جامعة الانبار

قسم الجيولوجيا التطبيقية

رمادي- العراق

سلام عبيد إبراهيم

المحاضرة (٨)

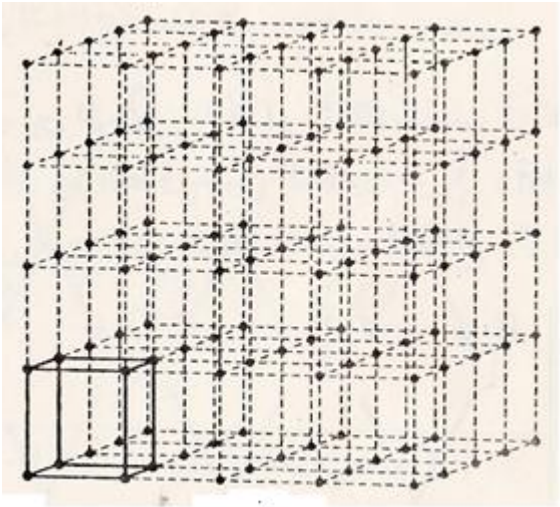
البنية الذرية للبلورات

البنية الذرية للبلورات: Crystal Lattice

عرفنا من المحاضرات السابقة المظهر الخارجي للبلورات اي المجاميع النقطية ال ٣٢ صنف بلوري ذات الانظمة البلورية السبعة ، هذا المظهر الخارجي للبلورات ما هو الا انعكاس للترتيب الداخلي للذرات كما ذكرنا سابقا .

وعليه لابد ان نعرج على دراسة الترتيب الداخلي لوحدات الخلايا وكيفية تشكيل هذه البنية والتي تنعكس على الخارج نتيجة التكرار المنتظم في ثلاث اتجاهات ؛ حيث قد يكون التكرار متساويا في ثلاث اتجاهات وينشا او يعكس النظام المكعب او يكون التكرار متساويا في اتجاهين ويختلف في الاتجاه الثالث ويشير او يعكس النظام الرباعي او يكون التكرار مختلفا في الاتجاهات الثلاث abc ويعكس النظام المعيني القائم لكن يجب ان نشير الى التكرار في الاتجاه الواحد يكون ثابت او متساوي التكرار.

اذا البنية البلورية Crystal Lattice عبارة عن تكرار مكونات المادة المتبلورة من ذرات وايونات بفواصل منتظمة في الابعاد الثلاث . وعند تمثيل الترتيب الذري على شكل مجموعة من النقاط في الفراغ فان الشكل الحاصل من توزيع النقاط في الفراغ يمثل بنية فراغية او بنية بلورية Space lattice وعلى هذا الاساس يمكن تعريف البنية الفراغية عبارة عن صفوف غير محدد الطول من نقاط البنية موزعة في الابعاد الثلاث في الفراغ بوحدات تكرار ثابتة بحيث يكون لكل نقطة محيط متماثل مع النقاط الاخرى شكل-١ .

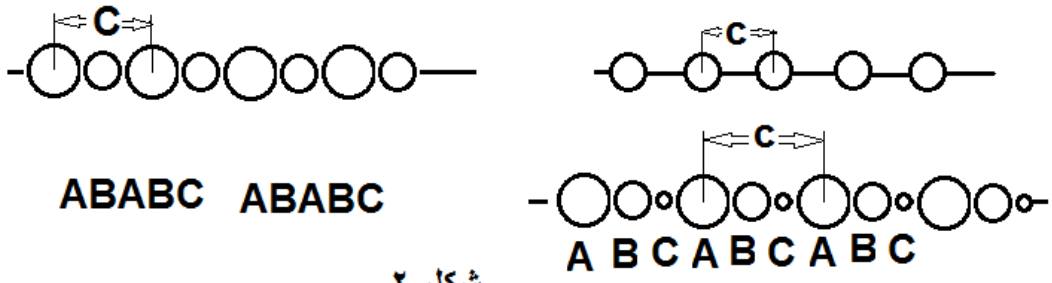


شكل-١

ولكي نفهم الترتيب الذري الداخلي المنتظم للبلورات في الابعاد الثلاث لابد ان نبدأ في الحالات الاكثر بساطة فنأخذ الترتيب في اتجاه واحد One dimensional patterns ثم ندرس الترتيب في اتجاهين لتكون انماط ثنائية البعد Two dimensional patterns والتي تسمى بالشبكات nets واخيرا النمط بثلاث ابعاد Three dimensional patterns وهذه تمثل البنية الفراغية Space lattice او البنية البلورية .

١) انماط احادية البعد: One dimensional patterns

اذا انماط احادية البعد وهي ترتيب أي مجموعة من نقاط البنية في الفراغ بحيث تكون هذه النقاط مرتبة ترتيبا منتظما وبفواصل ثابتة واتجاه محدد ينتج عنه نمط احادي البعد One dimensional patterns لاحظ شكل-٢.



