الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

République Algérienne Démocratique et Populaire

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

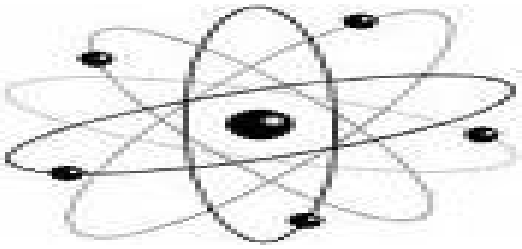
Universite Mohamed Khider – Biskra **جامعة محمد خيضر بسكرة**

faculte des sciences exactes.des sciences de la nature et de la vie.

كلية العلوم الدقيقة وعلوم الطبيعة والحياة

Departement des sciences de la matiere. **قسم علوم المادة**

Réf. :..... **المرجع:**.....



POLYCOPIE : Cristallographie physique.

2020/2021

2EME ANNEE LICENCE PHYSIQUE

Lakel Abdelghani

Université M. Khider de Biskra

Département des sciences de la matière

Cristallographie physique (D123)

I – GENERALITES

Définition de l'état cristallin.

Réseaux : définitions : Rangée et plan réticulaire. Mailles représentatives. Motif. Indices de Miller.

Réseau réciproque : Définition : Quelques propriétés et relations avec grandeur du réseau direct. Distance inter réticulaire

II – SYMETRIE DES FIGURES FINIES

Opérations de symétrie : Inversion, Rotation, Réflexion, Inversion rotatoire, Réflexion rotatoire. Notions de points équivalents

III – SYMETRIE DES RESEAUX – RESEAUX DE BRAVAIS

Systèmes cristallins. Les différents modes de réseaux. Les quatorze réseaux de Bravais. Incompatibilité de certains ordres d'axes de rotation avec les réseaux. Quelques relations géométriques dans les réseaux

IV – METHODES EXPERIMENTALES DE LA DIFFRACTION

Conditions de diffraction. Loi de Bragg. Equation de Von Laue. Construction d'Ewald. Différentes méthode de diffraction : Méthode de Laue. Méthode de Debye-Scherrer. Méthode du cristal tournant. Méthode de Weissenberg. Diffractomètres automatiques

V – LIAISONS CHIMIQUES

Généralités sur les liaisons chimiques. Structures stables et énergie interne. Les différentes liaisons dans les cristaux : Forces d'attraction, i) Liaisons fortes – liaisons de valence, Liaison ionique. Liaison de covalence. Liaison métallique. Interaction ion-dipôle

Ii) Liaisons faibles- Liaison de Van der Waals. Liaison par transfert de charge. Liaison hydrogène. Forces de répulsion

الفصل الأول

عموميات

مقدمة

تتكون المادة في حالاتها الثلاث المعروفة، الغازية والسائلة والصلبة، من ذرات أو جزيئات دائمة الحركة .ويعزي وجود المادة في إحدى هذه الحالات إلى طبيعة وحدود التأثيرات المتبادلة بين ذراتها وجزيئاتها .ويمكن تمييز كل حالة عن الأخرى فيزيائيا بالنظر في خاصية السريان أو التدفق حيث تكون المادة في حالتيها الغازية والسائلة قابلة للانسياب والتشكل بشكل الإناء الذي توضع فيه، بينما تفقد المادة الغازية أو السائلة قدرتها على التدفق عندما تتحول إلى الحالة الصلبة بعد تبريدها، وتتخذ شكلاً وحجماً ثابتين.

يستخدم في لغة علم البلورات عدد من المفاهيم والمصطلحات التي تساعد على وصف وتحليل التركيب البلوري الداخلي للماد ة. وسنقدم هنا بعض التعريفات الأساسية لأهم المفاهيم والمصطلحات البلورية.

أنواع المواد الصلبة :

المواد الصلبة تصنف إلي نوعين: مواد صلبة متبلورة كما هو الحال في المعادن وأغلب المركبات الكيميائية والسبائك و غير متبلورة كالزجاج والشمع.

أولا : مواد صلبة متبلورة:تحتوي علي صفوف من الذرات المرتبة بشكل هندسي معين وهذا الشكل الهندسي يكون مرتبا بصورة دورية متكررة في داخل الجسم الجامد.

ثانيا : المواد الصلبة الغير متبلورة:تحتوي علي صفوف من الذرات المرتبة بشكل عشوائيا وغير منتظم.

الشبيكة البلورية

هي نوع من التمثيل الرياضي لنمط ترتيب الوحدة البنائية الأساسية للمادة البلورية ويتم هذا التمثيل بعدد لا نهائي من النقاط الهندسية المرتبة ترتيباً شبكيا متوازياً. يتميز بالتماثل والتكرار المنتظم الدورية (في الفراغ). ويتكون التركيب البلوري بإضافة (الوحدة البنائية الأساسية) أو القاعدة لكل نقطة من نقاط الشبكة، فتكون العلاقة المنطقية هي:

التركيب البلوري = (القواعد) الوحدات الأساسية) + الشبكة الفراغية

وفي أبسط التركيبات البلورية توجد ذرة واحدة لكل نقطة في الشبكة، كما هوالحال في بلورات النحاس والذهب والفضة، وقد تكون الوحدة البنائية الأساسية أو (القاعدة) مجموعة من الذرات ، ويشترط حينئذ أن تكون الوحدات البنائية متطابقة في تركيبها وترتيبها وتوجيهها.

وتتركب البلورة المثالية من وحدات بنائية أساسية مرتبة على شبكة بلورية فراغية (ثلاثية الأبعاد) بحيث يبدو هذا الترتيب عند النظر إليه من أية نقطة من نقطالشبكة ذات متجه موضع $\vec{r}$هو نفسه عند النظر إليه من نقطة أخرى $\overrightarrow{r'}$ طبقاً للمعادلة

$$\vec{r}' = \vec{r} + \vec{T}$$

ويعرف المتجه الانتقالي $\vec{T}$ الذي يصل بين أي نقطتين في الشبكة بالمعادلة

$$\vec{T} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}$$

حيث $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\overrightarrow{\quad}$ تسمى المتجهات الانتقالية الأساسية وهي محددة وثابتة

n_1 , n_2 , n_3 أعداداً صحيحة

خلية الوحدة (الخلية الأولية)

يفيد مفهوم الشبكية البلورية كثيراً في دراسة الاحتمالات المختلفة لتنظيم الذرات داخل البلورات وفق ما يعرف بقوانين الهندسة البلورية.وقد يكون مناسباً في بعض الأحيان على سبيل التبسيط أن تكون الأمثلة التوضيحية أقرب إلى الفهم والاستيعاب في حالة شبيكة أحادية البعد، أو شبيكة في بعدين، ثم يجرى التعميم بسهولة لحالة (الشبيكة البلورية الفراغية) ثلاثية الأبعاد.

النظم البلورية وشبيكات برافية:

ينسب إلى عالم البلورات الفرنسي" برافية تصنيف الشبكات البلورية إلى أربع عشرة شبكة موزعة على سبعة أنظمة بلورية وعدد شبكات برافية الأربع عشرة والنظم البلورية السبعة محدود بعدد الطرق الممكنة لترتيب النقاط الشبكة بحيث تكون البيئة المحيطة بأي نقطة منها مماثلة تماماً للبيئة المحيطة بأية نقطة أخرى. وتكون "شبيكة برافية" بسيطة إذا كانت نقاطها عند الأركان فقط، ويرمز لها بالحرفP ، وعندما تشتمل على نقاط إضافية في مواضع خاصة فإنها تكون ممركزة الأوجه(F) ، أو ممركزة الجسم (I) أو ممركزة القاعدة(C)

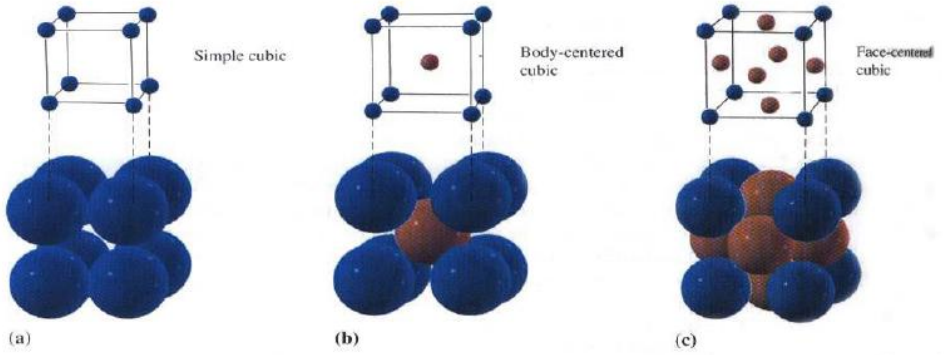
أنواع الخلايا

تتمز لخلايا بنوعين هما بدائية وغير بدائية .فالخلية البدائية لها ثلاثة أنواع كما موضح بالشكل

