

المواد البلورية

خواص ومفاهيم

م تكني

1432/ 2011

الفهرست

| | | | |
|----|-------|---|---------------------------------------|
| 5 | | 1 | تقديم |
| | | | 1.1 مقدمة |
| | | | 1.2 تصنيف المواد (الهندسية) |
| 7 | | 2 | التركيب الذري وتكوين المادة البلورية |
| | | | 1.2 تركيب الذرة |
| 8 | | | 2.2 الإلكترون في الذرة |
| | | | 1.2.2 العدد الكمي |
| 9 | | | 2.2.2 التوزيع الإلكتروني |
| 10 | | | 3.2 الجدول الدوري |
| 11 | | | 4.2 الروابط الذرية في المواد البلورية |
| | | | 1.4.2 الروابط الأساسية |
| 13 | | | 2.4.2 الروابط الثانوية |
| 14 | | 3 | البنية البلورية للجوامد |
| | | | 1.3 مقدمة |
| | | | 2.3 الخلية الوحدة |
| 15 | | | 3.3 الشبكات الفراغية و شبكات برافيه |
| 18 | | | 4.3 النظم البلورية |
| 20 | | | 5.3 المستويات والاتجاهات البلورية |
| | | | 1.5.3 معاملات ميلر |
| 22 | | | 2.5.3 المعاملات الاتجاهية |
| 23 | | | 3.5.3 المتعامد على مستوى بلوري |
| 25 | | | 6.3 التركيب البلوري للفلزات |
| | | | 1.6.3 النظام المكعبي مركزي الوجه |
| 26 | | | 2.6.3 النظام المكعبي مركزي الجسم |

| | | |
|-----------|-------|---|
| 27 | | 3.6.3 التركيب البلوري السداسي |
| 29 | | 7.3 التماثل البلوري |
| | | 1.7.3 عمليات التماثل النقطية |
| 30 | | 2.7.3 الطوائف النقطية |
| 32 | | 8.3 التركيب البلوري للخزفيات |
| 33 | | 1.8.3 التركيب البلوري نوع AX_n |
| 35 | | 2.8.3 التركيب البلوري نوع $A_m X_p$ |
| 36 | | 3.8.3 التركيب البلوري نوع $A_m B_n X_p$ |
| 37 | | 9.3 حساب الكثافة للجوامد البلورية |
| 39 | | 10.3 تعيين التركيب البلوري |
| | | 1.10.3 ظاهرة الحُيود |
| 41 | | 2.10.3 حيود الاشعة السينية من البلورات |
| 44 | | 3.10.3 ظاهرة الحُيود حسب قانون براج |
| 48 | | 4.10.3 التفسير الهندسي لقانون براج |
| 49 | | 5.10.3 الطرق العملية لتعيين التركيب البلوري |
| 52 | | 4 العيوب في الجوامد |
| | | 1.4 تقديم |
| 52 | | 2.4 العيوب النقطية |
| 55 | | 3.4 المحاليل الجامدة |
| 57 | | 4.4 العيوب الخطية_ الإنخلاعات |
| 59 | | 5.4 العيوب السطحية |
| | | 1.5.4 الحدود الحبيبية |
| 60 | | 2.5.4 حدود التوأمة |
| 62 | | 5 الخواص الميكانيكية للمادة |
| | | 1.5 مفهوم الإجهاد والانفعال |
| 64 | | 2.5 المنحنى إجهاد-انفعال |
| 65 | | 3.5 خواص المرونة للمواد |
| 67 | | 4.5 الانفعال اللدن |
| 70 | | 5.5 الإجهاد الهندسي والإجهاد الحقيقي |
| 71 | | 6.5 الصلادة |

| | | |
|----|-------|---------------------------------------|
| 74 | | 6 الانخلاعات و تقوية المواد |
| | | 1.6 الانخلاع و أساسيات اللدونة |
| | | 1.1.6 اللدونة |
| 74 | | 2.1.6 خواص الإنخلاعات |
| 76 | | 3.1.6 مستويات الانزلاق |
| | | 4.1.6 الإجهاد الناتج عن نظام الانزلاق |
| 78 | | 5.1.6 تشوه البلورات المتعددة |
| | | 2.6 آليات تقوية المعادن |
| 81 | | 3.6 إستعادة, إعادة تبلور, حالة نمو |
| | | 1.3.6 الإستعادة |
| | | 2.3.6 اعادة التبلور |
| 82 | | 3.3.6 النمو الحبيبي |
| 83 | | 7 الإخفاق |
| | | 1.7 تقديم |
| | | 2.7 أسس الكسر |
| | | 1.2.7 كسر مُطيل |
| 84 | | 2.2.7 كسر القصف |
| 85 | | 3.7 مبدأ ميكانيكا الانكسار |
| | | 1.3.7 تركيز الإجهاد |
| 87 | | 2.3.7 اختبار الصدم |
| 88 | | 3.3.7 الانفلاق و الانتقال مُطيل - قصف |
| | | 4.3.7 دراسات فركتوغرافيك |
| 89 | | 4.7 كلال |
| | | 1.4.7 الإجهاد الدوري |
| 90 | | 2.4.7 منحنى S-N |
| 92 | | 3.4.7 العوامل التي تؤثر في عمر الكلال |
| 92 | | 5.7 زحف |
| 93 | | 1.5.7 سلوك الزحف |
| 95 | | 2.5.7 آثار الضغط ودرجة الحرارة |
| 96 | | المراجع |

1 تقديم

1.1 مقدمة

يُعنى علم المواد بمفهومه العام بدراسة خصائص المادة لفهم تركيبها وبنيتها المجهرية بغرض تطويرها أو إعادة تشكيلها لتلبي الاحتياجات التكنولوجية الجديدة. تُوصف المادة استناداً إلى خصائصها الفيزيائية والكيميائية والميكانيكية، تشمل دراسة التركيب الكيماوي للمواد أساسيات الذرة و كيفية ارتباط العناصر في الوحدات الأساسية للمادة، أما الخواص الفيزيائية للجوامد فترتبط عموماً بالتناظر في التركيب البلوري و بطبيعة العناصر الداخلة فيه. تتجلى معظم الخواص على المستوى الجهري عند استجابة المادة لقوى أو تأثيرات خارجية، فتأخذ هذه الخواص عموماً طابعاً اتجاهياً يعتمد على اتجاه القياس.

1.2 تصنيف المواد (الهندسية)

وفقاً لطبيعة ارتباط الذرات مع بعضها البعض تصنف المواد المكثفة البلورية إلى فلزات وخزفيات وبوليمرات.

الفلزات *metals*

لا يزيد عدد إلكترونات التكافؤ عموماً بذرّات الفلز على ثلاثة، تُكوّن هذه الإلكترونات سحابة إلكترونية تعمل على ربط الأيونات الفلزية الموجبة ببعضها. يُعدّ الفلز مُطيلًا وقابلًا للطرق والتشكيل، كما يمكن تقويته ليصبح صلبًا وقابلًا للصقل. فجودة التوصيل الكهربائي والحراري للفلزات ترجع إلى سهولة حركة الإلكترونات الحرة بين الذرات التي تنتج عن طبيعة الرابطة الفلزية.

الخزفيات *ceramics*

تعتبر الخزفيات أكثر تركيباً لأنها تتكون من عناصر فلزية وأخرى لافلزية، وهي عادة ما تترايط بينها بمزيج من أنواع الروابط الذرية وذلك حسب الخواص الكيماوية للعناصر المشاركة في التركيب البلوري (أكاسيد ونيتريدات وكربيدات). تعتمد خواص الخزفيات الفيزيائية عموماً على الحرارة و نسبة الشوائب داخل التركيب، فهي غالباً ما تكون شبه موصلة للكهرباء وقصفة.

البوليمرات *polymers*

هي عبارة عن اتحاد عدد كبير من الوحدات المتشابهة (ميرات) لتكوين جزيء واحد. ترتبط الذرات، غالباً من عناصر الكربون والهيدروجين، فيما بينها تساهمياً أو بواسطة روابط فان دير فال الثانوية. تتميز البوليمرات بخفة وزنها لكنها تفقد قوتها في درجات حرارة معتدلة (100 - 400 درجة مئوية).

2 التركيب الذري وتكوين المادة البلورية

1.2 تركيب الذرة

تتكون الذرة من نواة صغيرة جداً تتحرك أو تلف حولها إلكترونات مشحونة سالبة الشحنة في مدارات معينة وتتكون النواة من نوعين من الجسيمات النوع الأول موجب الشحنة يسمى البروتون والثاني النيوترون غير مشحونة كهربائياً، وفي هذه الحالة تكون الذرة متعادلة كهربائياً. تُعتبر الذرة غير متحركة لأن كتلتها مركزة في النواة، بينما الإلكترونات تدور حولها في مدارات مقفلة. هذه الأخيرة لها كتل ضئيلة جداً $10^{-31} \cdot 9.11$ كجم؛ أما الكتلة البروتون تساوي تقريباً كتلة النيوترون وهي تناهز حوالي $10^{-27} \cdot 1.67$ كجم.

العدد الذري Z : يُعرّف بأنه عدد البروتونات أو عدد الإلكترونات. يحدد هذا العدد خواصّ العناصر ويرتبطها من خلال وحدات غير متجزئة لتأخذ قيم أعداد طبيعية من 1، للهيدروجين، إلى 92 لليورانيوم. هذا الأخير يمثل أعلى عدد ذري لعنصر يوجد بشكل طبيعي.

العدد الكتلي A : هو حاصل جمع عدد البروتونات Z و عدد النيوترونات N في النواة. ذرات عنصر لها نفس العدد الذري، أي عدد البروتونات لأن عدد النيوترونات قد يتغير. وهكذا يمكن لنفس العنصر في الجدول الدوري أن يتخذ كتل ذرية مختلفة وتعرف هذا النوع من الذرات باسم النظائر. الوزن الذري يستخدم في قياس الكتلة الذرية التي يُرمز لها اختصاراً بالوحدة (amu).

$$N + Z = A$$

المول هو الكمية التي تحتوي على عدد أفوجادرو N_A من الذرات أو الجزيئات

$$(\text{ذرة/ جزيء} = 6.023 \cdot 10^{23} \text{ } N_A)$$

$$1 \text{ g/mol} = 1 \text{ amu /atom (or molecule)}$$

2.2 الإلكترون في الذرة

في الجزء الأخير من القرن التاسع عشر كان من الواضح أنّ العديد من الظواهر التي تنطوي على الإلكترونات في المواد المكثفة لا يمكن تفسيرها بالميكانيكا الكلاسيكية فما تبع ذلك هو إنشاء مجموعة من المبادئ والقوانين التي تحكم نظم الكيانات الذرية ودون الذرية الذي عرفت باسم ميكانيكي الكم.

نموذج بوهر الذري: حدد هذا النموذج العلاقة بين كمية الحركة الدورانية و الرقم الكمي لمدارات الإلكترونات، أو بعبارة أخرى ارتباط طاقة الإلكترون المسموح بها بالمنسوب الطاقى. تبين بعد ذلك أنّ هذا النموذج يضم بعض القيود وذلك لعدم قدرته على تفسير العديد من الظواهر التي تنطوي على الإلكترون.

النموذج الميكانيكي المَوْجى: الذي يعتبر الإلكترون له خصائص على حد سواء كموجة وكجسيم. لم يعد التعامل مع الإلكترون كجسيم يتحرك في مدار منفصل بل يمكن اعتبار الإلكترون مَوْجود احتماليا في آن واحد و في مَوَاقِع مختلفة. من خلال هذا النموذج تم شيئا ما التوصل إلى تفسير واقعي للطبيعة الغريبة والمثيرة في نفس الوقت للإلكترون. ففي علوم المادة يُعتمد النموذج الذي يلائم طبيعة الخاصية أو الظاهرة المراد دراستها.

1.2.2 العدد الكمي

باستخدام ميكانيكا الموجة يمكن توزيع الإلكترونات في الذرة طبقا لقواعد معينة تتلخص في أربعة رموز تدعى أعداد الكم. فعدد المستويات يعبر عنه بالرقم (n) ، الذي يدل على عدد المستويات المفردة للطاقة المسموح بها، ويرمز للمدارات أيضا بالحروف $M, L, K..$ هذه المدارات تنقسم بدورها إلى مدارات داخلية تحدد بعدد الكم الثانوي (l) ، الذي يرمز له بالحروف s أو p أو d أو f المتعلقة بالشكل الذي يأخذه المدار الداخلى و عدد الإلكترونات الأقصى التي يمكن استيعابها في المدار هو سعة المدار. يتعين عدد الحالات الطاقية لكل مدار ثانوي بواسطة العدد الكمي الثالث (m_l) ، أما العدد الكمي الرابع (m_s) فيتعلق بعزم اللف المرتبط بكل إلكترون والذي يتسبب في نشوء كمية حركة زاوية ذاتية للإلكترون حول محور داخله، ولف الإلكترون يمكن أن يتخذ إحدى القيمتين، إما $+1/2$ أو $-1/2$.

2.2.2 التوزيع الإلكتروني

إنّ منسوب الطاقة لبوهر يفصل مستويات الإلكترون، أما أعداد الكم فتُملي عدد الحالات في كل مدار. لتحديد الطريقة التي يتم بها تعبئة هذه الحالات بالإلكترونات نستخدم مبدأ الاستبعاد لبولي الذي لا يسمح بتداخل السحب الإلكترونية، لذلك فإن قوى التجاذب تجعل الجزئيات تتماس، وهذا المبدأ يُنصّ على أنّ كل حالة يمكن أن لا تضم أكثر من إلكترونين متساويتين في القيمة و متعاكستين في اللف. عندما تحتل الإلكترونات أدنى الطاقات الممكنة يقال أنّ الذرة تكون في حالة الاستقرار مع وجود احتمال أن تنتقل الإلكترونات لحالات الطاقة أعلى، فالبنية الإلكترونية للذرة تعتمد على الكيفية التي تُعبأ بها الحالات الإلكترونية.

إنّ إلكترونات التكافؤ هي تلك التي تشغل المدار الأخير أو القشرة الخارجية، تُفقد هذه الإلكترونات أو تُضم بسهولة إلى ذرة أخرى فتشترك الذرات فيها معا. تعتبر هذه الإلكترونات في غاية الأهمية لتشكيل البنى بين الذرية أو الجزيئية بواسطة الترابط الذري. وبالإضافة إلى ذلك تعتمد كثير من الخواص الكيميائية و الفيزيائية على إلكترونات التكافؤ خاصة في حالة الغازات الخاملة ذات التركيب الإلكتروني المستقر، إذ تتباعد ذراتها ويضعف تأثيرها و تفاعلها مع غيرها من الذرات تقريبا. ولكن في المواد الجامدة تكون الذرات متقاربة تقاربا كافيا ليُجعل تلك الذرات تتفاعل و تؤثر على بعضها، و في هذه الحالة فإن كل مستوى طاقي في الغلاف الخارجي الأقصى ينقسم عن نفسه إلى عدد من المستويات المفردة مكونا حزما طاقية متميزة.

3.2 الجدول الدوري

بدأت منذ مطلع عام 1800 محاولات عدة لتصنيف العناصر إلى مجموعات عناصر متشابهة فيما بينها بخواصها الكيماوية. قام الروسي ديمتري ماندليف عام 1869 بنشر جدولته الذي أصبح الأساس للجدول الدوري الحالي، وكان يحتوي حين ذاك ستة وستين عنصراً معروفاً، بيّن فيه العلاقة التي تجمع بين الخواص الكيماوية للعناصر وكتلتها الذرية. وهكذا، وبفضل موزلي الذي بيّن أنّ مكانَ عنصرٍ في الجدول الدوري إنما يتوقف على عدده الذري Z (عدد الإلكترونات) وليس على كتلته الذرية.

يوجد 18 مجموعة في الجدول الدوري القياسي. كل مجموعة لها تركيب متماثل في غلاف الإلكترونات الخارجي لذرات تلك العناصر، الذي تعتمد عليه معظم الخواص الفيزيائية والكيميائية لعناصر المجموعة الواحدة. وقد تم تطوير نظام مقترح من IUPAC لمجموعات مرقمة بأرقام عربية، من 1 إلى 18، لتحل محل الأرقام الرومانية، هذه الأخيرة قد تسبب أحيانا بعض الالتباس

لأنها تستخدم نفس الأسماء لمعان مختلفة. وفي ما يلي أمثلة لدلالة الأرقام العربية لبعض المجموعات.

