المتجه الانتقالي هنا هو $\vec{T} = 5\vec{a} + \vec{b}$ والذي يربط اي نقطة شبيكة في خلية الوحدة $ABCD$ مع النقطة الشبيكية المكافئة لها في خلية اخرى $\acute{A}\acute{B}\acute{C}\acute{D}$.

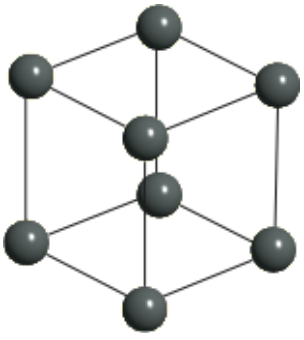
وحدة الخلية Unit Cell: تسمى مساحة متوازي الاضلاع (الجزء المضلل في الشكل اعلاه) الذي له جوانب عبارة عن متجهات الاساس a و b (او الشكل المجسم في الابعاد الثلاثة a,b,c كما في الشكل المكعب في ص١٦) بـ خلية الوحدة او وحدة الخلية او وحدة البناء البلوري. وهي اصغر شكل هندسي يمكن بتكراره الحصول على الشبيكة البلورية.

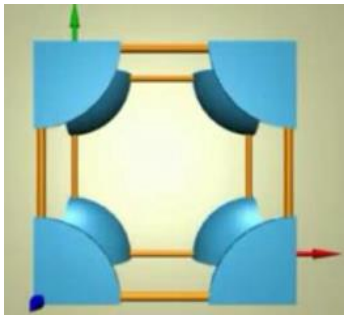
حجم وحدة الخلية بدلالة المتجهات الأساسية (بثلاثة ابعاد) هو: $V = \left|(\vec{a} \times \vec{b}).\vec{c}\right| = \left|(\vec{b} \times \vec{c}).\vec{a}\right| = \left|(\vec{c} \times \vec{a}).\vec{b}\right|$

واذا كانت الشبيكة مستوية فان وحدة الخلية ببعدين فتمثل بسطح مساحته: $S = \left|\vec{a} \times \vec{b}\right|$

يمكن اختيار اتجاهات واطوال المحاور بحيث تتفق مع اتجاهات واطوال الخلية (a,b,c) وعندها تسمى (a,b,c) بالمحاور البلورية و تسمى الزوايا α,β,γ بين هذه المحاور بالزوايا بين الوجوه/الاوجه. الزاوية α محصورة بين المحورين b,c (المستوي YZ) و الزاوية β محصورة بين المحورين a,c (المستوي XZ) و الزاوية γ محصورة بين المحورين a,b (المستوي XY). ولذلك تسمى المحاور البلورية a,b,c و زوايا الاوجه α,β,γ بمعاملات الشبيكة لوحدة الخلية حيث من خلالها يمكن معرفة الشكل الهندسي للخلية وحساب حجمها و سطحها.

الخلية البدائية *Primitive Cell*: هي الخلية التي تحتوي على ثمان ذرات في أركانها. وبما ان في الخلية البدائية كل ذرة مشتركة بين ثمان خلايا (في ثلاث ابعاد) لذا فكل ذرة سوف تعطي حصتها (والتي تساوي $\frac{1}{8}$) لكل خلية. وبذلك تحتوي الخلية البدائية على نقطة شبيكية واحدة $\left(8_{atoms\ in\ corners} \times \frac{1}{8} = 1\right)$.





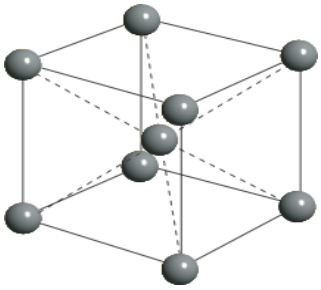
الخلية غير البدائية Non-Primitive Cells:

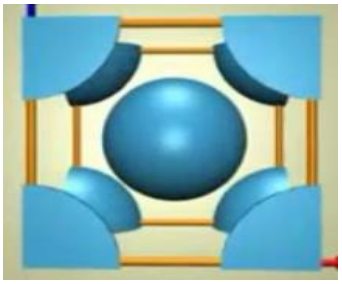
تحتوي مثلا ذرة في مركز الخلية او في متوسط سطوحها إضافة الى ذرات أركانها وهكذا فان هناك اكثر من نقطة شبيكية واحدة في خلية الوحدة للخلية غير البدائية. **وتكون الخلية غير البدائية في الابعاد الثلاثة على ثلاثة أنواع:**

١-خلية متمركزة الجسم Body-Centered Cell

ويرمز لها بالحرف (I) ويحوي هذا النوع من الخلايا على نقطة شبيكية واحدة في مركز الخلية بالاضافة الى وجود نقطة شبيكية عند كل نقطة ركنية مشتركة بين ثمان خلايا مجاورة. اذن كل خلية متمركزة الجسم تحتوي على نقطتين شبيكيتين $\left(8_{atoms\ in\ corners} \times \frac{1}{8} + 1_{center} = 2\right)$.

