك فجميع الأ اط ا ستقلة دد بالأشعة $\vec{k}$ الواقعة داخل منطقة بريلوان الأو .

من العلاقة(60.4) كن كتابة مركبات الشعاع $\vec{k}$ با اه الأشعة الأولية للشبكة ا عكوسة:

$$\vec{k}_{A_i}=\frac{n_i}{N_i}\vec{A}_i \qquad (62.4)$$

حيث $\vec{k}_{A_i}$ هي مركبة $\vec{k}$ ا اه $\vec{A}_i$.

الان ثل كل قيمة من قيم $\vec{k}$ بنقطة فضاء الشبكة ا عكوسة وبذلك يكون ا جم ا خصص لقيمة واحـدة لـ ـ $\vec{k}$ فضاء الشبكة ا عكوسة هو:

$$\Delta\vec{k}_{A_1}.\left(\Delta\vec{k}_{A_2}\times\Delta\vec{k}_{A_3}\right)=\frac{\vec{A}_1}{N_1}.\left(\frac{\vec{A}_2}{N_2}\times\frac{\vec{A}_3}{N_3}\right)=\frac{V_e^*}{N} \qquad (63.4)$$

حيث V_e^* حجم ا لية الأولية للشبكة ا عكوسة وهو نفسه حجم منطقة بريلوان.

وحيث أن كل الأشعة ا ستقلة $\vec{k}$ موجودة داخل منطقة بريلوان فإن عددها ا سموح هو:

$$\frac{V_e^*}{\left(\frac{V_e^*}{N}\right)}=N \qquad (64.4)$$

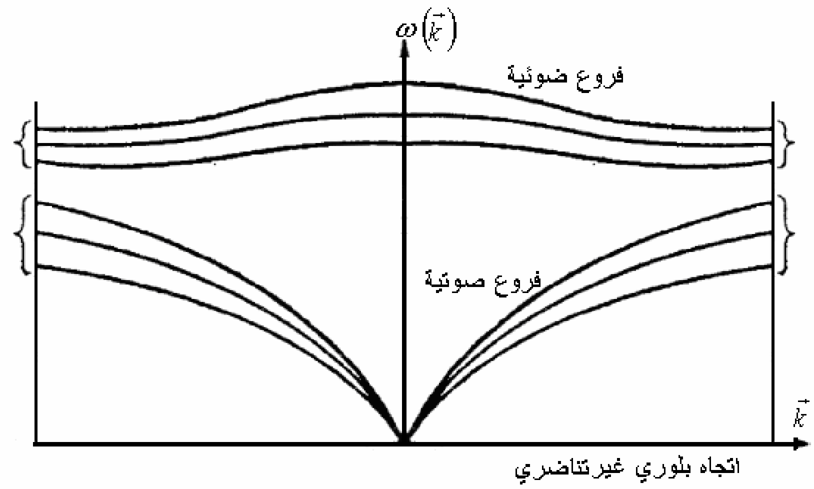
وهو نفسه عدد ا لايا ا ساوي لعدد الذرات .

لقد بينت ا سابات أنه لكل ا اه انتشار مع $\vec{k}$ توجد ثلاثة مقادير لشعاع الاستقطاب $\vec{\varepsilon}_p\left(\vec{k}\right)\left(p=1,2,3\right)$ مع هذا وجود $3N$ ط. هذه الأ اط موزعة على ثلاثة فروع للتبدد, كل فرع به N ط و تلف هذه الفـروع عـن بعضها بالاستقطاب حيث $\omega_p\left(\vec{k}\right)\left(p=1,2,3\right)$ وكـل هـذه الفـروع صـوتية ذلـك أ ـا تتمتـع با اصـية $\left(\omega_p\left(\vec{k}\rightarrow 0\right)\right)\rightarrow 0$.

2. ا لية الأولية لشبكة برا وي أكثر من ذرة واحدة.

لنعت الأن أن ا لية الأولية لشبكة برا وي أكثر من ذرة, يظهر الفرق بـ طبيعة اهتزاز شبكة برا الأحادية الذرة وا تعددة الذرات بظهور فروع ضوئية منحنيات التبدد الأخ ة منهما, وا سابات بينت أن عدد الأ ـاط هـذه ا الة هو $3\varsigma N$ حيث N عدد ا لايا الأولية و ς : عدد الذرات ا نتسبة لكل خلية أولية(وهو ثل أيضا عـدد ذرات القاعدة ا قبل لعقدة من عقد شبكة برا ا باشرة) وهذه الأ ـاط موزعة على 3ς فرعا مـن فـروع التبـدد $\omega_p\left(\vec{k}\right)\left(p=1,,2,3,.....\ 3\varsigma\right)$ وهذه الفروع تلف عن بعضها بالاستقطاب وينتسب لكل فرع N طا تلفة عن بعضها بقيمة الشعاع $\vec{k}$. مع هذا أنه لكل قيمة $\vec{k}$ يوجد 3ς طا.ثلاثة منها صوتية وبقيـة الفـروع والـ عـددها $3\left(\varsigma-1\right)$ ضوئية حيث: $\left(\omega_p\left(\vec{k}\rightarrow 0\right)\right)\rightarrow\omega_{\max}\neq 0$.

يبـ الشكل(11.4) منحـ التبدد للشبكة البلورية الفراغية ا ؤلفة من ذرتـ أو أيونـ ا لمية الأولية (القاعدة مكونة من أيونـ أو ذرتـ) ا اهات عامة للفضاء $\vec{k}$. حيث ثل الفروع الثلاثة السفلى الفروع الصوتية والـ تكون خطيـة عند قيم $\vec{k}$ الصغـ ة أما الثلاثة العليا فهي ضوئية ويزداد تسطحها كلما كـ ثابت القوة بـ ذرات القاعدة الواحدة عنـه بـ القواعد.مع ملاحظة أن ا اهات الانتشار ا مثلة الرسم لا تكون منطبقة عل أحد ا اور العالية التناظر بسبب عدم وجود الانطباق.



الشكل(11.4):منحـ التبدد للشبكة البلورية الفراغية ا ؤلفة من ذرتـ ا لمية الأولية.

و ـدر بنا الإشارة إ أن الأ اط الصوتية هي الـ ا الدور الرئيس لتحديد ا واص ا رارية للبلورات بينما الأ اط الضوئية فتحدد ا واص الضوئية للبورات.

- **كثافة الأنماط لشبكة برافي ثلاثية الأبعاد أحادية الذرة(في تقريب ديباي)**

ذكرنا سابقا أن كل قيمة من قيم الشعاع ا وجي $\vec{k}$ ثل بنقطة فضاء الـ شبكة ا عكوسـة أو الفـ ضاء $\vec{k}$ وا جـم ا خصص لنقطة واحدة هو $\left(V_e^*/N\right)$, عندئذ فإن عدد قيم $\vec{k}$ وحدة ا جم لفضاء الشبكة ا عكوسة هو $\left\{1/\left(V_e^*/N\right)=\left(N/V_e^*\right)\right\}$ وبذلك يكون عدد قيم $\vec{k}$ بـ القيمتـ k و $k+dk$ هو عدد النقاط قشرة كروية للفضاء $\vec{k}$ ـكها dk :

$$g(k)dk = \frac{N}{V_e^*} 4\pi k^2 dk \tag{65.4}$$

لدينا: $V_e^* = (2\pi)^3 / V_e$ حيث V_e : حجم ا لية الأولية للشبكة ا باشرة و حيث أن عدد ا لايا الأولية هو N (وهو نفسه عدد الذرات هذه ا الة)فإن حجم البلور هو $V=NV_e$ ومنه كن أن نكتب ما يلي:

$$g(k)dk = \frac{V}{2\pi^2} k^2 dk \tag{66.4}$$

لكل قيمة من قيم k توجد ثلاثة أ اط اهتزازية وذلك حسب الاستقطاب وعليه يكون عدد الأناط الاهتزازيـة ا ـال $d\omega$ أي ب ω و $\omega + d\omega$ هو:

$$D(\omega)d\omega = 3g(k)dk \tag{67.4}$$

حيث $D(\omega)$ كثافة الأ اط أو عدد الأ اط لوحدة طول ال التردد:

$$D(\omega)d\omega = 3\frac{V}{2\pi^2} k^2 dk \tag{68.4}$$

وحسب تقريب ديباي الذي يفرض أن البلورة متماثلة ا ناحي وقانون التبدد من أجل الفروع الصوتية هو:

$$\omega = v_g k = v_p k = v_S k \tag{69.4}$$

حيث : v_g , v_p , v_S هي سرعة الصوت والطور وا موعة على التوا .

