جامعة الانبار

قسم الجيولوجيا التطبيقية

رمادي- العراق

سلام عبيد إبراهيم

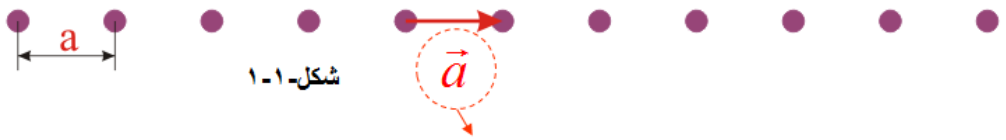
المحاضرة (9)

تناظر البنية الذرية للبلورات

تناظر البنية الذرية للبلورات: Symmetry in crystal lattice

عرفنا في المحاضرة السابقة كيفية تشكل وبناء وحدات الخلايا في تجاه واحد و اتجاهين وفي ثلاث اتجاهات 1D, 2D, 3D . الان نأخذ تناظر البنية الذريةcrystal lattice او Space Lattice في الاتجاه الواحد والاتجاهين والثلاث اتجاهات . اذا لبناء البنية الذرية في اتجاه واحد يكون التكرار لنقاط البنية في اتجاه واحد ويتميز هذا النمط بما يلي:

1) يوجد فقط نوع واحد من نقاط البنية .
2) تعرف هذه النقاط او توصف (Single lattice parameter) بمعامل بنية مفرد وهو (a) اي تتكرر النقاط في اتجاه واحد وبمسافات متكررة . لاحظ شكل-1-1
3) عناصر التناظر هو(I ≡ m = 2d). لاحظ شكل-1-2
4) وحدة الخلية لهذه البنية تكون بشكل خط مستقيم بطول وحدة a



شكل-١-١

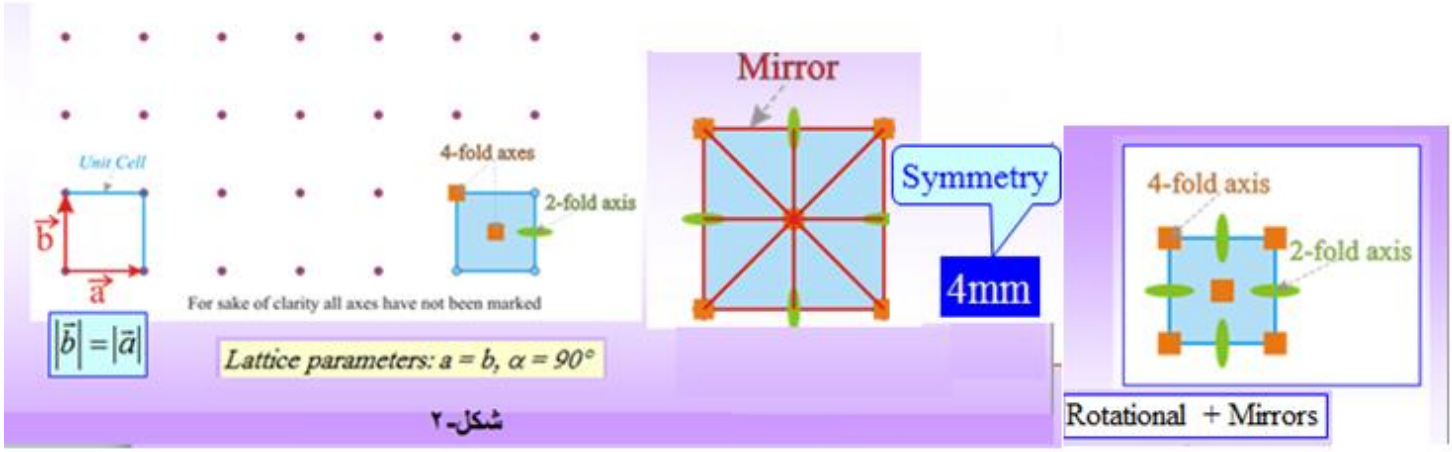
شكل١-٢

التناظر في الاتجاهين: Symmetry of 2D lattice

كما عرفنا ترتيب البنية الفضائية في اتجاهين تتشكل من خمس شبكات (الشبكة المربعة والمستطيلة والسداسية والمستطيلة الممركزة والشبكة المائلة. الان سنأخذ تناظر كل نوع من بنيات الشبكات ذات البعد الثنائي.

1)تناظر البنية الشبكية المربعة: Symmetry in Square lattice وتتميز:

أ) ونلاحظ كما في شكل-2 نلاحظ وجود محاور تناظر رباعية تكون عمودية على الشبكة حيث تتكرر نقاط البنية اربع مرات خلال الدورة الكاملة ويقع هذا المحور الرباعي عند نقاط البنية وعند مركز المربع.
ب) كذلك توجد محاور تناظر ثنائية توجد عند منتصفات المسافة بين محور b, a
ت) وجود مستويات تناظر تكون عمودية على المحاور الثنائية والرباعية ومنتصفات المحاور الرباعية والثنائية لاحظ شكل-2
ث) وبذلك يكون الرمز العام 2/m 2/m 4/m .



شكل-٢

2)تناظر البنية الشبكية المستطيلة: Symmetry in Rectangular lattice

وتتميز بشكل عام كما موضح في(شكل 3)

ا)حيث تقع نقاط البنية عند الاركان.

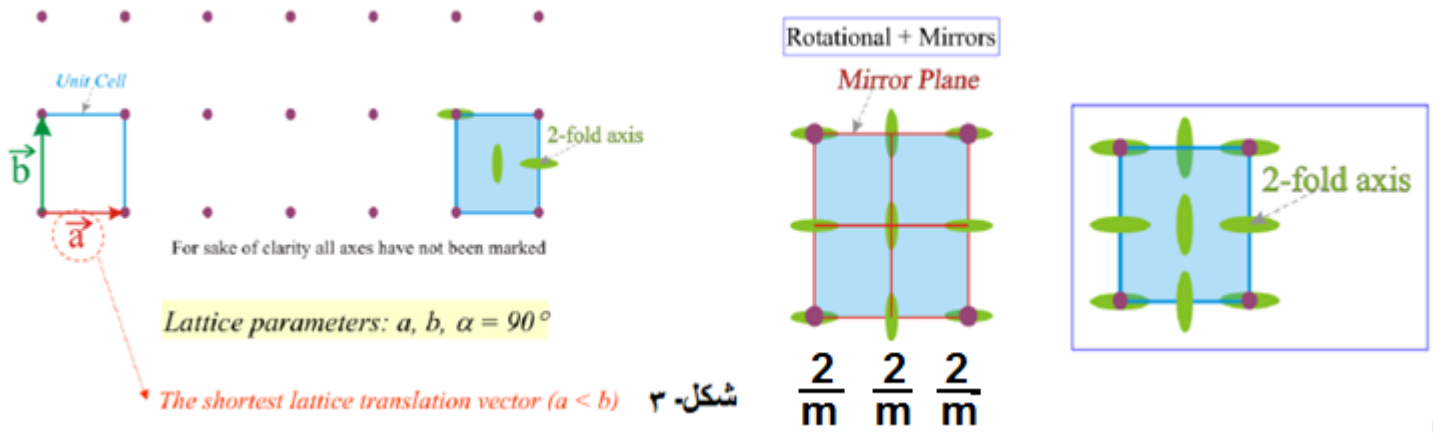
ب) كما هنالك محاور تناظر ثنائية دورانية تنطبق على نقاط البنية الواقعة عند زويا وحدة الشبكة.

