$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{x^2} + \frac{1}{y^2} + \frac{1}{z^2}}}$$

وحيث أن المسافات المقطوعة x و y و z ترتبط بأدلة ميلر h و k و l بالعلاقة،

$$h = n\frac{a}{x},\ k = n\frac{b}{y},\ l = n\frac{c}{z}$$

حيث n هو عامل مشترك يستخدم لاختزال الأدلة الى اصغر اعداد ممكنة وليكن n=1 . و a, b, c هي ابعاد الخلية.

$$x = \frac{a}{h}, y = \frac{b}{k}, z = \frac{c}{l}$$

بالتعويض بمعادلة حساب d_{hkl} أعلاه نحصل على:

$$\boldsymbol{d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}}}\ , and\ for\ cubic\ cell\ a = b = c\ , \boldsymbol{d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}}$$

ومن هذه المعادلة يمكن حساب المسافة بين المستويات بعد معرفة ادلة ميلر وابعاد البلورة.

مثال: احسب المسافة البينية في البلورة المكعبة للمستويات: (511) ,(333) ، وناقش النتيجة.

الحل: نفرض طول ضلع المكعب a $(a=b=c)$ ونستخدم العلاقة اعلاه،

$$d_{333} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{a^2} + \frac{l^2}{a^2}}} = \frac{1}{\sqrt{\frac{3^2}{a^2} + \frac{3^2}{a^2} + \frac{3^2}{a^2}}} = \sqrt{\frac{a^2}{27}} = \frac{a}{3\sqrt{3}}$$

$$d_{511} = \frac{1}{\sqrt{\frac{25}{a^2} + \frac{1}{a^2} + \frac{1}{a^2}}} = \sqrt{\frac{a^2}{27}} = \frac{a}{3\sqrt{3}}$$

نلاحظ ان هذه السطوح لها نفس المسافات البينية مع اختلاف معاملات ميلر لها .

الزاوية بين المستويات:

الزاوية θ المحصورة بين المستويات تعطى بالعلاقة : $\cos\theta = \frac{h_1h_2+k_1k_2+l_1l_2}{\sqrt{(h_1^2+k_1^2+l_1^2)(h_2^2+k_2^2+l_2^2)}}$ حيث ان:

h_1, k_1, l_1 هي معاملات ميلر للمستوي الاول و h_2, k_2, l_2 معاملات ميلر للمستوي الثاني.

مثال: احسب الزاوية بين المستويين (100) و (010).

الحل: نطبق القانون اعلاه $\cos\theta = \frac{0+0+0}{\sqrt{(1+0+0)(0+1+0)}} = \frac{0}{1} = 0 \Rightarrow \theta = \cos^{-1} 0 = 90^o$

تمرين:

١-احسب المسافة البينية في البلورة المكعبة للمستويات: (600), (422).

٢-اثبت ان المسافة بين المستويات (111) في بلورة المكعب البسيط هي $\frac{a}{\sqrt{3}}$ حيث a طول ضلع المكعب.

٣-ارسم المستويين (111) و (212) ثم احسب الزاوية المحصورة بينهما.

التركيب الذري للبلورات Atomic Structure of Crystals

تتأثر الخصائص الفيزيائية للمواد البلورية بالشكل الهندسي للبلورة و بالتركيب الذري ايضاً. و المقصود بالتركيب الذري للبلورة هو الشكل الناتج من ترتيب الذرات في النسق البلوري ، و حجم و كثافة وحدة الخلية يعتمدان على عدد الذرات في كل خلية.

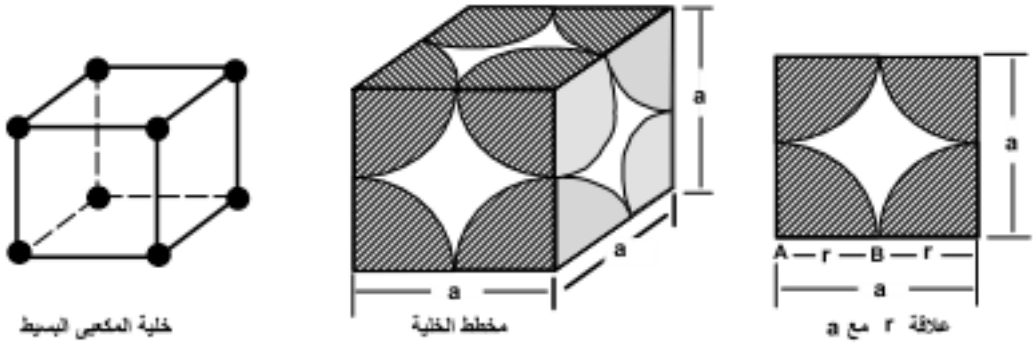
عدد الذرات في وحدة الخلية:

لتعيين عدد الذرات في وحدة الخلية يجب اولاً معرفة الشكل الهندسي للخلية و نصف القطر الذري لها. نصف القطر الذري هو نصف المسافة بين مركزي اقرب ذرتين متجاورتين و متلامستين في البلورة. فيما يلي سنوضح بعض الامثلة :

١-التركيب المكعبي البسيط Simple Cubic, SC

توجد ذرة عند كل ركن من الاركان الثمانية للخلية وهذه الذرة تشارك ثمانية خلايا مجاورة، لذلك يكون نصيب كل خلية من كل ذرة بمقدار $(\frac{1}{8})$ذرة.

و بما ان لكل خلية 8 اركان، فأن عدد الذرات في وحدة الخلية هو: $8 \times \frac{1}{8} = 1$ ، ذرة واحدة.



خلية المكعبي البسيط مخطط الخلية علاقة r مع a

و يمكن حساب نصف القطر الذري في التركيب المكعبي البسيط من خلال التعريف السابق و الشكل اعلاه، حيث نلاحظ ان المسافة AB تمثل نصف القطر الذري. و كذلك فان:

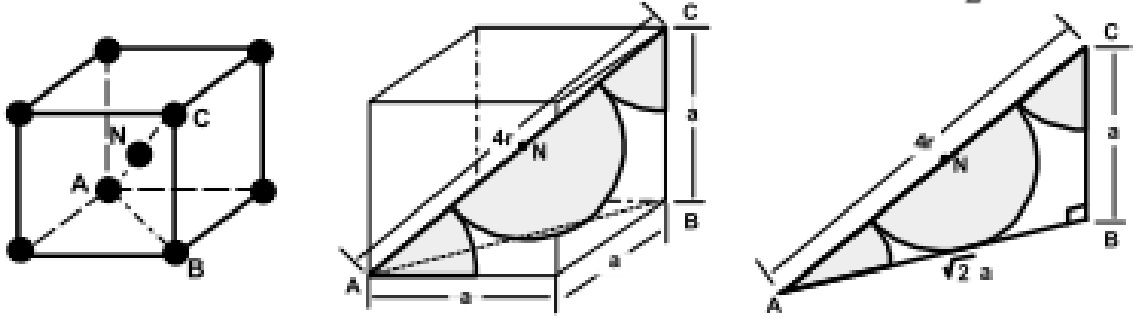
$$.r = \frac{a}{2} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{a = 2\,r}$$

a هو طول ضلع الخلية المكعبة و r نصف القطر الذري.

٢-التركيب المكعبي المتمركز الجسم Body Cubic Centered, BCC

هذا التركيب هو عبارة عن التركيب المكعبي البسيط مضافا اليه ذرة متمركز في وسط الخلية، وعليه يكون عدد الذرات في الخلية هنا مساوياً الى: $8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$ ، ذرتين فقط.

و لحساب نصف القطر الذري ، من التعريف ومن الشكل التالي فأن الذرتين C و N هما اقرب الجيران المتلامسان. نلاحظ ان: $r = \frac{CN}{2}$



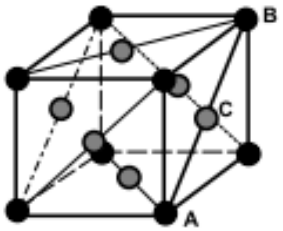
خلية المكعبي المتمركز الجسم مخطط الخلية علاقة r مع a

$$AC = \sqrt{\overline{AB}^2 + \overline{BC}^2} = \sqrt{\left(\sqrt{2}\,a\right)^2 + a^2} = \sqrt{3}\,a \quad \Rightarrow$$

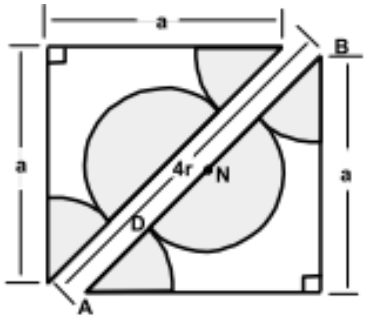
$$r = AD = \frac{AN}{2} = \frac{AC}{4} = \frac{\sqrt{3}\,a}{4} \quad ,or, \quad \boldsymbol{a = \frac{4\,r}{\sqrt{3}}}$$