شكل-٢

تدعى المسافة بين نقطتين بنية متشابهتين بوحدة التكرار repeat unite ويمكن تعريفها على انها المسافة الثابتة والمتكررة بين نقاط البنية المتشابهة . نلاحظ شكل-٢ هناك نوع واحد اساسي فقط من هذا النمط حيث تلاحظ الاختلاف الوحيد في الانماط الاحادية البعد هو الاختلاف في وحدة التكرار (المسافة)

٢) الانماط ثنائية البعد: Two dimensional patterns

في الانماط الثنائية البعد والتي تشكل شبكة (nets) وهو رص صفوف متشابهة (صفين على الاقل) من انماط احادية البعد بحيث تكون وحدة التكرار في كل صف ثابتة لاحظ شكل ٣-أ؛ ب

شكل-٣-ب

شكل-٣ - أ

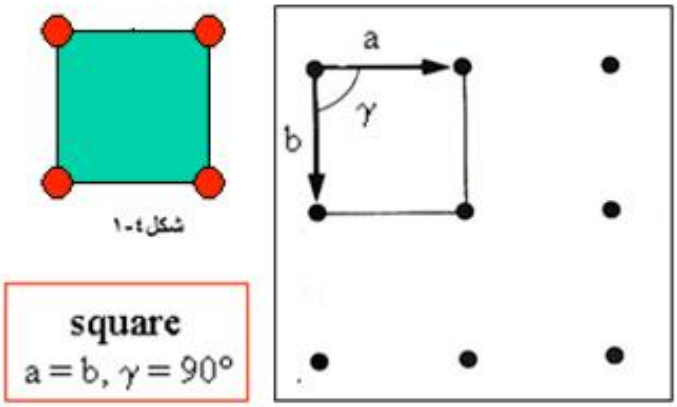
لكن ليس من الضروري تكون وحدة التكرار الفاصلة بين الصفوف a مساوية لوحدة التكرار b . فكل وحدتي تكرار غير متوازيتين تكو حافتين لشكل متوازي اضلاع تدعى بوحدة الشبكة net unite وهناك شروط لبناء الشبكة تؤخذ بنظر الاعتبار وهي :

١) ان يتم اختيار الصفين اللذين يتميزان بأقصر وحدة تكرار ممكنة .
٢) ان تكون الزاوية المحصورة بين هذين الصفين اقرب ما يكون للتعامد.
٣) ان يكون الصفين متجاورين.

انواع وحدات الشبكة في الانماط ثنائية البعد : Type of net unite two-dimensional

أولا: وحدة الشبكة المربعة: Square net unite

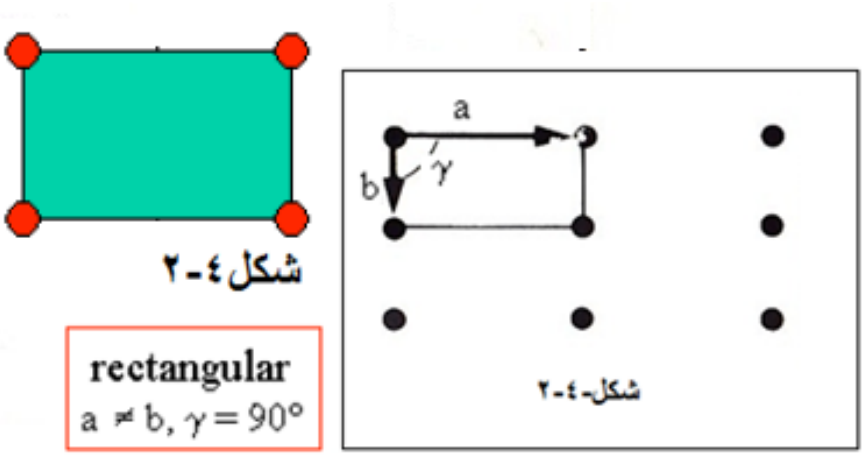
وهنا تكون a=b $\gamma = 90^o$ اي تكون وحدتي التكرار متساوية في الاتجاهين لاحظ شكل٤-١



شكل٤-١

ثانيا: وحدة الشبكة المستطيلة: Rectangular net unite

وهنا تكون وحدتي التكرار في الاتجاهين a ؛ b مختلفتين اي ان: $a \neq b, \gamma = 90^o$ لاحظ الشكل ٤-٢



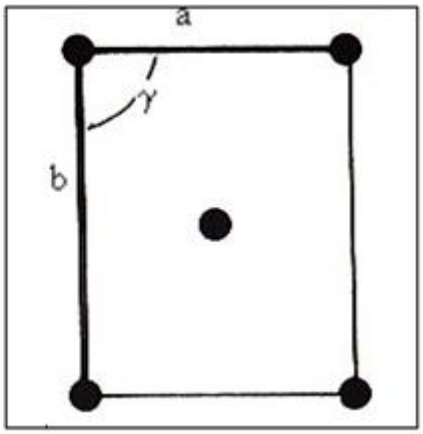
شكل ٤-٢

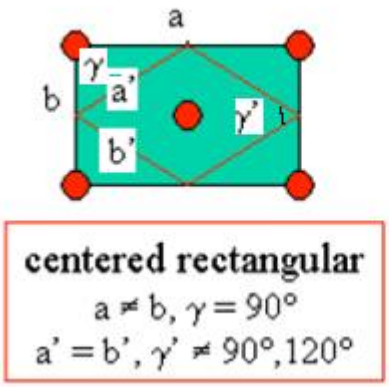
شكل-٤-٢

ثالثا: وحدة الشبكة المعينية او الشبكة الماسية: Rhombic or Diamond net unite

وتدعى هذه الشبكة بالمستطيل الممركز (Center rectangular) حيث تكون طول وحدة التكرار في الاتجاهين a , b غير متساويين والزاوية ɣ تساوي 90° اي قائمة لكن هناك نقطة بنية متمركزة في وسط المستطيل لاحظ شكل٤-٣

كذلك تكون وحدتي التكرار a´ , b´ متساويتين ولا تساوي الزواية الداخلية بينهما 90° او 60° او 120°