ج) كما توجد محاور دورانية ثنائية تقع في منتصفات المسافة بين نقاط البنية على امتداد الاتجاه a ولاتجاه b.

د) وجميع هذه المحاور تكون عمودية على مستوى تناظر افقي موازي لمستوي الشبكة.

و) اضافة الى ذلك فان الحافات الموازية لاتجاهات (b ,a) لوحدة الشبكة والخطوط الموازية لها والتي تمر بمنتصفات المسافة بين نقطة البنية تعتبر مستويات تناظر وهي بذلك تتعامد مع محاور تناظر ثنائية بمستوى الشبكة .

ي) وبذلك يكون الرمز العام 2/m 2/m 2/m. اي (A+m)

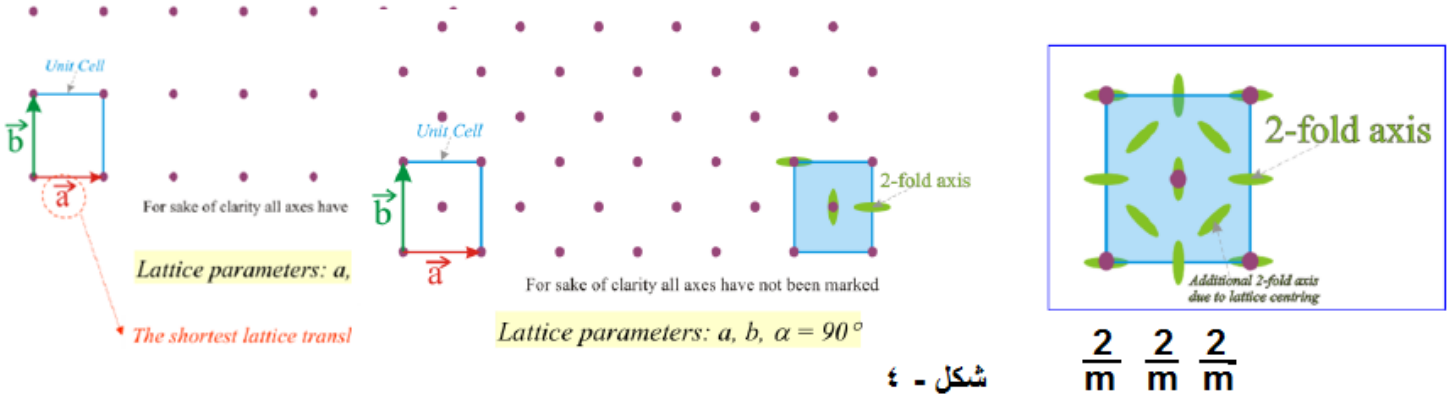


شكل- ٣

3) تناظر الشبكة الماسية او المستطيلة الممركزة(Symmetry in (Rhombic or Diamond net unite

وتتشكل نقاط البنية عند الزوايا ومركز المستطيل ويكون التناظر كما في حالة الشبكة المستطيلة اي يكون الرمز العام 2/m 2/m 2/m

لاحظ شكل-4



شكل - ٤

4) تناظر الشبكة المائلة : Symmetry in Oblique net unite(parallelogram)

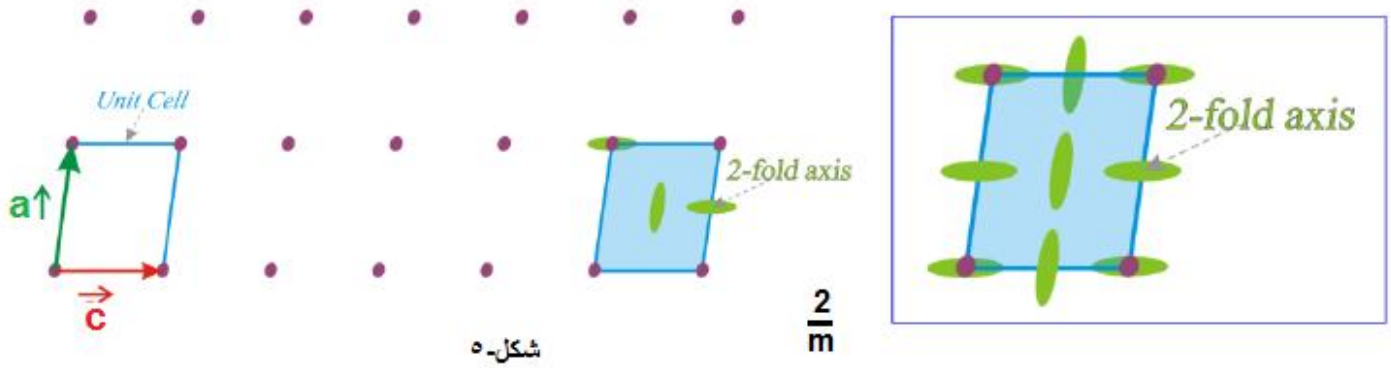
وتتميز تناظر هذه الشبكة :

1) وجود محاور تناظر ثنائية تنطبق على نقاط البنية .

2) وجود محاو ثنائية في منتصفات المسافة بين نقاط البنية.

3) وجود مستوي تناظر عمود على المحور التناظر الثنائي والذي يكون موازيا لمستوي الشبكة(سطح الورقة).