- 1: فلزات قلوية, 2: فلزات قلوية ترابية, 11: معادن العملات, 13: مجموعة البورون, 14: مجموعة الكربون, 15: مجموعة النيتروجين, 16: مجموعة كالوجين, 17: مجموعة الهالوجينات, و18: مجموعة الغازات النبيلة. يضاف إلى ما سبق سلسلتان من العناصر تُضاف إلى الجدول الدوري الأساسي وتدعى أحيانا أخرى بالأترية النادرة [rare earth elements REE]. السلسلة الأولى, وأعدادها الذرية من 58 إلى 71, تدعى بعناصر اللانثانيدات إذ أنها تلي عنصر اللانثانيوم, أما السلسلة الثانية, بأعدادها الذرية من 90 إلى 103, فتدعى بالأكتينيدات نسبة إلى الأكتينيوم الذي تليه.

الجدول الدوري الحديث للعناصر

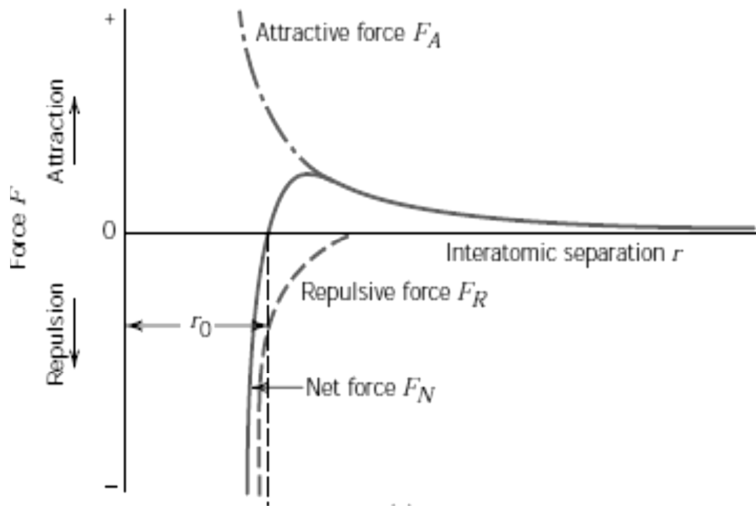
| | | | | | | | | | | | | | | | | | | العناصر البادرة | | | | | |
|------------------------|--------------------|---------------------|---------------------|---------------------|--------------------|---------------------|--------------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|--------------------|---------------------|---------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|-------------------|---------------------|--------------------|--------------------|-------------------|
| 1 | | | | | | | | | | | | | | | | | 1 | 2 | | | | | |
| H 1.00797 | | | | | | | | | | | | | | | | | H 1.00797 | He 4.0026 | | | | | |
| 3 Li 6.939 | 4 Be 9.0122 | | | | | | | | | | | | | | | 5 B 10.811 | 6 C 12.0112 | 7 N 14.0067 | 8 O 15.9994 | 9 F 18.9984 | 10 Ne 20.183 | | |
| 11 Na 22.9898 | 12 Mg 24.312 | 13 Al 26.9815 | 14 Si 28.086 | 15 P 30.9738 | 16 S 32.064 | 17 Cl 35.453 | 18 Ar 39.948 | | | | | | | | | | | 31 Ga 69.72 | 32 Ge 72.59 | 33 As 74.9216 | 34 Se 78.96 | 35 Br 79.909 | 36 Kr 83.80 |
| 19 K 39.102 | 20 Ca 40.08 | 21 Sc 44.956 | 22 Ti 47.90 | 23 V 50.942 | 24 Cr 51.996 | 25 Mn 54.9380 | 26 Fe 55.847 | 27 Co 58.9332 | 28 Ni 58.71 | 29 Cu 63.54 | 30 Zn 65.37 | 31 Ga 69.72 | 32 Ge 72.59 | 33 As 74.9216 | 34 Se 78.96 | 35 Br 79.909 | 36 Kr 83.80 | | | | | | |
| 37 Rb 85.47 | 38 Sr 87.62 | 39 Y 88.905 | 40 Zr 91.22 | 41 Nb 92.906 | 42 Mo 95.94 | 43 Tc (99) | 44 Ru 101.07 | 45 Rh 102.905 | 46 Pd 106.4 | 47 Ag 107.870 | 48 Cd 112.40 | 49 In 114.82 | 50 Sn 118.69 | 51 Sb 121.75 | 52 Te 127.60 | 53 I 126.904 | 54 Xe 131.30 | | | | | | |
| 55 Cs 132.905 | 56 Ba 137.34 | 57 La 138.91 | 72 Hf 178.49 | 73 Ta 180.948 | 74 W 183.85 | 75 Re 186.2 | 76 Os 190.2 | 77 Ir 192.2 | 78 Pt 195.09 | 79 Au 196.967 | 80 Hg 200.59 | 81 Tl 204.37 | 82 Pb 207.19 | 83 Bi 208.980 | 84 Po (210) | 85 At (210) | 86 Rn (222) | | | | | | |
| 87 Fr (223) | 88 Ra (226) | 89 Ac (227) | 104 Rf (261) | 105 Db (262) | 106 Sg (266) | 107 Bh (262) | 108 Hs (265) | 109 Mt (266) | 110 ? (271) | 111 ? (272) | 112 ? (277) | العناصر البادرة | | | | | | | | | | | |
| سوائل، مواد صلبة مصنعة | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| * سلسلة اللانثانيدات | | 58 Ce 140.12 | 59 Pr 140.907 | 60 Nd 144.24 | 61 Pm (147) | 62 Sm 150.35 | 63 Eu 151.96 | 64 Gd 157.25 | 65 Tb 158.924 | 66 Dy 162.50 | 67 Ho 164.930 | 68 Er 167.26 | 69 Tm 168.934 | 70 Yb 173.04 | 71 Lu 174.97 | | | | | | | | |
| # سلسلة الأكتينيدات | | 90 Th 232.038 | 91 Pa (231) | 92 U 238.03 | 93 Np (237) | 94 Pu (242) | 95 Am (243) | 96 Cm (247) | 97 Bk (247) | 98 Cf (249) | 99 Es (254) | 100 Fm (253) | 101 Md (256) | 102 No (256) | 103 Lr (257) | | | | | | | | |

جدول 1 الجدول الدوري للعناصر الكيميائية

4.2 الروابط الذرية في المواد البلورية

1.2.4 الروابط الأساسية

الرابطة الأيونية Ionic bond: تنشأ الرابطة الأيونية بين ذرتين تختلفان في المقدرة على كسب الإلكترونات، ويتم ترتيب الأيونات بحيث يكون تجاذب الأيونات مختلفة الشحنة أقوى من تنافر الأيونات متشابهة الشحنة، و الشكل النهائي للبنية يتحدد بمدى شدة هذا الاختلاف في قوى التجاذب والتنافر بين الأيونات المشحونة كهربائياً. والرابطة الأيونية هي ما ينشأ عن التفاعل الكهروستاتي أو الكولومي بين الأيونات مختلفة الشحنة. إن توزيع الشحنات حول الأيونات في البلورة الأيونية يكون كروي شبه متماثل مع بعض التشويه في مناطق التماس للأيونات المتجاورة. التفاعل الكولومي قوي جداً وبعيد المدى نسبياً، هذا راجع إلى أن طاقة الربط تتناسب مع $1/r$ للإلكترون، فطاقة الربط الأيونية هي طاقة وضع ناتجة تعتمد قيمتها على كمية الشحنة المتوفرة بالأيونين وعلى المسافة بين الذرية (شكل 1).



شكل 2 منحنى طاقة الارتباط بدلالة المسافة بين الذرية

طاقة الجذب الأيوني E_A بين أيونين
تكتب بدلالة المسافة بين الذرية
كالتالي

$$E_A = -\frac{A}{r}$$

وطاقة التنافر E_R هي كالتالي

$$E_R = \frac{B}{r^n}$$

A و B و n هي ثوابت لها علاقة بالنظام الأيوني، فإذا اردنا التحويل إلى وحدات النظام الدولي SI يجب اعتبار الثابت A بأنه

$$A = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} (Z_1 e)(Z_2 e)$$

ϵ_0 السماحية في الفراغ (8.85×10^{-12} F/m), Z_1 و Z_2 تكافؤ الأيونين الموجب والسالب, e هي الشحنة الإلكترونية (1.602×10^{-19} C)

تحدث الرابطة الأيونية عادةً بين الفلزات (ذات طاقة التأين المنخفضة والتي تميل لفقدان الإلكترونات) واللافلزات (ذات كهروسالبية مرتفعة والتي تميل لاكتساب الإلكترون)

الرابطة التساهمية Covalent bond: عندما تتشارك الذرات في الإلكترونات تصبح في حالة مستقرة, وتشارك الذرات بالإلكترونات بالطريقة التي تستوفي الأغلفة الخارجية العدد اللازم للتشبع. تنشأ الرابطة التساهمية بين ذرتين متشابهتين أو مختلفتين إذ أن كل منهما تساهم بنفس العدد من الإلكترونات في هذه الرابطة. يحدث هذا النوع من الترابط غالباً بين الذرات التي لها سالبية كهربائية متماثلة (عالية), حيث أنه تلزم طاقة كبيرة لتحريك الإلكترون من الذرة.

أحياناً إن طاقة التماسك في الرابطة التساهمية تقارب أو تفوق نظيرتها في الرابطة الأيونية على الرغم من أنها تنشأ بين الذرات المتعادلة كهربياً, مثلاً الألماس. إن الرابطة التساهمية تختص بانها ذات طابع اتجاهي, و يتميز قياسها بمقدار واتجاه محدد حسب توزيع وطاقات الإلكترون في الفضاء الثلاثي الأبعاد. وعندئذ توصف عموماً هذه الجوامد البلورية بانها متباينة في خاصية الربط, لإيزوتروبية, أي أنها تعتمد على الاتجاه البلوري.

في العديد من البلورات يتراوح الترابط بين الأيوني و التساهمي, لذا من الأجدى تحديد مقدار نسبي للترابط الأيوني في البلورة, يعرف بمدى أيونية الرابطة % ionic character

$$\% \text{ ionic character} = \{1 - \exp[-(0.25)(X_A - X_B)^2]\} \times 100$$

X_A و X_B الكهروسالبية لذرتي العنصرين المترابطين

الرابطة الفلزية Metallic bond: المعادن بشكل عام تحتوي على 1 أو 2 أو 3 إلكترونات التكافؤ, و التي ليس ارتباط بذرة معينة إذ يمكنها الانجراف بحرية خلال بلورة الفلز, وهذه الإلكترونات هي ما تعرف بالإلكترونات التوصيل. والتفاعل بين نوى الأيونات الموجبة وتلك الإلكترونات ينشأ عنه تجاذب كهروستاتي يشد البلورة الفلزية بالكامل ويحدد القيم المعروفة لطاقة الترابط الفلزي.

2.2.4 الروابط الثانوية

ثنائي القطب *electric dipole*: يتولد في جوهره عندما تنفصل الشحنة الكهربائية للذرة أو الجزيء إلى أجزاء إيجابية وأخرى سلبية.

الرابطة الهيدروجينية: تتكون الرابطة الهيدروجينية عند اتحاد الهيدروجين مع عناصر ذات كهروسالبية عالية مثل الهالوجينات والأكسجين وتعتبر روابط الهيدروجين هي أقوى نوع للترابط الثانوي. فإن توزيع الشحنات الداخلية يسفر عن ظهور ثنائي القطب الكهربائي وبسبب وجود هذه قطبية عالية فإن أحد طرفي الجزيء المستقطب سوف يتجاذب مع طرف جزيء مجاور يحمل شحنة جزئية مغايرة. فإن أطراف الجزيئات التي تحمل شحنة سالبة سوف تتجاذب مع أطراف جزيئات تحمل شحنة جزئية موجبة لبروتون الهيدروجين H^+ والعكس صحيح. وهكذا فإن البروتون يكون جسر بين طرفي الذرات السالبة الشحنة.

رابطة فاندر فالس: *Van der Walls bond*. تتماسك ذرات الغازات النادرة والجزيئات المشبعة في الجوامد بقوى إلكتروستاتية وهي نوع من أنواع الارتباط الضعيف. من المعروف وبصورة عامة أن للذرات وللجزيئات المعتدلة كهربائياً عزم ثنائي قطب كهربائي معدوم، إلا أن هذا لا يحول دون وجود قيمة صغيرة لهذا العزم الناشئة عن الاهتزازات اللحظية لمواقع الإلكترونات في مداراتها، وتجدر الإشارة إلى أن تفاعل ثنائي القطب لا يقتصر على الجزيئات القطبية ذات ثنائيات أقطاب دائمة بل أيضاً بين الجزيئات الغير القطبية التي يمكن أن يُستحث فيها ثنائي قطب منتج. وينشأ عن التفاعل المتبادل بين العزوم الأصلية والمستحثثة قوى جذب تعمل على تماسك الذرات أو الجزيئات في التركيب البلوري، فإن هذه القوى التي تنشأ عن هذا التفاعل المتبادل تسمى قوى فاندر فالز. تعيّن هذه التفاعلات التركيب ثلاثي الأبعاد للجزيئات في الجوامد و تحدد الشكل الهندسي العام للبلورات، فرابطة فاندر فالز تتبع عموماً أنظمة بلورية منخفضة التماثل.

في الجوامد الجزيئية تتألف الخلايا الأساسية من جزيئات، وتعتمد قوى الارتباط الثانوية على نوعية المركب الجزيئي المتبلور. فقد تكون هذه القوى على شكل قوى فاندر فالز إذا كانت الجزيئات لا تمتلك عزم ثنائي القطب، أو تكون كقوى تجاذب بين عزوم ثنائي القطب للجزيئات المستقطبة أو قد تُمثل بقوى الترابط الهيدروجيني. تهتم الكيمياء الجزيئية بالقوانين التي تحكم التفاعلات بين الجزيئات التي ينتج عنها تكون أو تكسير للروابط الكيميائية.

3 البنية البلورية للجوامد

1.3 مقدمة

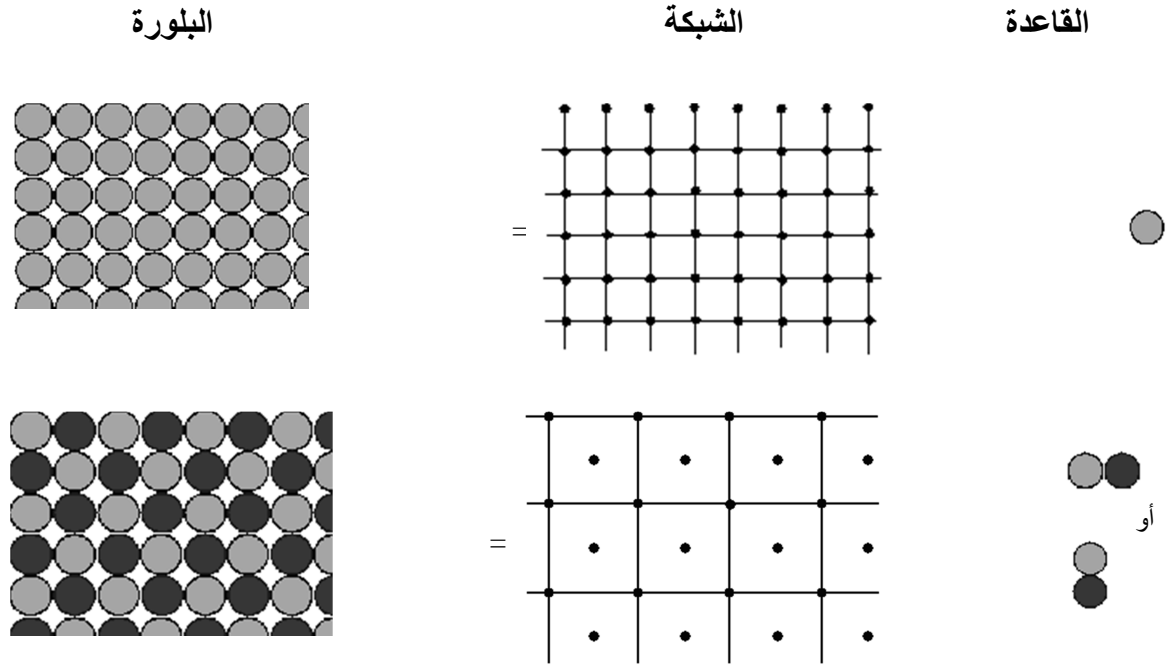
أصبحت الدراسات الحديثة لا تقتصر فقط على التحليل الهندسي والكيماوي للبنيات البلورية كقياس الزوايا بين أوجه البلورات الخارجية, وإنما تعتمد على الخواص الفيزيائية للمادة المرتبطة بالتناظر الداخلي للمواد, وعلى الخصوص قابلية المادة على إحداث ظاهرة الحيود عن الأشعة الكهرومغناطيسية. فعلى هذا الأساس, أمكن اعتبار معظم الجوامد بانها في حد ذاتها بلورية بالرغم من أن مظهرها الخارجي يخفي هيئتها البلورية.