والآن نستطيع أن نكتب:

$$D(\omega)d\omega = 3\frac{V}{2\pi^2}\frac{\omega^2}{v_S^3} d\omega \tag{70.4}$$

إن تقريب ديباي يب أن التردد ينحصر ب قيمتا أصـغرية $(\omega_{min} = 0)$ و أعظميـة $(\omega_{max} = \omega_D)$ حيـث ω_D يسمى تردد ديباي والتقريب عل منطقة منطقة وجود النقط ا مثلة لقيم k الفضاء $\vec{k}$ كروية نصف قطرها k_D بدلا من الأشكال ا عقدة نطقة بريلوان الأو (مع ملاحظة أن كرة ديباي تساوي من حيث ا جـم منطقـة بريلـوان الأو).ويكون عدد الأ اط الكلي هو:

$$3N = \int_0^{\omega_D} D(\omega)d\omega \tag{71.4}$$

$$3N = \int_0^{\omega_D} 3\frac{V}{2\pi^2}\frac{\omega^2}{v_S^3} d\omega$$

با ساب د:

$$\omega_D = \sqrt[3]{\left(\frac{6N\pi^2}{V}\right)} v_S = \sqrt[3]{6\pi^2 n_a}\ v_S \qquad (72.4)$$

$$k_D = \sqrt[3]{\left(\frac{6N\pi^2}{V}\right)} = \sqrt[3]{6\pi^2 n_a} \qquad (73.4)$$

حيث n_a عدد الذرات لوحدة ا جم أو تركيز الذرات و k_D العدد ا وجي لديباي.

ومنه نستطيع كتابة كثافة الأ اط لديباي بالشكل:

$$D_D(\omega) = \frac{9N}{\omega_D^3}\omega^2 \qquad (74.4)$$

6-4 تكميم اهتزازات الشبكة البلورية

يع النتائج ا صلنا عليها سابقا تعتمد على ا يكانيكا التقليدية حيث توصلنا إ بعض النتائج ا امة الواصـفة ركة الذرات أو الأيونات البلورات, إلا أن دراسة التأ ا تبادل ب الذرات أو الأيونات ا هتزة و جسيمات أخرى كالإلكترونات أوالنيترونات يوجب الدراسة إطار ميكانيكا الكم.

تدرس اهتزازات الشبكة البلورية(الأ اط الطبيعية) ميكانيكا الكم من حيث الطاقة, فلكل ط اهتـزازي طاقـة معينة واندفاع مع وحسب نظرية الاهتزاز كن ا هان على أن طاقة كل ط طبيعي تساوي طاقة هزاز توافقي له كتلة تساوي كتلة تساوي كتلة الذرات ا هتزة وله تردد يساوي تردد النمط مثل هذه ا زازات تسمى طبيعيـة.وعليـه كـن إرجاع دراسة اهتزاز أعداد كب ة من الذرات إ تتبادل التأ فيما بينها إ مسألة دراسة أ اط اهتزازية طبيعية مستقلة عن بعضها .وهذه الأخ ة تتحول إ مسألة دراسة عدد كب من ا زازات التوافقية ا ساوية أ عدد الأ اط.مثل هذا التبسيط كن خاصة إذا كان الكمون يتناسب مع مربع الإزاحة ب الذرات عند وضع التوازن.

تتع القيمة الذاتية لطاقة ا زاز التوافقي(وهي نفسها طاقة النمط ا وافق له) ميكانيكا الكم بالعلاقة التالية:

$$E_{n_{k,p}} = \left(n_{\vec{k},p} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_p(\vec{k}) \qquad (75.4)$$

حيث $\omega_p(\vec{k})$: تردد النمط (أو ا زاز الموافق له) ا ـدد بالـشعاع $\vec{k}$ (قيمـة وا اهـا) و الفـرع p

($p = 1,2,3....3\varsigma$ حيث ς : عدد الذرات ا نتسبة لكل خلية أولية)

$n_{\vec{k},p}$: هو عددصحيح موجب أو معدوم ويسمى بعدد الانشغال ويصف درجة اضطراب النمط فإذا كانت قيمة $n_{\vec{k},p}$ كب يع أن الاضطراب كب (وهذا يع من وجهة النظر التقليدية بأن سعة الاهتزاز كب ة) وحالة كل بلـورة متكونـة من N خلية أولية دد بأعداد انشغال $3N\varsigma$ ط طبيعي.

$\frac{1}{2}\hbar\omega_p\left(\vec{k}\right)$: تسمى بالطاقة الصفرية(طاقة ا زاز عند الصفر ا طلق حيث يكون($n_{\vec{k},p} = 0$)

الشكل(12.4) يب طيف طاقة ا زاز ا طي ا كممة بالكمية والطاقة الكلية للبلورة هي موع طاقات يع ا ـزازات (الأ اط ا وافقة ا) ونكتب:

$$U_{tot} = \sum_{\vec{k},p} E_{n_{k,p}} = \sum_{\vec{k},p} \left(n_{\vec{k},p} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_p\left(\vec{k}\right) \qquad (76.4)$$

نتطرق الآن إ أسلوب تبادل الطاقة ب الأ اط الطبيعية ا ختلفة أو بينها وب الإلكترونات الساقطة أو النيترونات ..., من ا عادلة والشكل(12.4) واضح أن الطاقة $n_{\vec{k},p}\ \hbar\omega_p\left(\vec{k}\right)$ تع عن كمية الطاقة ا متصة أو ا نبعثة مـن قبـل النمط $\left(\vec{k},p\right)$ أو ا زاز ا رافق له بسب تفاعله مع الأ اط الأخرى أو مع جسيمات ساقطة على البلورة وهـذا يعـ أن عملية التبادل الطاقي تتم بشكل مكمم, نفس ا الة ظهرت حالة إشعاع ا سم الأسـود وأدت إ فـرض وجـود الفوتونات من قبل بلانك. فكما أن كوانتا ا قل الكهرومغناطيسي هو الفوتون الذي تلك خاصية الازدواجية(موجـة-جسيم) , كذلك اقترح أن يكون كوانتا حقل موجات ا رونة هو الفونون و ذا ا قل خاصية الازدواجية أيـضا. طاقـة الفونون الواحد$\hbar\omega_p\left(\vec{k}\right)$ وطاقة $n_{\vec{k},p}$ من الفونونات هو $n_{\vec{k},p}\ \hbar\omega_p\left(\vec{k}\right)$. فبدلا من قـول أن الـنمط $\left(\vec{k},p\right)$ ا الة ا ثارة $n_{\vec{k},p}$ نقول بوجود $n_{\vec{k},p}$ من الفونونات ذات النوع p والشعاع ا وجي $\vec{k}$ البلورة. إن وجود ط مع البلور يع وجود فنونه ا لائم وإثارة هذا النمط إ ا الات $n_{\vec{k},p}$ يع زيادة عدد فونوناته, ومن وجهة النظر هـذه تعت البلورة ا سخنة كصندوق تلئ بغاز من الفونونات .

كن اعتبار الفونونات البلورة أشباه ا سيمات كالفوتونات وذلك لسبب :

1. عندما تتبادل الفونونات التأث ا تبادل مع بعضها الإلكترونات مثلا فيمكن أن يتولد فونون أو يف فونون أو أكثر.

2. كثافة الفونونات أو عددها المتوسط يتعلق بدرجة حرارة الجسم الصلب.

وحيث أن سبب الفنونات معدوم فهي تخضع لإحصاء بوز- أنشتاين.