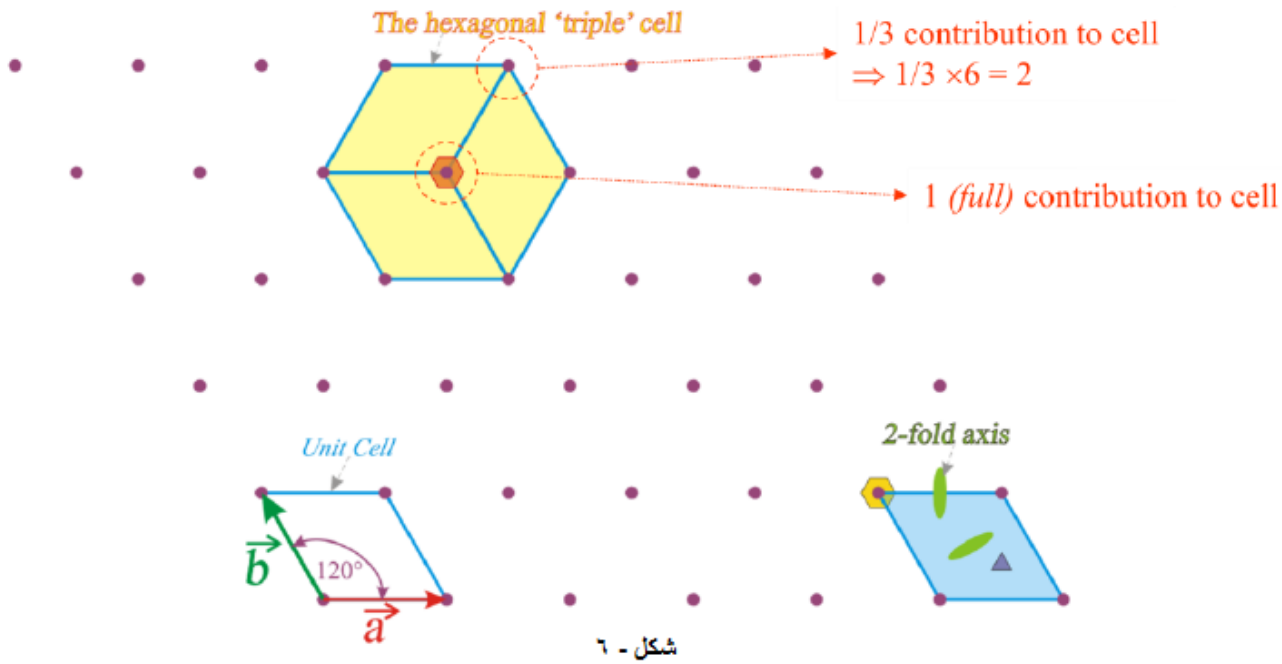
4) وبهذا يكون رمز التناظر للشبكة المائلة 2/m . لاحظ شكل-5



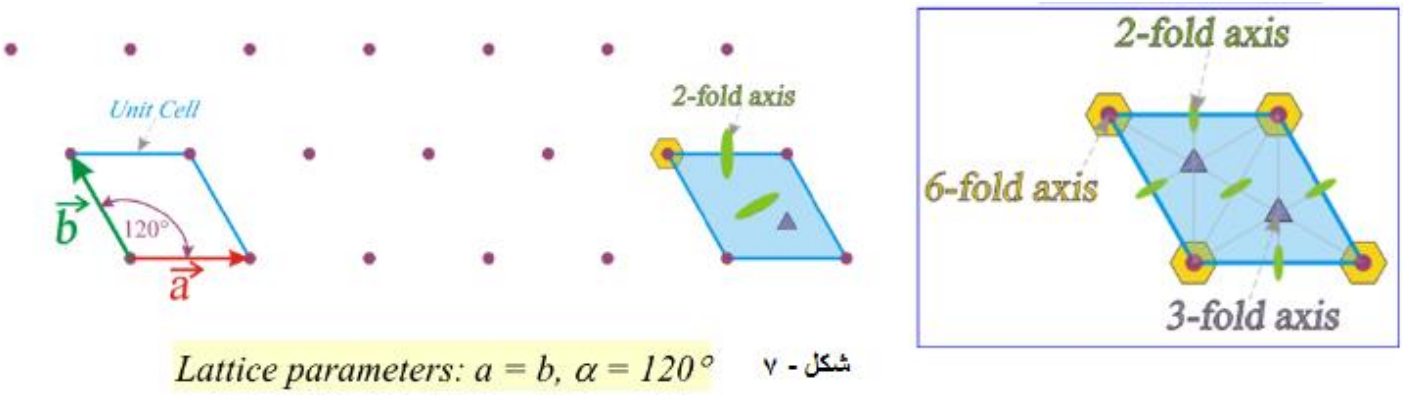
شكل-٥

5) تناظر وحدة الشبكة السداسية : Symmetry in Hexagonal or 120 Rhombic net unite

نستطيع ان نشكل وحدات خلية اخرى من دون التغير في التركيب البلوري حيث يمكن ان نشتق من وحدة الشبكة السداسية (شكل6) Hexagonal net unite وحدة شبكة معينية Rhombic net unite وبدون تنغير في الشكل البلوري للشبكة السداسية شكل-7



شكل - ٦



شكل - ٧

تمتاز تناظر الشبكة السداسية كما نلاحظ شكل-7 وشكل -6 :

1) تظهر وحدة الشبكة المعينية من التكرار 120° بين محور (b ,a)
2) نلاحظ وجود محاور تتناظر سداسية وثلاثية وثنائية.
3) حيث نلاحظ وجود محاور تناظر سداسية عند نقاط البنية شكل-6 .
4) عند منتصفات المسافة بين نقاط البنية توجد محاور تناظر ثنائية عمودية على وحدة الشبكة. شكل6؛ وشكل 7 .
5) مراكز المثلثات تعتبر محاور تناظر ثلاثية والتي تربط كل ثلاث من نقاط البنية (لاحظ الجهة اليمنى من شكل7).
6) وجود مستويات تناظر على اطوال المحاور ضمن وحدات التكرار التي يرمز لها(a1, a2, a3)
7) اضافة الى وجود مستويات تناظر تعمل زاوية مقدارها 30° بين المحاور .
8) لذا يكون التناظر لهذه الوحدة الشبكية 6/m 2/m 2/m .

لاحظ جدول – 1 يوضح التناظر(Symmetry) للوحدات الشبكية الثنائية البعد (2D- Lattice) وشكل وحدات الخلايا (UC) ومعاملات كل شبكة (Lattice Parameters).

Lattice	Symmetry	Shape of UC	Lattice Parameters
1. Square	4mm	1. Square	($a = b$, $\alpha = 90°$)
2. Rectangle	2mm	2. Rectangle	($a \neq b$, $\alpha = 90°$)
3. Centred Rectangle	2mm	"	($a \neq b$, $\alpha = 90°$)
4. 120° Rhombus	6mm	3. 120° Rhombus	($a = b$, $\alpha = 120°$)
5. Parallelogram	2	4. Parallelogram	($a \neq b$, α general value)

جدول-١

المجاميع الفضائية المائتان والثلاثون : The 230 space group

عرفنا المجاميع النقطية pointe group والمتشكلة من 32 صنف بلوري والناتجة من الانظمة البلورية السبعة مع عناصر التناظر الداخلة عليها من عناصر التناظر اللاازاحية وتشمل (A, $\bar{A}$, I, m) وعرفنا تناظر ومميزات كل صنف مع الرسم المسقط الستريوغرافي.

عندما نأتي الى البنية الذرية crystal lattice وتم دراسة البنية الذرية في اتجاه واحد وفي اتجاهين ولاحظنا تشكل الشبكة المربعة، والمستطيلة، والمستطيلة الممركزة، والسداسية والشبكة المائلة؛ هذه الشبكات لاحظناها في بعدين . وعند بناء هذه الشبكات الثنائية البعد في ثلاث ابعاد والتي نتج عنها خلايا الوحدة unite cells والمؤلفة من اربع انواع من الخلايا وهي (P, I , F, C) وعرفنا مميزات كل وحدة خلية من عدد الذرات الداخلة في الخلية واحداثيات الخلية وبيئة البنية لكل خلية.