المواد البلورية: تشغل ذرات المادة مواقع محددة ضمن شبكة فراغية دورية ثلاثية الأبعاد, تغطي كامل أبعاد الجسم الناتج وتشكل *البلورات الأحادية*. وأن حالتها تقترن بالبنية البلورية من المستوى المجهرى إلى المستوى الجهرى المتمثل بالوجوه الخارجية. تنمو البلورات عموماً من نوى عديدة تشكلت أنياً لتلتقي على سطوح رقيقة تسمى حدود الحبيبات ويسمى الجامد الناتج *البلورات المتعددة*. وبناءً على هذا فتعبير المادة البلورية يقترن عموماً بالبلورات المتعددة المؤلفة من عدد كبير من البلورات الأحادية أو الحبيبات تتماسك فيما بينها عبر حدود حبيبية.

المواد اللابلورية: فهي مواد جامدة عديمة النظام البلوري, تحطمت بنيتها البلورية ويفتقد فيها التناظر الدوري الذي يعتبر سمة أساسية من سمات الحالة البلورية كالزجاج مثلاً.

2.3 الخلية الوحدة

الخلية الوحدة Unit Cell هي أصغر مجموعة من الذرات أو الوحدة البنوية التي بعملية تكريرها في الفضاء يمكن بناء البلورة كلياً.



شكل 3 نموذج الشبكة البلورية والنقاط الصغيرة ما هي نقاط التقاء الخطوط الشبكية و تمثل المواقع التي يمكن للذرات أن تحتلها لتكوين البنية البلورية. والشكل يوضح العلاقة بين الشبكة و البنية البلورية، وكيفية ربط الشبكة بمكونات القاعدة

لتحليل البنيات البلورية يمكن تمثيل الذرات على أنها كرات مصممة لها أقطار محددة تتلامس كل ذرة مع أقرب جيرانها من الذرات، وغالبا ما تمثل مواقع الذرات بنقاط مركز الكرات في بنية هندسية تسمى الشبكة البلورية *crystal lattice*.

3.3 الشبكات الفراغية و شبكات برافيه

يوجد عدد من البنيات البلورية لا حصر له ولا يمكن الإلمام به هندسياً، لذلك، ومن الأجدى أن تُقسم هذه البنيات على شكل أنظمة أو وحدات هندسية بغض النظر عن التركيب الذري. تُعرّف مواقع البلورات كنقاط متكافئة *equivalent points* في الفراغ تنتظم في تماثل مكاني محدد نتيجة لإزاحات متكررة. في هذا الصدد، يمكن الاستعانة بالمفهوم الرياضي للإزاحة حسب المنطق التحليلي للمتجهات. عند حدوث الإزاحة يتم الانتقال من نقطة إلى أخرى في نظام دوري، أو بعبارة أخرى يمكن رؤية نفس الصورة من خلال أي نقطة من النقاط المتكافئة التي تم الانتقال إليها بواسطة الإزاحة التماثلية *translational symmetry*.

يمكن وصف مجموعة النقاط المتكافئة بواسطة المتجه R بالعلاقة الآتية :

$$n_3a_3 + n_2a_2 + n_1a_1 = R$$

حيث n_i عدد صحيح و a_i وحدة متجه في الاتجاه i .

يُسمح هندسيا تقسيم فراغ الشبكة إلى حيزات ذات حجوم متساوية بدلالة متجهات الإزاحة, ويأخذ في الحسبان المقدار والاتجاه لكل متجه. ومن خلال ذلك تعرف متجهات القاعدة *basis vectors*, إذ ما هي إلا أصغر متجهات إزاحة, مستقلة عن بعضها البعض, والتي يمكن بواسطتها استخلاص أو توليد الشبكة بكاملها. فالخلية الوحدة تعتبر هي أصغر حيز ممتد بواسطة متجهات القاعدة يكون على هيئة متوازي المستطيلات.

إن اختيار الخلية الوحدة أو الأساسية يعتمد بالخصوص على أبعاد وزوايا متجهات القاعدة, ومن تمّة وُضعت بعض القيود لتحديد عدد الخلايا الأساسية المثالية وحُصر هذا العدد في 14 خلية ثلاثية البعد تسمى شبكات برافيه *Bravais lattices* (جدول 2). استطاع برافيه تصنيف هذه الشبكات على أساس متجهات الإزاحة المنتظمة, يأخذ فيها بعين الاعتبار الأطوال والزوايا المنحصرة بين كل زوج من هذه المتجهات الوحيدة. هذه الأطوال والزوايا تدعى ثوابت أو بارامترات الخلية *cell parameters*, فبالتالي, يمكن بواسطتها تحديد حجم الخلية الوحدة لشبكات برافيه:

$$(\vec{b} \times \vec{c}) \cdot \vec{a}$$

حيث $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ هي ثوابت الخلية الوحدة.

أول ما يُلفت النظر هو أنّ محاور القاعدة والزوايا المنحصرة بينها قد لا تكون بالضرورة متعامدة مع بعضها البعض.. توصف شبكات برافيه نظريا بنقاط في الفراغ ثلاثي البعد تطبق عليها عمليات الإزاحة المتماثلة على المحاور الثلاث (يمين- شمال, وأمام-خلف, وأعلى-أسفل), وتختص بمجموعة أشكال هندسية متناظرة.

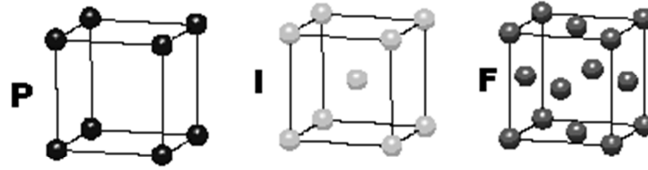
النظام البلوري ثلاثي الميل لا يتضمن إلا نمط واحد بدائي يرمز له P أي primitive وهذا النمط يحتوي على أقل نسبة من التناظر, حيث تختلف جميع بارامترات الشبكة فيما بينها. أما النظام أحادي الميل, فله نمطين أولهما بدائي P وآخر غير بدائية ويرمز له بالرمز C centered base. في النظام الثلاثي بزيادة نقطتين عند مراكز وجهي القاعدة والسطح (أي الموازيين للمستوى (ab)). في النظام الثلاثي تكون الخلية بدائية على هيئة جسم معين الأوجه, أما في النظام السداسي فالخلية تكون أيضا بدائية على هيئة منشور قائم, قاعدته على شكل معين زاويته 60° . وهناك أربعة أنماط للشبكة في حالة

النظام المعيني القائم, قد يكون إما بدائي P, أو C, أو I body centered إذا نقطة عند مركز الخلية, أو face centered F الذي يتضمن نقطة عند مركز كل وجه. تكون أبسط الوحدات الأساسية للنظام رباعي الأضلاع على هيئة بدائية قائم P, كما يمكنه أن يكون على النمط I. وأخيرا الخلايا الثلاثة للنظام المكعبي وهي البسيط (s.c.) ومركزي الجسم I و مركزي الأوجه F.

CUBIC

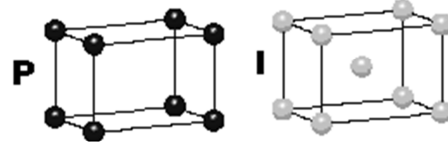
$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

**TETRAGONAL**

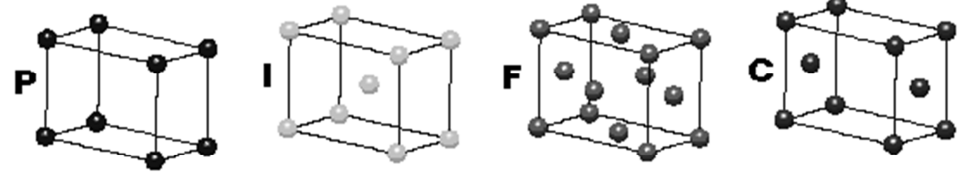
$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

**ORTHORHOMBIC**

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

**HEXAGONAL**

$$a = b \neq c$$

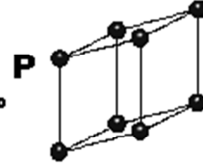
$$\alpha = \beta = 90^\circ$$

$$\gamma = 120^\circ$$

**TRIGONAL**

$$a = b = c$$

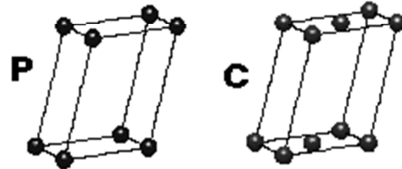
$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

**MONOCLINIC**

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \gamma = 90^\circ$$

$$\beta \neq 120^\circ$$

**TRICLINIC**

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



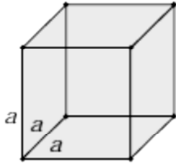
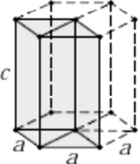
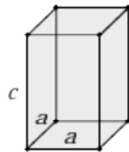
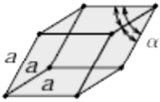
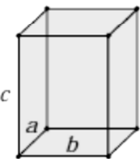
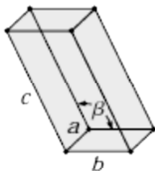
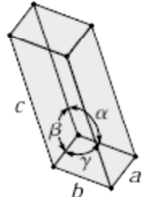
جدول 2 شبكات برفيه للفضاء الثلاثي الأبعاد

4.3 النظم البلورية

اتخذ التصنيف البلوري أبعادا كثيرة في مجالات متنوعة للعلوم الطبيعية وميادين الهندسة, ولم يصر مقتصرا على أهل الاختصاص فقط. نتيجة لذلك قد اصطلح على سبعة نظم بلورية *seven crystal systems* تعتمد في تقسيمها على العلاقات بين محاور الخلايا الوحّدية و الزوايا المنحصرة بينها, التي يعبر عليها بالبرامترات الشبكية (كما في الجدول 3). والنظم السبع هي: ثلاثي الميل *Triclnic* احادي الميل *Monoclinic*, المعيني القائم *Orthorhombic*, رباعي الاضلاع *Tetragonal*, المكعبية *Cubic*, الثلاثي *Trigonal*, و السداسي *Hexagonal*.

نظام الإحداثيات البلوري

كل شبكة بلورية لها نظام إحداثيات بلوري منفرد بها يمكن تعريفه من خلال متجهات القاعدة الثلاث *a* و *b* و *c* التي تكون الخلية الأساسية. بخلاف نظام الإحداثيات الديكارتي فان الإحداثيات البلورية لا تكون بالضرورة متعامدة *orthonormale*, ومتجهات القاعدة قد لا تكون بالضرورة متساوية. فبصفة عامة يتضمن نظام الإحداثيات البلورية ستة بارامترات, الثوابت *a* و *b* و *c* والزوايا المنحصرة بينها α و β و γ .

| <i>Crystal System</i> | <i>Axial Relationships</i> | <i>Interaxial Angles</i> | <i>Unit Cell Geometry</i> |
|-----------------------|----------------------------|---|---|
| Cubic | $a = b = c$ | $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ |  |
| Hexagonal | $a = b \neq c$ | $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$ |  |
| Tetragonal | $a = b \neq c$ | $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ |  |
| Rhombohedral | $a = b = c$ | $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$ |  |
| Orthorhombic | $a \neq b \neq c$ | $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ |  |
| Monoclinic | $a \neq b \neq c$ | $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$ |  |
| Triclinic | $a \neq b \neq c$ | $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ |  |

جدول 3 العلاقات بين بارامترات الشبكة والأشكال الثلاثية البعد للخلايا للوحدة للنظم البلورية السبعة، ثوابت الخلية الوحدة في شبكة فراغية، المحاور الشبكية a و b و c تنحصر بينها الزوايا α و β و γ .

5.3 المستويات والاتجاهات البلورية

1.5.3 معاملات ميلر

كل مجموعة مستويات متماثلة لها اتجاه محدد بدلالة إحداثيات الخلية الأساسية, ولتعيين هذا الاتجاه نستخدم ما يسمى **معاملات ميلر** *Miller Indices*.

نعتبر نظام إحداثيات ثلاثي البعد, نقطة الأصل فيه O والإحداثيات البلورية هي Ox, Oy, Oz , نعين فيه أحد المستويات ABC , بحيث المسافة OA تساوي a , المسافة OB تساوي b , المسافة OC تساوي c , وذلك باعتبار أن a و b و c تمثل وحدات المسافات للنظام الإحداثي البلوري و المعاملات m و n و p تسمى أحيانا **معاملات فايس** *Weiss indices*.

نعتبر معادلة السطح ABC (الهندسة التحليلية):

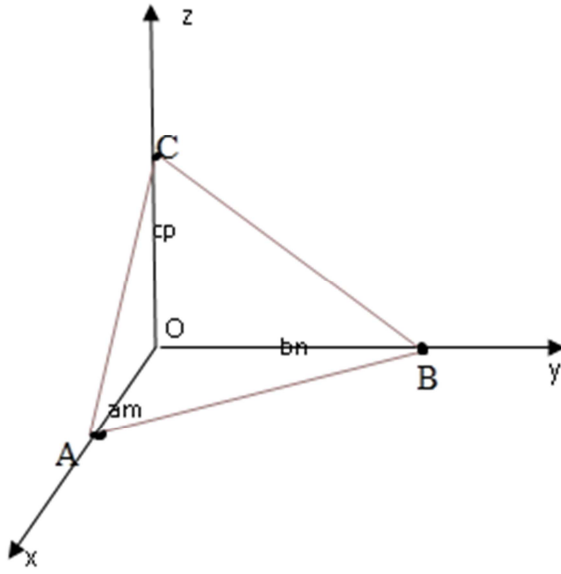
$$\frac{x}{m} + \frac{y}{n} + \frac{z}{p} = hx + ky + lz = 1$$

تحدد المستويات البلورية من حيث موقعها واتجاهها إذا علمت ثلاثة نقط بشرط ألا تكون على خط مستقيم. بالنسبة لأسطح البلورات فإننا لا نحتاج بالضرورة إلى التقاطعات مع الإحداثيات وإنما الأهم من ذلك هو نسب المسافات المحصورة

$$OA : OB : OC$$

و بالتالي

$$ma : nb : pc = m : n : p$$



شكل 4

والآن المستوى ABC يقطع الإحداثيات البلورية Ox, Oy, Oz عند معاملات الوحدات القياسية المقلوبة التي تسمى معاملات ميلر.

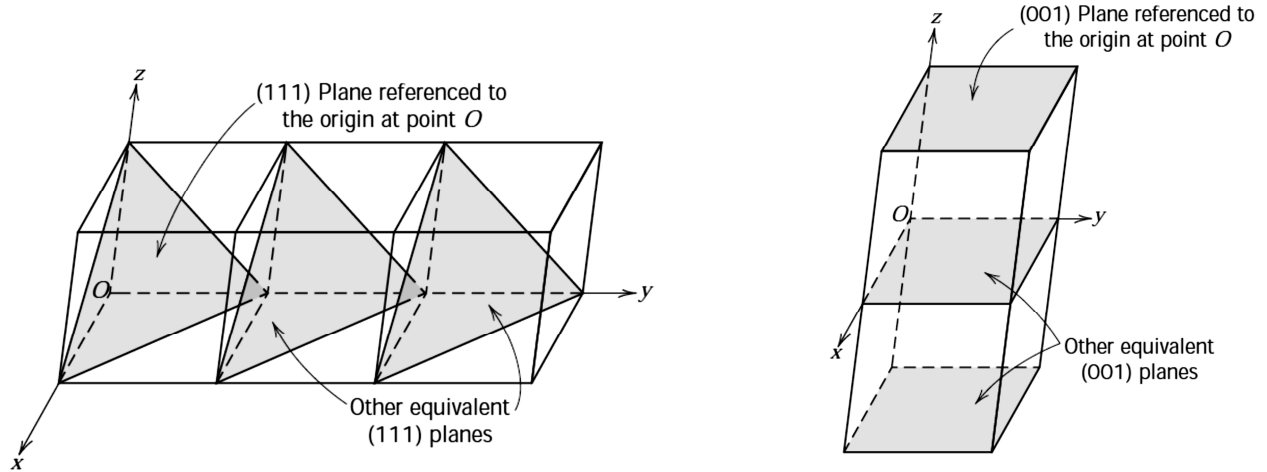
$$h = \frac{1}{m}; k = \frac{1}{n}; l = \frac{1}{p}$$

بشرط أن h و k و l تمثل أقل قيم صحيحة ممكنة تحقق المعادلة لأن هذه الأرقام تحدد أيضا كل المستويات الموازية للسطح ABC.