متمركز الجسم

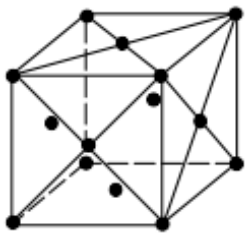




٢- خلية متمركزة الأوجه Face-Centered Cell

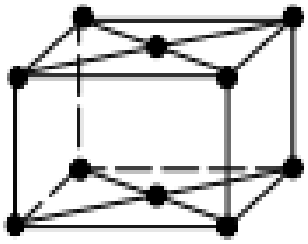
يرمز لهذه الخلية بالحرف **(F)** ويحوي هذا النوع من الخلايا بالإضافة الى وجود نقطة شبيكية عند كل نقطة ركنية مشتركة مع ثمانية خلايا مجاورة على نقطة شبيكية عند مركز كل وجه من الأوجه الستة لمتوازي السطوح. وحيث ان كل وجه يكون مشترك بين خليتين متلاصقتين فان نصف $\frac{1}{2}$ النقطة يتبع الخلية الواحدة بالتالي تسهم النقاط الواقعة عند مركز كل وجه بما يساوي 3 ثلاث نقاط شبيكية $(6 \times \frac{1}{2}=3)$، اذن تحتوي كل خلية متمركزة الأوجه على 4 نقاط شبيكية. $\left(8_{atoms\ in\ corners} \times \frac{1}{8} + 6_{face} \times \frac{1}{2} = 4\right)$

متمركز الاوجه



٣-خلية متمركزة الوجهين Base-Centered Cell

يرمز لهذه الخلية بالحرف (**C**) ويحوي هذا النوع من الخلايا بالإضافة الى وجود نقطة شبيكية عند كل نقطة ركنية مشتركة مع ثمانية خلايا مجاورة على نقطة شبيكية عند مركز وجهين متقابلين منها، وحيث ان كل وجه يكون مشترك بين خليتين متلاصقتين فان نصف $\frac{1}{2}$ النقطة يتبع الخلية الواحدة ، بالتالي تسهم النقطتين الواقعتين عند مركز الوجهين المتقابلين بما يساوي نقطة شبيكية واحدة $(2 \times \frac{1}{2}=1)$، اذن كل خلية متمركزة الوجهين المتقابلين تحتوي على نقطتين شبيكيتين.$\left(8_{\,in\ corners} \times \frac{1}{8} + 2_{face} \times \frac{1}{2} = 2\right)$



متمركز الوجهين المتقابلين

خلية ويكنر – سيتز Wigner Seitz Primitive Cell

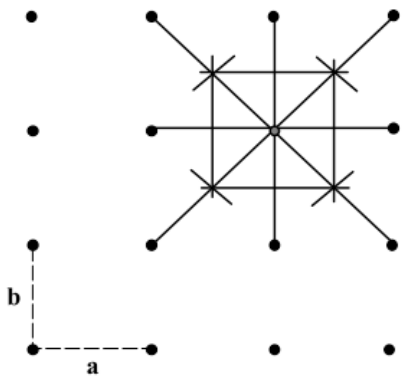
هناك طريقة أخرى لاختيار الخلية البدائية وتعرّف بأسم مكتشف هذه الطريقة وهي خلية ويكنر– سيتز. حيث انه اقترح طريقة بسيطة يمكن بواسطتها اختيار وحدة الخلية، وذلك باجراء الخطوات التالية:

١-نرسم نقاط الشبيكة البرافيزية.