وعرفنا ان هذه الانواع الاربعة من خلايا الوحدة تشكل 14 وحدة خلية موزعة على الانظمة البلورية السبعة والتي سميت بخلايا برافس. وكذلك تطرقنا الى التناظر للوحدات الاحادية والثنائية البعد.
الان نتعرف على المجاميع الفضائية (230) وهذه ناتجة من البنية الذرية للبلورة والمتشكلة من خلايا برافس وعناصر التناظر اللاازاحية (A, $\bar{A}$, I, m) وعناصر التناظر الازاحية والتي تشمل :

1) محور التناظر الانتقالي : Translation (T)
2) مستوي تناظر انعكاس – انتقال : Glide plan or (Reflection -Translation).
3) محور حلزوني دوران – انتقال : Screw axes or (Rotation – Translation).

اذا هذه العناصر التناظر الازاحية وخصوصا عنصر التناظر الثاني والثالث تمثل عناصر تناظر مركبة من مستوي انعكاس وانتقال (m - T)وكذلك محور دوران وانتقال(R - T) والتي توجد في البنية الذرية الفضائية والتي تسمى الاشكال اللانهائية.

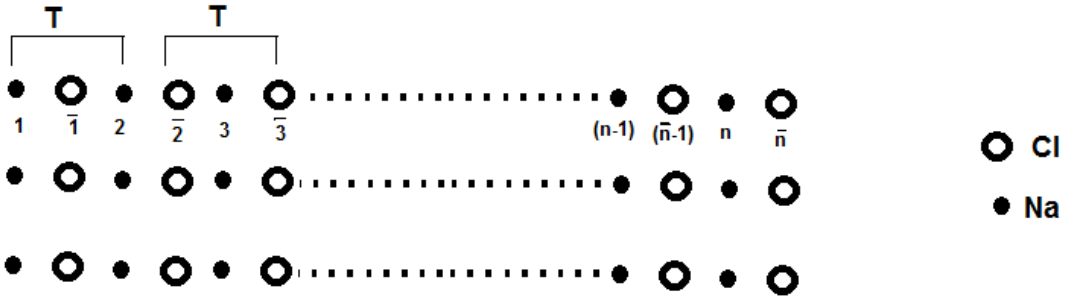
اذا هذه العناصر المركبة اضافة الى محور التناظر الانتقالي T والتي اسميناها بعناصر التناظر الازاحية (T, R-T, m-T) وعناصر التناظر اللاازاحية (A, $\bar{A}$, I, m) مع وجود 14 خلية برافس الموزعة على سبعة انظمة بلورية مجاميع فضائية (Space groups) وعددها 230 مجموعة فضائية.

عناصر التناظر الازاحية:

الان يجب ان نوضح ونفهم عناصر التناظر الازاحية (T, R-T, m-T) :

1) محور التناظر الانتقالي : (T) Translation

قد نرى بساطة في دراسة محور التناظر الانتقالي لكنه مهم جدا وهو اساس بناء البنية الذرية وهو عبارة عن ذلك الاتجاه في البنية الذرية (اللانهائي) الذي اذا ما انتقلت نقاط البنية على طول هذا المتجه مسافة معينة لحلت كل نقطة بنية محل نفسها(شكل-8)



شكل-٨

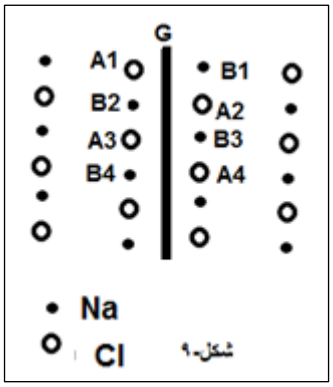
نلاحظ من الشكل ذرة الصوديوم Na وذرة الكلور Cl حيث ذرة الصوديوم رقم 1 حلت محل نفسها على طول هذا المحور عند موقع 2، وموقع 3 وكذلك ذرة الكلور رقم $\bar{1}$ حلت في $\bar{2}$ ، $\bar{3}$ لمسافة ثابتة ومحددة ومتساوية حيث الى ان نصل الى n من ذرات الصوديوم و $\bar{n}$ من ذرات الكلور ؛ ونتيجة لذلك تحل الشبكة البلورية محل نفسها وان اتجاه (n-1) هو اتجاه محور التناظر الانتقالي .

ان اصغر مسافة يجب ان ينتقلها الشكل اللانهائي او الشبكة البلورية على محور التناظر الانتقالي كما يحل الشكل محل نفسه تدعى بمسافة الانتقال او خطوة الانتقال او وحدة التكرار(Translation step or repeat unite).

فمسافة الانتقال هنا في الشكل اعلاه(T) هي المسافة بين ذرة الصوديوم (1, 2) او بين ذرة الكلور ($\bar{1}$, $\bar{2}$) . يرمز لمحور التناظر الانتقالي (T) دون اضافة ارقام الى يمين الرمز نظرا لعدم وجود درجات او مراتب لهذا المحور.

2) مستوي الانزلاق : Glide plan :

او مستوي الانعكاس – الانتقال(m-T) ويمثل مستوى تناظر انعكاس- انزلاق او انزياح (Sliding – Reflection) وهو عنصر تناظر مركب يوجد في البنية الذرية اللانهائية وناتج من عمليتي تناظر انعكاس ثم انتقال.



شكل-٩

من(شكل -9) نلاحظ وجود ايونات الصوديوم والكلور متعاقبة مع بعضها حيث باستخدام هذا المستوي المركب (Glide plan) يمكن احلال ايونات الصوديوم محل بعضها البعض وكذلك الامر بالنسبة لأيونات الكلور . اي يمكن احلال الشبكة محل نفسها وحسب الخطوات التالية:

عندما نمرر مستويا كما في الشكل-9 (مستوي G) حيث نلاحظ ذرة الكلور Cl و بالرمز A1 فأنها تنعكس عبر المستوي لتحل محل B1 ولكن يتم انتقال A1 بعد انعكاسها الى A2 بصورة موازية للمستوي ((Gفي اتجاه (B1- B3) وعلى مسافة تساوي T وهي مسافه او خطوة انتقال (Translation step). وكذلك الحال للنقطة B1 وهي ايون الصوديوم تنعكس عند A1 ثم تنتقل بمسافة T عند B2 ، وهكذا يمكن احلال النقطة A2 محل النقطة A3 وكذلك الحال بالنسبة لذرة الصوديوم يمكن احلال (B3, B2, B1....) محل بعضها البعض وبذلك تأخذ الشبكة البلورية مواقع مماثلة للوضع الاول اي تحل كل نقطة بنية محل نفسها من خلال هذا المستوي الذي يسمى بمستوي الانزلاق ويعرف هذا المستوي على انه : المستوي الذي يوجد ضمن الاشكال اللانهائية (اي البنية الذرية) الذي اذا ما انعكست فيه نقاط الشكل وانتقلت موازية له لمسافة معينة فان الشكل يحل محل نفسه.