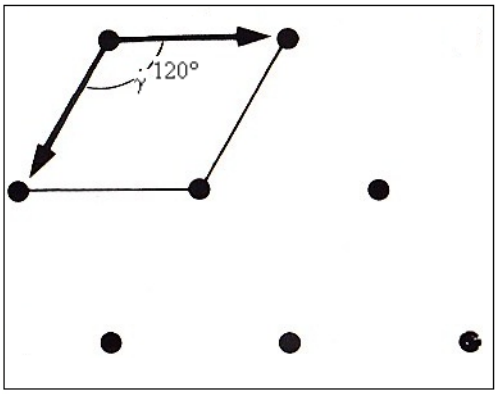


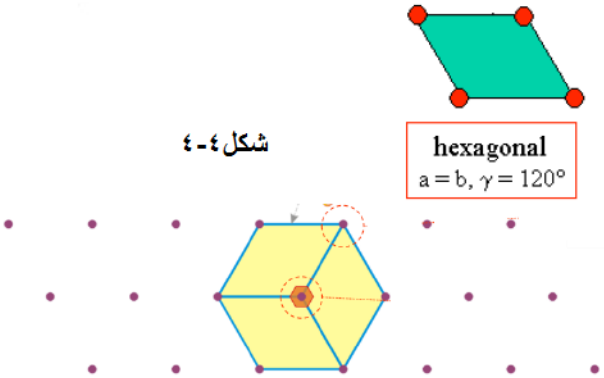


شكل٤-٣

رابعا: وحدة الشبكة السداسية : Hexagonal or 120 Rhombic net unite

ونكون نقاط التكرار متساوية ايضا حيث تكون الزاوية المحصورة بينهما 60° او 120° ولا تساوي 90° ويحصل لهذه الشبكة ترتيب خاص لتوزيع النقاط بحيث يحصل شكل سداسيا يحوي في داخله نقطة بنية اضافية ممركزة ، حيث a=b ɣ=60°=120° ≠ 90° لاحظ شكل٤-٤.



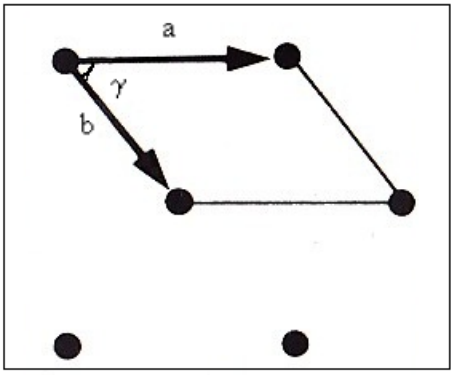


شكل٤-٤

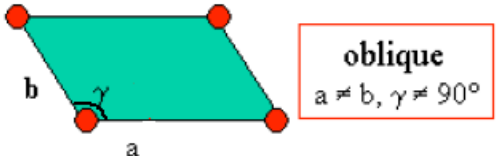
خامسا : الشبكة المائلة : Oblique net unite

وهنا تكون وحدتي التكرار a, b غير متساويتين وتكون الزاوية المحصورة ɣ لا تساوي 90° او 60° او 120° لاحظ شكل٤-٥ اي ان:

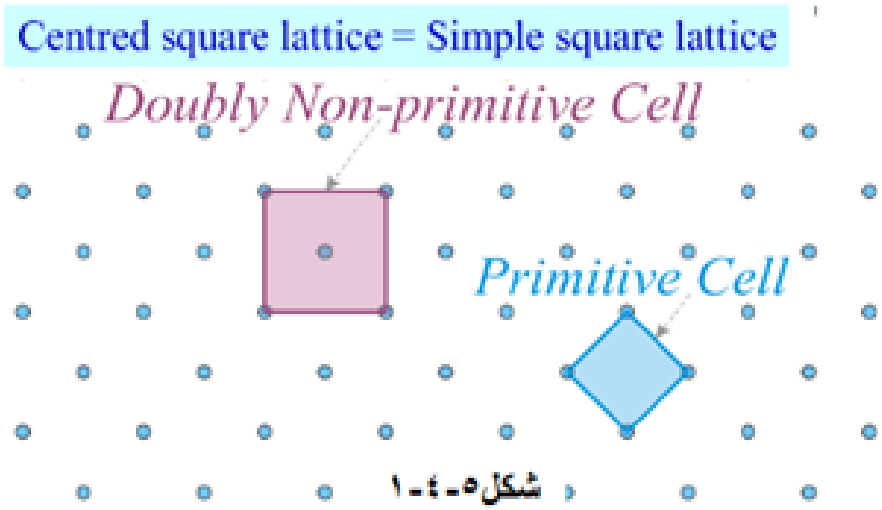
$$a \neq b, \quad \gamma \neq 90° \neq 60 \neq 120$$