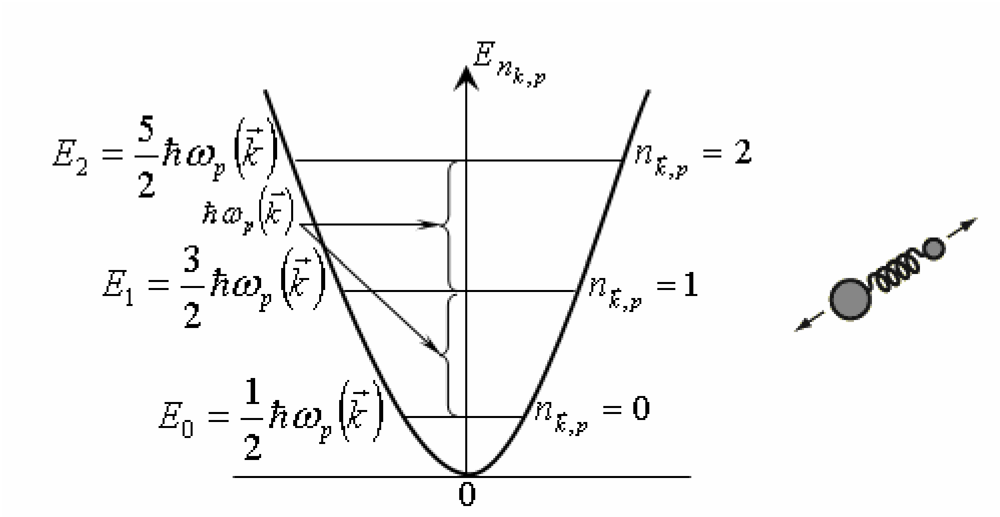
و البلورات توجد قواعد الاختيار من أجل الانتقالات المسموحة بين الحالات الكممة، وقد وجدنا أن انعراج الأشعة السينية بواسطة البلورة محكوم بقانون اختيار شعاع الموجة:

$$\vec{K}' = \vec{K} + \vec{G} \quad (77.4)$$

حيث $\vec{G}$ شعاع الشبكة المعكوسة و$\vec{K}$ و$\vec{K}'$ الشعاعان الموجيان للفوتون قبل وبعد التبعثر المرن. و تعبر هذه العلاقة أنه أثناء عملية الحيود فان كامل البلورة سوف ترتد بكمية حركة $(-\hbar\vec{G})$ وهو شرط حفظ كمية الحركة للجملة ككل، وأن شعاع الموجة الكلي للأمواج المتفاعلة محفوظ في شبكة دورية.لكن عندما يكون تبعثر الفوتونات عن البلورة ليس مرنا فإن ذلك سيؤدي إلى إحداث (creation) أو امتصاص (absorption) فونون ويصبح قانون اصطفاء شعاع الموجة بالشكل:

$$\vec{K}' = \vec{K} + \vec{G} \pm \vec{k}_p \quad (78.4)$$

تعبر إشارة الموجب امتصاص فونون ، وإشارة السالب إحداث فونون. و في حالة الانعراج اللامرن نحتاج أيضا إلى قانون حفظ الطاقة ويلزم هنا استخدام النيترونات للحصول على نتائج أدق.



الشكل(12.4): طاقة الوضع المكممة كدالة للموضع.

7-4 الخصائص الحرارية

1-7-4 السعة الحرارية

السعة ا رارية هي كمية ا رارة اللازمة لرفع درجة حرارة جسم ما درجة مئوية واحدة و سب من خلال علاقة كمية ا رارة التالية:

$$\Delta Q = C_s m \Delta T = C \Delta T \qquad (79.4)$$

ا قدار $(C_s m = C)$ ثل السعة ا رارية ، وا قدار (C_s) يسمى ا رارة النوعية وهي كمية الحرارة اللازمة لرفـع درجة واحد غرام من ا ادة درجة مئوية واحدة. تدرس عادة السعة ا رارية ت حجم ثابت C_v ،و ت ضغط ثابت C_p وتش التجارب أن الفارق بينهما صغ جدا حال الأجسام ا امدة (راجع الديناميكا ا رارية) لأن العمل ا نجز أثنـاء التمدد ا راري ضئيل،تدرس عادة السعة ا رارية ت حجم ثابت وتسمى اختصارا السعة ا رارية، ولذلك ستتم الدراسة وفق القانون الأول الديناميكا ا رارية واعتبار العمل معدوم لتحولات الطاقة ا رارية، أي تصبح الطاقة الداخلية للمـادة ا امدة مساوية إ كمية ا رارة ومنه تعطى علاقة السعة ا رارية وفق العلاقة:

$$\Delta Q = \Delta U - W \Rightarrow \Delta Q = \Delta U \quad (W = 0)$$

$$C = \frac{\Delta Q}{\Delta T} = \frac{\Delta U}{\Delta T} \qquad (80.4)$$

تعتمد السعة ا رارية للمواد الصلبة على درجة ا رارة لتلك ا ادة و الشكل(13.4) فيبـ ا نحنيـات التجريبيـة للسعة ا رارية لكل من الرصاص والفضة والأ نيوم وا اس و الاختلاف الب بينها يظهر درجات ا رارة الواطئة فقـط .و كن تلخيص ا قائق التجريبية ا اصة بالسعة ا رارية فيما يلي:

1. عند درجات ا رارة العالية (أي أعلى من درجة حرارة الغرفة) فإن السعة ا رارية لاتعتمد على درجة ا رارة وتساوي $3R = 25\,J/mole\,\overset{o}{k} = 6\,cal/mol.\overset{o}{K}$ حيث R ثل الثابت العام للغازات.

2. كلما قلت درجة ا رارة فإن السعة ا رارية تقل بصورة معينة وفقا للقانون الثالث للديناميكا ا رارية.و مـدى أقل من $20\overset{o}{k}$ أي عند درجات ا رارة الواطئة والقريبة من الصفر ا طلق تأخد السعة ا رارية سلوكها مع درجات

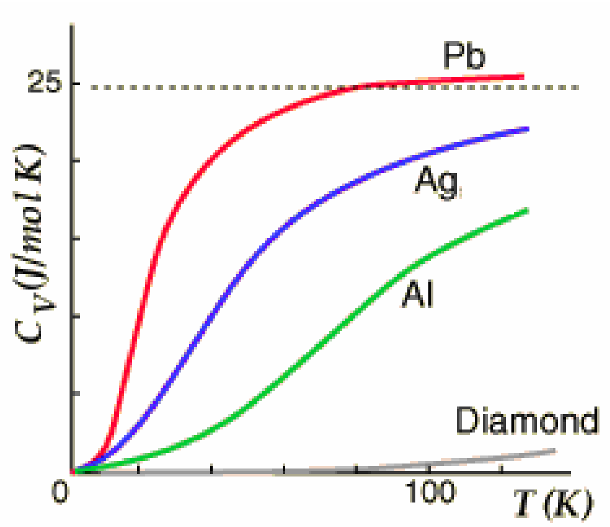
ا رارة الصور التالية:

$$C = aT^3 + \gamma T \qquad \text{للمعادن}$$

$$C = aT^3 \qquad \text{للعوازل}$$

$$C = aT^2 \qquad \text{للمركبات الطبقية}$$

إن التفسـ النظري ذه ا قائق التجريبية كان من أهم ا شاكل النظرية بداية هذا القرن. هذا البنـد سنحاول أن نعرض النماذج النظرية ا وضوعة لتفسـ تغ السعة ا رارية مع درجة ا رارة.



الشكل(13.4): ا نحـ التجريـ للسعة ا رارية لكل من الرصاص والفضة والأ نيوم وا اس.

أ- السعة الحرارية وفق النموذج الكلاسيكي

يعتمد هذا النموذج على توزع بولتزمان – ماكسويل الكلاسيكي، ويعتـ كما وجدنا اهتزاز الـ شبكة ا طيـة أن الذرات تتذبذب حول مواقعها الاتزانية يث أن كل ذرة ثل هزاز توافقي طاقته الوسطى الكلية تساوي إ ضعف طاقتـة ا ركية، وحيث أن الطاقة ا ركية وفق هذا النموذج تساوي إ $(K_BT/2)$ فإن الطاقة الكليـة للـهزاز تـساوي إ (K_BT)، وإذا كان الشبكة (N) ذرة، لكل منها ثلاثة درجات حرية (الأبعاد الثلاثة) فان الطاقة الوسطية الكلية