تنقسم مستويات الانزلاق على اساس طبيعة الانزلاق وعلاقة بالمحاور البلورية الى الانواع التالية:

اولا) مستويات انزلاق محورية Axial Glides:

وهي تكون مستويات انزلاقها موازية لمحور بلوري وتساوي (1/2) نصف وحدة تكرار على طول المحور البلوري ويعطى لها العلاقة (a, c, b)حيث تكون مسافة الانزلاق (1/2a ، 1/2b ، 1/2c) .

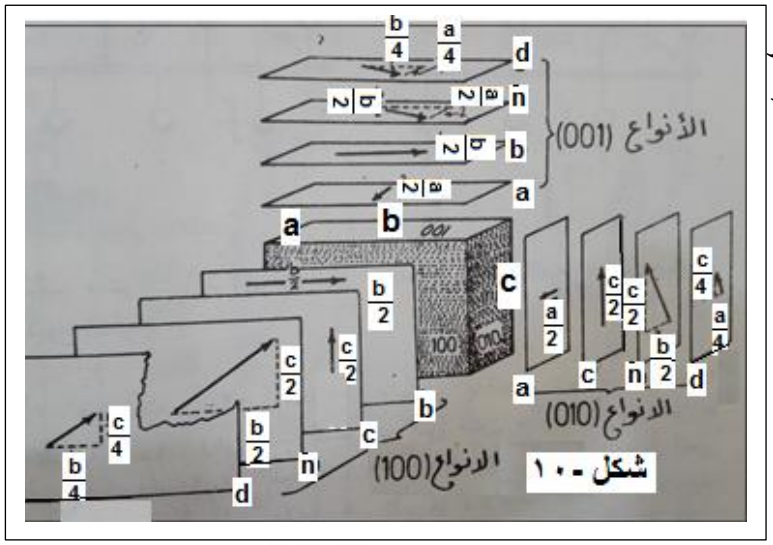
ثانيا)مستويات انزلاق قطرية Diagonal Glides (n):

ويكون الرمز العام لها (n) وهذه المستويات تكون فيها مكونات الانزلاق عبارة عن مجموع المتجهات (Vectors Sum) أي اثنين من

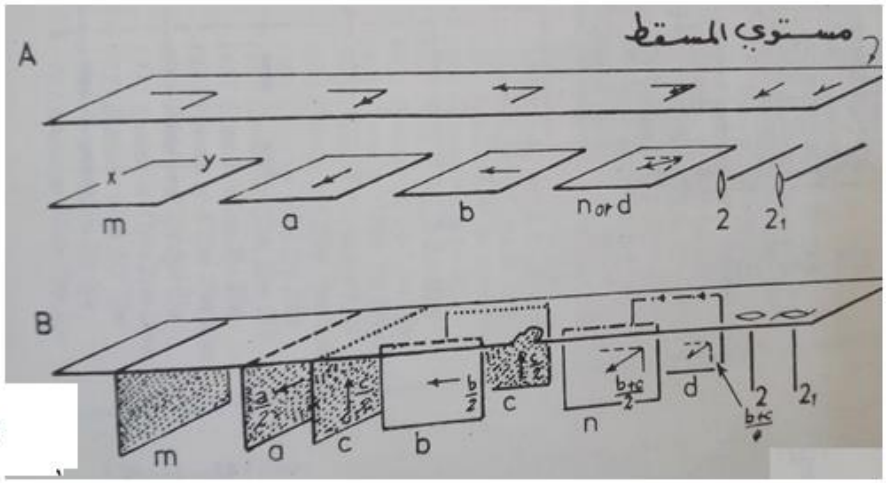
المتجهات اي باتجاه وحدتين تكرار (a/2+b/2 or a/2+c/2 or b/2+c/2).

ثالثا) مستويات انزلاق ماسية Diamond Glides (d) :

ويكون الرمز العام لها (d) وهذه المستويات تكون فيها مكونات الانزلاق عبارة عن مجموع المتجهات (Vectors Sum) أي اثنين من المتجهات بمقدار(1/4) وحدة تكرار(1/4c, 1/4b, 1/4a) وتكون مقدار اتجاه الازاحة (1/4a+1/4b+1/4c) او ((1/4a+1/4b)او (1/4a+1/4c) او(1/4b+1/4c) . نلاحظ شكل-10 يوضح انواع مستويات الانزلاق مع رموزها لبلوره تابعة للنظام المعيني القائم.

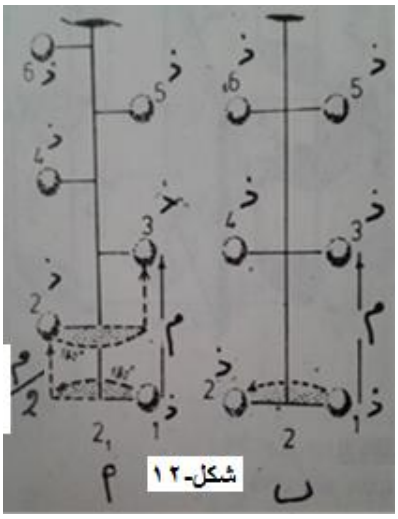


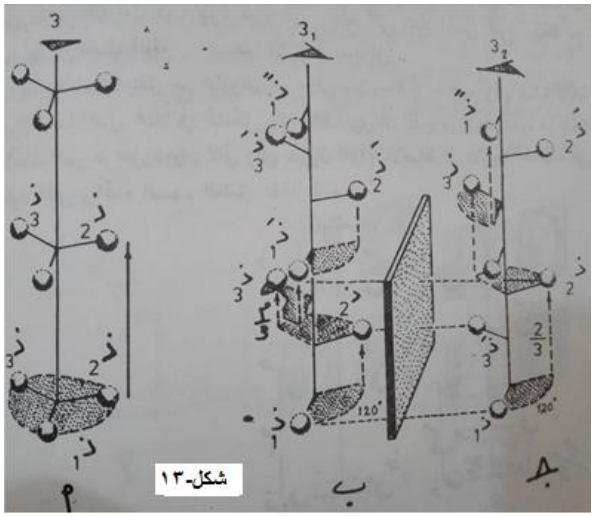
كما نلاحظ شكل-11 الرموز المستخدمة لمستويات التناظر الاعتيادية m والمستويات الزاحفة (a,b,c,n.d)ومحاور التناظر الاعتيادية(الثنائي 2) والمحاور الحلزونية(2_1) عند مستوي التناظر الموازي(001) لاحظ شكل(A-11)، في حين شكل(B -11)فيمثل عمليات التناظر الاخرى والعمودية على المستوي(001)