إذا كان مستوى ما مثلا يقطع المحاور على التوالي في مسافات 1, 2, 4 فان مقلوبات هذه الأرقام 1, 1/2, 1/4, و نعرف أن المضاعف المشترك الأصغر للمقام يساوي 4, نضرب كل مقام في 4 لتصبح النسب هي 4 : 2 : 1 , وهذه الأخيرة تمثل مقاديره بين قوسين معاملات ميلر (4 2 1)

فيما يخص التحليل التركيبي البلوري من الأجدى أن نحدد اتجاه المستوى بواسطة معاملات ميلر, فهي تقوم بدور تعديلي للمسافات المنحصرة بدلالة ثوابت نظام الإحداثيات البلورية. فنسب هذه المسافات بالنسبة لوحدات الإحداثيات البلورية هي كسرية في طبيعتها, لذلك يتم تعديلها بدلالة معاملات تؤدي نفس الغرض ولها قيم صحيحة.

يمكن استخدام الشارات السالبة لوصف اتجاه معين في الشبكة. في الحالة التي يأخذ فيها أحد المعاملات قيمة 0, ثم نحدد نقاط الإحداثيات الغير صفرية و نرسم منها متوازيات للمحاور ذات المعاملات الصفرية, أما اذا حدث التقاطع مع محور ما عند ما لا نهاية فان الإحداثي المناظر يكون صفرا.

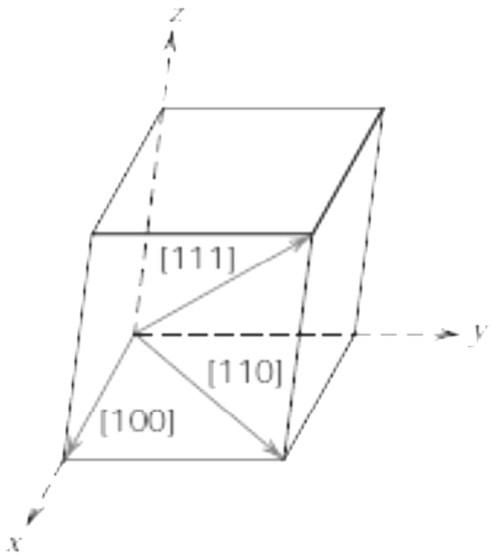


شكل 5 إحدائيات ميلر لبعض المستويات البلورية المهمة (001) و (111) والمستويات الموازية أو المتكافئة لها عن طريق الإزاحة.

2.5.3 المعاملات الاتجاهية $[uvw]$

يتم اختيار نقطة الأصل O من أركان الخلية الأساسية للبلورة بحيث يمر بها المتجه مع الاحتفاظ باتجاهات المحاور. نأخذ إسقاط المتجه ma و nb و pc على المحاور الثلاثة بدلالة أطوال متجهات القاعدة أي طول ضلع الخلية a و b و c .

هذه الإسقاطات على نظام الإحدائيات ليس لها مضاعف مشترك أكبر من الواحد الصحيح. فنقوم بتعديل نظام الإحدائيات بضرب هذه الأرقام للإسقاطات الثلاثة أو تقسيمها بعامل مشترك لاخترالها لأصغر ثلاثة أرقام صحيحة. في النهاية يُعطى الاتجاه المطلوب بوصل نقطة الأصل بنقطة المتجه فتوضع بين أقواس مربعة $[uvw]$ ، حيث u هو العدد الصحيح للإسقاط على المحور x ، ونفس الشيء بالنسبة ل v و w على المحورين y و z (الشكل 5).



شكل 6 الاتجاهات البلورية $[111]$ $[110]$ $[100]$ في الخلية الوحدة.

المتجهات البلورية في النظام المكعبي

يُعطى اتجاه الإحداثي x بواسطة المتجه $[100]$ واتجاه الإحداثي y بواسطة المتجه $[010]$ واتجاه الإحداثي z بواسطة المتجه $[001]$. ويلاحظ أنّ الاتجاه $[uvw]$ في البلورات المكعبية يكون دائماً متعامداً مع المستوى (hkl) الذي له نفس الأرقام، وان كان هذا الأمر ليس صحيحاً على إطلاقه في النظم البلورية الأخرى.

المتجهات المتساوية في كثافتها الذرية في النظام المكعبي هي المتجهات التي لها نفس الإحداثيات بغض النظر عن الترتيب والإشارة، عموماً تدعى عائلة المتجهات ويرمز لها بأقواس زوايا.

مثلاً العائلة $\langle 100 \rangle$ تتكون من المتجهات $[100]$ $[0\bar{1}0]$ $[00\bar{1}]$ $[\bar{1}00]$ $[010]$

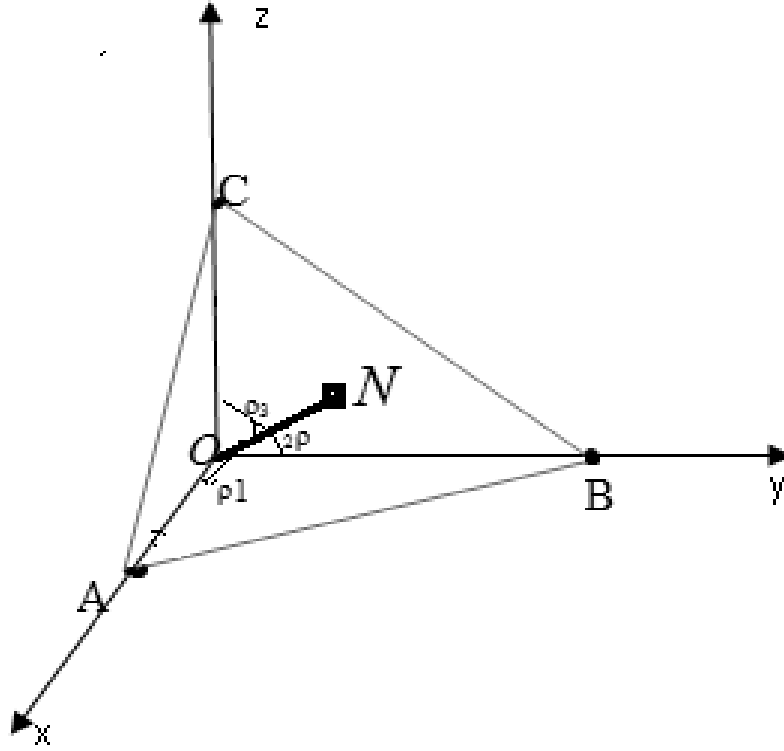
وقد تعني الإحداثيات (hkl) مستوى أو مجموعة من المستويات المتوازية. أما إذا ذكر المستوى (200) فيعني به المستوى الموازي للمستوى (100) ، ولكنه يقطع المحور a عند $1/2$. و عندما يقطع المستوى محورا إلى الجانب السالب من نقطة الأصل فإن الإحداثي المناظر لذلك يكون سالبا و توضع فوقه إشارة $-$. فمجموعة أوجه المكعب الستة تمثلها ببساطة العائلة $\{100\}$ التي تقوم مقام المستويات $(0\bar{1}0)$ $(\bar{1}00)$ $(00\bar{1})$ (010) (001) (100) .

3.5.3 المتعامد على مستوى بلوري

نعين خط متعامد على المستوى ABC (حسب الشكل 6)، أحيانا يسمى المتعامد على المستوى Normale، إذ يعبر على أقصر مسافة بين المستوى ABC و نقطة الأصل O . زوايا المتعامد ON على الإحداثيات OX و OY و OZ هي ρ_1 و ρ_2 و ρ_3 وفواصله على الإحداثيات البلورية هي كالتالي

$$\cos \rho_1 : \cos \rho_2 : \cos \rho_3 = \frac{1}{OA} : \frac{1}{OB} : \frac{1}{OC} = \frac{1}{ma} : \frac{1}{nb} : \frac{1}{pc}$$

من خلال العلاقة بين المثلثات AON و BON و CON ، بحيث المسافة OA تساوي am ، المسافة OB تساوي bn ، المسافة OC تساوي cp .



شكل 7

نستخدم بعد ذلك معاملات ميلر للمستويات لكي نستخلص العلاقة

$$\cos \rho_1 : \cos \rho_2 : \cos \rho_3 = \frac{a}{h} : \frac{b}{k} : \frac{c}{l}$$

التي تبين ارتباط جيوب التمام الاتجاهية للمتعامد على مستوى بمعاملات ميلر لنفس المستوى (علاقة بالغة الأهمية في علم البلورات).

في حالة النظام المكعبي البسيط ليس هنالك اختلاف في أطوال الخلية الأساسية, لذا فان معاملات ميلر لمستوى هي جيوب التمام الاتجاهية cosine directions للمتعامد على نفس المستوى

$$h : k : l = \cos \rho_1 : \cos \rho_2 : \cos \rho_3$$

يتم تحديد الاتجاه المستويات البلورية بواسطة اتجاه المتعامد عليها بدلالة معاملات ميلر أو الزوايا المنحصرة بين المتعامد والإحداثيات البلورية. فبالتالي يمكن الاستغناء على قياس المسافات عن

نقطة الأصل وتعويضها بنسب المقاطع على الإحداثيات و بالضبط جيوب التمام الاتجاهية للعمودي على المستوى.

6.3 التركيب البلوري للفلزات

إن الفلزات تتبلور على العموم في تراكيب عالية التناظر (غالبا مكعبية), إذ يمكن تمثيلها بنموذج الكرات المتراسة لتسهيل التحليل الهندسي لبنياتها البلورية. الترابط الفلزي غير اتجاهي حيث ترابط ذرات الفلز المتجاورة بشكل منتظم وثابت في عامة الاتجاهات.

العدد التنسيقي *coordination Number* : حسب نموذج الكرات المصمتة فإنه عدد الذرات التي تلامس الذرة.

العدد الفعلي للذرات في الخلية: يمثل عدد الذرات في الخلية بالأخذ بالاعتبار للخلايا المجاورة بشكل مباشر. فنصيب الخلية من ذرة المركز الحجمي هو ذرة واحدة, أما نصيبها من ذرة واقعة في ركن الخلية المكعبية مثلا هو $1/8$ ذرة ومن ذرة تقع عند مركز وجه المكعب هو $1/2$ ذرة.

معامل الرص الذري *Atomic Packing Factor (APF)*: يمثل نسبة الحجم الذي تحتله الذرات في الخلية. الخلايا المعتادة التي تتبلور فيها عامة الفلزات تعتبر نسبيا بسيطة من أصناف النظام المكعبي FCC و BCC و صنف النظام السداسي HCP.

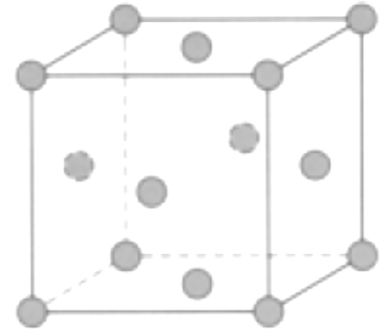
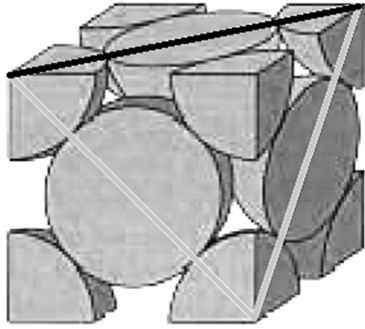
1.6.3 النظام المكعبي مركزي الوجه *Face-Centered-Cubic (FCC)*

الخلية الوحيدة عبارة عن مكعب تقع الذرات في كل ركن من أركانه و في مركز كل وجه من أوجهه. تتلامس الأيونات الفلزية مع بعضها البعض الآخر.

العدد التنسيقي يساوي 12, فاذا اعتبرنا ذرة في مركز الوجه, فإنها تلامس أربع ذرات في الأركان وأربع لمراكز الأوجه الأمامية وأربع لمراكز الأوجه الخلفية. في الواقع, جميع الذرات في النظام البلوري متساوية و متماثلة بمعنى أنه إذا وجدنا العدد التنسيقي لذرة فإن جميع الذرات يكون لها نفس العدد التنسيقي.

العدد الفعلي للذرات في الخلية 4, هذا العدد يمثل نصيب كل خلية من ذرات الأركان الثمانية مضروب في $1/8$ و من ذرات مراكز الأوجه الستة مضروب في $1/2$

معامل الرص الذري *APF* يساوي 0.74 (أي الحد الأعلى لنموذج الكرات المصمتة فتأبت الشبكة أي طول وجه المكعب في هذه الحالة يقارب ضعفي قطر الذرة).



شكل 8 مقطع مكعبي لبعض الكرات المصمتة ذات الرص المتلاصق في بلورة مكعبية متمركزة الوجه FCC، على اليمين الشكل المبسط

2.6.3 النظام المكعبي مركزي الجسم (BCC) Body-Centered-Cubic

العدد التنسيقي هنا هو 8، في هذه الحالة نجد أن ذرات الأركان الثمانية تلمس الذرة في مركز المكعب. يمكن التعبير عن بعد الشبكة بواسطة طول ضلع المكعب بدلالة نصف القطر الذري

$$a = \frac{4 \cdot R}{\sqrt{3}}$$

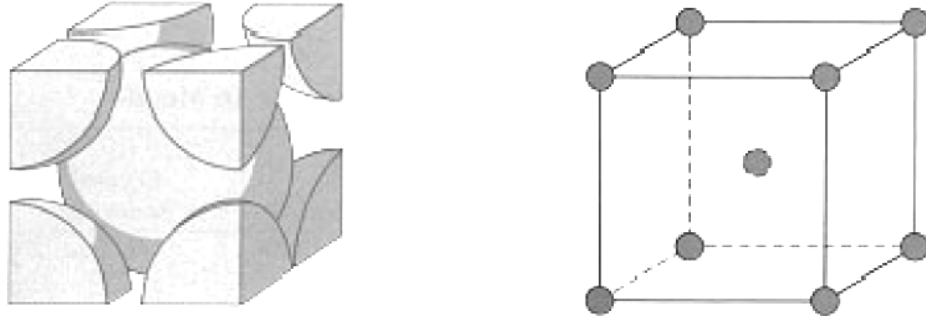
العدد الفعلي للذرات في الخلية: نجد أن ذرة المركز بكاملها داخل الخلية، وذرات الأركان نصيب كل خلية منها 1/8، ولدينا 8 أركان في المكعب، فالعدد الصافي لذرات الأركان في المكعب هو:

$$8 \cdot \frac{1}{8} = 1 \text{ ذرة. أما بالنسبة ذرة المركز فتعد خالصة للمكعب إذ تحسب } 1 \cdot 1 = 1 \text{ ذرة،}$$

و بالتالي فالعدد الفعلي للذرات هو 2 ذرة.

معامل الرص الذري APF يساوي 0.68 (يأخذ في الاعتبار عامل التشابه لكل ذرات المكعب)

هناك عدة معادن لها هذا النوع من الخلايا الوحدة Cr, Mo, Na, K α , Fe

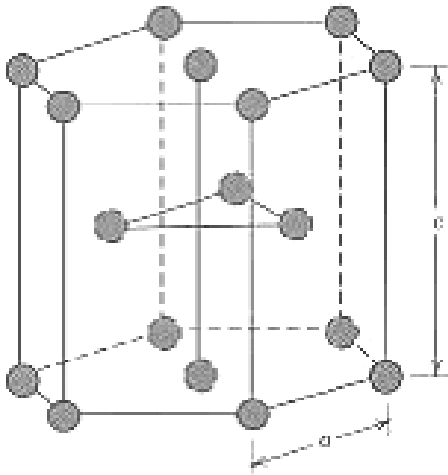


شكل 9 شكل يوضح توزيع الذرات في البنية البلورية BCC, على اليمين الشكل المبسط وعلى الشمال نموذج الكرات المصمتة

3.6.3 التركيب البلوري السداسي متلاصق الرص HCP

هذا التركيب أساسه شبكة سداسية بسيطة من شبكات برافيه, وتتكون من رص شبكيتين مثلثتين ذواتي بعدين.

وفي هذه الحالة هنالك ثابتين يحددان أبعاد الشبكة, الأول a يحدد اتجاه الرص موازي للقاعدة السداسية للخلية والثاني يقوم برص المستويات بحيث تعبئ المستويات فوق بعضها بمسافة ثابتة مقدارها c , والنسبة $c/a = 1.633$.