للجملة تعطى بالعلاقة :

$$\langle U_{tot} \rangle = 3NK_B\, T \qquad (81.4)$$

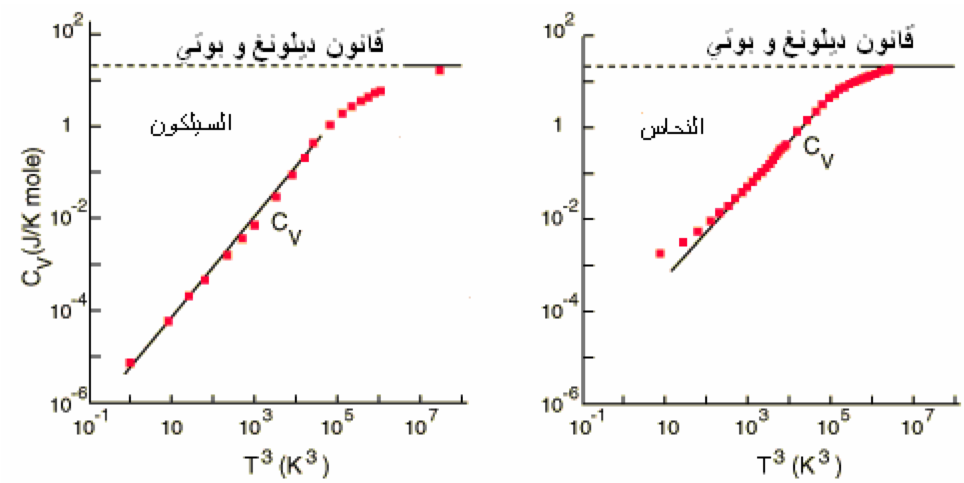
و حال احتواء البلورة على مول من الذرات فان N تصبح عدد افوقادرو $N_A = 6.022\ 10^{23}$ ومنه:

$$\langle U_{tot} \rangle = 3N_A KT = 3RT \qquad (82.4)$$

حيث R الثابت العام للغازات $R = N_A K_B \approx 2\,cal/mol.\overset{o}{K}$ ومنه السعة ا رارية هي:

$$C = \frac{d\langle U_{tot} \rangle}{dT} = 3R \approx 6cal/mol.K = 25\, \overset{o}{J}/mol.\overset{o}{K} \qquad (83.4)$$

وتعرف هذه العلاقة بقانون ديلونغ– بو (Dulong-Petit) (أنظر الشكل(14.4)) و هو يوافق النتائج العملية عند درجات ا رارة العالية ولكن هذه النظرية تفشل اما عند درجات ا رارة الواطئة حيث أن السعة ا رارية تعتمد السعة ا رارية تعتمد على درجات ا رارة بصورة واضحة.



الشكل (14.4): ا ط الأفقي ا نقط حدود قانون ديلونغ – بو لكل من النحاس والسيلكون.

ب- نموذج أينشتاين للسعة الحرارية

لقد قام أينشتاين هذا النموذج مع الطريقة الكلاسيكية إ فرضية بلانك حيث اعتبر أن ا سم الصلب يتألف من موعة من الذرات تز حول مواضع اتزا ا كهزازات توافقية مستقلة عن بعضها البعض أي أن كل ذرة الشبكة عبارة عن هزاز توافقي مستقل عن ا زازات الأخرى وبالتا هناك ط واحد من الاهتزاز تردد ω_E . طاقة كل مهتز وفقا لنظرية بلانك ا كممة عبارة عن كمات متقطعة ا العلاقة التالية:

$$E_n = n\hbar\omega \qquad n = 0,1,2,3,... \tag{84.4}$$

ولكن مستويات الطاقة للمهتز التوافقي(الشكل(12.4)) بينت أن الطاقة الصفر ا طلق لا تساوي الصفر وأعطت ا عادلة التالية :

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad n = 0,1,2,3... \tag{85.4}$$

وللتوفيق ب ا ا فان ا الة $n=0$ لا تتعلق بدرجة ا رارة ، وكوننا بصدد تأث درجة ا رارة على الشبكة البلورية فإننا مل $n=0$ ا ناقشة.

سب الطاقة الوسطية $\langle E \rangle$ لكل مهتز هذه النظرية مع طاقات كل ا زازات التوافقية E_n التقسيم على عددها N أي:

$$N = \sum_n N(E_n) \qquad E = \sum_n N(E_n)E_n \quad \Rightarrow \quad \langle E \rangle = \frac{E}{N} = \frac{\sum_n N(E_n)E_n}{\sum_n N(E_n)} \tag{86.4}$$

و حال الطاقات ا ستمرة تأخذ العلاقة(86.4) شكل تكامل على النحو التا :

$$\langle E \rangle = \frac{\int_0^\infty N(E)EdE}{\int_0^\infty N(E)dE} \tag{87.4}$$

ـدد عدد ا ـزازات وفقا لعامل بولتزمان ($e^{\frac{-E}{K_BT}}$) والذي يعطي احتمالية كون مستوي الطاقة E_n مشغولا أم لا.
ومنه تصبح العلاقة (86.4):

$$\langle E\rangle=\frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\hbar\omega e^{\frac{-n\hbar\omega}{K_BT}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{\frac{-n\hbar\omega}{K_BT}}} \quad (88.4)$$

$$\langle E\rangle=\frac{0+\hbar\omega e^{\frac{-\hbar\omega}{K_BT}}+2\hbar\omega e^{\frac{-2\hbar\omega}{K_BT}}+.........}{1+e^{\frac{-\hbar\omega}{K_BT}}+e^{\frac{-2\hbar\omega}{K_BT}}+......}$$

بوضع $x=\frac{-\hbar\omega}{K_BT}$ ـد:

$$\langle E\rangle=\frac{\hbar\omega e^{x}(1+2e^{x}+3e^{2x}+........)}{1+e^{x}+e^{2x}+.....} \quad (89.4)$$

ا موع بداخل القوسيس ا وجودين البسط ثل نشر لسلسلة هندسية وهو يساوي $\left(\frac{1}{(1-e^{x})^2}\right)$ وا موع ا قام نشر لسلسلة هندسية و يساوي $\left(\frac{1}{1-e^{x}}\right)$ ومنه تصبح العلاقة(89.4):

$$\langle E\rangle=\frac{\hbar\omega e^{x}}{1-e^{x}}=\frac{\hbar\omega}{e^{-x}-1}=\frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{K_BT}}-1} \quad (90.4)$$

و ا أن كل ذرة ا ثلاثة درجات حرية فان الطاقة الكلية ول من ا ادة ا امدة تضرب بـ $3N_A$ أي:

$$\langle U_{tot}\rangle=3N\frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{K_BT}}-1}=3N_A\frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\theta_E}{T}}-1} \quad (91.4)$$

حيث ا قدار $\theta_E=\frac{\hbar\omega}{K_B}$ ويسمى بدرجة حرارة اينشتاين.

ومنه نشتق الطاقة الكلية بالنسبة لدرجة ا رارة فنحصل على العلاقة العامة للسعة ا رارية وفق هذا النموذج:

$$C_v = \frac{d\langle U_{tot}\rangle}{dT} = \frac{3N_A K_B\left(\frac{\hbar\omega}{K_B T}\right)^2 e^{\frac{\hbar\omega}{K_B T}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{K_B T}} - 1\right)^2} \qquad (92.4)$$

تدرس العلاقة(92.4) الات ا رارة العالية وا نخفضة وتكون النتيجة كما يلي:

1) الدراسة عند المجالات الحرارية العالية

هذه ا الة يكون($K_BT >> \hbar\omega$) ولذلك نفك ا قام وفق نشر سلسلة هندسية أي:

$$e^{\frac{\hbar\omega}{K_BT}} - 1 = 1 + \frac{\hbar\omega}{K_BT} + \left(\frac{\hbar\omega}{K_BT}\right)^2 + ... - 1 \approx \frac{\hbar\omega}{K_BT} \qquad (93.4)$$

نعوض العلاقة (93.4) العلاقة (92.4) فنجد:

$$C_v = 3N_AK_B\left(1 + \frac{\hbar\omega}{K_BT}\right) = 3N_AK_B + \frac{\hbar\omega}{T} \approx 3N_AK_B = 3R \qquad (94.4)$$

العلاقة (94.4) تتفق مع التجربة و مع قانون ديلونغ – بو الدرجات العالية.