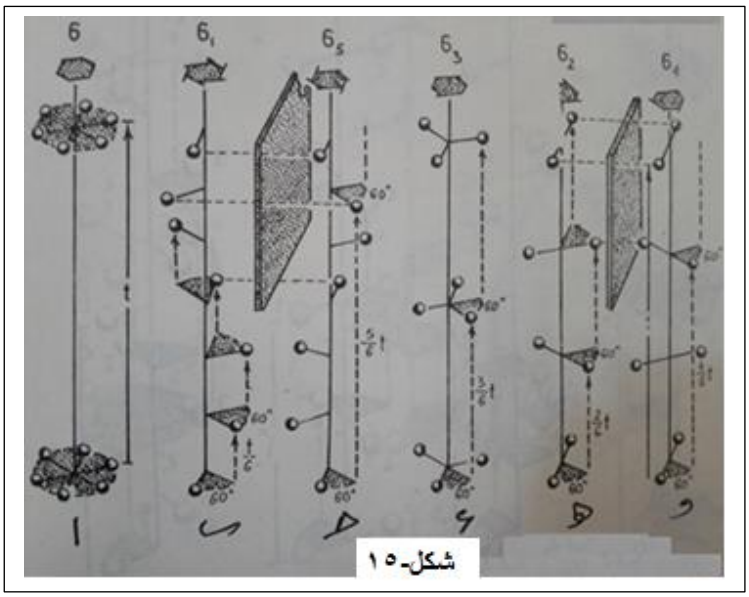
شكل-١١

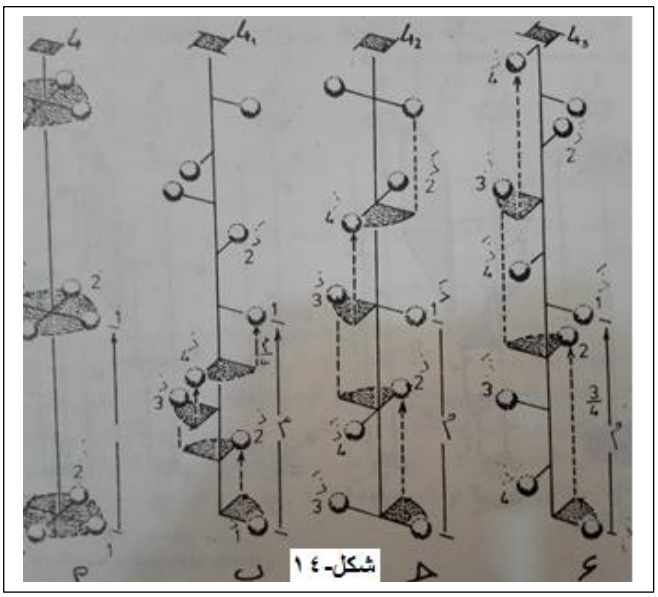
3)المحاور الحلزونية Screw axis: وينتج هذا المحور من تألف محور دوران مع ازاحة اي هو محور مركب من دوران مع ازاحة (Rotation + Translation) موازية لمحور الدوران بمقدار يساوي جزء من وحدة التكرار بين نقاط البنية. او بتعريف اخر المحور الحلزوني عبارة عن ذلك المستقيم في الشكل اللانهائي الذي اذا ما حصل ودارت نقطة بنية حوله بزاوية معينة وانتقل لمسافة معينه بالتوازي معه لحل الشكل محل نفسه. ويكون المحور الحلزوني اما ثنائي او ثلاثي او رباعي او سداسي، ويكون في المحور الثنائي مثلا دوران 180° ثم انتقال مسافة على طول المحور بمقدار 1/2 نصف وحدة تكرار لاحظ شكل- 12





وكذلك الحال بالنسبة لمحاور الدوران الحلزونية الثلاثية والرباعية والسداسية لاحظ الاشكال(13، 14 ، 15) على التوالي. حيث يكون في محور الدوران الثلاثي الحلزوني ويكون بشكل نوعين وهما 3_1 ، 3_2 يتضمنان ازاحة مساوية بمقدار1/3 لكنهما يختلفان في اتجاه الدوران شكل-13 وكذلك الحال للمحور الدوران الحلزوني الرباعي ويكون من نوع 4_1 ، 4_2، 4_3 لاحظ شكل -14والسداسي 6_2 6_1، 6_3، 6_4، 6_5 . وبذلك يكون اتجاه الدوران اما يميني right- handed مع اتجاه عقرب الساعة اقل من 1/2. او يكون اتجاه يساري Left-handed مع اتجاه عكس عقرب الساعة اكبر من 1/2. وذلك اعتمادا على قيمة النسبة بين الرمز السفلي على الرمز الاساس. فاذا كان حاصل تقسيم الرمز السفلي(مقدار الازاحة) الى الرمز الاساس(رتبة محور الدوران) اقل من 1/2 فيكون المحور الحلزوني يميني (مع عقرب الساعة). اما اذا كانت النسبة (الرمز السفلي على الاساس) اكبر من 1/2 فيكون المحور الحلزوني يساري (عكس عقرب الساعة). على سبيل المثال المحور الحلزوني 4_1 هو محور يميني وذلك حاصل قسمة الرقم السفلي(مقدار الازاحة) الى الرمز العلوي (رتبة دوران المحور) تساوي 1/4 وهي اقل من 1/2 وعليه فالمحور يميني ، اما رمز المحور الحلزوني 3_2 فتكون النسبة بين الرقم السفلي الى الرمز العلوي 2/3 اي اكبر من 1/2 لذا يكون المحور من نوع يساري لاحظ شكل 13، 14، 15 .





ان اهمية المحور الحلزوني اليميني واليساري هو انه في كل البلورات المختلفة والعائدة لنفس المادة والتي لها بنية شبكية واحدة فتملك اما محور حلزوني يميني او محور حلزوني يساري وهذا الاختلاف في نوع المحور يميني او يساري ينعكس على الصفات الفيزياوية (كدوران مستوى الاستقطاب وكذلك لوضعية الوجوه المتماثلة.

شرح بعض الرموز المجاميع الفضائية: ان معرفة او اشتقاق بعض الرموز الفضائية حيث يتكون الرمز للمجموعة الفضائية لاي معدن او بلورة من الرمز الخاص بنوع بنية برافس اةلا اي احد الرموز (F, I, C, B, A, P او R) يليه من اليسار الى اليمين التناظر العالمي (هرمان – موجن) للصنف البلوري التابع له المعدن مع الاخذ بنظر الاعتباروجود المحاور الحلزونية و/او مستويات الانزلاق.

امثلة: p432 يشير هذا الرمز للمجموعة الفضائية Space group ويدل المجموعة النقطية بنية ابتدائية او خلية وحدة نوع P ولها ثلاث محاور تناظر رباعية واربع محاور تناظر ثلاثية وست محاور ثنائية التناظر وهذا الصنف (432) هو الصنف الجايرودي (Gyroidal) التابع لنظام المكعب.