1. مكعب بسيط (SC)

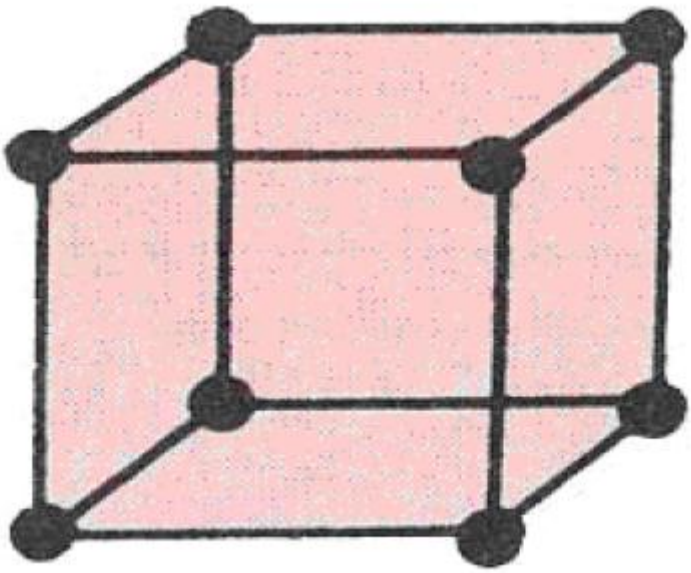
2. مكعب جسمي المركز (BCC)

3. مكعب وجهي المركز (FCC)



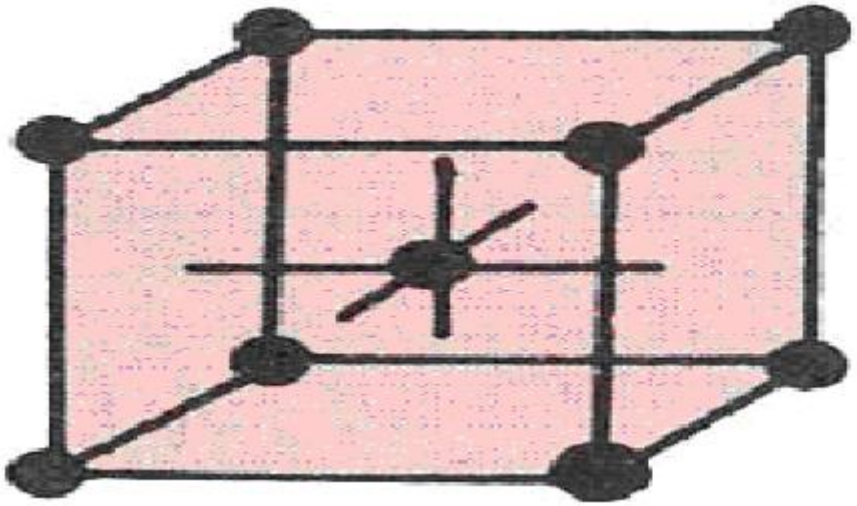
أ ـ المكعب البسيط (SC)

وهو عبارة عن مكعب به ثماني ذرات موجودة في أركان المكعب(نقاط شبكة عند الزوايا فقط) وهو فارغ من الداخل من أي جسم وعندئذ فكل نقطة(جزيء , ذرة ,أيون) تتشارك بها ثمانية خلايا الأمر الذي يعني أن الخلية الواحدة تمثل نقطة واحدة فقط أي تمثل نقطة من كل زاوية من الزوايا الثمانية.



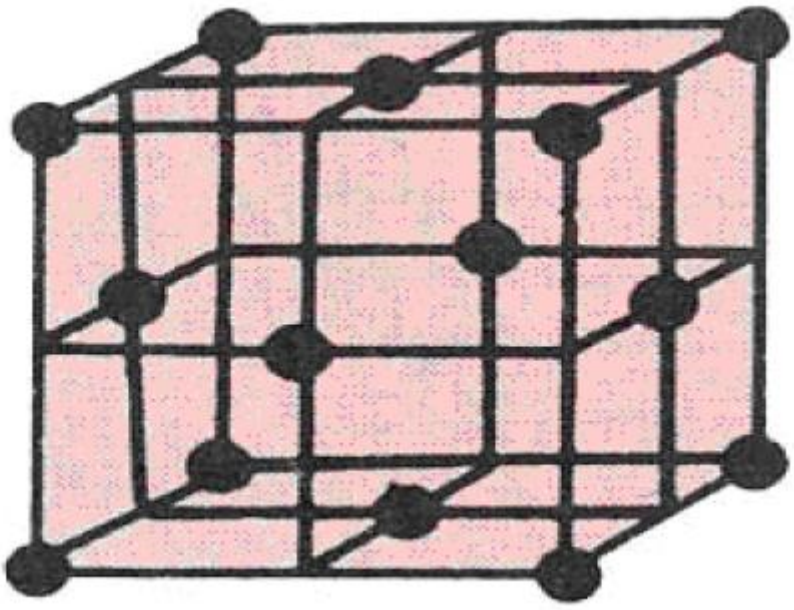
ب - مكعب ممركز الجسم(BCC)

هي خلية مكعبة لها ثماني ذرات في أركان المكعبات(نقاط الشبكة عند الأركان) وذرة في وسط المكعب (نقطة شبكية) في مركز الخلية وهذا يعني أن الخلية الوحدة تمثل نقطتين والذرة الوسطية تلامس الذرات في الأركان المقابلة.

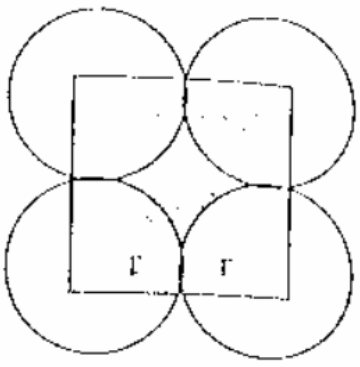


ج - مكعب المركزالوجوه(FCC)

وتمثل بمكعب له ثماني ذرات موجودة في الأركان الثمانية للمكعب أيضا و ست ذرات موجودة في وسط كل وجهة من الوجوه الست للمكعب(نقاط شبكية عند الأركان الثمانية ونقطة في مركز كل من والوجوه الستة وبما أن كل وجه يكون مشترك بين خليتين فإن هذا يعني أن نصيب الخلية من هذه النقاط الست هو ثلاث نقاط ليكون مجمل ما تمثله الخلية هو أربع نقاط

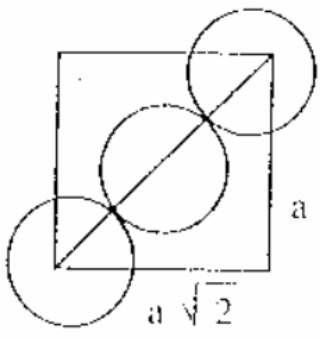


الخاصية	المكعب البسيطsc	المكعب متمركز الجسم bcc	المكعب متمركز الأوجه fcc
حجم خلية الوحدة (طول الضلع a)	a^3	a^3	a^3
عدد نقط الشبيكة لكل خلية وحدة	1	2	4
عدد نقط الشبيكة لكل وحدة حجم	$1/a^3$	$2/a^3$	$4/a^3$
عدد أقرب الجيران (النقط المحيطة)ويعرف بعدد التناسق أو الجوار	6	8	12
المسافة لأقرب الجيران (النقط المحيطة)	a	$\frac{a}{2}\sqrt{3}$	$\frac{a}{2}\sqrt{2}$
عدد الجيران التالية	12	6	6
المسافة لأقرب النقط التالية	$\frac{a}{2}\sqrt{2}$	a	a



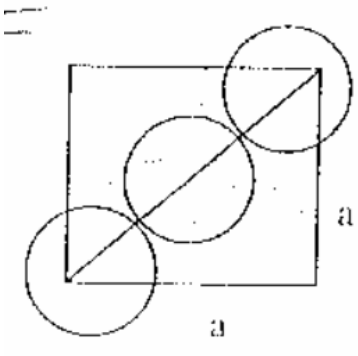
مكعب بسيط (SC)

$a = 2r$



مكعب متمركز الجسم (bcc)

$a\sqrt{3} = 4r$



مكعب متمركز الأوجه (fcc)