شكل ٤-٥

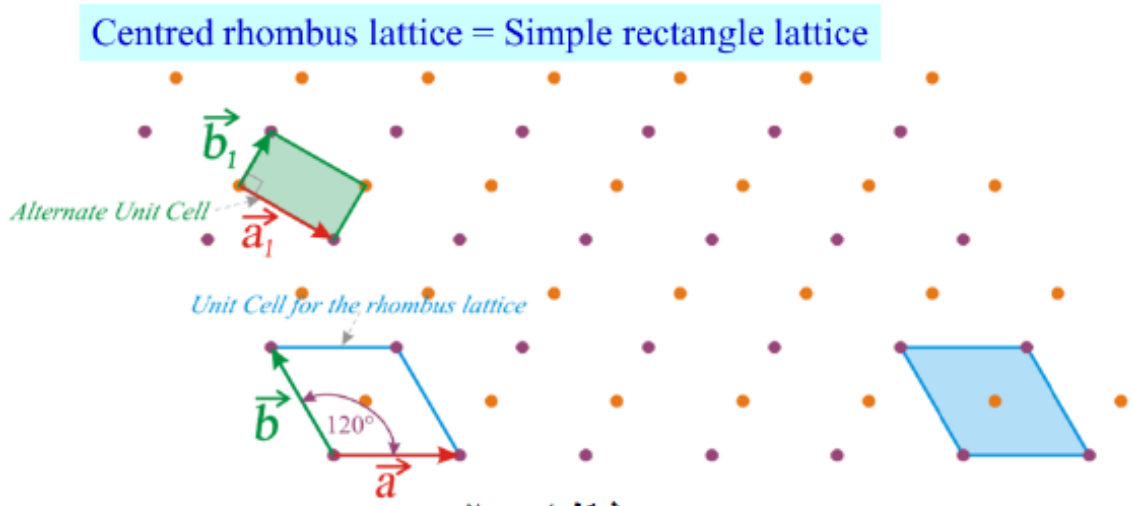


أذا الشبكات الثنائية البعد المربعة والمستطيلة والمائلة والمعينية على سبيل المثال لا توجد شبكة مربعة ممركزة وذلك لان الشبكة المربعة الممركزة مساوية للشبكة المربعة البسيطة (Center Square lattice = Simple Square lattice) لاحظ الشكل٥-٤-١



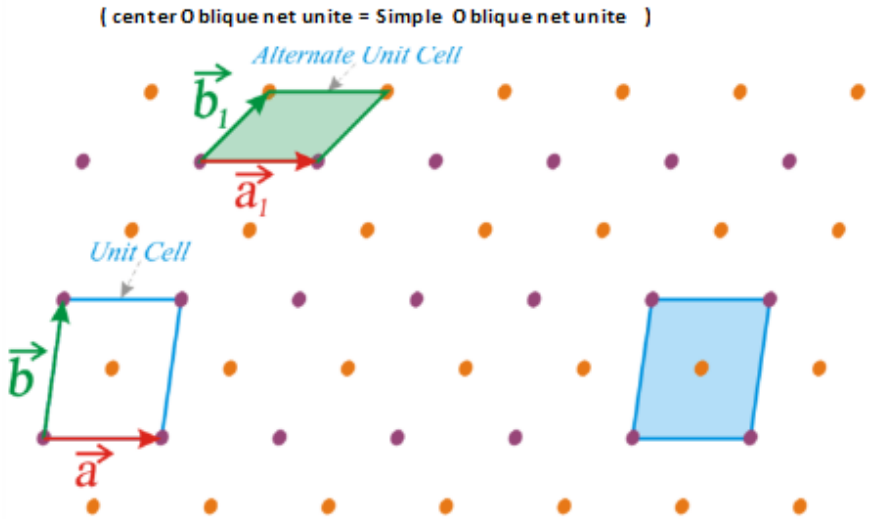
شكل٥-٤-١

كذا الحال لا توجد خلية سداسية ممركزة لان الخلية السداسية الممركزة مساوية الى خلية المستطيل البسيطة لاحظ شكل ٥-٤-٢
(Center rhombus lattice = Simple rectangle lattice)



شكل٤-٥-٢

كذلك لا توجد لدينا شبكة ممركزة مائلة وذلك لان الشبكة الممركزة المائلة مساوية للشبكة المائلة البسيطة لاحظ الشكل ٤-٥-٣
(center Oblique net unite = Simple Oblique net unite)



شكل٤-٥-٣

البنية الفراغية: Space Lattice

اذا من هذه الوحدات الشبكية الخمسة ذات البعدين عند ترتيبها في ثلاث ابعاد تتشكل البنية الفراغية ، اي عند ترتيب اي وحدة شبكية من احد هذه الانواع الخمسة بترتيب متوازي في ثلاث ابعاد مع التكرار المتوازي في ثلاث اتجاهات سوف تتشكل لدينا البنية الفراغية او لبنية البلورية Crystal lattice or Space lattice. وبذلك يكون **تعريف البنية الفراغية على انها صفوف غير محددة الطول من نقاط البنية الموزعة في الفراغ في الابعاد الثلاث وبوحدات تكرار ثابتة.**

شروط بناء البنية الفراغية:

١) يجب ان تكون الشبكات المكونة للبنية الفراغية متوازية مع بعضها البعض بحيث تكون حافة وحدة الشبكة في مستوي معين تكون موازية لحافات وحدة الشبكات الاخرى التي فوقها والتي تحتها.
٢) يجب ان تكون الشبكات الموازية لبعضها من نفس النوعية.
٣) يجب ان تكون وحدة التكرار بين هذه الشبكات ثابتة.
٤) يجب ان لا تكون هناك ازاحة افقية غير ثابتة بين الشبكات اي اذا مر خط مستقيم من نقطة معينة في شبكة فانه سوف يمتد خلال جميع الشبكات الاخرى بنقاط بنية متشابهة بالاتجاه والتركيب لتلك الاولى التي مر بها بحيث تتكر علية النقاط بوحدات تكرار ثابتة.
٥) ان يكون لكل نقطة بنية في شبكة معينة نفس البيئة للنقطة المتشابهة لها في الشبكات الاخرى ونعني بالبيئة هنا هو نوع وتوزيع نقاط البنية حول تلك النقطة.