2) الدراسة عند المجالات الحرارية المنخفضة

هذه ا الة يكون($K_BT << \hbar\omega$) ومنه يهمل الواحد ا قام العلاقة (92.4) و د:

$$C_v = \frac{d\langle E\rangle_{tot}}{dT} = \frac{3N_A K_B\left(\frac{\hbar\omega}{K_B T}\right)^2 e^{\frac{\hbar\omega}{K_B T}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{K_B T}}\right)^2} = 3N_AK_B\left(\frac{\hbar\omega}{K_BT}\right)^2 e^{\frac{-\hbar\omega}{K_BT}}$$

$$C_v = 3R\left(\frac{\hbar\omega}{K_BT}\right)^2 e^{\frac{-\hbar\omega}{K_BT}} = 3R\left(\frac{\theta_E}{T}\right)^2 e^{\frac{-\theta_E}{T}} \qquad (95.4)$$

تب العلاقة (95.4) أن السعة ا رارية تقترب من الصفر بشكل أسي وتصبح صفرا عندما(T=0)،و عليه فالطريق الـذي

تسلكه للوصول إ الصفر لا يتفق مع النتائج التجريبية. وقد تصحيح هذا النموذج من قبل ديباي الذي أعطى وذجـا أخر يتفق مع التجربة اما و ما يلي سوف نبينه.

ج- نموذج ديباي للسعة الحرارية

افترض ديباي أن تردد الشبكة البلورية يغطي الا واسعا من القيم وليس قيمة وحيدة كما افترضها انـشتاين، وهذه الترددات تتراوح ماب قيمة دنيا وقيمة عظمى $(\omega_{min} \leq \omega \leq \omega_{max})$ ، و ساب القيمة الوسطى لطاقة يـع ا زازات (ا ذبذبات) نستخدم نفس العبارة ال استخدمت وذج اينشتاين(راجع العلاقة11) مع الفارق أننا أمام العديد من الترددات صرها مـاب تـردد أصـغري$(\omega_{min} = 0)$ وتـردد أعظمـي يـسمى بتـردد ديبـاي $(\omega_{max} = \omega_D)$،واستخدام إحصاء بوز– انشتاين، كننا الآن كتابة علاقة الطاقة الاهتزازيـة الداخليـة للجملـة ا دروسة بالعلاقة التالية:

$$\langle U_{tot} \rangle = \int_0^{E_{max}} \langle E \rangle dN(E) = \int_0^{\omega_{max}} \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{K_B T}} - 1} D(\omega) d\omega$$

$$\langle U_{tot} \rangle = \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{K_B T}} - 1} D_D(\omega) d\omega \qquad (95.4)$$

كننا استخدام عبارة كثافة الأ اط ال صلنا عليها سابقا من تقريب ديباي (أنظر العلاقة(74.4)):

$$D_D(\omega) = \frac{9N}{\omega_D^3}\omega^2 \qquad (96.4)$$

نعوض العلاقة (96.4) في العلاقة (95.4) فنجد:

$$\langle U_{tot} \rangle = \frac{9N}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{K_B T}} - 1} . d\omega \qquad (97.4)$$

لنضع $x=\frac{\hbar\omega}{K_BT}$ وعليه د ما يلي:

$$x=\frac{\hbar\omega}{K_BT}\Rightarrow\omega=\frac{K_BT}{\hbar}x\Rightarrow d\omega=\frac{K_BT}{\hbar}dx$$

$$\omega^3d\omega=\frac{K_B^3T^3x^3}{\hbar^3}.\frac{K_BT}{\hbar}dx\Rightarrow\frac{K_B^4T^4x^3}{\hbar^4}dx \tag{98.4}$$

$$x=0\Rightarrow\omega=0 \tag{99.4}$$

$$\omega_{\max}=\omega_D=\frac{K_BT}{\hbar}x_{\max}\Rightarrow x_{\max}=\frac{\hbar\omega_D}{K_BT}=\frac{\theta_D}{T} \tag{100.4}$$

حيث $\theta_D=\frac{\hbar\omega_D}{K_B}$ درجة حرارة ديباي وعندها تكون طاقة الاهتزاز أك ما كن.

ومنه العلاقة العامة للطاقة بعد تعويض (98.4) و(99.4)و(100.4) (97.4) تعطى بالشكل التا :

$$\langle U_{tot}\rangle=\frac{9NK_BT^4}{\theta_D^3}\int_0^{x_{\max}}\frac{x^3}{e^x-1}dx \tag{101.4}$$

وهذه هي العلاقة العامة للطاقة ا توسطة الكلية.أما السعة ا رارية فيمكن أن صل عليها بتفاضل العلاقة (101.4) بالنسبة إ درجة ا رارة فنحصل على العلاقة التالية:

$$C_v=9NK_B\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3\int_0^{\frac{\theta_D}{T}}\frac{x^4e^x}{\left(e^x-1\right)^2}dx \tag{102.4}$$

تدرس العلاقات (101.4) أو(102.4)عند درجات ا رارة العالية وا نخفضة وفقا ا يلي:

أ- الدراسة عند الدرجات الحرارية العالية

هذه ا الة $K_BT>>\hbar\omega$ وبنشر ا قام (101.4) وفق سلسلة فنجد أن:

$$\frac{x^3}{e^x-1}=\frac{x^3}{1+x+x^2+.......}\approx\frac{x^3}{x}=x^2 \tag{103.4}$$

نعوض (103.4) العلاقة (101.4) فنجد:

$$\langle U_{tot}\rangle = \frac{9NK_BT^4}{\theta_D^3}\int_0^{x_{\max}}\frac{x^3}{e^x-1}dx = \frac{9NK_BT^4}{\theta_D^3}\int_0^{x_{\max}}x^2dx$$

$$\langle U_{tot}\rangle = \frac{9NK_BT^4}{\theta_D^3}.\frac{x_{\max}^3}{3} = \frac{9NK_BT^4}{\theta_D^3}.\frac{\theta_D^3}{3T^3} = 3NK_BT$$

(104.4)
$$C_v = \frac{d\langle U\rangle}{dT} = 3NK_B$$

ومن أجل مول من ا ادة الصلبة فإن عدد الذرات يساوي عدد أفوقادرو أي $N = N_A$ ومنه:

(105.4)
$$C_v = 3N_AK_B = 3R$$

العلاقة (105.4) تتفق مع التجربة و مع قانون ديلونغ – بو و وذج أينشتاين الدرجات العالية.

ب- الدراسة عند الدرجات الحرارية المنخفضة

هذه ا الة $K_BT << \hbar\omega$ حيث تصبح حدود التكامل بالشكل $((x_{\max}\to\infty)\mapsto 0)$ ولدينا التكامل الشه :

(106.4)
$$\int_0^{\infty}\frac{x^3}{e^x-1}dx = \frac{\pi^4}{15}$$

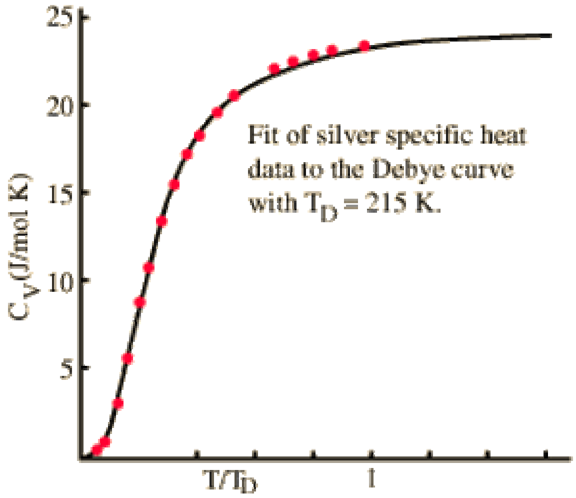
ومنه نعوض قيمة التكامل العلاقة(101.4) العلاقة فنجد:

$$\langle U_{tot}\rangle = \frac{9NK_BT^4}{\theta_D^3}\int_0^{x_{\max}\to\infty}\frac{x^3}{e^x-1}dx = \frac{9NK_BT^4}{\theta_D^3}.\frac{\pi^4}{15} = \frac{3\pi^4NK_BT^4}{5\theta_D^3}$$