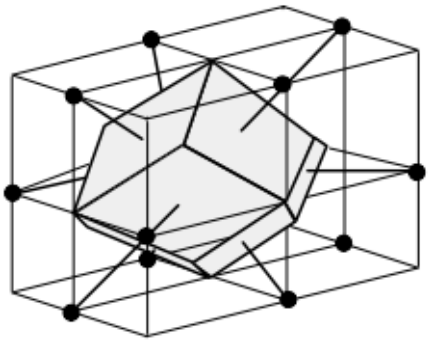
٢-نختار نقطة معينة من نقاط الشبيكة، نرسم خطوطا من هذه النقطة لتوصيلها بالنقاط المجاورة لها.

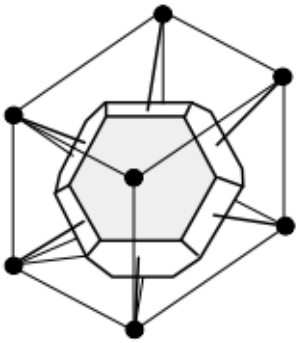
٣-نرسم خطوط عمودية و تمر بمنصفات الخطوط المرسومة في الخطوة السابقة.

٤-فنحصل على خلية ويكنر-سيتز، وهي اصغر مساحة ناتجة (في حالة البعدين) او اصغر حجم ناتج (في الابعاد الثلاثة) من التقاطعات المستحصلة اعلاه.



خلية ويكنر – سيتز في بعدين، a=b





خلية ويكنر–سيتز في الابعاد الثلاثة

مكعب متمركز الجسم BCC مكعب متمركز الاوجه FCC

عمليات التناظر Symmetry Operations:

ان البناء البلوري الشبكي مصمم ليخضع الى عمليات انتقال او دوران او تناظر تعيده الى وضعه الاصلي. وقد تطرقنا الى موضوع الانتقال من خلال المتجه T: $\vec{T} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}$

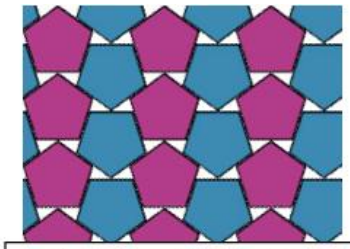
الا ان الانتقال (الانسحاب) قد يرافقه عمليات اخرى مثل عملية الدوران Rotation Operation وعملية الانعكاس Reflection Operator و عملية الانقلاب Inversion Operation. وكذلك يمكن تطبيق كافة هذه العمليات في آنٍ واحد على احدى العقد البلورية. فيما يلي عرض عن هذه العمليات:

١–عمليات التناظر الدوراني Rotated Symmetry Operations : و تتم بدوران الشبيكة البلورية حول محور يمر من احدى النقاط الشبيكية، ويتطلب معرفة عدد المرات التي تدورها البلورة لكي تنطبق على نفسها مجددا (تعود الى الوضع الاصلي قبل الدوران).

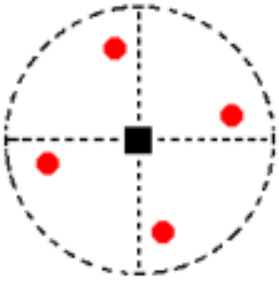
عدد مرات الانطباق بعد الدوران n يسمى بـ عدد الثنيات (الطيات) number of folds او رتبة التناظر او رتبة المحور. فاذا كان هناك انطباق واحد فيكون محورها من الدرجة الاولى، واذا كان هناك انطباقين فيكون المحور من الدرجة الثانية، وهكذا .....

اذا كانت الشبيكة دورية لا نهائية فانها تفتقد محاور الدرجة الخامسة والسابعة لعدم امكانية تكرار الوضع الاصلي بهذا العدد من الدورات (n=5,7) بسبب ترك فراغات فيما بين العقد البلورية وبذلك تفقد الصفة الدورية للتركيب البلوري.

تعطى الزاوية θ المناظرة لعدد الطيات بالعلاقة $\frac{2\pi}{n}$ و $n=1,2,3,4,6$. فمثلا عندما تكون n=3 فان البلورة تمتلك ثلاث انطباقات، اي ان زاوية الدوران $(\theta = \frac{360^o}{3} = 120^o)$ كما في حالة المثلث متساوي الساقين.