وعليه فمن بناء وحدات الشبكات الثنائية في ثلاث ابعاد سوف تتشكل البنية الفراغية ضمن المحاور الثلاث c, b, a ومن هذه المتوازيات في ثلاث الاتجاهات تتكون لدينا وحدة خلية واحدة unite cell فقط ؛ **ويمكن تعريف وحدة الخلية على انها اصغر شكل هندسي منتظم في البنية الفراغية حيث عند ازاحتها باتجاه حافاتها بدون ان تبدي اي تغير في شكلها، حجمها واتجاهها او محتواها.**

انواع خلايا الوحدة: Types of unite cells

وبذلك خلايا الوحدة تكون من سبعة انواع اعتمادا على اطوال الوحدة في ثلاث اتجاهات واعتمادا على الزاوية بين هذه الاطوال α β γ وهذا ما يعكس سبع انظمة بلورية وهي:

ت	النظام البلوري	اطوال المحاور	العلاقة الزاوية	انواع خلايا الوحدة	العدد	اسم وحدة الخلية
1	Cubic	a=b=c	γ=β=α=90º	P, I, F	3	خلية المكعب
2	Tetragonal	a=b ≠ c	γ=β=α=90º	P, I	2	خلية الرباعي
3	Orthihorombic	a≠ b ≠ c	γ=β=α=90º	P, C, I, F	4	خلية المعيني القائم
4	Hexagonal	a1=a2=a3≠c	γ=β=90º. α=120	P = C	2	الخلية السداسية
5	Trigonal	a=b=c	γ≠β≠ α≠90º	P=R	1	خلية الوحدة المعينية
6	Monoclinic	a ≠ b≠ c	γ=α=90º ≠β	P, C	2	خلية احادي الميل
7	Triclnic	a ≠ b≠ c	γ≠βα≠ 90º	P	1	خلية ثلاثي الميل
					14	

جدول-١

ومن هذه الخلايا السبع سوف تشكل الانظمة البلورية السبعة. لاحظ جدول-١

بنيات برافس: Bravais lattices

ان خلايا الوحدة المتشكلة والتي ذكرنها سابقا فأنها تتكرر وتنتظم في الابعاد الثلاثة وانها تتواجد في الانظمة البلورية السبعة (المكعب ، الرباعي .....الخ) حيث اشار العالم برافس انه توجد اربع عشرة طريقة لترتيب النقاط في الفراغ وهذا يعني الذرات والايونات والجزيئات المكونة للبلورات تستطيع ان ترتب نفسها ضمن هذه الطرائق الاربع عشر فقط؛ وهذه البنيات الاربع عشر سميت بنيات برافس نسبة الى مكتشفها ؛ وهذه الاربع عشر بنية تقع ضمن الانظمة البلورية السبعة.

انواع بنيات برافس:

تتحدد الانواع الاربعة عشر من بنيات برفس بما يلي:

١) اي نوع من الشبكات الاساسية الخمس جمعت او زحفت.

٢) طول متجه الرص والزاوية التي يجمعها مع الشبكة على نسق النقاط في الشبكة.

ذكرنا ان بنيات برافس عددها ١٤ بنية ضمن الانظمة البلورية لكن من ناحية بناءها وعدد الذرات في خلية كل وحدة فانها تكون من اربع خلايا وحدة فقط وكما يلي:

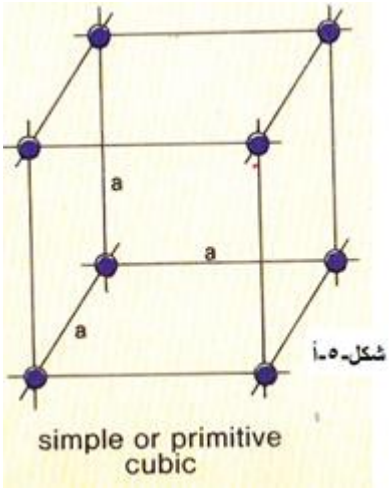
١) خلية الوحدة الابتدائية : Primitive unite cell

ويرمز لها بالحرف P

حيث تحتل نقاط البنية عند زويا الخلية فقط حيث تشترك كل نقطة بنية عند اركان الزوايا الخلية (عند الزاوية المجسمة) والتي تأخذ الشكل المكعب او متوازي مستطيلات وتتوزع كل نقطة بنية بين ثمان خلايا اخرى ولهذا فان كل نقطة تمثل (1/8 ذره) وعليه فان عدد نقاط البنية او عدد الذرات هو واحد اي ذره واحدة (1= 1/8 x 8)

بنية كل نقطة محاطة ب ٦ نقاط اخرى مشابهة اي بيئة النقطة هو ستة حيث كل نقطة محاطة بست نقاط متشابهة .

الاحداثيات (0, 0, 0) لاحظ شكل٥-أ

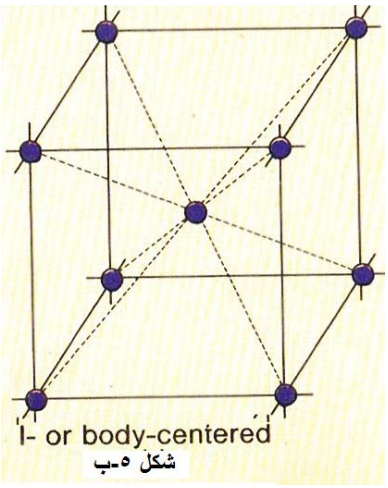


٢) خلية الوحدة الممركزة الجسم Budy center unite cell (I)

ويرمز لها بالرمز I حيث تكون من ثمان نقاط عند الزوايا اضافة الى نقطة في مركز الخلية وبذلك يكون عدد الذرات المشتركة لهذه الخلية ذرتين (2 = 1 + 1/8 x 8) حيث ذرة المركز لا يشترك معها اية خلية اخرى فتعتبر ذره واحدة اما الذرات عند الزوايا المجسمة فتعتبر ثمن ذره.