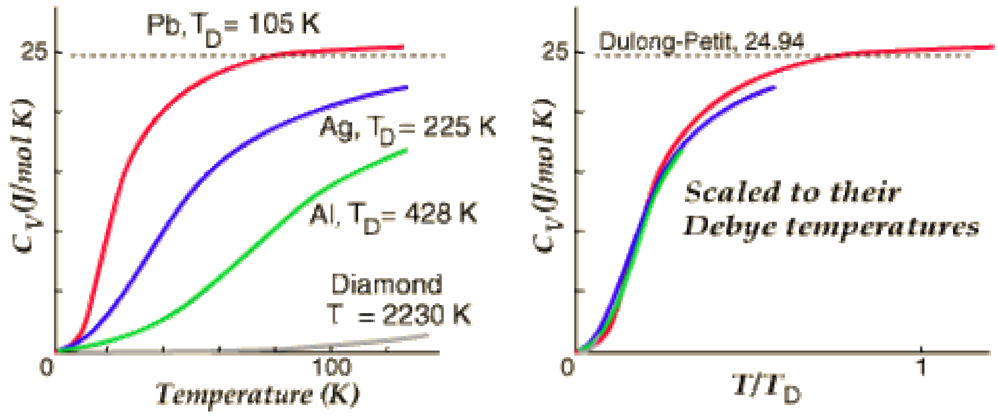
أما السعة ا رارية من أجل مول من ا ادة الصلبة فهي:

$$C_v = \frac{d\langle U\rangle}{dT} = \frac{12\pi^4 N_A K_B T^3}{5\theta_D^3} = \frac{12}{5}\pi^4 R\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \qquad (107.4)$$

العلاقة(107.4) تبـ أن السعة ا رارية الدرجات ا نخفضة تتناقص با نفاض درجة ا رارة وتتناسب مع T^3 وتدعى هذه العلاقة بقانون ديباي T^3 (الأس الثالث لديباي) وتتوافق اما مع النتائج التجريبية . أنظر الشكل (15.4) و(16.4).



الشكل(15.4): توافق منحـ السعة ا رارية النظري (حسب وذج ديباي) مع ا نحـ التجريـ للفضة.



الشكل(**16.4**): أشكال أخرى للسعة ا رارية كدالة لدرجة ا رارة.

ا دول(1.4) نعرض درجة حرارة ديباي لبعض العناصر وا ركبات الشهـ ة:

العنصر	درجة حرارة ديباي $\theta_D \left(\overset{o}{K} \right)$	العنصر	درجة حرارة ديباي θ_D
Al	428	Ca	230
Pb	110	Cr	630
Na	158	Mn	450
Li	370	Fe	467
Be	1160	Cu	343
Au	164	Zn	310
Si	640	Ge	370
SiO_2	470	LiF	732
NaCl	321	CaF_2	510

الجدول(1.4): درجة حرارة ديباي لبعض العناصر وا ركبات الشه ة

2-7-4 الاهتزازات اللاتوافقية

عند معا تنا لاهتزازات الشبكة البلورية اقتصرت دراستنا على التقريب التوافقي وبعبارة أخرى إذا نشرنا عبارة قوى التأث ا تبادل ب الذرات على شكل سلسلة وفق القوى ا تصاعدة لانزياح الذرات x أي:

$$F(x) = -\beta\, x + \gamma\, x^2 - \alpha\, x^3 \qquad (108.4)$$

واعت نا أن القوة متناسبة خطيا مع الانزياح x أي أن الذرات خاضعة لقوى شبه مرنة تعطى بقانون هوك:

$$F(x) = -\beta\, x \qquad (109.4)$$

وهذا التقريب كما رأينا سابقا يسمى بالتقريب التوافقي, ومن الواضح أنه كلما ازداد الانزياح x اضطررنا لإدخال

ا دود ا والية من النشر.

يع عن كمون التأث ا تبادل ب الذرات بالسلسلة التالية:

$$U(x) = -f\,x^2 - g\,x^3 + h\,x^4 \qquad (110.4)$$

حيث: f , g , h ثوابت موجبة, ا د الثا أي ا د ا تعلق با قدار x^3 يصف اللاتناظر قوى التنافر ا تبادلة ب الذرات أو ا زيئات ويدعى ا قدار g با عامل اللاتوافقي أما ا د الثالث فيعمل على اختزال الطاقة اللازمة للإزاحة و بذلك فهو يعمل على فيف الاهتزازات ذات السعات الكب ة.

لقد بينت الدراسات والنتائج التجريبية أن كث ا من الظواهر ا امة كالتمدد ا راري والتأث ا تبادل ب الأمواج ا رنة (الفونونات) وثبوت السعة ا رارية درجات ا رارة العالية وغ ها ...لا كن تفس ها إلا بالاعتماد على ا دود اللاتوافقية.

3-7-4 التمدد الحراري

كننا فهم التمدد ا راري وإ اد معمل التمدد ا راري ا طي إذ أخذنا بع الاعتبار ا دود اللاتوافقية كمون التأث ا تبادل ب الذرات حيث أن ارتفاع درجات ا رارة يزيد من متوسط سعة اهتزاز الذرات (كنتيجة حتمية لبعد كمون التأث ا تبادل عن التقريب التوافقي) ويؤدي إ دد الشبكة البلورية للمادة.

كننا استنتاج القيمة الوسطية لانزياح زوج من الذرات مسافة x درجة حرارة T نستخدم لذلك تابع توزيع بواتزمان الذي يسمح لنا بإ اد القيمة الوسطية للمقدارx وفق الاحتمال الترموديناميكي:

$$\langle x\rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} x \exp\left(-\frac{U(x)}{K_B T}\right)dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{U(x)}{K_B T}\right)dx} \qquad (111.4)$$

حالة الانزياحات الصغ ة كننا نشر الطاقة الكامنة للتأث ا تبادل كما العلاقة (110.4) وبناء عليه كن حساب قيمة البسط العلاقة(111.4) كمايلي:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x\exp\left(-\frac{U(x)}{K_BT}\right)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x\exp\left(-\frac{f\,x^2}{K_BT}\right).\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-\frac{g\,x^3+h\,x^4}{K_BT}\right)dx$$

$$\cong \int_{-\infty}^{+\infty} x\exp\left(-\frac{f\,x^2}{K_BT}\right).\left(1+\frac{g}{K_BT}x^3+\frac{h}{K_BT}x^4+..........\right)dx$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-\frac{f\,x^2}{K_BT}\right).\left(x+\frac{g}{K_BT}x^4+\frac{h}{K_BT}x^5+..........\right)dx$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty} x\exp\left(-\frac{f\,x^2}{K_BT}\right)dx+\frac{g}{K_BT}\int_{-\infty}^{+\infty}x^4\exp\left(-\frac{f\,x^2}{K_BT}\right)dx+\frac{h}{K_BT}\int_{-\infty}^{+\infty}x^5\exp\left(-\frac{f\,x^2}{K_BT}\right)dx+.....$$

التكاملان الأول والثالث ا اويان على القيمة x و x^5 معدومان لأن ما بداخل التكامل دالة فردية وتكامل دالة فردية هو دالة زوجية وحدود التكامل متساوية القيمة ومتعاكسة الإشارة. أما التكامل الثا فهو شه وعليه د:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x\exp\left(-\frac{U(x)}{K_BT}\right)dx \cong \frac{g}{K_BT}\int_{-\infty}^{+\infty}x^4\exp\left(-\frac{f\,x^2}{K_BT}\right)=dx\frac{3g\sqrt{\pi}}{4K_BT}\left(\frac{K_BT}{f}\right)^{\frac{5}{2}} \qquad (112.4)$$

وبالطريقة نفسها سب قيمة ا قام فنجد:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-\frac{U(x)}{K_BT}\right)dx \cong \int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-\frac{f\,x^2}{K_BT}\right)dx=\left(\frac{\pi K_BT}{f}\right)^{\frac{1}{2}} \qquad (113.4)$$

ومنه:

$$\langle x\rangle = \frac{3K_BT}{4f^2}g \qquad (114.4)$$

وهكذا نرى أن القيمة الوسطى لانزياح الذرات $\langle x\rangle$ ثابتة أما معامل التمدد ا طي فيحدد تعريفا من العلاقة التالية:

$$\alpha=\frac{\langle x\rangle}{aT}=\frac{3K_BT}{4a\,f^2}g \qquad (115.4)$$

حيث a البعد ب الذرات. تب العلاقة أنه من أجل $g=0$ أي عند الاهتزازات التوافقية لأن معامل التمدد ا طي ا ـراري معدوم.

4-7-4 التوصيل الحراري في العوازل

التوصل ا راري هو عملية انتقال حرارة من جزء إ آخر داخل مادة ما نتيجة لوجود تدرج أو ميل حراري بالنـسبة للعوازل من ا وامد وال تفتقرإ وجود إلكترونات حرة شبكتها، يعتـ التوصل ا راري تر ـة لعمليـة انتـشار الفونونات من مناطق ساخنة إ أخرى باردة.