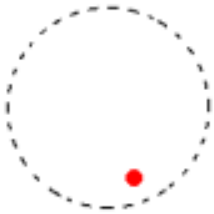


شبكه خماسية لا تمتلك تناظر دورانى

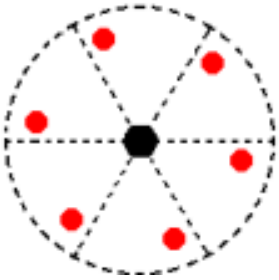


$n = 4 \rightarrow \theta = 90^o$

4

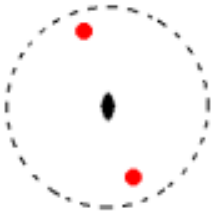


1 $n = 1 \rightarrow \theta = 360^o$

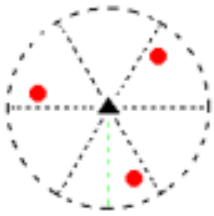


$n = 6 \rightarrow \theta = 60^o$

6



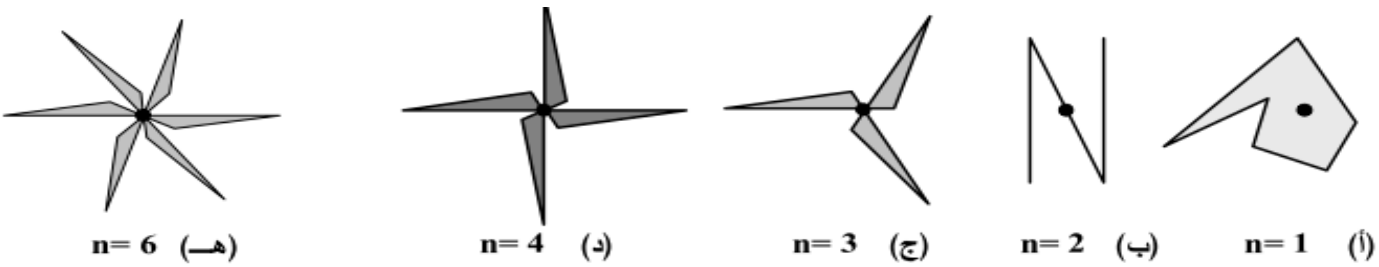
2 $n = 2 \rightarrow \theta = 180^o$



3 $n = 3 \rightarrow \theta = 120^o$

التناظر الدوراني: عدد الطيات و درجة الحور وزاوية الدوران

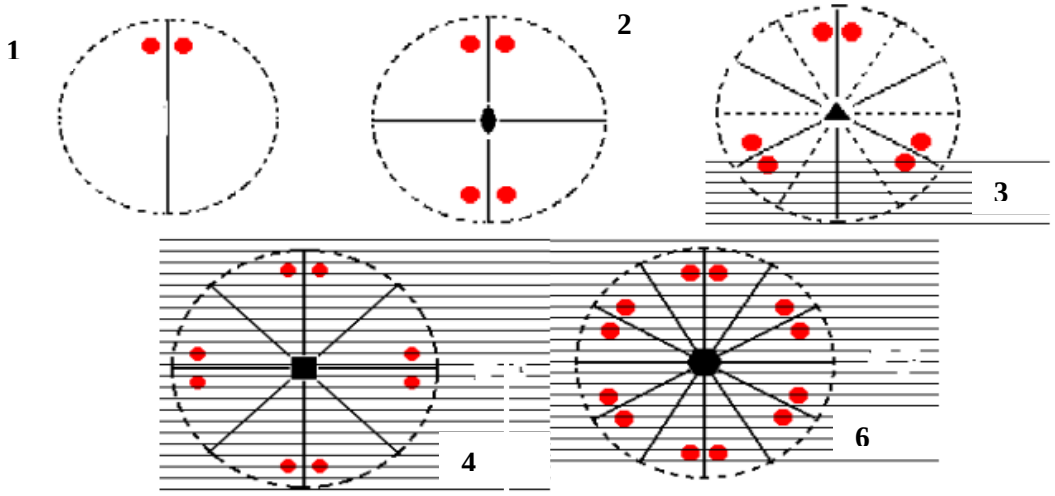
محور التناظر: عبارة عن مستقيم اذا ما دار الشكل حوله بزاوية معينة حل الشكل محل نفسه.



n= 6 (هـ) n= 4 (د) n= 3 (ج) n= 2 (ب) n= 1 (أ)