$a\sqrt{2} = 4r$

النظام البلوري	شبيكات برافيه	خصائص خلية الوحدة
ثلاثي الميل	P	$a \neq b \neq c$
Triclinic		$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$
أحادي الميل	P,C	$a \neq b \neq c$
Monoclinic		$\alpha = \gamma = 90° \neq \beta$
مستطيلي متعامد	P, C, I, F	$a \neq b \neq c$
Orthorhombic		$\alpha = \gamma = 90° = \beta$
مربعي	P , I	$a = b \neq c$
Tetragonal		$\alpha = \beta = \gamma = 90°$
مكعب	P, I, F	$a = b = c$
Cubic		$\alpha = \beta = \gamma = 90°$
ثلاثي التماثل	P	$a = b = c$
Trigonal		$\alpha = \beta = \gamma < 120°,$
		$\neq 90°$
سداسي	P	$a = b \neq c$
Hexagonal		$\alpha = \beta = 90°$, $\gamma = 120°$

إحداثيات ميلر: Indices Miller

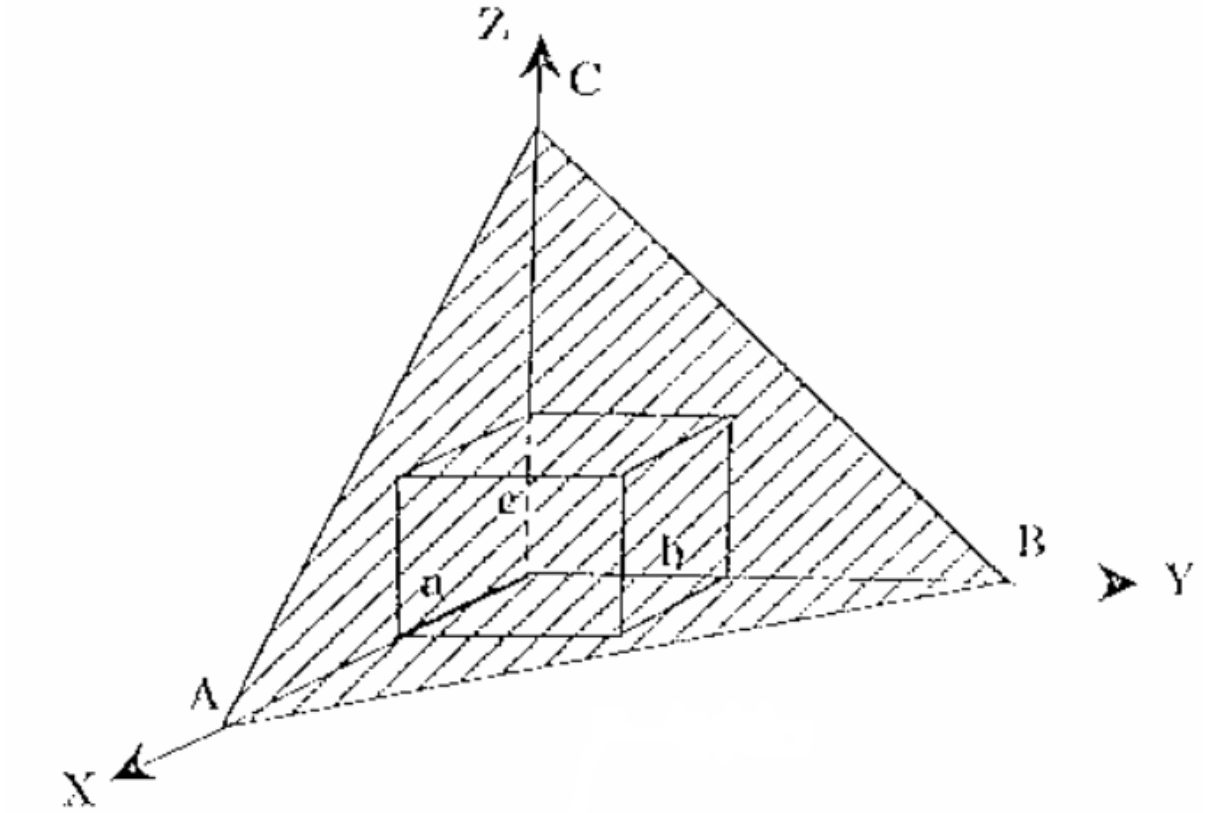
اصطلح على تحديد المستويات البلورية بإحداثيات ميلر طبقاً للخطوات التالية

أولاً: امسك البلورة في وضع ثابت وعين الأطوال التي يقطعها المستوى من المحاور الأساسية X ,Y , Z بدلالة ثوابت الشبكة a ,b , c.

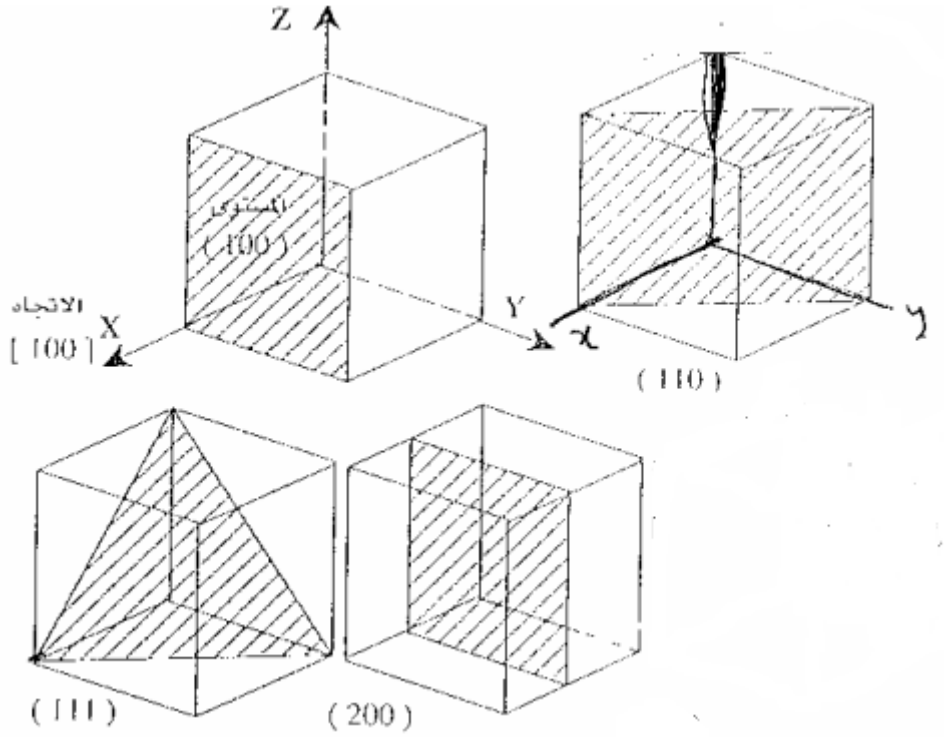
ثانياً: خذ مقلوب هذه الأطوال واختزلها إلى أعداد صحيحة، بشرط ألا يكون بينها أي قاسم مشترك (سوى الواحد الصحيح)، فيكون الناتج حينئذ هي إحداثيات ميلر للمستوى المطلوب وصفه أو تحديده، وتوضع هذه المعاملات بين

قوسين وتكتب على الصورة (hkl) :وإذا قطع المستوى أحد المحـاور في لناحية السالبة، فإن الطول المقطوع يكون سالباً وتوضع علامـة (-) فـوق المعامل المناظر. وإذا كان أحد الأطوال المقطوعة لانهائياً في طولـه، أي أن المستوى يوازي أحد المحاور، فإن معامل ميلر المناظر يساوي صفراً

على سـبيل المثـال: المـستوى ABC فـي الـشكل التـالي يقطـع المحاور X,Y,Z بنسب 3a:2b:2cعلى الترتيب



نوجد مقلوبات هذه الأعداد1/2 , 1/2 , 1/3 :ثم نختزلها حسب القاعدة إلى أعداد صحيحة فتحصل على إحداثيات ميلر(233)



من ناحية أخرى، تستخدم إحداثيات مماثلة لإحداثيات ميلر لتحديد الاتجاهات داخل البلورة، وهي أيضاً أعداد صحيحة لا يوجد بينها قاسم مشترك،وتتناسب مع المركبات الأساسية لمتجه له الاتجاه المطلوب، وتكتب بين قوسين مربعين على الصورة [w v u] فالاتجاه الموجب للمحور X هو [100]،والاتجاه Y هو [010]

مثال

يتبلور الحديد بترتيب ذري تكعيبي متمركز الجسم (bcc) احسب مقدار ثابت الشبكة (طول ضلع خلية الوحدة a) علماً بأن كثافة الحديد 94.7 $\rho = g/cm^3$ ووزنه الذري 85.55 = (M) وعدد أفوجادرو $N_A = 6{,}6210^{23}$