٣-التركيب المكعبي متمركز الاوجه Face Cubic Centered, FCC

في التركيب المكعبي المتمركز الاوجه توجد ذرة واحدة في مركز كل وجه وهي متشاركة بين خليتين متجاورتين، بالاضافة الى الذرات الثمانية في اركان المكعب و التي مجموعها تساهم بتكوين ذرة واحدة، اي ان: $8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$ اربع ذرات. انظر الشكل التالي.



خلية المكعبي المتمركز الوجه



علاقة r مع a

ان الذرتين A و C هما اقرب الجيران المتلامسان لذا يكون نصف القطر الذري r :

$$r = AD = \frac{AC}{2} = \frac{AB}{4} \quad \longrightarrow \quad \therefore r = \frac{\sqrt{2}\,a}{4} \quad \& \quad a = \frac{4r}{\sqrt{2}}$$
$$\because AB = \sqrt{2}\,a$$

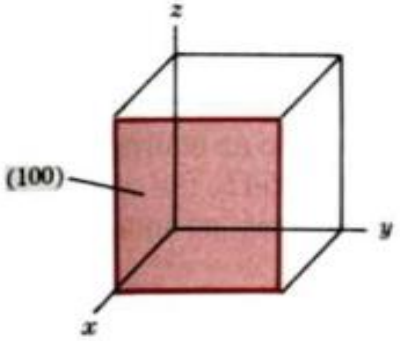
مثال: احسب طول ضلع خلية الوحدة لشبيكة متمركزة الاوجه اذا علمت ان نصف القطر الذري للفضة هو 1.441 أنجستروم.

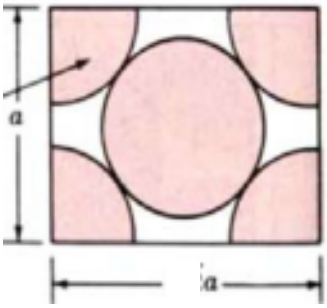
الحل: $a = \frac{4\,r}{\sqrt{2}} = \frac{4 \times 1.441}{1.414} = 4.076\ A^o$ طول ضلع خلية الوحدة لشبيكة الفضة.

تمرين: اعد المثال السابق لذرة النحاس التي لها نصف قطر ذري = 1.276 أنجستروم.

مثال: اذا علمت ان الرصاص يتبلور بشكل مكعب متمركز الاوجه وطول ضلع خليته المكعبة =4.93 أنجستروم. احسب الكثافة الذرية للمستويات البلورية (111) ,(100).

الحل: المستوي (100) يحتوي ذرتين اثنتين $\left(4_{corners} \times \frac{1}{4} + 1_{face\ centered} = 2\right)$. لذا فأن الكثافة الذرية $\rho_{(100)}$ تساوي عدد الذرات مقسوما على المساحة (مساحة هذا الوجه = مساحة المربع). وعليه فأن:

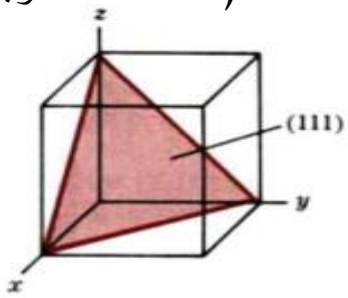




$$\rho_{(100)} = \frac{2 \text{ atoms}}{(a \text{ mm})^2} = \frac{2 \text{ atoms}}{\left(4.93\times10^{-7}\right)^2 \text{ mm}^2}$$

$$= 8.23\text{x}10^{12} \text{ atoms/mm}^2$$

المستوي (111) يحتوي ذرتين اثنتين $\left(3_{corners} \times \frac{1}{6} + 3_{face\ centered} \times \frac{1}{2} = 2\right)$ للمثلث في الشكل ادناه، لذا فأن الكثافة الذرية $\rho_{(111)}$ تساوي عدد الذرات مقسوما على المساحة (مساحة هذا الوجه = مساحة المثلث). وعليه فأن: طول ضلع المكعب = a