ثل معامل التوصل ا راري ثابت التناسب العلاقة بـ فيض الطاقة ا رارية ا نساب Q ع وحدة ا ساحات وحدة الزمن وا يل ا راري (dT/dX) بـ نقطتـ الفرق بـ درجـ حرارتيهما dT ويبعدان عن بعضهما مـسافة dX أي أن:

$$Q = K\left(\frac{dT}{dX}\right) \qquad (116.4)$$

حيث ثل K معامل التوصل ا راري.

منظومة مؤلفة من هزازات توافقية مثالية تكون أ اط الاهتزاز ا تعددة استقلالية تامة عن بعضها البعض، أي لا يوجد تفاعل ما بـ هذه الأ اط ا ختلفة،أي أنه إذا أثـ ط ما فسوف يهتز النظام بصو رة مستقرة إ ما لا اية وتسري مثل هذه ا نظومة طاقة ا زازات على شكل أمواج مرنة تنتشر بسرعة الصوت، ولن تكون هناك مقاومة لسريان هـذه الطاقة، ويصل معامل التوصيل ا راري إ قيمة لا ائية. إلا أن الواقع غـ ذلك, ففي البلورات ا قيقية سـوف يكـون ازدياد سعة الاهتزاز إثر الإثارة ا رارية مرتبط با د الثا السلسلة وهو ا د اللاتوافقي وهذا يعـ ما يلي:

كي يتسـ لنا إدراك عملية التوصيل ا راري ا وامد العازلة تاج الأمر إ معرفة معدل التدفق ا راري بالفونونات ع البلورة ا عنية .

تعطي نظرية ا ركة للغازات -وهي نظرية كلاسيكية- قيمة عامل التوصيل ا راري بالعلاقة:

$$K = \frac{1}{3}C\langle v\rangle\lambda \qquad (117.4)$$

حيث ثل $\langle v \rangle$ متوسط سرعة ا زيئات ، و C السعة ا رارية لوحدة ا جوم و λ متوسط ا سار ا ر للجزئ كن الاسترشاد ذه العلاقة إذا اعت نا الفونونات وكأ ا غاز ينتشر داخل ا ادة وذلك إطار ما يعرف بـ" وذج الغاز."

رأينا البنود السابقة أنه عند درجة ا رارة العالية تكون السعة ا رارية ثابتة و بط تعباً للدالة T^3 عند درجـات ا رارة ا نخفضة وغالباً ما تبقى السرعة ثابتة, عندئذ تتع قيمة معامل التوصيل ا راري K بدلالة متوسط ا سار ا ـ ر وهذا بدوره يتوقف على آليات التشتت (التبعثر) ا ختلفة الشبكة وال كن حصرها العمليات التالية:

1 - تفاعل فونون مع فونون.

2 - التشتت بالعيوب البلورية شبكة ا ادة.

3- تشتت الفونونات على حواف العينة ا ادية(حدود ا ادة).

تؤثر كل آلية من هذه الآليات بصورة مستقلة قيمة التوصيل ا راري فإذا كانت مسا ة التـصادمات الفونونيـة K_p ومسا ة التشتت بالعيوب الشبيكية K_i ، ومسا ة التشتت على حدود أو حواف ا ادة K_b عندئذ تتحدد قيمة معامـل التوصيل ا راري للمادة ا عنية بالعلاقة:

$$K = K_p + K_i + K_b \tag{118.4}$$

أ- تفاعلات فونون مع فونون

إذا كانت القوى ا ؤثرة بـ الذرات هي قوى توافقية تؤدي إ إزاحات توافقية لا تتعدى حدود قانون هوك، فلن تكون هناك تصادمات بـ الفونونات ا ختلفة. وبذلك د أن ا وجات التوافقية لا تسبب مقاومة حرارية، وهذه هـي حالـة الفونونات عند درجات ا رارة ا نخفضة، أما عند درجات ا رارة ا رتفعة فإن نشاط ا ركات اللاتوافقية يزداد وتتمدد ا اد ة. و يزداد تفاعل فونون - فونون ا يؤدي إ ظهور مقاومة حرارية. تقع هذه التفاعلات (الاصطدامات) إطـار قانو حفظ الطاقة وحفظ كمية ا ركة:

1. قانون حفظ الطاقة

طاقة ا وجة بعد التصادم يساوي موع ا وجة ا تصادمة قبل تصادمهما.

$$\begin{aligned} \hbar\omega_1 + \hbar\omega_2 &= \hbar\omega_3 \\ \omega_1 + \omega_2 &= \omega_3 \end{aligned} \qquad (119.4)$$

2. قانون حفظ كمية الحركة

كمية حركة ا وجة بعد التصادم يساوي موع كمية حركة ا وجة ا تصادمة قبل تصادمهما.

$$\begin{aligned} \hbar\vec{k}_1 + \hbar\vec{k}_2 &= \hbar\vec{k}_3 \\ \vec{k}_1 + \vec{k}_2 &= \vec{k}_3 \end{aligned} \qquad (120.4)$$

حيث: $\vec{k}_2, \vec{k}_1$ متجها شعاعي ا وجة الواردة ويقعان كلا ا منطقة بريلوان الأو وفور حدوث التصادم علينـا أن نفرق ب عملية ا:

- **العمليـة العاديـة:** ويرمز ا بالرمز N نسبة إ ا رف الأول من الكلمة (Normal) فيها يقع متجه ا وجة بعد التصادم $\vec{k}_3$ داخل منطقة بريلوان الأو ولاينتج عن هذه العملية مسا ة ا قاومة ا رارية نظرا لأن الطاقة ا رارية بعد عملية التصادم لاتزال تنساب الا اه نفسه الذي كانت تتحرك فيه قبل التصادم وهي تساهم فقط ترسـيخ حالـة التوازن (الاستقرار) ا راري الشبكة البلورية.
- **عملية الانقـلاب:** ويرمز ا بالرمز U نسبة للحرف الأول من الكلمة الأ انية (UmKlapp) وتع هذه الكلمـة القفز إ نقطة مكافئة وهي ا سؤولة عن الكمية K_p هذه العملية يقع متجه ا وجة بعد التـصادم $\vec{k}_3'$ $\left(\vec{k}_3' = \vec{k}_1 + \vec{k}_2\right)$ خارج منطقة بريلوان الأو ويكون الطول ا وجي ا وافق λ_3' أقل من ضعف ا سافة البينية لذرات الشبكة ويتميز الفونون الناتج ذو متجه ا وجة $\vec{k}_3$ ا يلي:

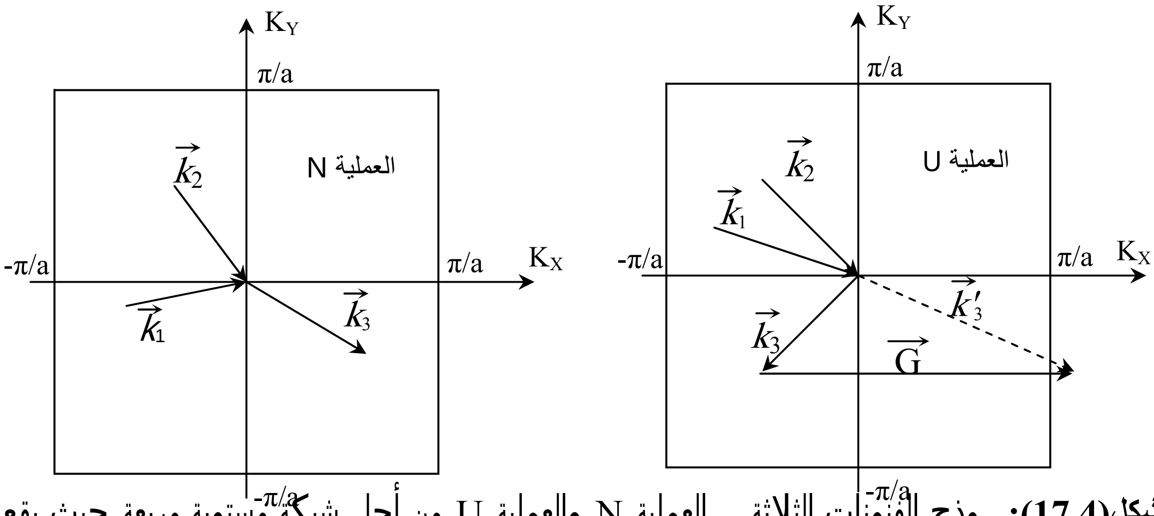
  - يتحرك الا اه ا عاكس لا اهي $\vec{k}_2, \vec{k}_1$ تقريبا.
  - يتخذ ا تجه ا وجي $\vec{k}_3$ له القيمة: $k_3 = k_2 - \dfrac{\pi}{2}$
  - تظل طاقته الكلية فوظة دون تبدد.