معامل التعبئة

يعرف عامل التعبئة (الرص) بأنه أكبر نسبة من الحجم الذي يمكن أن تشغله الذرات الموجودة في خلية الوحدة. احسب عامل التعبئة لكل من شبكات النظام البلوري المكعب

$$\text{عامل التعبئة (F)} = \frac{\text{حجم الذرات الموجودة في خلية الوحدة}}{\text{الحجم الكلي لخلية الوحدة}}$$

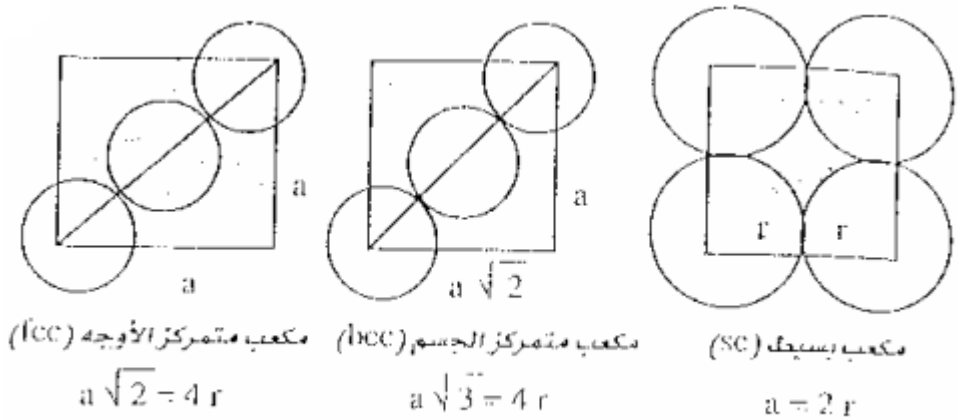
فإذا كان عدد الذرات في خلية الوحدة n، وحجم كل ذرة v ونصف قطرها r ، وطول ضلع المكعب a فإن :

$$F = \frac{n \times v}{a^3}$$

$$F_{sc} = \frac{1 \times 4\pi r^3}{3 \times 8r^3} = \frac{\pi}{6} = 0.52$$

$$F_{bcc} = \frac{2 \times 4\pi r^3}{3\,(4r/\sqrt{3})^3} = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} = 0.68$$

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

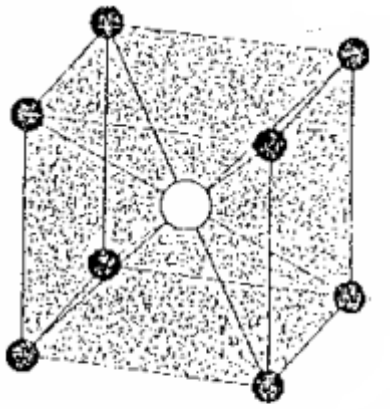


أمثلة لبعض التركيبات البلورية :

(أ) كلوريد السيزيوم Cl Cs:

تنتمي إلى النظام البلوري المكعب متمركز الجسم(bcc) ، وتشغل أيونات السيزيوم Cs^+أركان خلية الوحدة، أي النقاط 000، بينما يشغل أيون الكلور Cl^- مركز جسم المكعب 1/2 1/2 1/2وبهذا تحوي خلية الوحدة جزيئاً واحداً من كلوريد السيزيوم Cl Cs يمكن اعتبار الشبكة البلورية لكلوريد السيزيوم مكونة من شبكتين فرعيتين من نوع المكعب البسيط لكل من أيونات السيزيوم

وأيونات الكلور، ثم أزيحت هاتان الشبكتان بالنسبة لبعضهما البعض على طول قطر المكعب بمقدار نصف ذلك القطر.



بلورة كلوريد السيزيوم

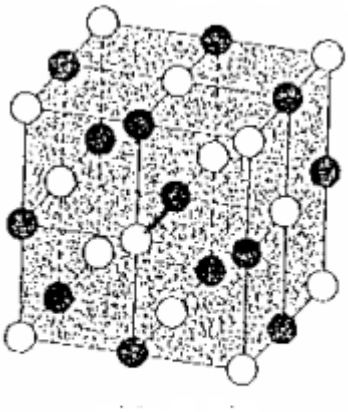
(ب) كلوريد الصوديوم Cl Na:

ينتمي إلى النظام البلوري المكعب المتمركز الوجوه وتحوي خلية الوحدة أربعة جزيئات حقيقية NaCl إحداثيات أيوناتها هي

$$\circ Na^+ : 000\ ,\ \frac{1}{2}\frac{1}{2}0\ ,\ \frac{1}{2}0\frac{1}{2}\ ,\ 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$$

$$\bullet Cl^- : \frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}, 00\frac{1}{2}\ ,\ 0\frac{1}{2}0\ ,\ \frac{1}{2}00$$

وعدد التناسق لكل أيون يساوي ستة أيونات مخالفة. الوحدة البنائية الأساسية (القاعدة) تتكون من أيون صوديوم Na^+ وأيون كلور Cl^- يفصلها نصف طول قطر خلية الوحدة المكعبة في الشبكية البلورية الفراغية ويمكن اعتبار التركيب البلوري لكلوريد الصوديوم مكوناً من شبكتين فرعيتين متداخلتين من نوع المكعب متمركز الوجوه، إحداهما لأيونات الصوديوم والأخرى لأيونات الكلور، ثم أزيحت هاتان الشبكتان الفرعيتان بالنسبة لبعضهما البعض بمقدار نصف طول ضلع المكعب.



بلورة كلوريد الصوديوم

(جـ) التركيب البلوري للألماس :

ينتمي إلى النظام المكعب متمركز الأوجه والوحدة البنائية الأساسية (القاعدة) المرافقة لكل نقطة شبكة تتكون من ذرتي كربون إحداثياتهما هي : (0,0,0) 1/4, 1/4, 1/4 ويحيط بكل ذرة أربع ذرات هي أقرب جيرانها (عدد التناسق) وتحوي وحدة الخلية ثماني ذرات حقيقية. ويعتبر التركيب الماسي فارغاً نسبياً، حيث إن عامل التعبئة يقدر بنسبة 34% فقط. ويمكن اعتبار التركيب الماسي مكوناً من شبكتين فرعيتين من نوع المكعب متمركز الأوجه، ثم تداخلت هاتان الشبكتان الفرعيتان بإزاحة مقدارها 1/4 طول قطر المكعب.

كلية العلوم الدقيقة و علوم الطبيعة و الحياة **جامعة محمد خيضر- بسكرة**

قسم علوم المادة **السنة الثانية فيزياء**

مقياس: علم البلورات للفيزياء

السلسلة الأولى

التمرين الاول:(البنية البلورية لمعدن الألمنيوم)

يتبلور الالمنيوم وفق البنية المكعبة الممركزة الوجوه. والمطلوب:

1. ارسم الخلية العنصرية لمعدن الالمنيوم.
2. احسب Z العدد التناسقي (الجوار المباشر).
3. إذا علمت أن بعد الخلية العنصرية هو $a = 4{,}04A$ احسب نصف قطر ذرة الألمنيوم r .
4. احسب الكتلة الحجمية للالمنيوم.

معطيات: $M_{Al} = 27\ g.mol^{-1}$ $N_A = 6.023\ 10^{23}\ mol^{-1}$

التمرين الثاني

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

1. ارسم شكلا توضيحا لبنى الحديد السابقة.
2. احسب التراص وقان بين البنيتين.
3. احسب نصف قطر ذرة الحديد في كل بنية. ماذا تلاحظ؟

معطيات: $a_\alpha = 291\ pm$ $a_\beta = 365\ pm$

التمرين الثالث:

أ) خذ شبكة مكعبة واجب عن الاسلة التالية:

1) عين الاتجاهات [100]،[111] ،[120] ،[221] ،[320].

2) عين المستويات (001)،(111) ، (221) ، (120) ، (320).

ب) احسب الزاوية بين الاتجاهين [111] و [111]. والزاوية بين المستوين (001) و (110).

التمرين الرابع

احسب كثافة المتجه [110] للذهب إذا علمت أن ثابت الشبكة a=0.408nm هذا مع العلم بأن خلية الذهب من نوع CFC.

التمرين الخامس: برهن ان معكوس"الشبكة المعكوسة" هو شبكة مباشرة.