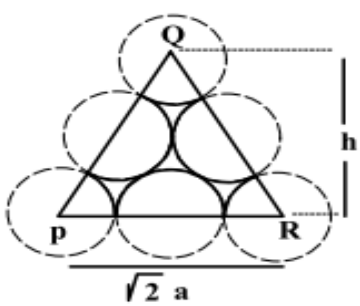
قطر كل وجه من وجوه المكعب يحسب حسب نظرية فيثاغورس وبالتالي فانه يساوي $a\ \sqrt{2}$. في الشكل المجاور فان **$a\ \sqrt{2}$ تمثل طول قاعدة المثلث.**

ارتفاع المثلث h يحسب من قانون الجيب تمام (المجاور / الوتر)، اي ان **الارتفاع** = $\boldsymbol{h = \sqrt{2}\ a\ \cos 30^o}$. وعليه فان **مساحة هذا الوجه** (مساحة المثلث= نصف القاعدة x الارتفاع) تساوي:

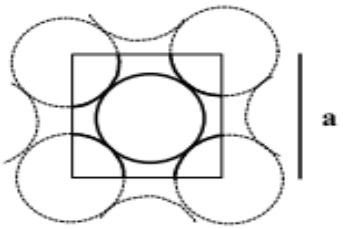
$\frac{1}{2} \times \sqrt{2}\ a\ \times \sqrt{2}\ a\ \times \frac{\sqrt{3}}{2} = \frac{\sqrt{3}}{2}\ \boldsymbol{a^2}$ لذلك فالكثافة لهذا الوجه تكون

$$\rho_{(111)} = \frac{2 \text{ atoms}}{\sqrt{3}/2a^2} = \frac{2 \text{ atoms}}{\sqrt{3}\ (4.93\times10^{-7})^2 \text{ mm}^2} \quad = 9.5\ \text{x}10^{12} \text{ atoms/mm}^2$$

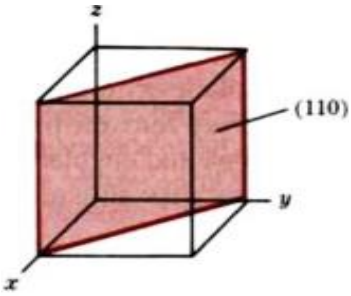
وللتوضيح اكثر انظر الشكل التالي:

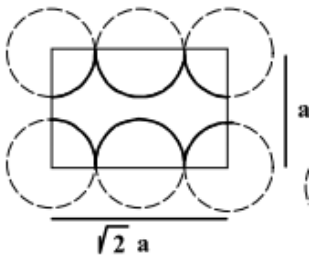


المستوى (111)



المستوى (100)





ج- المستوى (110)

تمرين:١- اعد المثال السابق باحتساب الكثافة الذرية للوجه(110) لمادة الرصاص ايضاً.(الاشكال كما في اعلاه من اليمين)

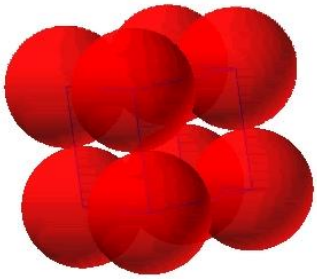
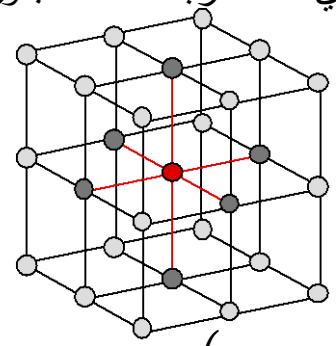
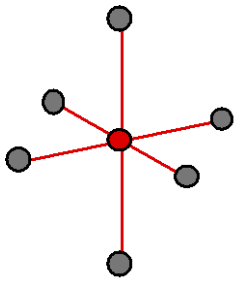
٢- بعد كل هذا الشرح ، ما الفائدة من معاملات ميلر؟

عدد التناسق للذرات في البلورة:

يمثل عدد التناسق لعقدة الشبيكة (الذرة) مدى قدرة تراص الذرات في الشبيكة البلورية. **ويعرف بانه:**

عدد اقرب العقد في الشبيكة بالنسبة الى عقدة معينة، أي عدد اقرب العقد المجاورة لتلك العقدة.