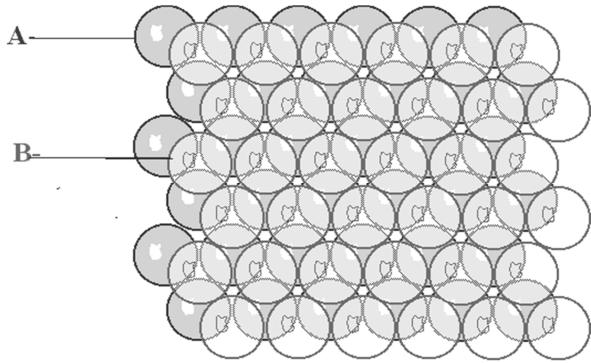
شكل 10 التركيب البلوري السداسي متلاصق الرص (نموذج الكرات المصمتة)

العدد التنسيقي يساوي 12, والعدد الفعلي للذرات في الخلية هو 6 ذرات, أي 3 ذرات المستوى الاستوائي للخلية, وذرة واحدة تتقاسمها ذرتي القاعدة و ذرتين تقاسمهما 12 ذرة ركنية للخلية السداسية (شكل 9).

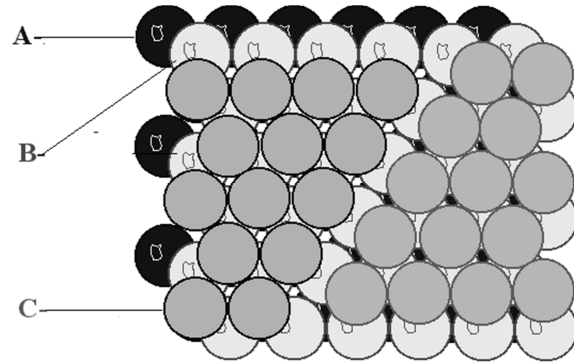
معامل الرص النري APF يساوي 0.74.

و من بين الأمثلة التي لها هذا النوع من الخلايا الوحدة Ti و Zn و Mg و Cd .

فالملاحظ في الفلزات أنّ خلايا FCC و HCP لهما نفس معامل الرص الذي يساوي 0.74, لكن هناك اختلاف في رص الطبقتين الثانية والثالثة (شكل 10). عند القيام برص كرات معدنية بحيث تكون الطبقة الأولى مثلثية مستوية, أما الكرات في الطبقة الثانية فتوضع فوق الفراغات الموجودة في الطبقة الأولى, وعندها يمكن أن توضع كرات الطبقة الثالثة في فجوات بحيث توازي كراتها كرات الطبقة الأولى في موقعها, يعني رص من صنف ABAB ... , أو أن توضع كرات الطبقة الثالثة في فجوات أخرى بحيث لا توازي كراتها تلك للطبقة الأولى لتكون رصا من صنف ABC ABC... . فالصنف ABAB ... تنتج عنه شبكة FCC المكعبية, أما الصنف ABC ABC... فيكون شبكة HCP السداسية.



الصنف ABAB ... لشبكة FCC المحكمة الرص



الصنف ABC ABC... لشبكة HCP المحكمة الرص

7.3 التماثل البلوري

إن أنظمة البلورات السبع ليست كافية لوصف البنيات الهندسية للخزفيات, ويشترط في اختيار القاعدة المناسبة أن تكون متطابقة في تركيبها واتجاهها, لأن متجهات القاعدة هي الأساس الذي ستقوم عليه كل عمليات التماثل لوصف الخلية الوحدة وبالتالي تحديد التركيب البلوري. وتجدر الإشارة إلى أن متجهات القاعدة لا تمثل بالضرورة ثوابت الخلية الوحدة إلا في حالات الشبكات البدائية ذات قاعدة أحادية.

1.7.3 عمليات التماثل النقطية

ان عمليات التماثل في البلورات المثالية هي اهم الميزات التي تصف البناء البلوري, اذ بإجراء هذه العمليات يعود البناء البلوري لوضعه الأصلي, فعمليات الإزاحة والدوران والانعكاس تعتبر من عمليات التماثل الأساسية, فهي تتم في حد ذاتها بطرق هندسية بحثة مستقلة عن التركيب تسمى عمليات التماثل النقطية التي تحتوي على العناصر التالية:

محور *الدوران*, مضاعفات صحيحة لدوران بزواوية مقدارها $\pi/2n$ وتُمثل المحاور بالرمز n , وقد وُجد أن شبكات براهيه البلورية لا تحتل إلا وجود محاور 1 و 2 و 3 و 4 و 6, فهي تناظر زوايا دوران على الترتيب 360, 180, 120, 90, 60 درجة.

محور *الدوران الانعكاسي*, وحوله يكون الدوران بزواوية مقدارها $\pi/2n$ مصحوبا بانعكاس في مستوى مرآوي متعامدا مع المحور.

محور *الدوران الانقلابي*, وحوله يتم دوران بزواوية $\pi/2n$ متبوعا بانقلاب خلال نقطة ثابتة تقع على محور n في دوران انقلابي.

نقطة *الانعكاس*, وفيه تتحول كل نقطة إلى صورتها في مرآة يمثلها مستوى يعرف بالمستوى المرآوي.

نقطة الانقلاب, وتحدث هذه العملية خلال نقطة ثابتة هي مركز الانقلاب بحيث تتحول أية نقطة يحددها متجه (r) إلى نقطة يحددها متجه آخر هو (-r).

2.7.3 الطوائف النقطية Point Groups

يعتبر مبدأ اللاتغير *Invariance* أساس تقسيم البلورات إلى فئات وطوائف, فهو يحتم عدم تغيير الصورة الأصلية للشكل الهندسي بعد إجراء عمليات التماثل كالدوران أو الإزاحة. تصنف العديد من البلورات في مجموعات معينة تدعى الطوائف, تدخل في نطاق ما يسمى في الجبر بالطوائف المنفصلة أو بالضبط Discrete Groups. يتم تعريف كل طائفة بعناصر التماثل التي تحتويها وعمليات الربط بين تلك العناصر. هناك 32 طائفة بلورية معرّفة برموزها ومنتفق عليها دولياً من خلال الأعمال التي قام بها *Hermann* في 1928 و *Mauguin* في 1931. تتمثل هذه الطوائف في أجسام هندسية حقيقية (Polyhedra) وتوصف برموز متكونة من أحرف أو إشارات متتالية, مع الأخذ بعين الاعتبار التالي في ترتيب الرموز (فالترتيب لا يكون بالضرورة تبادلياً). وهذه أمثلة لبعض الطوائف:

| | |
|------------|--|
| n | يشير إلى النوع من الطوائف التي لا تحتوي إلا على محور دوران ذي n طية |
| \bar{n} | تحتوي هذه الطائفة على محور دوران انقلابي n- طية وتضم هذه الطائفة ذات محور دوران انعكاسي, S6 التي تؤول إلى $\bar{3}$ و S4 التي تؤول إلى $\bar{4}$ |
| nmm | الطوائف التي تحتوي بداخلها على مستويين مرآويين محددتين يتقاطعان على محور دوران ذي n طية (مثال mm2, mm4, mm6) |
| m3 | طائفة يكون فيها المحور 3 هو المحور الرئيسي ينتج معه ثلاثة مستويات تماثل m |
| n22 | طائفة تتعامد فيها المحاور ذات الطيتين مع المحور الرئيسي |
| $m\bar{n}$ | طائفة تحتوي على محور دوران انقلابي n طية يوازي مستوى مرآوي m |
| m/n | طائفة تحتوي على مستوى مرآوي يقطعه محور ذي n طية ويتعامد معه |

وتتضم تحت الطائفة n/m كذلك طوائف متكافئة أخرى:

$$m/\bar{6} = m/6; m/\bar{3} = m/6; m/\bar{4} = m/4; m/\bar{2} = m$$

| | | | | | | |
|---|-----------|-------|------------|-----|-------------|-------------|
| | | | | | 1 | $\bar{1}$ |
| | | | | 2 | m | $2/m$ |
| | | | | 222 | mm2 | mmm |
| 4 | $\bar{4}$ | $4/m$ | 422 | 4mm | $2m\bar{4}$ | $4/mmm$ |
| | | 3 | $\bar{3}$ | 32 | 3m | $m\bar{3}$ |
| 6 | $\bar{6}$ | $6/m$ | 622 | 6mm | $2m\bar{6}$ | $6/mmm$ |
| | | 23 | $m\bar{3}$ | 432 | $3m\bar{4}$ | $m\bar{3}m$ |

جدول 4 تصنيف الدولي للطوائف النقطية International symbols

| التصنيف الدولي | تصنيف "شونفليس" | التصنيف الدولي |
|---------------------------|-----------------|---|
| $m\bar{3}m$ (Octahedron) | O_h | طائفة مكتملة للمكعب ثماني الأوجه الذي يدل عليه الحرف O. (h مستوى انعكاس أفقي) |
| 432 | O | المجموعة المكعبية التي لا تتضمن اية عمليات تماثل غير سوية |
| $\bar{4}3m$ (Tetrahedron) | T_d | مجموعة التماثل المكتملة لرباعي الأوجه المنتظم الشامل لكل العمليات |
| 23 | T | مجموعة رباعي الأوجه المنتظم مع استبعاد كل العمليات غير السوي |
| $m\bar{3}$ | T_h | يضاف إلى المجموعة T الانقلاب والانعكاس على مستوى أفقي |

جدول 5 تصنيف الطوائف المكعبية

8.3 التركيب البلوري للخزفيات

بالنسبة لبلورات الخزفيات Ceramics يأخذ مفهوم الرص, أو إحكام التعبئة, المعروف لذا الفلزات بُعداً آخر. فيعتمد التماثل أيضاً على العناصر المكونة لقاعدة الخلية الوحدة والارتباط الذري. فالخلايا الأساسية للفلزات النقية تكون عموماً أحادية القاعدة, أي تضم ذرة عنصر واحد يصاحب كل نقطة من نقاط الشبكة البلورية, أما قواعد الخلايا الأساسية للخزفيات فقد تحتضن مجموعة من الذرات ذات أحجام المختلفة وارتباط هندسي معين.

تتكون بلورات الخزفيات عموماً من أيونات سالبة تسمى أنيونات *anions* وأيونات موجبة, غالباً من عنصر فلزي, تسمى كاتيونات *Cations* وشحنة كل أيون تساوي مضاعفاً بسيطاً لشحنة الإلكترون. وفي هذا الباب يكون من الأجدى دراسة التراكيب البلورية للخزفيات البسيطة لأنها مواد طبيعية معروفة, يجري عليها الكثير من الحسابات النظرية والتجريبية كما بحث الكثير من خواصها الفيزيائية. فهناك اختلاف شاسع في البنى البلورية بدءاً بالتركيبات البسيطة للهاليدات أحادية التكافؤ و الألماس إلى أن يشمل تراكيب معقدة كالسليكات والمركبات بين المعدنية.

عند معالجة الارتباط الذري في البلورة يأخذ بعين الاعتبار التجاذب الكهروستاتي بين إلكترونات التكافؤ للذرات, لهذا يجب التساؤل عن طبيعة هذه القوى التي تمسك بأجزاء هذه البلورات في الحالة الجامدة. في حالة الارتباط الأيوني تتوزع الشحنات الإلكترونية حول النواة بشكل شبه متماثل في الفضاء الخارجي للذرات مشابهاً لذلك في تركيب ذرات الغازات الخاملة مع بعض التشويه في المناطق التي تتلامس فيها الأيونات. أما إذا كان نوع الارتباط تساهمياً فتتوزع الشحنات الإلكترونية في الفراغ بشكل غير استمراري يأخذ طابعاً اتجاهياً. في الواقع هناك مدى متصل للارتباط بين الطابع الأيوني و الطابع التساهمي يقدر بنسبة الربط الأيوني % ionic character. لقد تمكن بولينج Pauling من عمل مقياس يعتمد على خاصية السالبية الكهربية electronegativity التي تمثل قدرة الذرة على جذب الإلكترونات إليها في تركيب معين, وذلك للتخلص من هذا الخلط في تعريف الروابط في البلورات (نظرية التراكيب الأيونية).

عند حدوث الاتزان الحراري, يمكن تحديد تناسق الأيونات بدلالة أنصاف القطر النسبية r_c / r_a للكاتيون c على الأنيون a , فالكاتيونات تميل ليكون لها أكبر عدد تناسق. عندما تبلغ r_c / r_a قيمتها الحرجة المطلوبة للاتزان تصبح عندها الأيونات متلامسة, فيمكننا استخلاص الكيفية الهندسية التي يرتبط بها كل أيون مع أقرب جيرانه (كما في الجدول التالي).

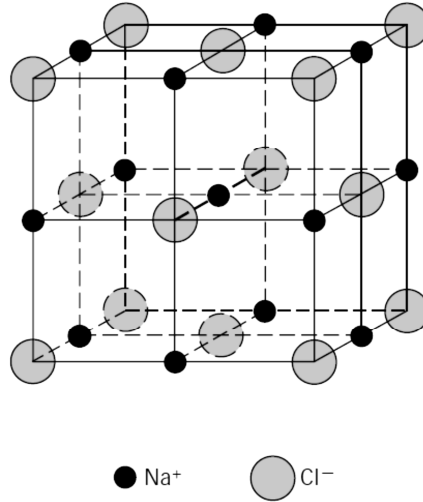
| هندسة موقع الكاتيون | عدد التناسق (للكاتيون) | قيمة r_c/r_a |
|---------------------|------------------------|----------------|
| triangular planar | 3 | 0.255 _ 0.155 |
| Tetrahedron | 4 | 0.414 _ 0.255 |
| cubic | 6 | 0.732 _ 0.414 |
| Octahedron | 8 | 1 _ 0.732 |

في حالة التركيبات البسيطة مثلا المركبات ثنائية الذرة NaCl و ClCs وغيرها، يمكن الاعتماد على جداول نسب أنصاف القطر الأيونات، إلا أنه في حالات أخرى يمكن استخدام عمليات تداخل أو ضم أكثر من شبكة بلورية، مثال شبكة ZnS المتكونة من تداخل شبكتين متمركزتي الوجه FCC. والشرط الأساسي لتعريف مثل هذه العمليات هو أن إجراءها يجب أن يكون داخلا في نطاق شبكات برافيه والطوائف النقطية.

1.8.3 التركيب البلوري نوع AX₂

كلوريد الصوديوم NaCl

تتكون هذه البلورة من أعداد متساوية من أيونات الكلور Cl^- وأيونات الصوديوم Na^+ . عدد التناسق لكل أيون يساوي 6، أي ستة أيونات من النوع المخالف. نصف طول قطر خلية الوحدة المكعبة في الشبكية البلورية الفراغية ويمكن اعتبار التركيب البلوري لكلوريد الصوديوم ينتمي إلى الشبكة المكعبية متمركزة الوجه FCC، بشرط أننا نفترض أن الخلية مكونة من شبكتين فرعيتين متداخلتين من نوع FCC، إحداهما لأيونات Na^+ والأخرى لأيونات Cl^- ، ثم أزيحت هاتان الشبكتان الفرعيتان بالنسبة لبعضهما البعض بمقدار نصف طول ضلع المكعب (انظر الشكل 11).



شكل 12

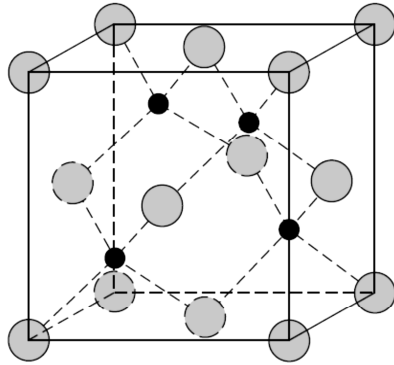
الخلية الوحدة و التركيب البلوري NaCl

كلوريد السيزيوم CsCl

تنتمي إلى النظام البلوري المكعبي أو بالضبط إلى الشبكة المكعبية متمركز الجسم BCC. تتخذ أيونات السيزيوم Cs^+ مواقعها عند نقاط شبكة مكعبية متمركزة الجسم بحيث يكون لكل ايون ثمانية جيران من النوع المخالف، وبالتالي عدد التناسق لكل أيون يساوي 6. ويكون التماثل الانتقالي لهذا التركيب هو تماثل شبكة برافيه المكعبية البسيطة، ذات قاعدة مكونة من ايون سيزيوم عند نقطة الأصل و أيون كلور عند مركز المكعب. وبهذا تحتوي الخلية عددا خالصا من ذرات و يساوي 1 ذرة في كل خلية لكل من الكلور ومن السيزيوم.