الفصل الثاني

عمليات التناظر

التماثل البلوري

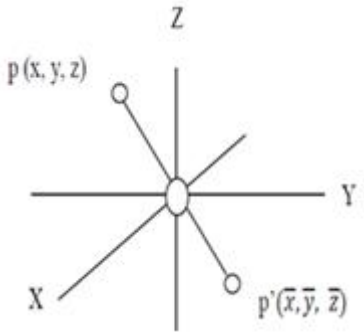
هناك عمليات تماثل أخرى يمكن تطبيقها عند نقطة معينة في الشبيكة البلورية ولهذا يطلق عليها اسم "عمليات التماثل النقطية" ومن أمثلته

أ- عملية الانقلاب

وتتم حول نقطة شبكة تسمى"مركز الانقلاب" بحيث تحول المتجه $\vec{r}$ ويرمز لهذه العملية $\bar{I}$

ب -عمليات الانعكاس

ويرمز لها بالحرف m وتحقق صورة مماثلة لنصفي الشبكة على جانبي مستوى تماثل يمر بنقطة من نقاطها



ج -عمليات الدوران

حول محور تماثل يمر بإحدى نقاط الشبكة ويحقق عودة البلورة إلى وضعها الأصلي بعد دوران زاوية معينة $\Phi = \frac{2\pi}{n}$ أو مضاعفاتها، حيث n عدد صحيح يصف محول التماثل بعدد طياته،ويأخذ قيماً محددة هي: 2 ,3 ,4 ,6 تناظر زوايا دوران 60° , 90° , 120° , 180° على الترتيب، ولا توجد أية شبيكة يمكنها أن تعودإلى وضعها الأصلي بأي عملية دوران أخرى، فلا يوجد مثلاً محورخماسي أو سباعي التماثل للشبيكة البلورية،ويمكن بالطرق الرياضية البحتة إثبات أن محاور التماثل الدورانية لا يمكن إلا أن تكون أحادية أو ثنائية أو ثلاثية أو رباعية أو سداسية.

د- عمليات دوران انقلابية

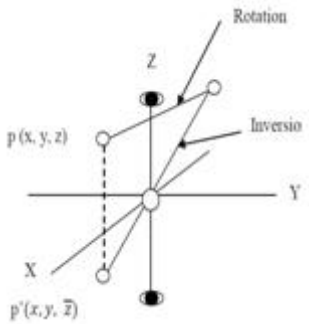
تتم بالدوران حول محول بزاوية $\Phi = \frac{2\pi}{n}$ حيث (n =1 , 2, 3, 4, 6) ثم يتبعها انقلاب حول نقطة شبكة يمر بها المحور ويعبر عن محاور الدوران الانقلابية

بالأرقام:$\bar{1},\bar{2},\bar{3},\bar{4},\bar{6}$ أن عملية الانعكاس m تكافئ عملية الدوران 180°متبوعة بعملية انقلاب ١عند نقطة تلاقي مستوى التماثل m بمحور التماثل 2 أي أن نقطة الشبكة P◦ تكافئ النقطة P بمستوى التماثل m وتكافئها أيضا بالدوران 180°∗حول المحور AA' لتصبح عند P' ثم بالانقلاب حول المركز I وهكذا يتضح أن لدينا عشرة عناصر فقط لتحديد التماثل البلوري هي

محاور الدوران:1, 2, 3, 4, 6.

ومحاور الدوران الانقلابية $\vec{1}, \vec{2}, \vec{3}, \vec{4}, \vec{6}$

وتتميز كل من خلايا الوحدة في شبيكات برافيه الأربع عشرة بوجود واحد أو أكثر من هذه العناصر



Symbole de l'axe	Représentation graphique d'un axe perpendiculaire au plan du dessin	Terminologie
1	.	*Identité*
2		*Axe binaire*
3		*Axe ternaire*
4		*Axe quaternaire*
5		*Axe quinaire*
6		*Axe sénaire*

جامعة محمد خيضر بسكرة **قسم علوم المادة**
كلية العلوم الدقيقة و علوم الطبيعة و الحياة السنة الثانية فيزياء

مقياس:علم البلورات للفيزياء

السلسلة الثانية

التمرين الاول

استعمل الاسقاط المجسم (la projection stéréographique)ومثل عناصر التناظر التالية:

$1, 2, 3, 4, 6$ et$\bar{1},\bar{2},\bar{3},\bar{4},\bar{6}$

التمرين الثاني

استعمل الاسقاط المجسم (la projection stéréographique)ومثل عناصر التناظر التالية:

- 222, 322, 422, 622, 233, 432.
- 2/m, 4/m, 6/m, mm2, 3mm, 4mm, 6mm, $\bar{3}$2m.
- $\bar{4}$2m, $\bar{6}$2m, $\bar{4}$3m, mmm, 4/mmm, 6/mmm, m$\bar{3}$, m$\bar{3}$m.

التمرين الثالث

ما هو عدد الانظمة البلورية؟

اذكر انماط شبكات برافي

سمي مختلف عناصر التناظر الموجود في الشبكة المكعبة.

التمرين الرابع

بلورة تنتسب لكل عقدة من شبكتها ذرة واحدة، اشعة الانسحاب الاساسية هي :

$$\overrightarrow{a_3} = \frac{3}{2}(\vec{\imath} + \vec{\jmath} + \vec{k}) ، \overrightarrow{a_2} = 3\vec{\jmath} ، \overrightarrow{a_1} = 3\vec{\imath}$$

- ماهي شبكة برافي .
- أحسب حجم الخلية الاولية.
- أحسب حجم الخلية الاساسية.

التمرين الخامس

وحدة التركيب البلوري للكالسيوم من النوع CFC.

- عين ثابت الشبكة a.
- أحسب فاصلة الجوار الاقرب.

كثافة الكالسيوم $\rho = 1550 Kg/m3$

الاستاذ :العاقل ع الغني

الفصل الرابع
الطرق التجريبية لانعراج الأشعة السينية

I – إنعراج الأشعة السينية في البلورات:

من المعلوم أنه لرؤية الأشياء المحيطة بنا بالعين المجردة نحتاج إلى الضوء المرئي، وإذا ما دعت الحاجة إلى التعرف إلى كيفية ترتيب الذرات في المادة، أو الأيونات و الجزيات في بلوراتها، فذلك يحتاج إلى ضوء ذي طول موجي قصير للغاية، عموما المادة في معظم حالاتها عبارة عن جسم متعدد البلورات مكونة من عدد كبير من البلورات الأحادية؛ وهو عبارة عن تراص منتظم من الذرات، يمكن وصف هذا التراص بمجموعة من المستويات البلورية معرفة بمسافات بينية تدعى بالمسافات بين المستويات الشبكية d_{hkl} حيث (hkl) قرائن ميلر، تقاس هذه المسافة عن طريق انعراج الأشعة السينية بواسطة قانون براغ

I –1قانون براغ:

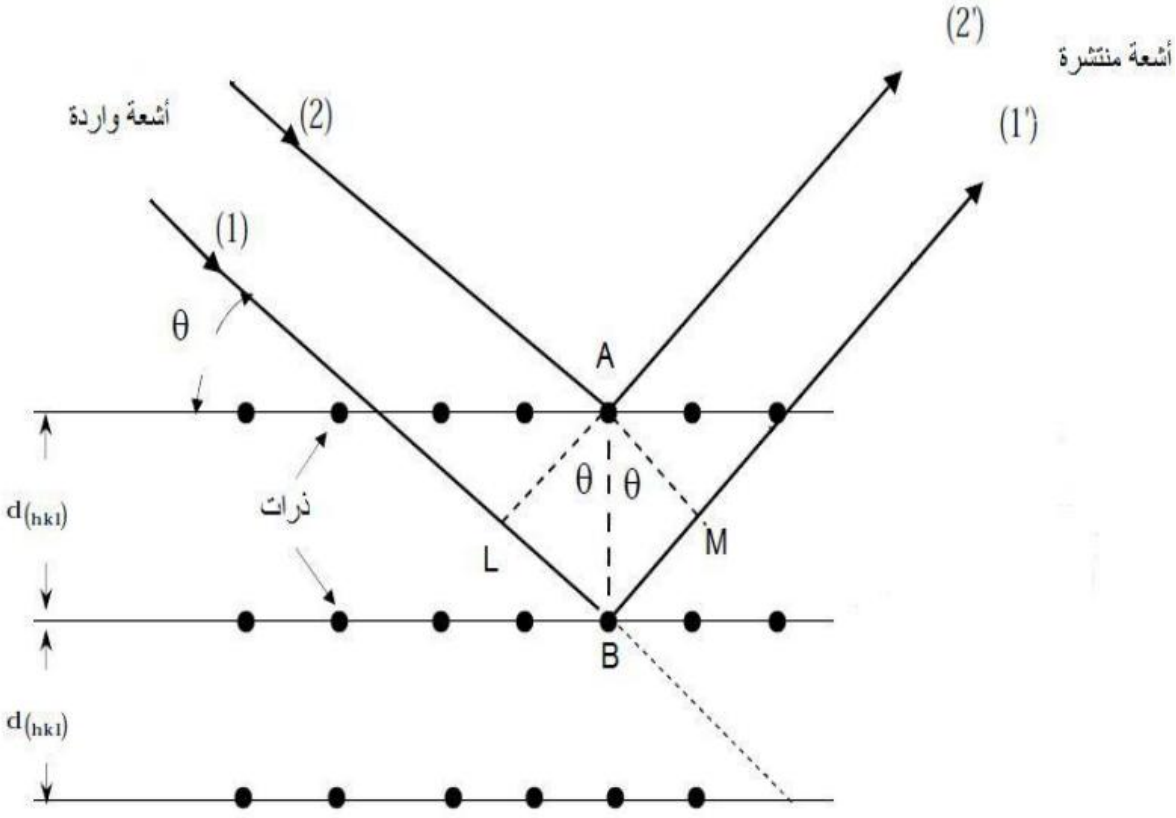
في عام 1913 م تمّكن وليام لورانس براغ من وضع الشروط الهندسية لحيود حزمة وحيدة الطول الموجي من الأشعة السينية، وقد نص القانون على أن)موجات الأشعة السينية التي تسقط على سطح بلورة ما تنعكس من المستويات الذرية المتوازية انعكاسًا منتظما ويحدث الحيود من المستويات المتوازية فقط عندما تتداخل الحزمات المنعكسة تداخلا بناء(أنظر الشكل وإذا كانت المسافة الموضحة بين المستويات المتوازية هي d فإن فرق المسار بين حزمات الأشعة المنعكسة $d \sin\theta$ من السطح الأعلى والسطح المجاور هو ($2d \sin\theta$) حيث أن θهي زاوية السقوط المحصورة بين الحزمة الساقطة والعمود المقام عند نقطة الانعكاس، ويحدث التداخل البناء للحزمات المنعكسة عندما يكون فرق المسار مساويًا لعدد صحيح من الأطوال الموجية للأشعة الساقطة لذلك يتحقق شروط الحيود إذا كان·

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

حيث أن (n) رتبة الحيود و (n=1 , 2 ,3,...)وهذه العلاقة تمثل قانون براغ ويتضح منها أن الانعكاس من المستويات المتوازية التي تبتعد عن بعضها بمقدار d لا يتم إلا لمقادير معينة من الزاوية (θ_Bزاوية براغ)، و يشترط أن يكون الطول الموجي مساويًا أو أقل من ضعف هذه المسافة بين المستويات المتوازية أي أن ($2d \geq \lambda$) وإذا كانت الرتبة هي الأولى n = 1 تكون قيمة زاوية براغ هي

$$\theta = \text{arc} \sin(\lambda/2d)$$

إن قانون براغ لا يعطي تفسيرا لحدوث الحيود بانعكاس الموجات من سطح البلورة و من الواضح أن الحيود يحدث نتيجة التغير الطوري في الشبكة الفراغية كما أن تكوين القاعدة الأساسية للبلورة من الذرات هو المسؤو ل عن تحديد شدة الحزمة المنعكسة من المستويات البلورية المتوازية فكلما كانت المستويات غنية بالذرات كلما كانت الشدة للحزمة المنعكسة عالية لهذا لابد أن يكون التصادم المرن بين الفوتونات للأشعة و ذرات البلورة هو الذي يؤدي إلى استطارة وعكس الحزمة الإشعاعية ليحدث الحيود



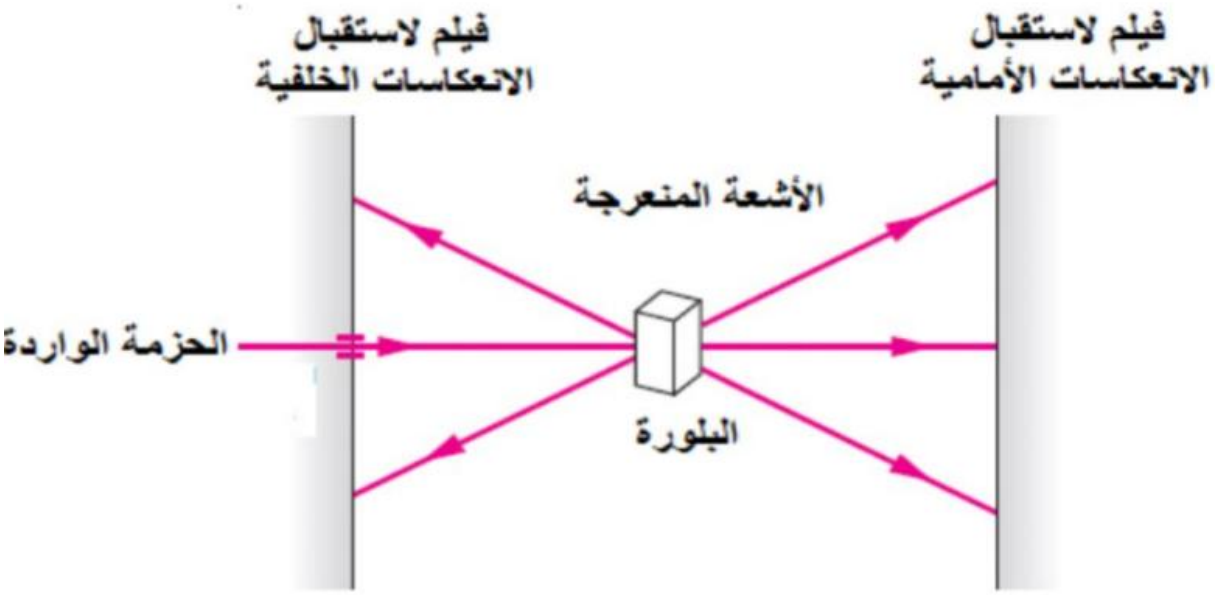
I –2 الطرق التجريبية لانعراج الأشعة السينية في البلورة:

توجد طرق عديدة لتسجيل شكل انعراج الأشعة السينية بحيث تعتمد على الشكل الذي توجد عليه العينة، وكذلك نوع الأشعة السينية المستخدمة، ولا يحدث انعراج الأشعة السينية إلا إذا توافقت قيم θو λ وحققت شرط براغ، بمعنى أنه بصفة عامة لا تنعكس حزمة من الأشعة السينية إذا سقطت على بلورة بأي زاوية اختيارية. ومن الناحية التجريبية يجب أن يتوافر مدى متصل من قيم λأوθ

I–2- 2 طريقة فون لاوي:

طريقة لاوي هي طريقة سريعة ومجدية لتحديد توجهات وتناظر البلورات والكشف عن العيوب البلورية والتشوهات التي تنشأ عند المعالجة الميكانيكية أو الحرارية للبلورات، تسقط حزمة من الأشعة السينية