- وعليه فإن هذه العملية تقلل من انتقال ا رارة, وذلك لارتداد الفونون عكس التدرج ا راري, ومن د من قيمة معامل التوصيل ا راري و ب التنويه أن العملية تقع فقط التركيبات الدوريـة, ولا ـدث الأوسـاط ا ستمرة, وهي ذات ارتباط وثيق تجه الشبكة ا عكوسة $\vec{G}$ فعملية. لقد ب العا ب لـيس (Peierls) أن عمليـة الفنونات الثلاثة وا همة التوصيل ا راري أو ا قاومة ا رارية ليست ا بينة العلاقة(120.4) ولكنها ذات علاقة أدق تعطى بالشكل التا :

$$\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_3 + \vec{G} \qquad (121.4)$$

حيث $\vec{G}$ متجه الشبكة ا عكوسة.

إذا كان $\vec{G} = \vec{0}$ أدى أ العملية N و إذا كان $\vec{G} \neq \vec{0}$ أدى إ العملية U.



الشكل(17.4): وذج الفنونات الثلاثة العملية N والعملية U من أجل شبكة مستوية مربعة حيث يقع التفاعل الأو داخل منطقة بريلوان بينما يقع الثانية خارجها.

ب- التشتت بالعيوب البلورية

هذا التشتت قد يكون نتيجة أي من العيوب التالية:

1 – العيوب النقطية

هي حالات ا لل الذي دث ط التركيب البلوري النموذجي ويؤثر على ا واقع الطبيعية للذرات و يتسبب

تشويه منطقة متمركزة دودة لا تتعدى عدداً قليلاً من خلايا الوحدة الشبكة البلورية. (ذرات شائبة, مواضع ذرية شاغرة...).

2 – العيوب الخطية

هي حالات ا لل الذي دث ط التركيب البلوري النموذجي ويؤثر على ا واقع الطبيعية للذرات ا وجودة صف كامل داخل البلورة يث لا يكون ا نفس إحداثيات باقي الذرات ا ماثلة ا .وتعرف هذه العيوب البلورية ا طية باسم الا لاعات.

3 - أو كليهما.

و البلورة كاملة التبلور ثل توزيع نظائر العناصر الكيميائية آلية هامة لتشتت الفونونات، حيث تضطرب دورية الشبكة بالتوزيع العشوائي للنظائر، ا يؤدي إ نقص التوصيل ا راري، كما أن هناك دائماً الات إجهاد ميكانيكي تضم الكث من الا لاعات البلورة وهذه تؤدي إ مقاومة حرارية تتناسب مع كثافة هذه الا لاعات . وبوجه عام كلما ازدادت كثافة العيوب بلورة ما ا فض متوسط ا سار ا ر وهبطت قيمة التوصيل ا راري.

ت- التشتت عند حواف العينة

مع الا فاض درجة ا رارة يقل تأث كل من العملية U والتشتت بفعل الشوائب وعند درجات حرارة شديدة الا فاض يصبح متوسط طول ا سار ا ر مقاربا لأبعاد العينة فإذا كانت كروية الشكل تقريباً، وذات قطر D فإن التوصيل ا راري يعطي بالعلاقة:

$$K = C\,V\,D \qquad (122.4)$$

والعامل الوحيد الذي يتأثر بدرجة ا رارة هذه العلاقة السعة ا رارية ا تتغ مع T^3 (حيث $T<<\theta_D$) وعند هذا ا دى من درجات ا رارة يتدخل حجم العينة وأبعادها كمؤثر يؤثر على انتشار الفونونات فتشتت هذه الأخ ة على حواف العينة حيث يكون طول ا سار ا ر ا مقاربا لأبعاد العينة. أما عند درجات ا رارة ا عتدلة (حيث $T>\theta_D$), فإن التوصيل ا راري يزداد بشكل بارز مع الا فاض, و كن تفس هذا السلوك من خلال العملية هذه ا نطقة, ذلك أن

العمليات لا دث إلا عندما يصبح للفنونات مقدار من الطاقة يزيد عن حد أد مع وقد اقترح العا ب س أن ا د الأد الأد اللازم من الطاقة يساوي $(K_B\theta_D/2)$ وتبعا لإحصاء بولتزمان فإن عدد الفنونات ال لك هذه الطاقة تتناسب مع $\exp(\theta_D/2T)$ وهذا يع أن:

$$\begin{aligned} \lambda &\propto \exp(\theta_D/2T) \\ K_P &\propto \exp(\theta_D/2T) \end{aligned} \qquad (123.4)$$

وبذلك دد العملية سلوك معامل التوصيل هذا ا دى من درجات ا رارة,حيث تسود الدالة الأسية على غ ها مـن الدوال.

يـ ا دول(2.4) الناقلية ا رارية وا سار الوسطي للفنون من أجل بعض العناصر وا ركبات ا امة درجـ ا ـرارة $T=273\overset{o}{K}$, $T=20\overset{o}{K}$.

البلورة	$T=273\overset{o}{K}$		$T=20\overset{o}{K}$	
	معامل الناقلية ا رارية $K[W/m.\overset{o}{K}]$	ا سار ا ر الوسطي $\lambda[\overset{o}{A}]$	معامل الناقلية ا رارية $K[W/m.\overset{o}{K}]$	ا سار ا ر الوسطي $\lambda[\overset{o}{A}]$
SiO_2	14	97	760	0.0075
CaF_2	11	72	85	0.001
NaCl	6.4	67	45	0.00023
Si	150	430	4200	0.041
Ge	70	330	1300	0.0045

الجدول(2.4): الناقلية ا رارية وا سار الوسطي للفنون لبعض العناصر وا ركبات الشه ة.

المراجع

المراجع

[1] - الدكتور عقيل عزيز داخل . مقدمة فيزياء ا سم الصلب(ا زء الأول) . ديوان ا طبوعات ا امعية .

[2]- الدكتور بسام ا عصرا الدكتور فخري كتكوت. فيزياء ا سم الصلب ديوان ا طبوعات ا امعية.

[3]- الدكتور عقيل عزيز داخل . رينات لولة فيزياء ا سم الصلب. ديوان ا طبوعات ا امعية.

[4] - الدكتور عبد الفتاح أ د الشاذ . فيزياء ا وامد(ا زء الأول والثا) . كلية التربية جامعة ع س

[5]- الدكتور سعود بن يد اللحيا . فيزياء ا وامد.جامعة أم القرى كلية العلوم التطبيقية شعبة الفيزياء الطبية.

[6] - الدكتور مد أ د ا لا . سلسلة اضرات. فيزياء ا وامد. قسم الفيزياء. كلية ا علم . جامعة الطائف.

[7]- الدكتور سعيد الراوي الدكتور شاكر جابر شاكر الدكتور يوسف مولود حسن. فيزياء ا الة الصلبة.وزاة التعليم العا والبحث العلمي جامعة ا وصل.

[8]- Charles Kittel . Introduction to Solid State Physics . seventh,edition John Wiley and Sons.inc.New york

[9]- Charles Kittel. Physique de l'état solide.2eCYCLE . ÉCOLES D'INGÉNIEURS . 7eédition.DUNOD.

[10]- R.Ouahes. elements de Radiocristallographie.office des publicqtions universitaires.

[11]– Sylvain Ravy. Physique de la mati re condens e

[12] -sylvain.ravy@synchrotron-soleil.fr-http://www.lps.u-psud.fr/Utilisateurs/ravy/ 18/9/2006.

[13]- F. VIVIER Cristallographie. Travaux Pratiques. IUT Créteil-VitryMesures Physiques (1ère année).

[14] Yuri M. Galperin .Introduction to Modern Solid State Physics. FYS 448

[15] Ashcroft / Mermin. Solide state physics.Harcourt collage publishers.