تركيب بلورة كبريتيد الزنك ZnS و الألماس C

وتتكون شبكة ZnS من مكعبين فرعين متداخلين من نوع FCC، حيث يكون كل منهما مزاح في اتجاه قطر الخلية المكعبية بمقدار ربع طول القطر. وهذا التركيب البلوري له عدد التناسق بمقدار 4، أي كل ذرة لها اربع جيران مرتبطة معهم بأدنى قيمة للمسافة بين الذرية، وبالتالي فالموقع الذي تحتله الذرات يوصف بأنه رباعي أوجه منتظم Tetrahedral site.



شكل 13

الخلية الوحدة والتركيب البلوري ZNS

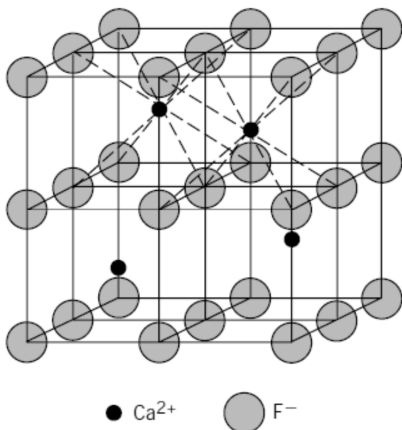
في حين أن الشبكة يمكن اعتبارها تنتمي إجمالاً إلى نظام المكعب متمركز الأوجه FCC مركب من قاعدتين، الأولى إحداثياتها عند نقطة الأصل و الثانية إحداثياتها عند

$$(z+y+x) \cdot a/4$$

أي عند مركز المكعب الممثل لربع الخلية. ويعتبر الارتباط الذري في بلورة الألماس تساهمي عالي التوجيه، حيث يخفض من

عدد اقرب الجيران ويزيد من حجم الفراغات الداخلية للخلية، ونتيجة لذلك فإن عامل التعبئة منخفض و يقدر فقط بنسبة 34%.

2.8.3 التركيب البلوري نوع $A_m X_p$



شكل 14 الخلية الوحدة والتركيب البلوري

للفلوريت (CaF₂)

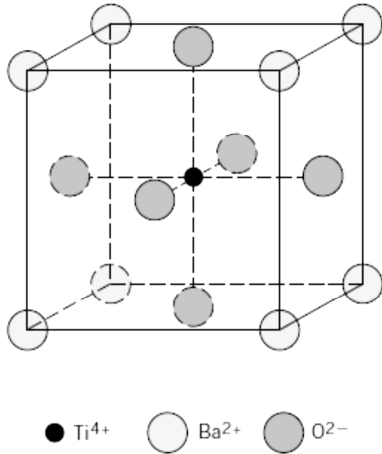
الملاحظ في هذا النوع من التركيب هو أن عدد الشحنات للكاتيون ولأنيون غير متساويين، وبالتالي تعين بارامترات m و p للتركيب $A_m X_p$ ، إذ لا يمكن لكلاهما أن يساويا 1 في آن واحد. من الأمثلة المعروفة لهذه التراكيب الفلوريت (CaF₂). التركيب البلوري يشبه إلى حد ما شبكة BCC لتركيب CsCl. يقسم مكعب الخلية إلى 8 مكعبات متساوية، تحتل أربع أيونات Ca²⁺ مراكز حجم المكعبات

الفرعية بشرط ألا تكون متجاورة، أما أيونات F^- فتأخذ موقعها عند كل ركن من المكعبات الفرعية الثمانية.

فالنتيجة الأنيون F^- يحيط به اربع كاتيونات Ca^{2+} فتحتل موقع رباعي أوجه منتظم، أما Ca^{2+} فيحيط بها ثمان F^- لتحتل موقع مكعب بسيط أو بعبارة أخرى عدد التناسق للأنيون F^- يساوي 4 وللكتيون Ca^{2+} يساوي 8. هذا الاختلاف في عدد التنسيق وفي شكل الموقع الهندسي راجع إلى انب عدد الكاتيونات Ca^{2+} الصافي في الخلية يمثل نصف عدد أنيونات F^- . زيادة على ذلك، فالتركيب البلوري يحاول أيضا تحقيق التعادل من جانب الشحنات الكهربائية للأيونات. وهناك مواد أخرى لها نفس التركيب تشمل مثلا الأكاسيد ThO_2 , PuO_2 , UO_2 .

3.8.3 التركيب البلوري نوع $A_m B_n X_p$

تتكون هذه البلورة من عدد m للكاتيونات A وعدد n من الكاتيونات B أما الرقم p فيعين عدد الأنيونات X . من اهم التراكيب المنحصرة تحت هذا التصنيف يمثلها الباريوم تيتانات $BaTiO_3$ إذ يشتهر بخواصه الكهرو ميكانيكية المتميزة، وبنيتنه البلورية تسمى تركيب البيروفسكيت *structure perovskite*.



وتتبلور في النظام المكعبي عند درجات حرارة فوق $120^\circ C$. تتكون الوحدة الأساسية (القاعدة) من كاتيونات الباريوم Ba^{2+} تحتل مواقع الأركان الثمانية من المكعب وكاتيون التيتان Ti^{4+} الذي يحتل مركز المكعب أما الأنيون O^{2-} فيتخذ المواقع الستة لمراكز أوجه المكعب.

أما شكل الموقع الذي يحتله الكاتيون Ti^{4+} المرتبط بالأنيونات الستة O^{2-} فهو ثماني أوجه منتظم *Octahedral site*، أي عدد تنسيق Ti^{4+} هو 6.

شكل 15 الخلية الوحدة و تركيب بلورة

بيروفسكيت ($BaTiO_3$)

9.3 حساب الكثافة للجوامد البلورية

يُمكن استنتاج كثافة المادة من خلال كثافة الخلية الوحدة عن طريق التماثل بالإزاحة, ويُفترض أيضاً أنّ الذرات تكون عبارة عن كرات مصمتة و مترابطة فيما بينها.

عدد الذرات في الخلية المكعبية البسيطة (c.s) هو 1 (8 أركان مقسومة على ثمان خلايا مجاورة)

عدد الذرات في الخلية المكعبية المتمركزة الجسم BCC هو 2 (1 للأركان و 1 للمركز)

عدد الذرات في الخلية المكعبية المتمركزة الأوجه FCC هو 4 (1 للأركان و 3 للأوجه أي 6

ذرات مقسومة اثنين من الخلايا المتجاورة لكل ذرة)

يفترض أنّ الشبّكة تكون مشغولة بذرات متماثلة لها نصف قطر R وبالتالي يكون الحجم بدلالة ثابت

الشبّكة المكعبية a

$$V_c = a^3$$

تحسب a بدورها بدلالة نصف قطر الذرة R, فيكون حجم الخلية V_c

$$R \quad a_{BCC} = 4/\sqrt{3} \quad ; \quad R \quad a_{FCC} = 2\sqrt{2}$$

وان كل خلية تحتوي عدد معين من ذرات, يمكن حساب كتلة الخلية وبالتالي الكثافة حيث

$$\text{الكثافة} = \text{كتلة الخلية الوحدة} / \text{حجم الخلية}$$

n عدد ذرات كل خلية لها الكتلة الذرية A, ونظراً أنّ الكتلة الذرية A تعطى بالجدول الدوري

(amu) و عدد أفوجادرو هو 6.023×10^{23} ذرة/مول N_A

تكون الكثافة هي

$$\rho = \frac{nA}{V_c N_A}$$

الكثافة الخطية: هي ببساطة عدد الذرات في وحدة أطوال من المُنْتَجِه ويمكن تعريفها تساوي عدد أقطار الذرات التي تتقاطع مع طول مختار من المُنْتَجِه.

الكثافة السطحية: هي عدد الذرات في وحدة المساحات من مستوى معين.

تبدو أهمية هذا التعريف عند دراسة بعض الخواص الفيزيائية كظاهرة اللدونة التي تعتمد على الانزلاق عبر المستويات البلورية ذات كثافة عليا، و خاصة في الاتجاهات عالية الرص الذري

مثلا علاقة مستويات الانزلاق بحركة الانخلاعات وخواص اللدونة للمواد البلورية.

ترتبط الخواص الفيزيائية للبلورات بطبيعة العناصر الداخلة التركيب البلوري و بالمواقع التي تشغلها تلك العناصر بالنسبة لبعضها البعض. فرغم أن النظام المكعبي في شبكة FCC يعتبر عالي التناظر فان العديد من الخواص يمكن أن تتغير بدلالة كثافة الرص حسب الاتجاه البلوري، وبالتالي تأخذ طابعا اتجاهيا يسمى *Anisotropy* في الخواص. تتأثر خاصية الانفعال الميكانيكي أو الاستطالة في المواد المتعددة التبلور بالاتجاه، ويُعبّر عن هذا فيزيائيا بواسطة المركبات المختلفة لمعامل المرونة، فيُفرض اتجاه مفضل على استطالة البلورات وعلى نسيج المادة *Texture* الإجمالي.

فالخواص القياسية في المادة المتبلورة عموما لا يمكن أن تُوصف بثوابت رقمية ولكن يعبر عنها بكميات مُتَّجِهَة أو بواسطة مُتَّجِه *Vector* ذات ثلاث مركبات في نظام الإحداثيات، وهي الكميات التي تحتاج في تعريفها إلى وجود مقدار واتجاه. وقد يطلق على المُنْتَجِه مصطلح ممتد *tensor* من الرتبة الأولى، يتميز بثلاثة أرقام أو مركبات ترتبط كل منها بأحد المحاور التي تمثل نظام الإحداثيات المتفق عليه لوصف الخواص البلورية للمادة. كما أن كميات أخرى توصف بممتد من الرتبة الثانية، والذي يحتوي على تسع مركبات يرتبط كل منها بزواج من المحاور أي أنها ترتبط بين مُتَّجِهين. تحليليا يعبر على الممتد بواسطة المصفوفات كأداة رياضية تحدد هذه الكميات القياسية للخواص المتباينة أو اللاإيزوتروبية للمادة فتمنحها معنى فيزيائيا.

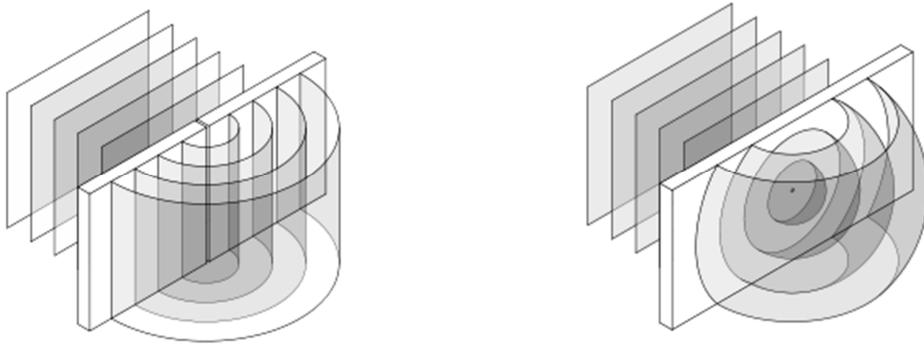
10.3 تعيين التركيب البلوري

1.10.3 ظاهرة الحيود

نظريا اتضح على يد ماكسويل Maxwell أنّ الضوء عبارة عن موجات كهرومغناطيسية, لكن اكتشاف الأشعة السينية على يد رونتجن Roentgen بدأ التيقن العملي بأن الضوء عبارة عن موجات لها نطاق مستمر من الطول الموجي. فبالنسبة للأشعة السينية يمكن أن يصل الطول الموجي إلى عُشر الأنجستروم, 0.1 \AA إلى 10^{-11} متر, مما يجعل الروابط بين الذرات لا تتأثر بانبعث هذه الأشعة بشكل واضح. وبالتالي, يتم التحكم في الشعاع الإلكتروني عن طريق الأنبوبة بواسطة الجهد التعجيل الكهربائي و مجمعات تعطي للشعاع النهائي الشكل و البُعد المرغوب فيه. إنّ إنتاج شعاع مستمر يعتمد على عنصر المادة المستخدم في المصدر, لأن استثارة الإلكترونات من ذراتها تتم في القشرات الداخلية. لذا يلزم طاقة كافية لجعل إلكترونات المدارات الداخلية تترك مواقعها, ثم يتم ملئها بسرعة بإلكترون من مستويات أعلى. وحسب ما تنص عليه قوانين فزياء الذرة, أنّ أثناء انتقال الإلكترون من قشرة ذرية إلى أخرى في الاتجاه الداخلي للذرة يتبدد التغير الحاصل في الطاقة على شكل أشعة منبعثة من الذرة لها طول موجي مميز

$$h \cdot c = E / \lambda \quad \text{مميز}$$

حيث h ثابت بلانك و c سرعة الضوء في الفراغ و E طاقة الشعاع.



شكل 16

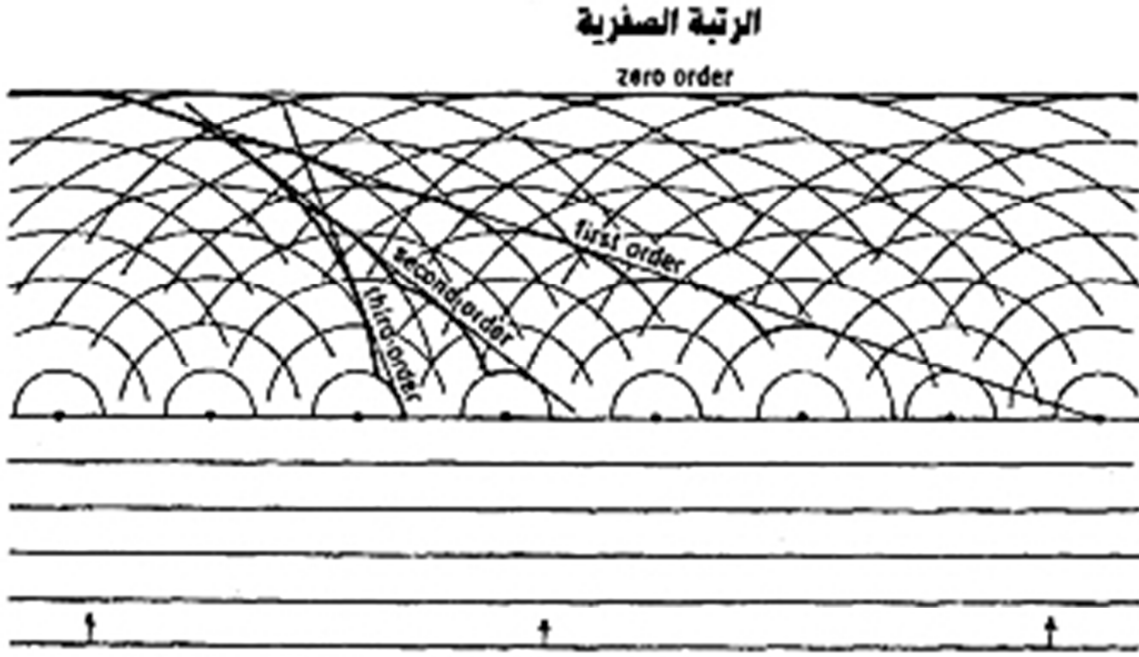
حيود الضوء بواسطة شق ضيق (على اليسار) وثقب صغير (على اليمين) بعدهما أصغر من طول الموجة الساقطة. ونتيجة للحيود تنشأ أغلفة موجات ذات شكل اسطواني (يسار) أو كروي (يمين)

يتم اختيار الطول الموجي حسب العناصر الكيميائية لأن تردد خطوط انبعاث الأشعة السينية لا تتوقف إلا على العدد الذري حسب ما توصل له موزلي عمليا 1913 Moseley. من الأطوال الموجية للإشعاع المشهورة في علوم البلورات $(\text{Cu K}\alpha_1)$ λ و مقدارها حوالي 1.54059 \AA , وموقع الشاغر للإلكترون يوجد في القشرة K.

عندما تنتشر الموجية للضوء كاضطرابات في الفراغ يشكل سطحها الأمامي واجهة تسمى واجهة الموجة wave front. ويبدو هذا التأثير واضحا عندما تصطدم واجهة الموجات الأصلية بحاجز ذا شق مجهري، يطابق ضيقه الطول الموجي المستخدم، ينحني خط واجهة الموجة ليكون قوسا دقيقا. فالشق يمكن اعتباره مصدرا لجهة موجة ثانوية تنتشر بنفس الطول الموجي. وهذا صادر مما نص عنه مبدأ هايجنز Huygens principle, وتجدر الإشارة إلى أن هذا يختلف عن الانكسار العياني الحادث لشعاع الضوء المستقيم عندما تتغير طبيعة الوسط لأن الطول الموجي و حجم مصدر الانعكاس الضوئي يختلفان في أبعادهما.