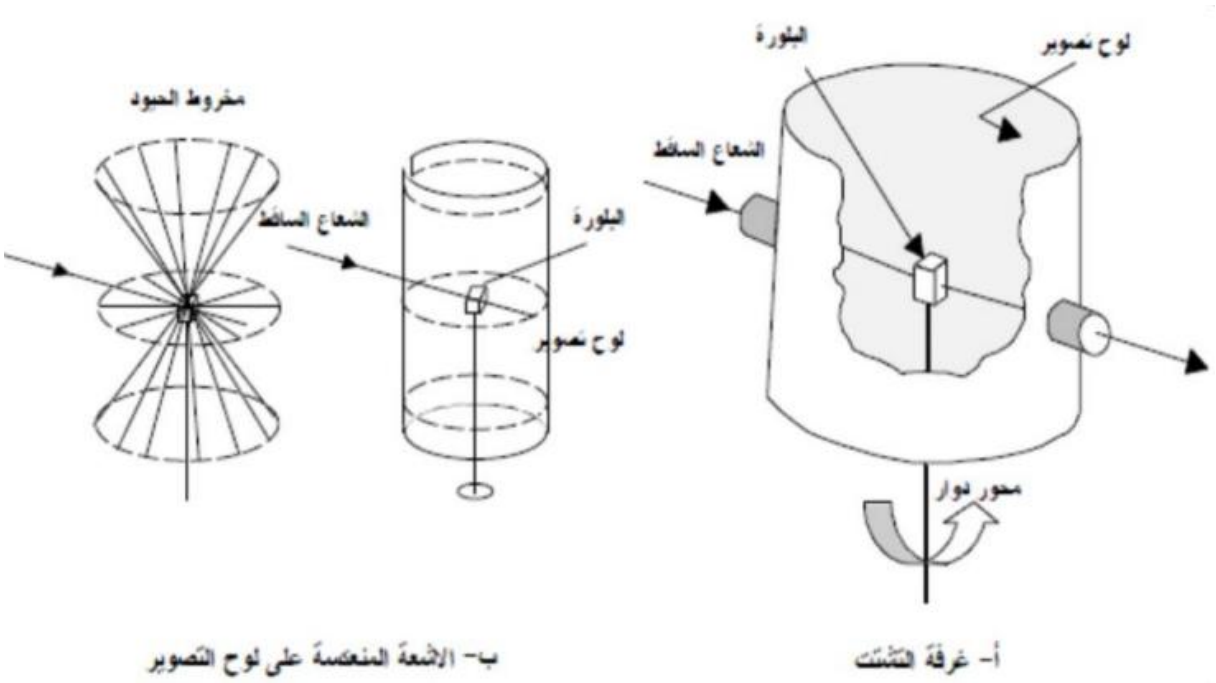
البيضاء على مجموعة من الثقوب تقع على خط مستقيم فتخرج منها الأشعة على هياة حزمة ضيقة وتعرف مجموعة الثقوب بالمجمع، حيت تسقط الأشعة السينية على بلورة أحادية أبعادها لا تزيد على 1 mm يثبث فيلمان مستويان أمام وخلف العينة بحيث تسقط الحزمة على فيلم الأمامي بينما تسقط الحزمة الحائدة للبلورة على الفيلم الخلفي، بما أن λ تغطي مجالا مستمرا كبيرا فإن كل مستوي انعكاسي بلوري سينتقي من حزمة الموجات الساقطة شعاعا طول موجته λ، يسقط بزاوية براغ θ_{hkl} تحقق تداخلا بناء مع الأشعة المنعكسة من المستويات البلورية ذات المسافة البينية d_{hkl} طبقا لقانون براغ، والصورة المتحصل عليها من الحيود تظهر بوضوح تناظر البلورة لطريقة لاوي عيوب تجعلها غير صالحة لتعيين التركيب البلوري، مثل وجود عدد كبير من الموجات، التي يمكنها أن تحدث انعكاسات مختلفة من نفس المستوى وتناظر مراتب مختلفة من الحيود، بل من الممكن أن تتطابق بعض الانعكاسات ذات المراتب المختلفة، ولا يوجد طريقة للكشف عن ذلك، وبالتالي يكون قياس شدة الانعكاسات أمرا صعبا



I –2- 2طريقة البلورة الدوارة:

يوضح الشكل آلة تصوير بسيطة لبلورة تدور حول محور ثابت فيها يأخذ الفيلم الفوتوغرافي شكلا اسطوانيا، ويشترط أن ينطبق محور الاسطوانة على محور يدور، وتركيب البلورة الأحادية على هذا المحور الأخير، وأبعاد البلورات تقل عادة عن ميليمتر واحد، وتسقط حزمة ضيقة من الأشعة السينية أحادية الموجة على البلورة أثناء دورانها على محور ثابت فيها. ويحدث الحيود في مستويات لها المسافة dعندما تتحقق زاوية السقوط θ قانون براغ؛ فمثلا الحيود الناشئ من جميع المستويات التي توازي

محور الدوران يقع في مستوى أفقي، ويقع الحيود الناشئ من مستويات مائلة على محور في طبقات تقع على اعلي وأسفل المستوى الأفقي

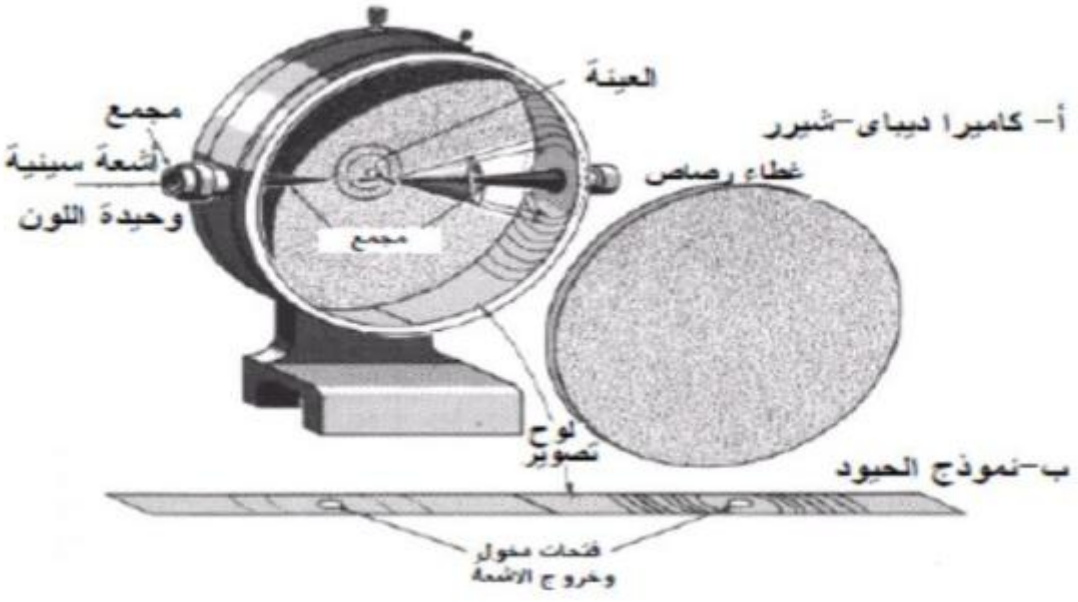


ب- الأشعة المنعكسة على لوح التصوير

أ- غرفة لاوي

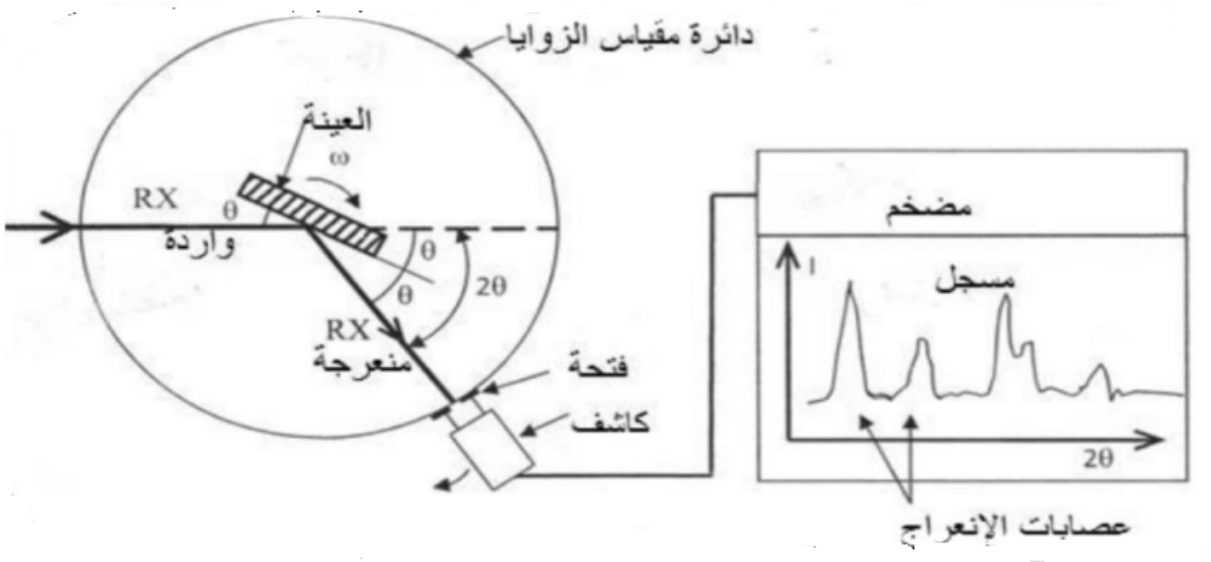
I–3- 2 طريقة المسحوق أو طريقة ديباي–شرر:

وهي مناسبة للدراسات التطبيقية ولا تشترط أن تكون البلورة أحادية، وفيها تسقط حزمة من الأشعة السينية أحادية الطول الموجي على مسحوق مادة متبلورة. ويكون توزيع اتجاهات حبيبات المسحوق في مدى مستمر تقريباً حيث إن كلا منها تعتبر بلورة صغيرة، ويتحقق قانون برا غ بالنسبة لعدد منها