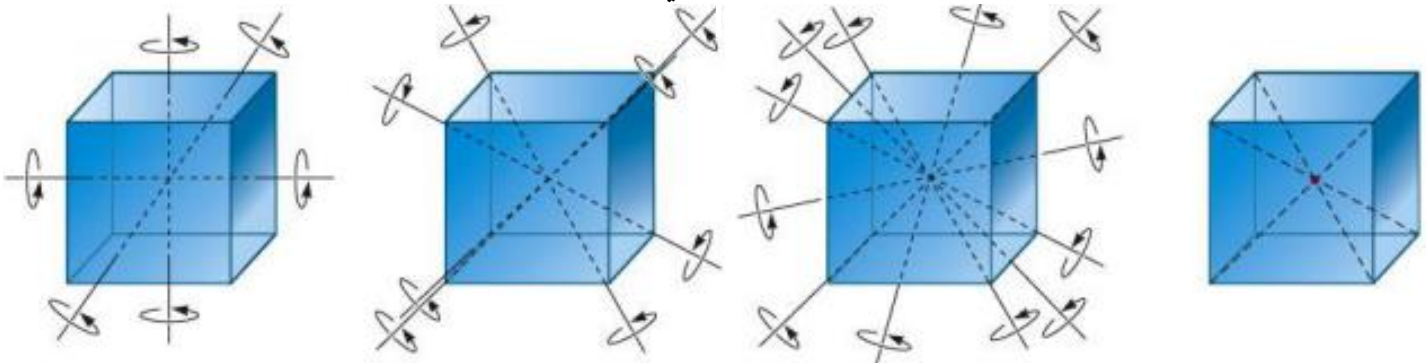
٢-عمليات التناظر الانعكاسي Reflected Symmetry Operations: وهي عملية تناظر بالنسبة لمستوٍ يمر بعقدة واحدة من عقد الشبيكة البلورية، ويرمز لهذه العملية بالرمز m نسبة الى المرآة mirror. وغالبا ما يسمى المستوى بـ مستوى المرآة mirror plane. هذا النوع من التناظر يصح فقط للشبيكة الدورية التي تعيد نفسها بعد الانعكاس من ذلك المستوى.

واذا حصل تناظر انعكاسي بالنسبة لمستوى عمودي على المستوى الاول فاننا نرمز لهذا النوع بالرمز mm ويلاحظ انه عندما تكون رتبة التناظر n عددا فرديا فان الشكل الهندسي لا يمتلك التناظر الانعكاسي، وعندما تكون n عددا زوجيا فهناك دوماً مجموعتان من المستويات الانعكاسية. وكما موضح بالشكل التالي:



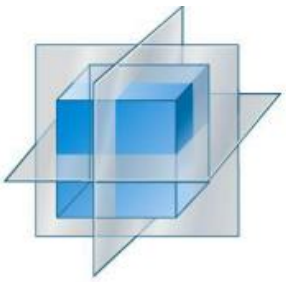
التناظر الانعكاسي و مستويات التناظر و رموزها

تعتبر الشبكات البلورية المكعبة من ابسط الشبكات و هي ايضا تمتلك عناصر التناظر التالية:



مركز انعكاس — ستة محاور من الدرجة٢ — اربعة محاور من الدرجة٣ — ثلاثة محاور من الدرجة٤

٤محاور من الاركان و٢من وجهين يعيد نفسه بعد دورتين — ٤محاور من الاركان فقط يعيد نفسه بعد ٣ دورات — ٣محاور من ٣ وجوه يعيد نفسه بعد ٤دورات

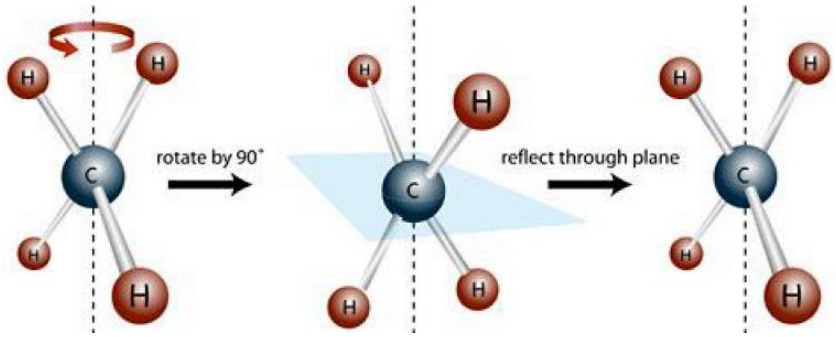


ثلاث مستويات تناظر موازية لوجوه المكعب

ستة مستويات للتناظر باتجاه اقطار المكعب

يسمى مجموع التناظر الدوراني والانعكاسي Roto-reflection بالزمرة النقطية للشبكة (lattice point group) وهي مجموعة عمليات التناظر التي إذا طبقت على إحدى عقد الشبكة البلورية لم تتغير .