عندما ينتشر الضوء عند ثقب موزعة بينها مسافات بينية متساوية تلقي بظلال على شكل شرائط متوازية تتناوب بين المعتمة و المضئية, وان مدى هذه الشرائط له علاقة بالطول الموجي و والمسافات البينية بين الثقوب وطور الموجة حين الاصطدام بالعائق, هذه الظاهرة تسمى حيودا بشكل عام. كل ثقب يحدث حوله مجموعة أغلفة كروية الشكل توازي جبهة الموجة في الفضاء ثلاثي البعد (شكل 15). فيمكن ربط الأغلفة المنبعثة من مصادر مختلفة بخطوط المماس, حيث تتذبذب الموجات في طور موحد لتشكل جبهة حيود موحدة تتقوى فيها الموجة فيزداد مداها. والملاحظ أن الجبهات الموحدة تتقاطع مع خط الجبهة الأصلية للشعاع الساقط بزواوية معينة تعرف ما يسمى برتبة الحيود. إن جبهة الشعاع الأصلي تمثل الرتبة الصفرية للحيود, وخطوط المماسات المشتركة التي تشكل أصغر زاوية مع الشعاع الأصلي تشير إلى جبهات حيود من الرتبة الأولى ونفس الشيء بالنسبة للرتب الأعلى (شكل 16).

وقد اتضح ان إذا كانت موجتين في نفس اللحظة وعند نفس النقطة لهما نفس قيمة و اتجاه واحد يقال أن الموجتين متحدتي الطور فتكون نتيجة ضم الموجتين تدخل بناء. ويمكن وصف الأشعة أنها متحدة الطور إذا كان الفرق في المسار إما يساوي الصفر أو يساوي عددا صحيحا من الطول الموجي. وإذا كان الفرق في المسار بين موجتين غير متحدتي الطور يساوي نصف طول الموجة في هذه الحالة فان جمعها يعطي قيمة صفرية, وينتج عن ذلك تدخل هدام. يعتبر التداخل البناء والتداخل الهدام حالتين قصوى للتداخلات الحقيقية في ظاهرة الحيود.



شكل 16 جبهة الخيود الموحدة حسب مبدأ هايجنز

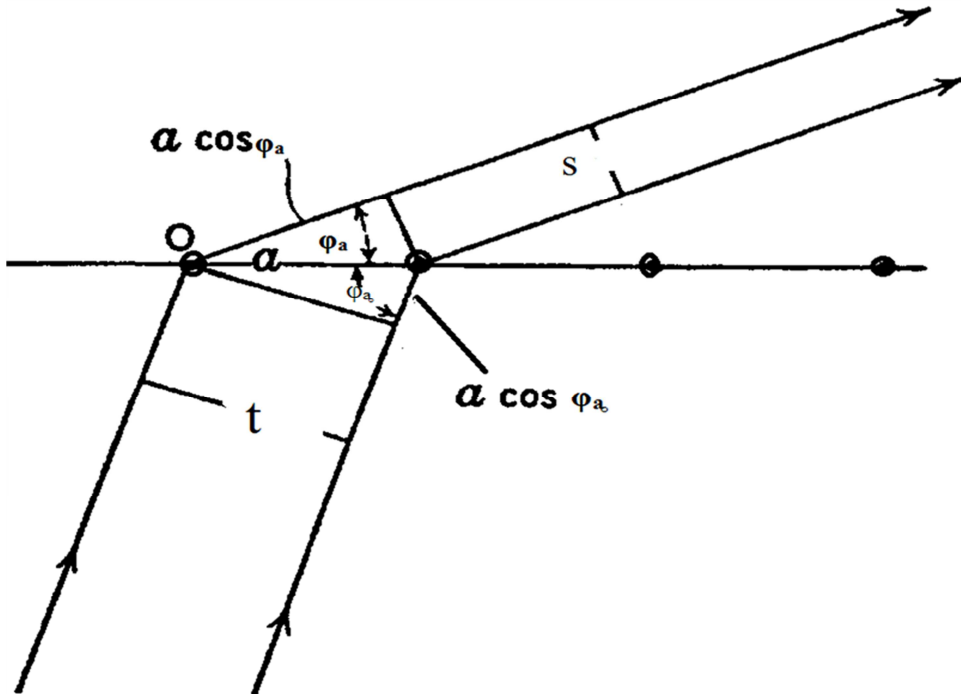
2.10.3 حيود الأشعة السينية من البلورات

لدواعي تبسيط ظاهرة الخيود يمكن اعتبار بلورة كصف أحادي البعد من الذرات، والذرات فيه تمثل مراكز للتشتت بينها مسافات ثابتة تتبع منها موجات ثانوية كروية الشكل، أما شعاع الخيود فينتشر بقوة في الاتجاه الذي تكون فيه الموجات المنبعثة من الذرات المتجاورة في نفس الطور حيث تتداخل فيما بينها بشكل بناء. والاهم من ذلك الأمر يؤدي في معظم الأحيان إلى حدوث تداخل هدام تلاشى اثره الموجات المتشتتة بعضها البعض، وإذا أدير خط الجبهة من رتبة ما على الشعاع الساقط كمحور، في الفضاء ثلاثي البعد، فانه سيشكل مخروط بزواوية ثابتة، وبالتالي يمكن تصور جبهات الخيود الموحدة على شكل مخاريط بزوايا رتب الخيود والمحور المشترك يمثل الشعاع الساقط.

أما في الميدان المجهرى فيأخذ ظاهرة الخيود بُعداً آخر ينبني على تشتيت الموجات السنية الكهرومغناطيسية حول الإلكترونات المكونة للذرات. فإذا اعترضت هذه الإلكترونات مسار موجات الأشعة السنية الساقط عليها من مصدر فإنها تتفاعل مع الموجة وتحاول من أيضا فرض طابعها الموجي لتكون مصدرا لموجات ثانوية دائرية لها تردد مماثل للموجات الأصلية. وباكتشاف حيود

الأشعة السينية من البلورات على يد von Laue & Knipping 1912 تم التأكد من البنية الشبكية للبلورات وكذلك من الطابع الموجي للأشعة السينية.

لما نعتبر ذرتين متجاورتين فان عند جبهة الحُيود الموحدة تكون المَوجات المنبعثة منهما في نفس الطَّور، وكما أنَّ التشتت يكون بناءً بمساهمة الذرات المتجاورة على طول خط المماس فلا بد لطول المسار أن يزداد بعدد صحيح من طول المَوجات. ففي الرتبة الأولى من الحُيود سيزداد بقدر λ . وحيث أنَّ المسافة t تمثل جزء من الجبهة المتقدمة نحو الصف و المسافة s جزء الجبهة المتشتتة بواسطة الذرات (شكل 17). فان مساهمة التشتت من كل نقطة من نقط الشبَّكة في اتجاه معين تختلف في طَّورها بمضاعفات عدد صحيح من λ وبالتالي، تبلغ سعة ذبذبة المَوجات المتشتتة في اتجاه ما نهايتها العظمى.



شكل 18

$$s - t = a \cos \varphi_a - a \cos \varphi_a = \lambda$$

فحسب رتبة الحيود

$$a [\cos \varphi_a - \cos \varphi_a] = n \lambda$$

فيمكن هنا استخدام الأرقام m و n و p للتعبير عن رتبة الحيود الاتجاه ثوابت الخلية الوحدة a و b و c ثلاثية البعد (شكل 18).

فمعادلات لاوي لحيود الأشعة السينية من البلورات *Laue equations* هي كالتالي:

$$a [\cos \varphi_a - \cos \varphi_a] = h \lambda$$

$$b [\cos \varphi_b - \cos \varphi_b] = k \lambda$$

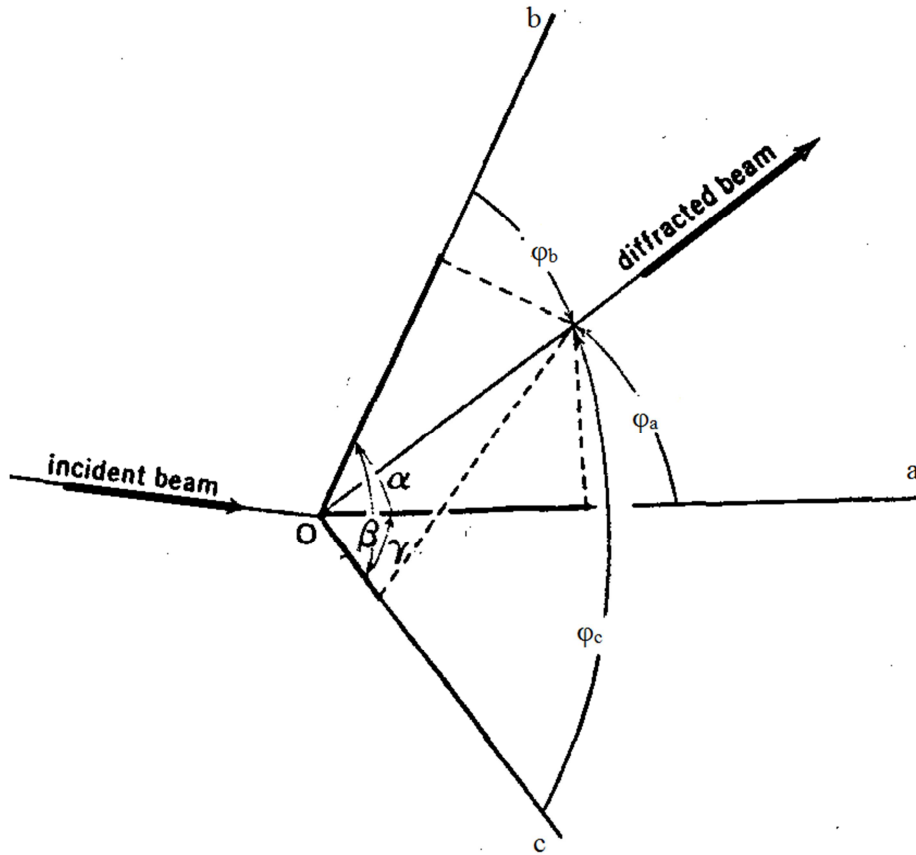
$$c [\cos \varphi_c - \cos \varphi_c] = l \lambda$$

$\varphi_a, \varphi_b, \varphi_c$ زوايا الشعاع الساقط بدلالة ثوابت الخلية الوحدة

$\varphi_a, \varphi_b, \varphi_c$ زوايا شعاع الحيود

h, k, l أعداد صحيحة أحيانا تسمى علامات لاوي.

في الشبّكة البلورية الثلاثية البعد يمكن استنتاج أي اتجاه خطي باستعمال هذه المعادلة. والجدير بالذكر، أن علامات لاوي ليست بالضرورة هي معاملات ميلر لمستوى الحيود، وذلك لأنها يمكن أن يكون لها قاسم مشترك بسيط يعبر عن درجة الحيود. يمكن التعبير على الحيود بدلالة الانعكاس من خطوط الشبّكة البلورية، حيث أن في حقيقة الأمر فإن خطوط الحيود تشكل مخروطي متناظر في الفضاء ثلاثي البعد فالانعكاس ما هو إلا نظير الحيود العادي في الجانب السفلي من المخروطي فهناك شروط لحدوث الحيود وضعها لاوي لكل سطح مخروطي أو لكل زاوية تحدد رتبة الحيود حسب معادلات لاوي. هذا لأن الحالات التي يقع فيها حيود تساهمي من كل التداخلات البناءة هو أمر شبه نادر الحدوث حسب ما تعطيه لنا شروط لاوي. فلا بد لكل الاتجاهات أن تكون ثابتة عند مقدار محدد إذ يجب التحكم في الزاوية بين الشعاع الساقط و اتجاه ثوابت الشبّكة لتتمكن أطوار الموجة المتشعبة أن تتحد فيحدث الحيود.



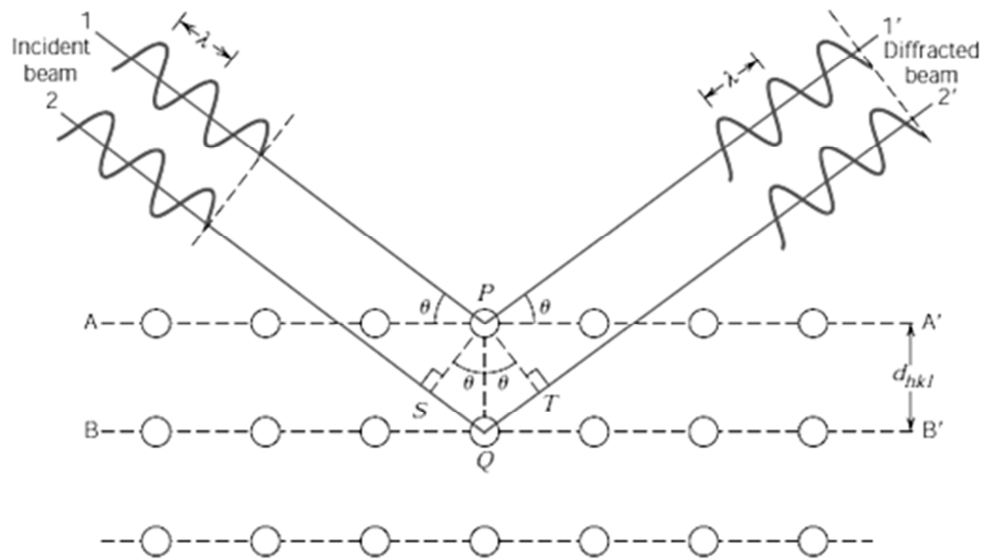
شكل 19

3.10.3 ظاهرة الحيود حسب قانون براج Bragg's law

إنَّ معادلة لاوي تواجه بعض التحديات خاصة في الشبكات الثلاثية البُعد بحيث يستدعي ذلك عموماً إيجاد الزوايا الستة وثلاث ثوابت الشبَّكة وثلاث أرقام لرتبة الحيود. وتمكن براج من فرض نموذج أبسط للبنية البلورية، بواسطته يمكن تحديد اتجاه حيود من بلورة عندما تسقط عليها الأشعة السينية. وتنتج أشعة الحيود من أوضاع خاصة عندما تتداخل موجات الأشعة الحائدة تداخلاً بناءً، وأوضح بأن انعكاس الأشعة السينية يكافئ ظاهرة الحيود أو يعتبر جزء منها.

نفترض أنَّ λ هي طول الموجة الساقطة، وان البنية البلورية تتألف من مستويات أو شرائح ذرية متوازية ولها مسافة بينية ثابتة d ، فليس من الضروري أن يحدث انعكاس شريحة مستقل عن انعكاس الشرائح الأخرى، ولكن كل الشرائح لها المقدرة أن تعكس جزءاً من الأشعة في آن واحد

(شكل 20). فذرات الشرائح المختلفة المشاركة في الانعكاس تتداخل موجاتها المنعكسة في نمط بناء أحادي الطور فتقوي بعضها. فيتضح من هذا أنّ حزمة الشعاع الساقط ستقطع مسافات غير متساوية اثر اختراقها للشرائح, فان الفرق في طول المسار الأشعة المنعكسة من مستويين متجاورين يساوي بالضبط عددا صحيحا من أطوال المَوجات فان كل المَوجات المنعكسة على طول الواجهة 1'2' تقوي بعضها بعضا.



شكل 21

الزيادة في طول المسار للشريحة 2 هو SQT فاذا كان الفرق في المسار مضاعف لعدد صحيح n هو عدد صحيح لطول الموجة

$$n\lambda = SQT$$

وحيث أن الشعاع الساقط والشعاع المنعكس كلاهما يماثل ويساوي الآخر كذلك فالزيادة في طول المسار يمكن أن تنقسم إلى نصفين:

$$n\lambda / 2 = SQ$$

وواضح من الشكل أن الطول SQ يرتبط بالمسافة d وزاوية الميل θ , وبالتعويض عن قيمة SQ من المعادلة

$$\sin\theta = SQ / d$$

أي أن شرط الانعكاس البناء

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

معادلة قانون براج تكتب:

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

تعطي المعادلة الزاوية التي عندها يحدث انعكاس متعاون من كل الشرائح لمجموعة مستويات لها مسافة بينية d.