الاحداثيات (0, 0, 0) زوايا الخلية ؛ (1/2, 1/2, 1/2) عند مركز الخلية .

بيئة النقطة ١٤ حيث كل نقطة محاطة بأربعة عشر نقطة اخرى لاحظ شكل ٥-ب



٣) خلية الوحدة الممركزة الاوجه (F) : Face center unite cell

ويرمز لها بالحرف F شكل٥-ج

وهذه الخلية تملك ثمان نقاط بنية عند الزوايا المجسمة حيث كل نقطة تمثل 1/8 ثمن ذره واحداثياتها (0, 0, 0) ؛ اضافة الى وجود نقطة بنية تتوسط كل وجه من اوجه الخلية اي ان هناك ست نقاط بنية وكل نقطة عند الوجه تمثل 1/2 نصف ذرة اي تشترك مع خليتين وبذلك يكون عدد الذرات لخلية الوحدة الممركز الوجه اربع ذرات (1/2 x 6 + 1/8 x 8 = 4)

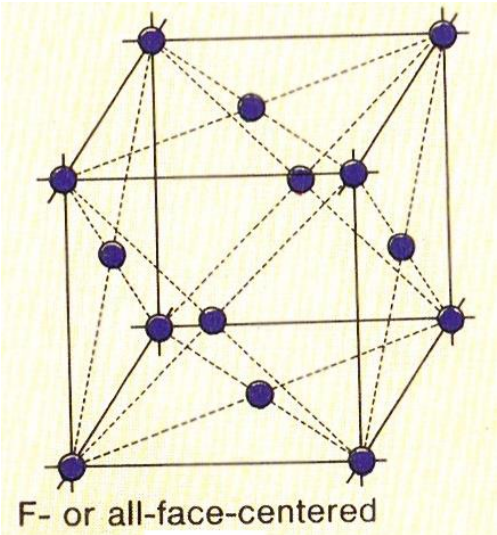
احداثيات نقاط البنية عند الاوجه تعتمد على موقع نقطة البنية في الوجه ؛

حيث الاحداثيات عند المستوي الذي يحوي(b, a) (1/2, 1/2, 0)

حيث الاحداثيات عند المستوي الذي يحوي (c, a) (1/2, 0, 1/2)

وكذلك الاحداثيات عند المستوي الذي يحوي (b, c) (0, 1/2, 1/2)

والاحداثيات عند زوايا الخلية (0, 0, 0) . اما بيئة النقطة فهي (١٨) حيث كل نقطة محاطة بثمانية عشر نقطة.



شكل ٥-ج

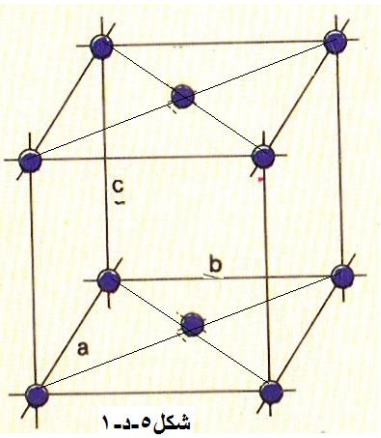
٤)خلية الوحدة الممركزة الوجهين المتقابلين: C- end center unite cell

وتكون هذه الخلية على ثلاث انواع حسب موقع نقاط البنية في الخلية ؛ حيث يرمز لها بالرمز C اذا كان موقع نقطة البنية على الوجه C شكل-٥-د-١ ؛ ويرمز للخلية بالرمز b اذا كان موقع نقطة البنية على الوجه b شكل-٥-د-٢؛ وكذا الحال يرمز للخلية بالرمز a اذا كان موقع نقاط البنية على الوجه a شكل٥-د-٣.

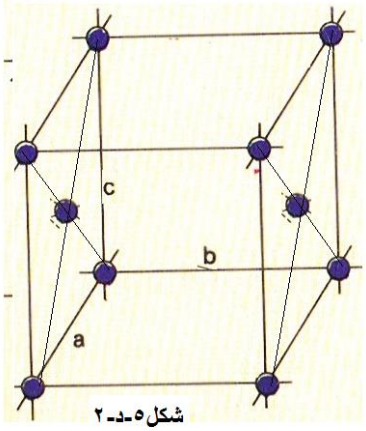
عدد الذرات لهذه الخلية هو ذرتين (1/8 x 8 + 2 x 1/2 =2) حيث تملك هذه الخلية ذرتين فقط موزعة عند الزويا وتعتبر ذره واحدة والذرة الاخرى بين مركز الوجهين .

احداثيات الذرة الاولى (0, 0, 0) واحداثيات الذرة الثانية الممركزة الوجه يعتمد على موقع الذرتين لذلك الوجه فاذا كان موقع الذرتين عند الوجه A فالاحداثيات (0, 1/2, 1/2) شكل٥-د-٣ ؛ او عند الوجة B فالاحداثيات (1/2, 0, 1/2) شكل٥-د-٢. وعندما تكون الذرات عند الوجه C فالاحداثيات(1/2, 1/2, 0) شكل٥-د-١.