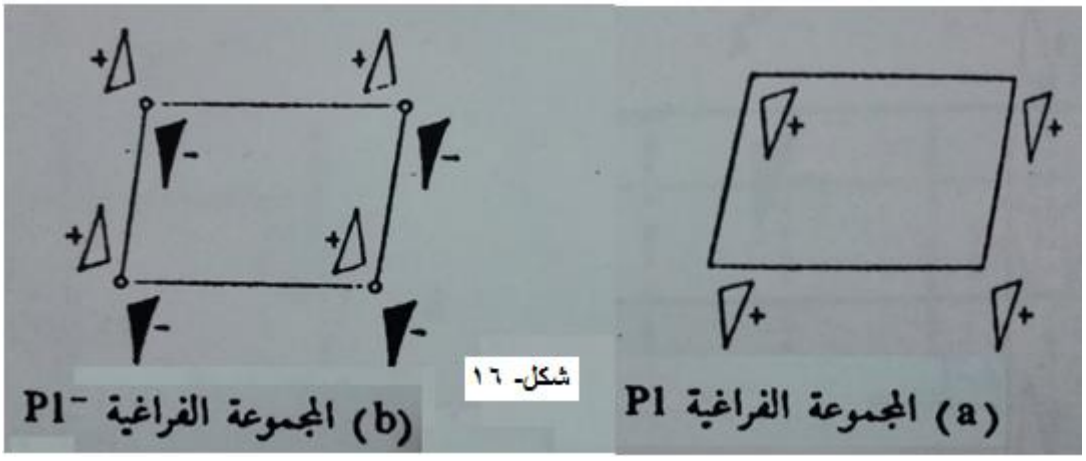
مثال/2 الرمز $Cmc2_1$

1)يمثل هذا الرمز النظام المعيني القائم. 2)حيث يدل على وجود وحدة خلية ممركزة الوجه عند المحور البلوري C او الوجه (001)

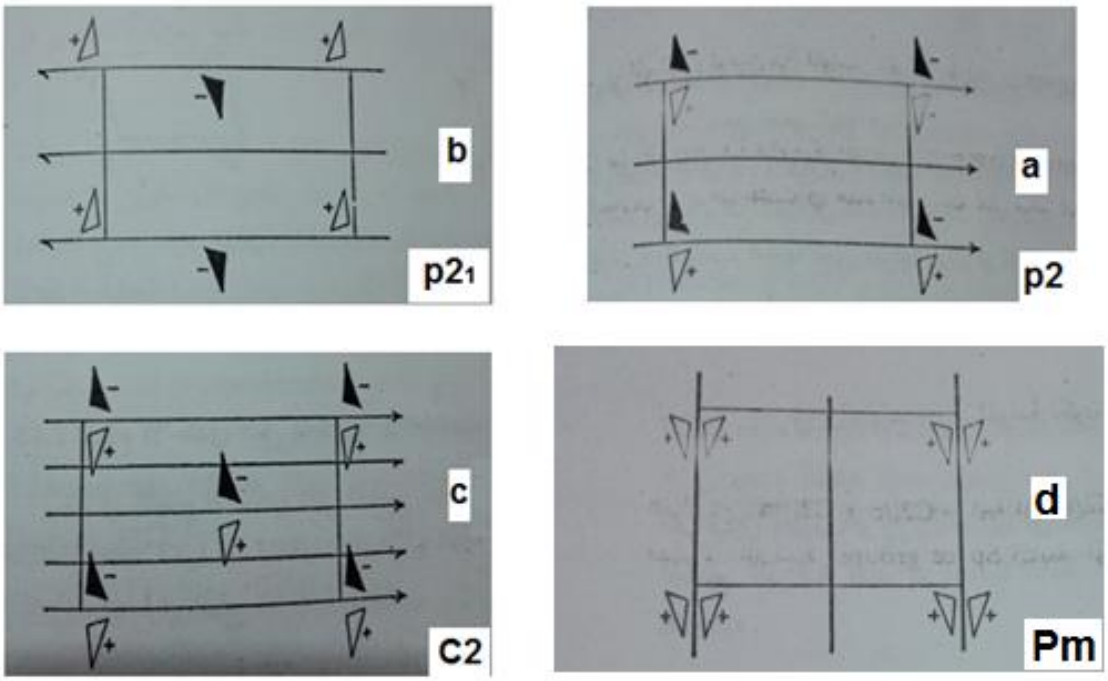
3) وجود مستوى تناظر (m) موازيا للوجه (100) محور a. 4) وجود مستوي انزلاق موزيا(010) محور b مع ازاحة C/2 (نصف C)

5) وجود محور حلزوني 2_1 يتضمن دورا 180° حول المحور البلوري C مع ازاحة مقدارها 1/2 بموازة المحور C 6) وبذلك ينتج الصنف البلوري mm2 او الصنف Rhombic- Pyramidal لنظام المعني القائم.

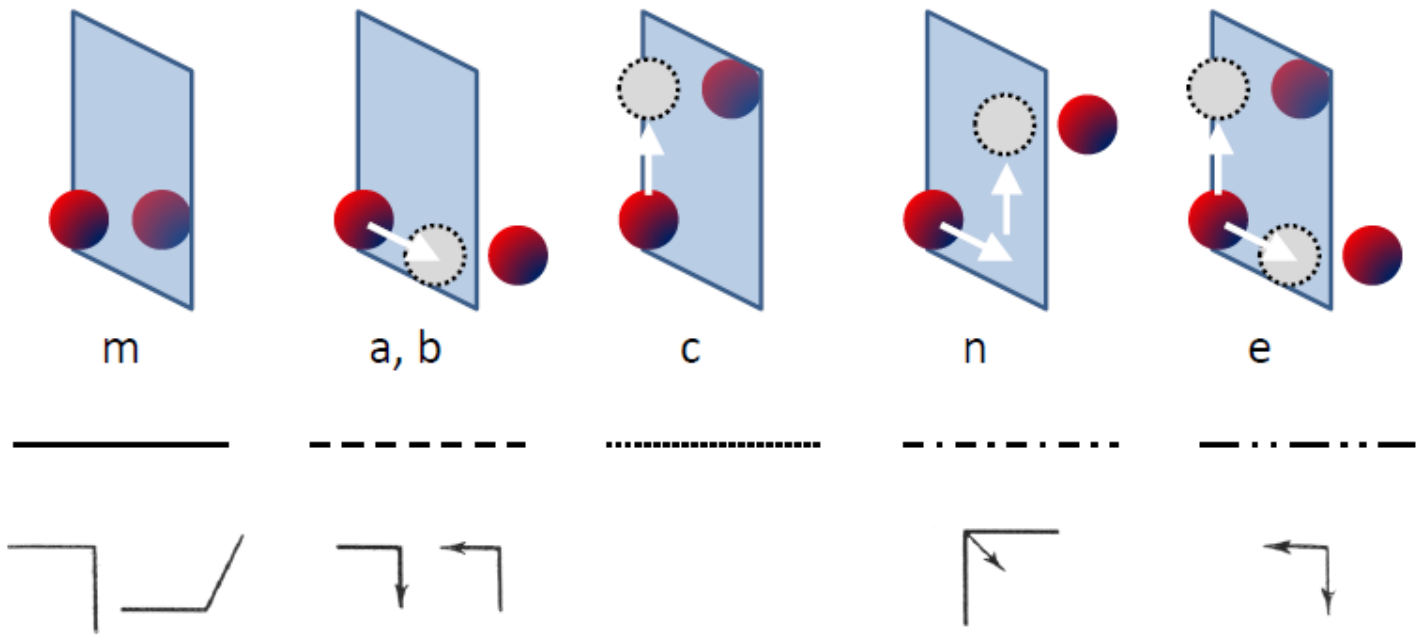
المجاميع الفضائية 230 : The 230 space group: اذا من تالف عناصر التناظر المختلفة اللاازاحية (A, A^{-} , m, i) وبضمنها كذلك عناصر التناظر الازاحية(المحاورر الحلزونية ومستوبات الانزلاق) مع خلايا برافس الاربعة عشر ينتج لدينا 230 مجموعة فضائية.