I –2 - 4 طريقة المسحوق باستعمال العداد

صِّمم هذا الجهاز ليعمل وفق طريقة ديباي وشرر باستثناء العداد المتحرك الذي يحل محل شريحة الفيلم، حيت يتألف الجهاز من أنبوبة توليد الأشعة السينية أحادية الطول الموجي، كذلك حامل العينة الذي يكون على شكل شريحة مستوية يمكنها أن تدور، بالإضافة إلى كاشف الأشعة السينية، ومقياس مدرج لتحديد الزوايا كما هو موضع في الشكل فعند خروج الأشعة من المصدر تسقط على العينة ثم تنعكس لتكنون أشعة منعرجة تلتقي في بؤرة عند فتحة خاصة لتجميع الأشعة فيقوم الكاشفة الذي يكون وضعه الزاوي 2θ بالتقاطها، بحيث يكون دوران العداد مصحوبا آليا بدوران العينة بزاوية θ وهذا يضمن أن تكون زاويتا السقوط علي العينة المستوية و الانعكاس منها متساويتين دائما، وهو النظام الضروري لاحتفاظ بشرط التركيز، وذلك حتى يتسنى قياس شدة الانعكاسات الضعيفة:

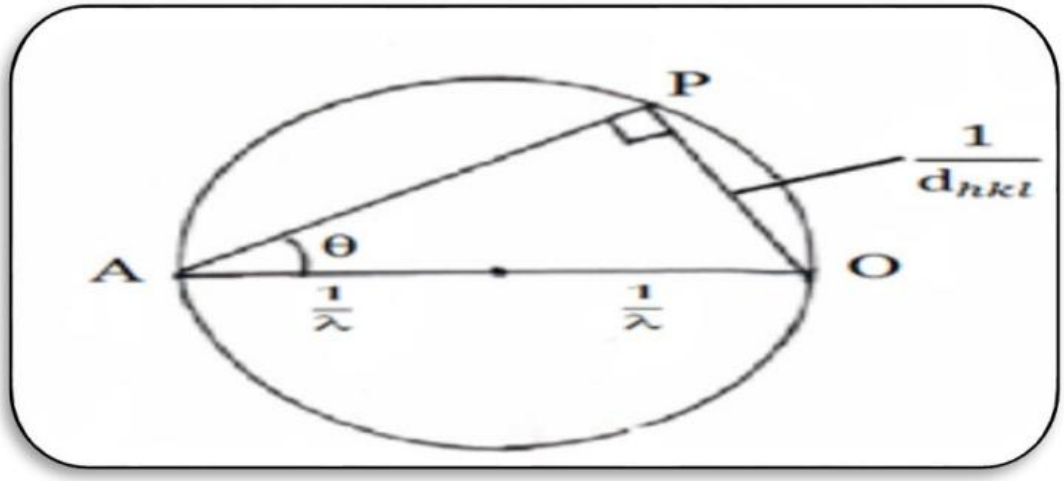


وتعتبر هذه الآلية دقيقة في المعلومات حيث يتم التسجيل فيها باستعمال عداد يعمل بصفة آلية، فعندما يوصل هذا الأخير بجهاز راسم يقوم برسم مخطط أي شدة كمية الإشعاع I بدلالة 2θ، إذ أن هذه التقنية تسمح بتأشير خطوط الانعراج حيت يرفق بكل خط قيمتين محسوبتين I ، d_{hkl}أو θ_{hkl}. ومنه يمكن الحصول على قائمة التنائيات، (I, d_{hkl})أو (θ_{hkl}, I) انطلاقا من المخطط، هذه القائمة تكون مميزة لكل عنصر أو مركب، هذه القوائم تم إعدادها مسبقا وضعت على شكل كتب في نظام بطاقات تعرف بـ .(A.S.T.M) ويمكن من خلالها تعيين وسائط الخلية البلورية، الطور وبالتالي تحديد ماهية المادة

I – 3 كرة ايوالد و الفضاء المعكوس:

استطاع العالم ايوالد ربط فكرة الشبكة المعكوسة مع فكرة كرة الانعكاس التي أطلق عليها بكرة ايوالد لتفسير النتائج التجريبية لحيود الأشعة السينية ومعرفة المستوى الذي يعكس الأشعة بمعرفة اتجاه وقيمة λ والآن نرى كيف أن لمعادلة براغ أهمية هندسية في الشبكة العكسية. يمكن كتابة معادلة برا غ بالصيغة الآتية

$$\sin\theta_B = \frac{\lambda}{2} / \ d_{hkl} = \frac{\left(\frac{1}{d_{hkl}}\right)}{\frac{2}{\lambda}}$$



I -4 تحليل طيف الانعراج في البلورات:

إن تحليل الطيف الناتج عن انعراج الأشعة السينية في البلورات يقدم لنا مجموعة كبيرة من المعلومات حول المادة المدروسة، من أهم هذه المعلومات المحصل عليها للمادة المجهولة، نجد مايلي

I - 4 -1 البنية البلورية:

طيف الانعراج هو دالة لتغير شدة انعراج الأشعة السينية بدلالة الزاوية θعبر تركيب بلوري معين من خلال دراسة وتحليل هذا الطيف يمكن الحصول على عدة خصائص متعلقة بالبلورة من أهمها:

بنية الشبكة البلورية: تكمن في التعرف على ثوابت الشبكة a ، b، c وα،β،γللخلية الأساسية للبلورة ومعرفة معاملات مليز للمستويات الانعراج (hkl) هذه المعلومات يمكن الحصول عليها أو معرفة تحديد قيم 2θ لزوايا الانعراج (hkl) المسببة لهذه القمم

<u>تموضع الذرات في الخلية الأساسية</u>: يمكن معرفة تموضع الذرات من خلال دراسة الكثافة الالكترونية وخاصة عند البلورات ذات المركبات المتعددة الذرات هذه الكثافة تترجم من خلال شكل القمة وشدة الأشعة المنعرجة ومن خلال كذلك دمج النتائج (تحديد الشبكة + تحديد تموضع الذرات (القاعدة)) يمكننا معرفة البنية البلورية. إضافة إلى معر فة البنية البلورية يمكن تحديد خواص أخرى للبلورات من خلال انعراج الأشعة السينية مثل حجم حبيبات في العينة

الفصل الخامس

الروابط الكيميائية

كلية العلوم الدقيقة و علوم الطبيعة و الحياة **جامعة محمد خيضر- بسكرة**
قسم علوم المادة **السنة الثانية فيزياء** **مقياس: علم البلورات للفيزياء**

السلسلة الثالثة

التمرين الاول

احسب ثابت الشبكة لبلورة مكعبة سقطت عليها أشعة سينية ذات طول موجي $\lambda=1.54\ A°$ انجستروم بزاوية $11,1°$ فحققت انعكاسات براج ذات الرتبة الأولى من المستويات(110).

التمرين الثاني

في تجربة ديباي شرر كان طول موجة المستخدم $\lambda=1.54\ A°$ والمسحوق البلوري من النوع bcc ثابت الشبكة $a=1,5\ A°$.

ماهي قرائن الانعكاس (hkl) الملائمة إلي أعظم زاوية براغية θ_{max}.

التمرين الثالث: أجب عن الاسلة التالية:

1) عرف ما يلي: الكهروسالبية، الألفة الإلكترونية ،طاقة التأين.
2) أذكر انواع الروابط داخل الجزيئات وعرفها.
3) أعط تعريف مختصر عن المجموعة I_A والمجموعة II_A واذكر ثلاث عناصر من كل مجموعة.
4) أذكر الحالات التي لا تتحقق فيها قاعدة الثمانية دون شرحها.
5) ارسم مخطط المقارنة بين الروابط التساهمية والشاردية بدلالة الفرق في الكهروسالبية.

التمرين الرابع

أبحث عن موقع عنصري الكلور والصوديوم في الجدول الدوري للعناصر، حدد العدد الشحني Z.

مثل الذرتين حسب نموذج بوهر.

اشرح كيف تنشأ بين الذرتين رابطة ذات طابع كهربائي.

التمرين الخامس

1. نعتبر جزيء الهيدروجين H_2 وجزيء كلور الهيدروجين HCl.
   - مثل الجزيئات المذكورة سابقا بإبراز الإلكترونات التي تتحد حسب القاعدة الثنائية أو الثمانية(تشبع المدار الخارجي).
2. مثل كل من جزيئات الميثان CH_4 والايثلين C_2H_4 والأسيتيلين C_2H_2 وذلك بتوضيح نوع الرابطة كربون-كربون(بسيطة او مضاعفة).

الاستاذ: العاقل ع الغني