والدوران والانعكاس يستلزم خطوتين الأولى دوران الجسم زاوية $(360/n)°$ حول محور التناظر ثم يعقب ذلك الانعكاس بالنسبة لمستو متعامد مع المحور(المحور عنصر تناظر في هذه العملية) ويرمز للعملية عادة بالرمز S انظر الشكل



٣-عمليات التناظر الانقلابي Inversion Symmetry Operations: و تتم هذه العملية باخذ نقطة جسمية من جهة واحدة من المستوى العمودي على مركز الخلية، ونجد نقطة في الطرف الاخر من المستوى بحيث تكون هذه النقطة مناظرة للنقطة الاولى. (للتوضيح اكثر انظر الاشكال في الملخص التالي):

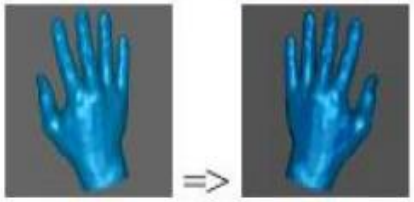
symmetry operations

موجز ماسبق

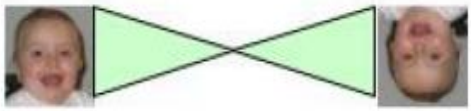
1 - Identity التطابق

2 - n-Fold Rotations
دوران بمرتبة نونية

3 - Reflection انعكاس

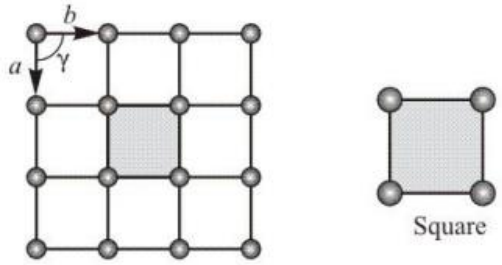


4 - Inversion انقلاب



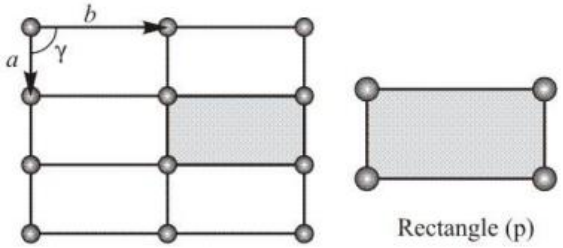
انواع الشبيكة في بعدين:

توجد خمسة أشكال للشبيكة في بعدين وذلك حسب: اطوال المتجهين البدائيين للشبيكة المستوية، والزاوية المحصورة بينهما.



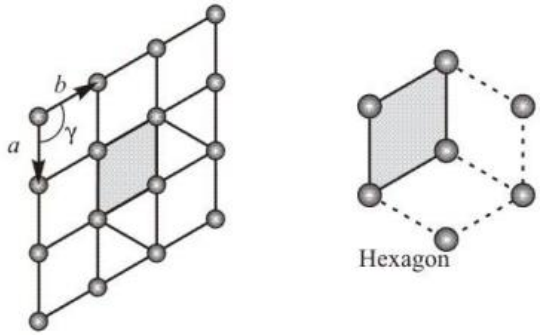
١- الشبيكة البدائية المربعة square lattice

$|\vec{a}| = |\vec{b}|$ $\gamma = 90$



٢- الشبيكة المستطيل البدائي Rectangle lattice (P)

$|\vec{a}| \neq |\vec{b}|$ $\gamma = 90$

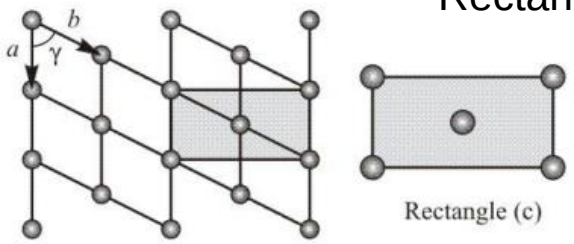


٣-الشبيكة البدائية السداسية Hexagonal lattice

$|\vec{a}| = |\vec{b}|$ $\gamma = 120$

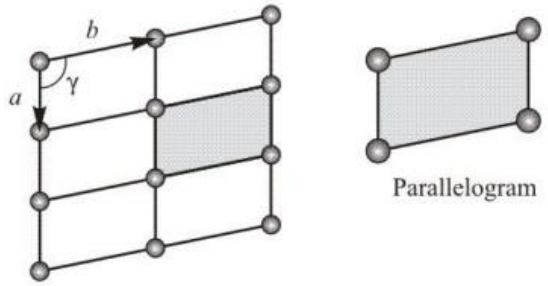
٤-الشبيكة المستطيل المتمركز الجسم Rectangle lattice (C)