شكل-16 يمثل المجموعة الفضائية لنظام ثلاثي الميل (P1)a , (P1¯)b

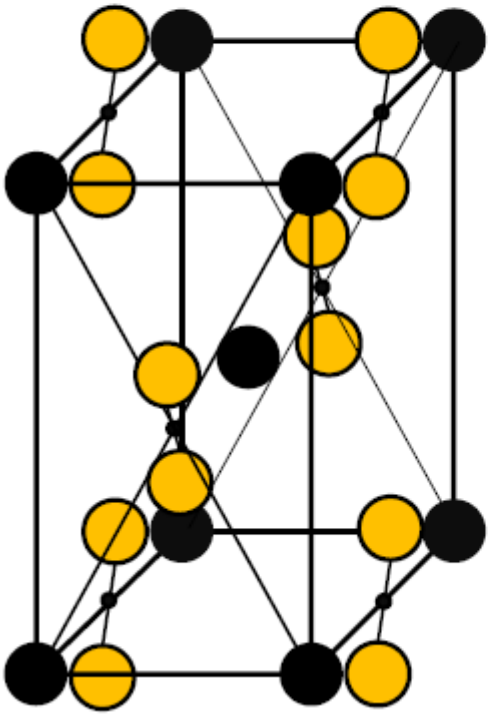


شكل-17 يمثل المجاميع الفضائية لنظام احادي الميل a(P2), b (P2₁) , C (C2) , d(Pm)

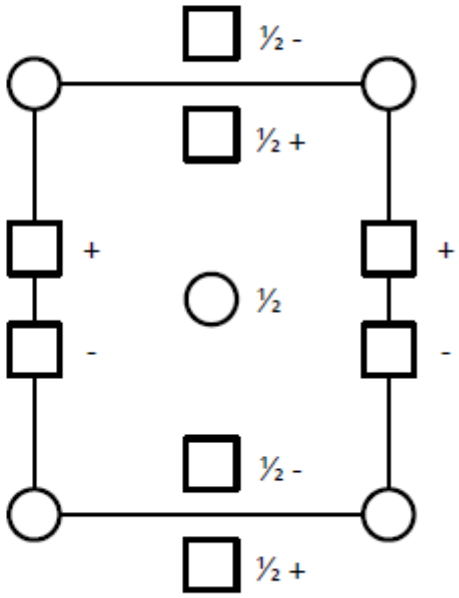

m
a, b
c
n
e

Example for a space group

- Marcasite (FeS_2)



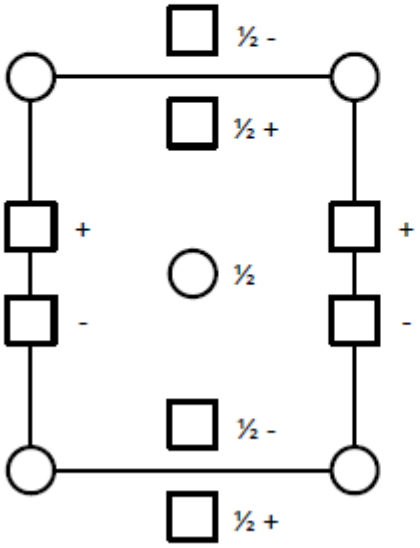
Projection onto basal plane

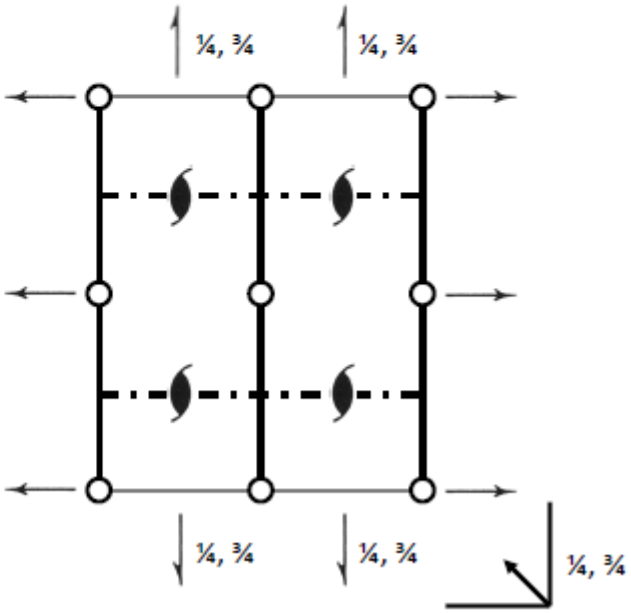


Example for a space group

- Marcasite (FeS_2)

Space group: $P\,\frac{2_1}{n}\,\frac{2}{m}\,\frac{2_1}{n}$





Relationship between the 230 Space groups and the 32 Crystal classes (Point groups):

- **A point group implies that one point within the lattice remains fixed.**
- **Point groups are defined on the basis of all possible combinations of the elements of symmetry**
- **there are 32 possible combinations.**
- **Space groups are defined by the combination of elements of symmetry, glide planes and screw axes, along with a definition of the space (Bravais) lattice (P, A, B, C, I, F, …etc.)**
- **Space groups and point groups of the same system have to be isogonal.**
- **The point group can therefore be derived from the space group by eliminating the lattice type, screw axes, and glide planes.**
- **You can figure out the crystal system easily from its point group or space group. Simply eliminate the space lattice symbol, replace every screw axis by its isogonal regular axis of symmetry, and replace every glide plane by the symbol "m" for the mirror. Now you have the point group (crystal class)!**

المصادر الأجنبية

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

المصادر العربية:

1) علم البلورات (د. يحيى الصايغ ، د. فيصل الكفيشي)
2) اسس علم البلورات (د. نجاح صادق جميل)