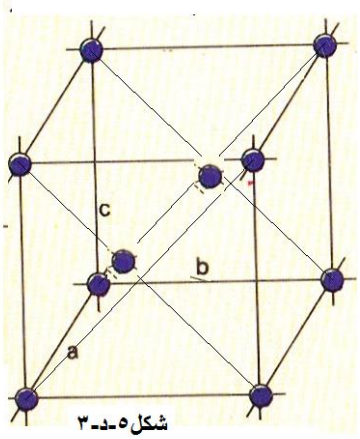
بيئة النقطة (١٠) عشرة نقاط فكل نقطة محاطة بعشر نقاط



شكل٥-د-١



شكل٥-د-٢

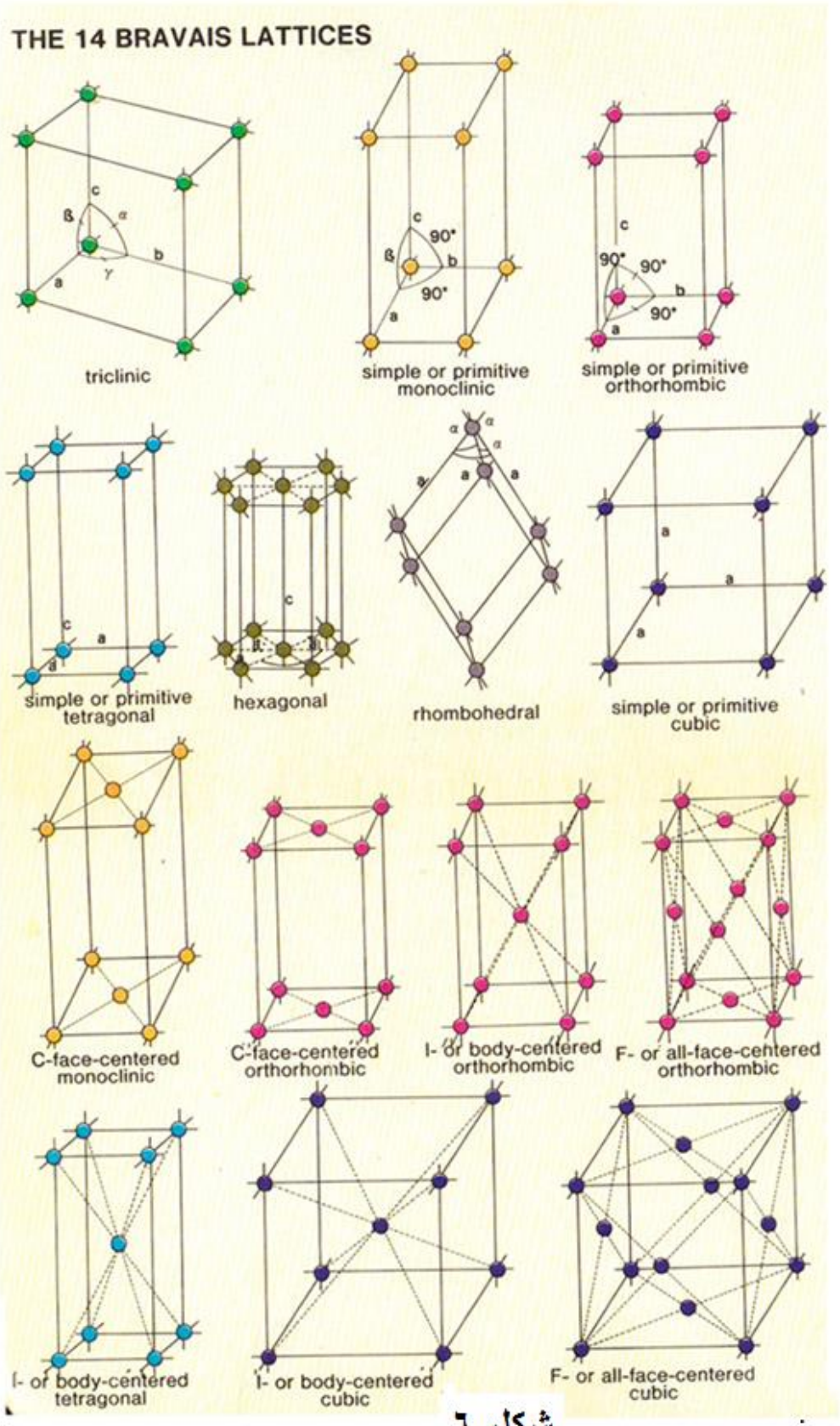


شكل٥-د-٣

توزيع خلايا برافس على الانظمة البلورية السبعة: The seven crystal and Bravais

لو تم توزيع الخلايا الاربع التي تم شرحها في الفقرة السابقة على الانظمة البلورية السبعة لكان لدينا ٢٨ بنية فراغية (٤ x ٧) لكن العالم برافس قام بتوزيع هذه الخلايا الاربع على الانظمة البلورية السبعة واصبح عددها (١٤) بنية فراغية وسميت خلايا برافس نسبة الى مكتشفها. لاحظ جدول-١ في المحاضرة.

اذا سبعة انظمة بلورية + اربع خلايا وحدة = ١٤ بنية برافس لاحظ شكل-٦

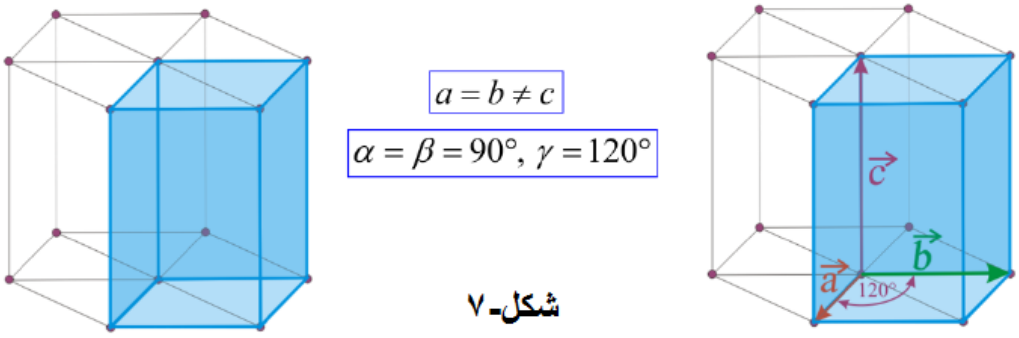


شكل-٦

من جدول رقم -١ في المحاضرة نلاحظ مايلي:

١) جميع الانظمة البلورية تحوي على خلية P .