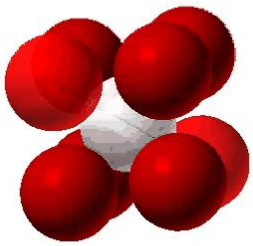
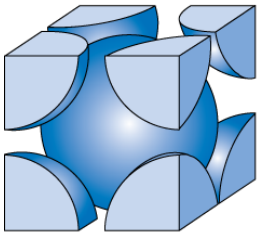
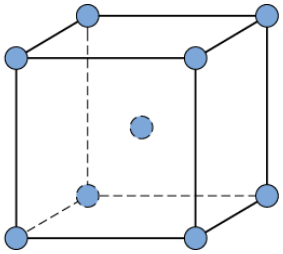
المكعب البسيط (SC)

عدد التناسق= 6 ⟷

عدد الذرات لوحدة الخلية: $\left(8_{corners} \times \frac{1}{8}\right) = 1 \ \frac{atom}{unit\ cell}$

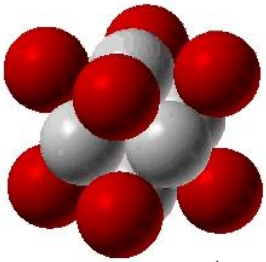
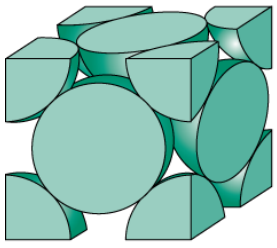
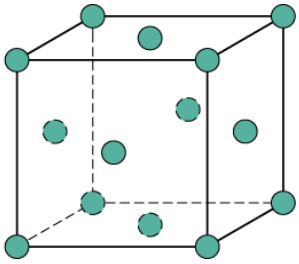
المكعب المتمركز الجسم (BCC)

عدد التناسق= 8 ⟷

عدد الذرات لوحدة الخلية: $\left(8_{corners} \times \frac{1}{8} + 1_{Body\ centered}\right) = 2 \ \frac{atom}{unit\ cell}$

المكعب المتمركز الاوجه (FCC)

عدد التناسق= 12 ⟷

عدد الذرات لوحدة الخلية: $\left(8_{corners} \times \frac{1}{8} + 6_{face\ centered} \times \frac{1}{2}\right) = 4 \ \frac{atom}{unit\ cell}$

مواضع النقاط داخل خلية الوحدة

تحدد النقاط داخل خلية الوحدة بواسطة احداثيات الشبيكة، بأن تؤخذ نقطة الاصل (0,0,0) عند ركن خلية الوحدة ويعبر عن الموضع بالاحداثيات x,y,z:

- احداثيات نقطة تتوسط خلية الوحدة (خلية متمركزة الجسم BCC)هى $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$
- احداثيات مراكز الاوجه هى ، ..... $\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0\right),\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right),\left(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)$ اكمل الفراغ.
- احداثيات الأركان هي: ..... (1,1,1), (1,1,0), (1,0,0), (0,0,0) اكمل الفراغ.

بعض خصائص الشبيكة المكعبة

الخصائص	المكعبى البسيط	المكعبى المتمركز الجسم	المكعبى المتمركز الأوجه
حجم خلية الوحدة	a^3	a^3	a^3
حجم الخلية الأولية	a^3	$\frac{a^3}{2}$	$\frac{a^3}{4}$
عدد العقد لكل وحدة خلية	1	2	4
عدد العقد لوحدة الحجم	$\frac{1}{a^3}$	$\frac{2}{a^3}$	$\frac{4}{a^3}$
العدد التناسقى	6	8	12
عدد العقد المجاورة للجوار المباشر	12	6	6
المسافة بين أقرب عقدتين	a	$\frac{\sqrt{3}\,a}{2}=0.86a$	$\frac{a}{\sqrt{2}}=0.7a$

مقارنة بين الانظمة البلورية من حيث خلية الوحدة (موقع الذرة ومشاركتها و مقدار المشاركة)		
موقع الذرة في الخلية	**الذرة متشاركة مع**	**مقدار مساهمة الذرة في بناء الخلية**
في احد اركان الخلية	**8 خلايا**	**1/8**
في مركز الخلية BCC	**1 خلية (غير متشاركة. في خليتها فقط)**	**1**
في مركز الوجه FCC	**2 خلية (خليتها و خلية متجاورة)**	**1/2**
في مركز احد الوجهين SCC	**2 خلية (خليتها و خلية متجاورة)**	**1/2**