$$|\vec{a}| \neq |\vec{b}| \qquad \gamma = 90$$



٥-الشبيكة متوازي الاضلاع المائلة oblique lattice

$$|\vec{a}| \neq |\vec{b}| \qquad \gamma \neq 90$$



<u>انواع الشبيكة في الابعاد الثلاثة:</u>

يتميز الشكل الخارجي لبلورات المواد بالسطوح المستوية الملساء والتي تسمى اوجه البلورة. ويختلف مظهر بلورات المواد المختلفة باختلاف اشكال الاوجه او باختلاف الزوايا بين الاوجه (اختلاف التماثل). المظهر الخارجي للبلورة يعكس طبيعة التركيب الداخلي لها (اشكال وحدات البناء الداخلية التي تتكون منها البلورة).

تمكن العالم برافيه عام ١٨٤٨ من ادخال مفهوم الشبيكة الى علم البلورات لتسهيل دراسة التركيب البلوري للمواد الصلبة. وقد تمكن من تصميم 14 شبيكة فقط تصف التراكيب البلورية لجميع المواد الصلبة مصنفةً في مجموعات رئيسية تسمى بالانظمة. يأتي هذا العدد الصغير (14 شبيكة) بسبب محدودية عدد حالات التماثل الانتقالي في الشبيكة، فمثلا، يستحيل بناء شبيكة ذات خلية بدائية خماسية الشكل (لان الشكل الخماسي لا يحقق صفة الدورية والانتظام وكما موضح في مسبقا).

في تشكيل ثنائي الابعاد نجد ان متطلبات التماثل تحدّد عدد الشبيكات الممكن بنائها و التي هي خمسة فقط (كما موضح في الفقرة السابقة n=1,2,3,4,6). بينما في الابعاد الثلاثة يبلغ عدد الشبيكات البرافيزية 14 شبيكة فقط. ويبلغ عدد الشبيكات غير البرافيزية 230 شبيكة. حيث تمتلك كل شبيكة برافيزية خلية بدائية (وحدة خلية) عبارة عن متوازي مستطيلات ابعاده هي متجهات الاساس a,b,c وله الزوايا α, β, γ وكما موضح في الجدول التالي:

الفصيلة	الخصائص	عدد الأنواع	النوع	الرمز	خصائص عناصر التماثل
فصيلة المكعبى Cubic	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	ثلاثة	مكعبي البسيط، SC مكعبي م. الجسم، BCC مكعبي م. الأوجه، FCC	P I F	أربعة محاور دوران ثلاثية الرتبة
فصيلة الرباعي القائم Tetragonal	$a=b\neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	نوعان	رباعي بسيط رباعي م. الجسم	P I	محور دوران ثلاثي الرتبة
فصيلة المستطيل القائم Orthorhombic	$a\neq b\neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	أربعة أنواع	مستطيل قائم بسيط مستطيل قائم م. الجسم مستطيل قائم م. الأوجه مستطيل قائم م. القاعدتين	P I F B	ثلاثة محاور دوران ثنائية الرتبة
فصيلة الثلاثي Trigonal	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma\neq90^\circ$	نوع واحد	خلية أولية	-	محور دوران ثلاثي الرتبة
فصيلة أحادى الميل Monoclinic	$a\neq b\neq c$ $\alpha=\beta=90^\circ\neq\gamma$	نوعان	أحادى الميل البسيط أحادى الميل م. القاعدتين	-	محور دوران ثنائي الرتبة
فصيلة ثلاثي الميل Triclinic	$a\neq b\neq c$ $\alpha\neq\beta\neq\gamma\neq90^\circ$	نوع واحد	ثلاثي الميل البسيط	-	لا يوجد
فصيلة السداسي Hexagonal	$a=b\neq c$ $\alpha=\beta=90^\circ$ & $\gamma=120^\circ$	نوع واحد	السداسي البسيط	-	محور دوران ثلاثي الرتبة