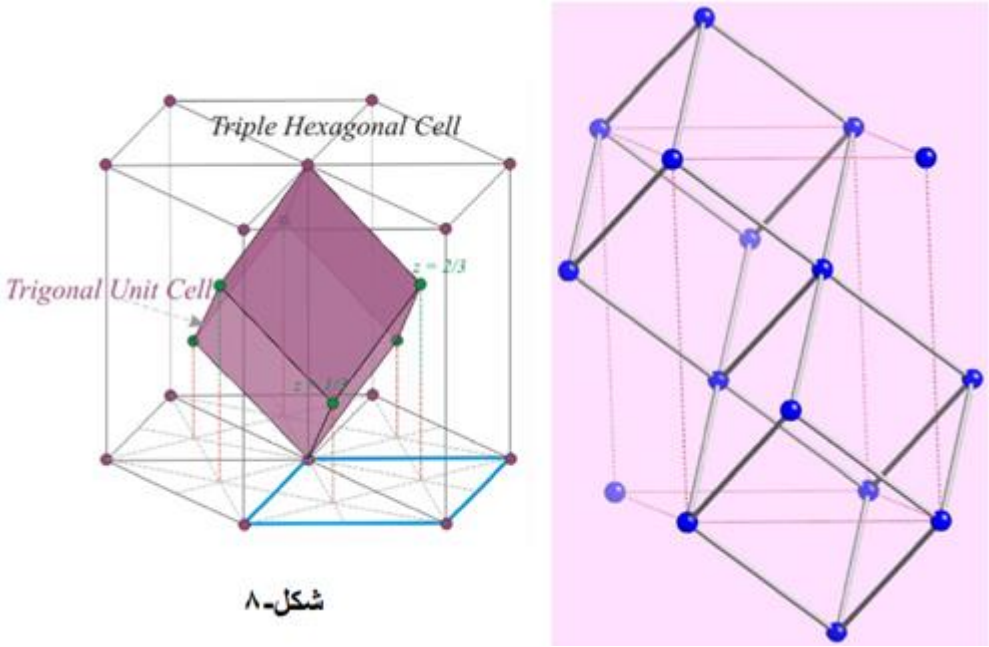
٢) في النظام السداسي خلية الوحدة p تكافئ خلية الوحدة الممركزة الوجهين المتقابلين لاحظ شكل-٧ حيث بلورة النظام السداسي من نوع C



شكل-٧

اي ممركزة الوجهين المتقابلين ، من الممكن ان تكون بلورة من النوع P اي(P = C) والسبب لا انه بقى النظام السداسي محافظا على العلاقة الزاوية بين المحاور البلورية ؛ بمعنى اخر تم استخراج خلية نوع P من خلية وحدة نوع C دون تغير في التركيب البلوري لخلية الوحدة او بقيت وحدة الخلية محافظة على شكلها.

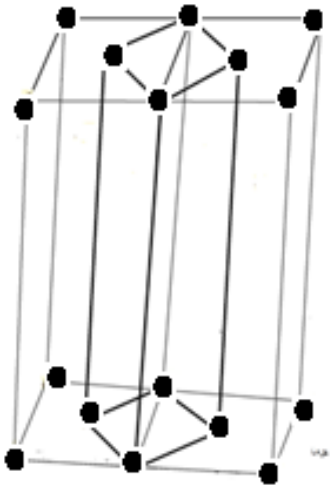
٣) في الثلاثي او معيني الاوجه فان الخلية P تكافئ R وذلك لان شكل الخلية عبارة عن معيني الاوجه لاحظ شكل-٨



شكل-٨

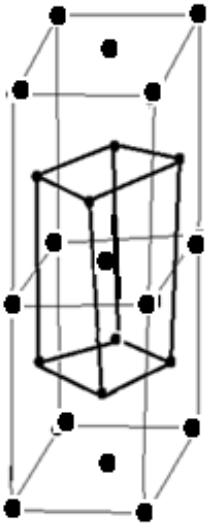
٤) لا يوجد في النظام الرباعي خلية وحدة من نوع F ونوع C ؛ وذلك كما نلاحظ في الشكل- ٩ من الممكن بناء هذه الخلايا لكنها بالنتيجة نلاحظ ان بنية C تكافئ P وتكون خلية الوحدة اصغر حجما من C. كذلك خلية الوحدة F تكافئ خلية الوحدة I

اذا (F = I) وكذلك (C = P) شكل ٩-أ؛ب.



شكل-٩-أ

C = P



شكل-٩-ب

F = I

المصادر الأجنبية

1) An Introduction Crystallography and Crystal Chemistry (Bloss)
2) An Introduction to Crystallography (Phillips)

المصادر العربية:

١) علم البلورات (د. يحيى الصايغ ، د. فيصل الكفيشي)
٢) اسس علم البلورات (د. نجاح صادق جميل)