وحيث أن $\sin\theta$ لا يمكن أن تزيد قيمتها عن الواحد الصحيح, فإن قانون براج يوضح أن الطول الموجي $n\lambda$ يجب أن تكون قيمته اقل من $2d$, وحيث أن اقل قيمة للعدد n هي الواحد الصحيح

على هذا يكون الشرط الواجب توافره لحدوث حيود عند زاوية 2θ هو

$$\lambda < 2d$$

2θ تمثل الزاوية بين شعاع الحيود و امتداد الشعاع الساقط إلى الأسفل.

فتحليل ظاهرة الحيود يسهل تصويره هندسيا من خلال المتجهات ومركباتها, لكن باعتبار الخاصية الدورية للأشعة و للبنيات البلورية, فان λ و d لا تمتلكان أصلا خواص المتجه. لذا يكون من الأجدر تعيين متجهين, واحد لطول المسافة البينية d يرمز اليه غالبا بالمتجه G والآخر للطول الموجي للشعاع λ يرمز اليه بالمتجه K . تُعطى قيمة متجه الموجة K بالمقلوب $\pi/2\lambda$, وكذلك المتجه G تُعطى قيمته بواسطة $2\pi/d$. في هذه الحالة يكون الانتقال من الشبكة العادية إلى الشبكة المقلوبة reciprocal lattice. فالانتقال من الفضاء العادي إلى الفضاء المقلوب يعتبر من العمليات الجبرية التي تطبق على مجال واسع لتحليل الخواص الفيزيائية للجوامد البلورية.

نعتبر مجموعة المستويات الموازية للمستوى (100) أي (200) و (300)... فالانعكاسات أصلا لا تقع في الفراغ البيني للمسافة d , لذا نستخدم مفهوم الشبكة المقلوبة لاسقاط الانعكاسات هذه مستويات على المسافة البينية d . فنقطة الانعكاس للمستوى (200) تقع في منتصف المسافة d , فهو انعكاس من الرتبة الثانية و نقطة الانعكاس للمستوى (300) تقع في ثلث المسافة d وهي تكافئ الانعكاس من الرتبة الثالثة وهكذا لغيرها من المستويات

وبصفة عامة, فالمسافة البينية التي يمكن بها إسقاط أي انعكاس لمستوى حقيقي $(nh nk nl)$ على المسافة البينية d

$$d' = d/n$$

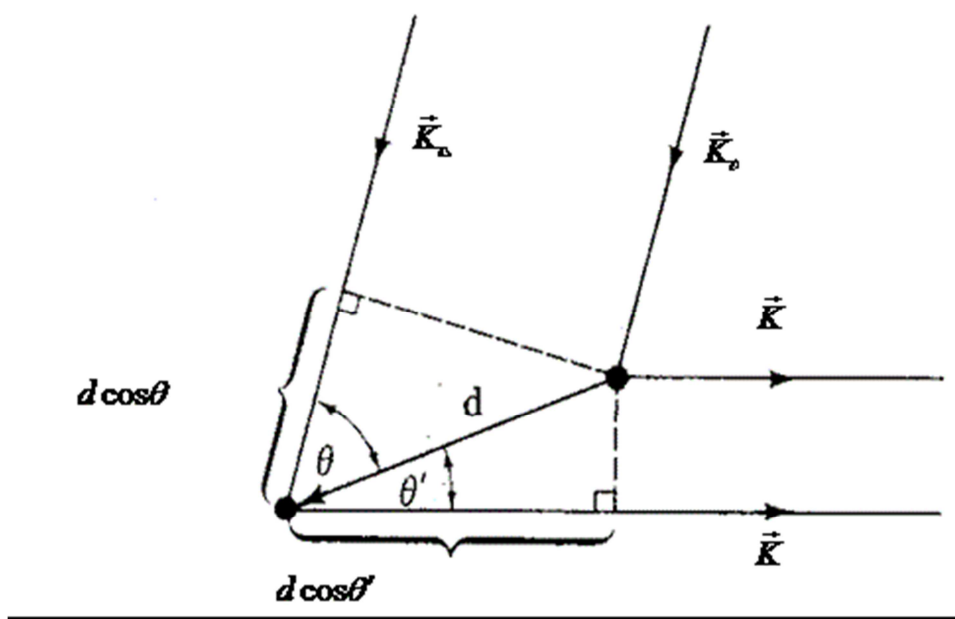
والمعامل المشترك البسيط n , اي 1 و 2 و 3 للمستويات (100) و (200) و (300) يبين رتبة الحيود, لهذا الغرض تستخدم علامات لاوي $nh nk nl$, حينها يمكن أن نستنتج منها أن حيوداً برتبة n قد حدث من مستويات لها معاملات ميلر (hkl) .

على هذا يمكن صياغة قانون براج, بصفة عامة فان الانعكاس من المرتبة n من أي مستوى (hkl) له مسافة بينية d كالتالي:

$$2d_{(hkl)} \cdot \sin\theta = n\lambda$$

كما هو الحال في الفضاء الحقيقي تعريف الشبكة المقلوبة في الفضاء المقلوب التي تمتد أيضا بين متجهات أولية. والاهم من ذلك هو أن كل متجه أولي يكون متعامدا مع وجه من أوجه الخلية

الأساسية للشبكة، مما يحد من إشكالية الزوايا. وعلى هذا النحو يمكن تحديد متوازي السطوح مقام على المُتَّجِهَات الأولية للشبكة المقلوبة الذي يسمى أيضا الخلية المقلوبة. عند القيام بعمليات التدوير للبلورة، فإن زاوية الدوران لكلا الشبكتين تبقى ثابتة في الفضاء الحقيقي و الفضاء المقلوب. الشكل 20 يبين سقوط مُتَّجِهَة مَوْجَة K_0 على نقطتين في الشبِّكَة المقلوبة، البُعد بينهما d ، فتنعكس انعكاسا بمتجهة مَوْجَة K وفق شرط فون لاوي لحيود الأشعة السينية.



شكل 22

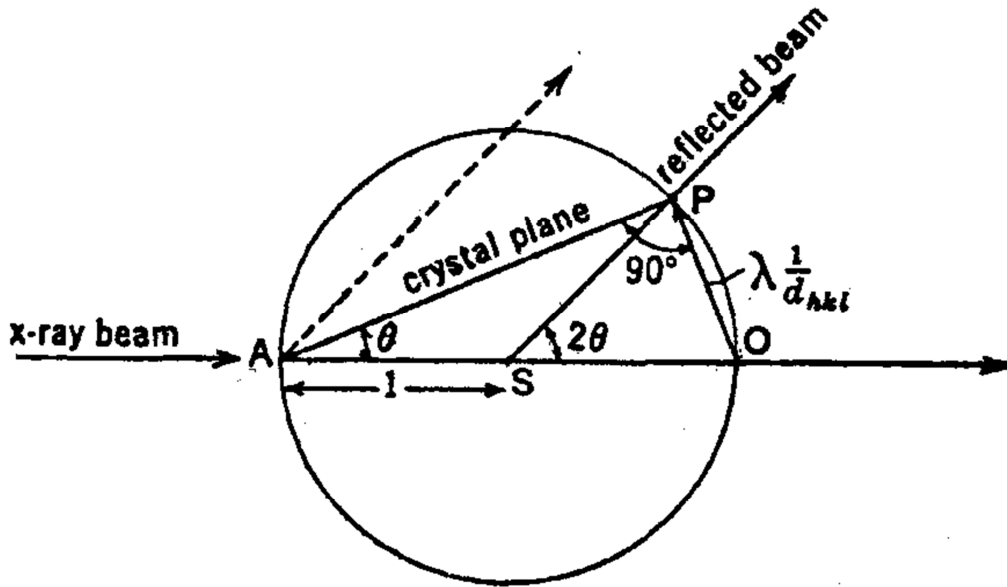
4.10.3 التفسير الهندسي لقانون براج

إن أبسط تمثيل هندسي مباشر لمعادلة براج وخاصة التمثيل الذي يحقق شروط الحيود هو كرة إيwald إن أبسط تمثيل هندسي مباشر لمعادلة براج وخاصة التمثيل الذي يحقق شروط الحيود هو كرة إيwald المبيّن في الشكل 21. حيث θ الزاوية بين قطر دائرة نصف قطرها $1/\lambda$ ويمثل خط الوصل لنقطة في شبكة مقلوبة في نهاية متجه قيمته $\lambda/d_{(hkl)}$

فقانون براج يمكن أن يُكتب بالطريقة

$$\frac{\lambda}{d(hkl)/2} = \sin \theta$$

وبفضل هذه الطريقة تم التوصل إلى أن أي نقطة في الشبّكة المقلوبة تدل على وجود انعكاس من مستوى بلوري ما.



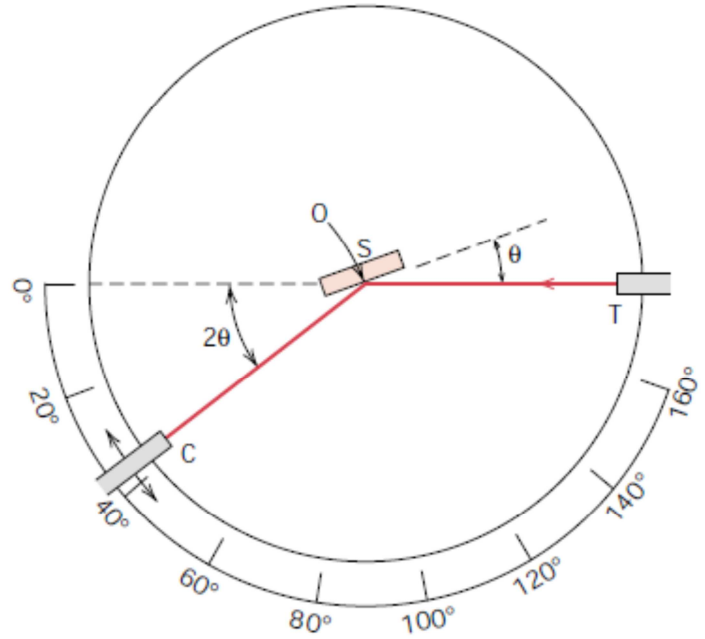
شكل 23

تُرسم كرة ايوالد حول الشعاع الساقط الذي يكون عموديا على محور دوران البلّورة فيقطع الكرة عند النقطة A, وفي نفس الوقت يكون موازيا لأحد مستويات الشبّكة المقلوبة. يعتبر السطح الاستوائي قاعدة توجيهية للشبّكة المقلوبة تتضمن نقطة سقوط الشعاع A والمسافة بينها وبين مركز الكرة $1/\lambda$ والنقطة O المتناظرة مع A حول المركز. وتعتبر والنقطة O هي نقطة الأصل لنظام الإحداثيات المرافق للشبّكة المقلوبة.

بذلك يمكن كشف أشعة الحيود التي تمثل معادلة براج بأي شعاع يقطع الكرة عند نقطة تخالف النقطة O, وبالتالي تكون كل زوايا أو حالات الحيود محتملة بدلالة أبعاد الشبّكة المقلوبة.

5.10.3 الطرق العملية لتعيين التركيب البلوري

يتكون جهاز الحُيود بصفة عامة من أجزاء عدة وهي مصدر لأشعة X, وجهاز للحصول على شعاع أولي, وحامل للعينة ووحدة للكشف وإجراء عملية العد لقياس شدة الأشعة المنعكسة من العينة. ومن الضروري أيضا وجود وحدة لقياس الزوايا (المنقل أو غونيو متر goniometer) وذلك لقياس تموضع الشعاع الساقط والعينة واتجاه أشعة الحُيود. عموما تكون أجهزة الحُيود مزودة بمكشاف للأشعة يلتقط الأشعة المنعكسة بواسطة نافذة, وهذه الأخيرة لها القدرة على الفحص نقطة بنقطة في الفضاء للشبكة البلورية المقلوبة والتي تسمى بالمكشافات النقطية. يتمكن الجهاز من المسح الثلاثي البعد للمواقع البلورية عن طريق عملية ضبط دوران بلورة والمكشاف حسب وضع مصدر الشعاع الساقط بواسطة المنقل (شكل 22).



شكل 22 رسم تمثيلي لجهاز الحُيود, T: مصدر أشعة X, S: العينة, C: الكشاف, و O: المحور الذي حوله تدور العينة و الكشاف

الحيود من البلورات الأحادية Crystal Single Diffraction

حيود الأشعة السينية من البلورات الأحادية هي الطريقة العملية الرئيسية لتعيين التركيب البلوري والجزئي وهي تستخدم دوران البلورة و تسجيل شكل الحيود بواسطة أفلام فوتوغرافية أو مناقل غونيو مترية بها عدادات لقياس شدة الأشعة وتجميع البيانات.

طريقة لاوي Laue photograph

يستخدم منبع للأشعة السينية يعطي طيفا مستمرا من الموجات, وتسقط حزمة الأشعة على مجموعة من الثقوب تقع على خط مستقيم تعرف بالمجمع, وتستخدم في هذه الطريقة بلورات أحادية ثابتة. يوضع الفيلم مستويا داخل حامل لاستقبال الأشعة الحائدة ويمكن للحامل أن يقع خلف بلورة أو أمامها أي أن القياس يكون باستقبال الأشعة الحائدة بالنهاذ أو بالانعكاس. تسقط الأشعة الحائدة على الفيلم على شكل طائفة من النقاط يعتمد توزيعها على وضع بلورة بالنسبة للشعاع الساقط. فصور لاوي تستخدم غالبا في الكشف عن الاتجاهات البلورية وتوضيح تماثل بلورة بالنسبة للأشعة الساقطة.

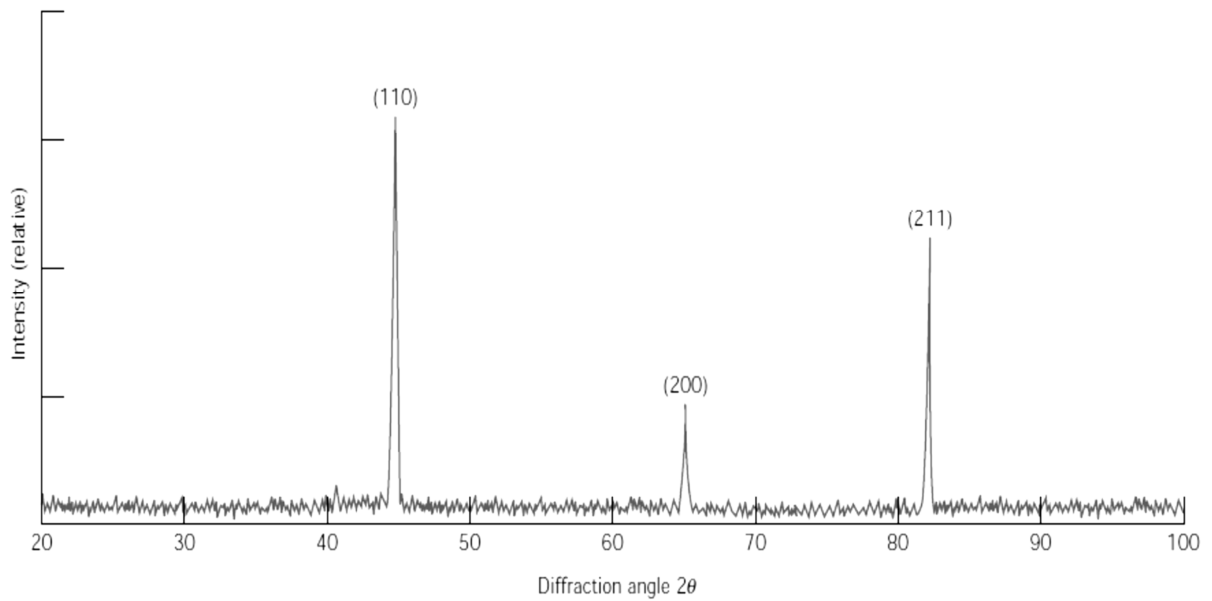
جهاز الحيود من البلورات الأحادية Single Crystal Diffractometer

فمن الأجهزة الواسعة الاستخدام جهاز حيود ذو أربع دوائر. توضع البلورة الأحادية في جهاز قياس الزوايا في المركز وتوصل بحامل العينة الذي يمكن العينة من الدوران حول المحاور الثلاثة. ويشترط أن ينطبق محور الأسطوانة الفوتوغرافية على محور دوراني, تتركب عليه البلورة الأحادية. الجهاز مصمم بأن يقع الشعاع المنعكس دائما في المستوى الأفقي, ويضبط ذلك بواسطة دائرتين, ودائرة ثالثة تنصف الشعاع الساقط و الشعاع المنعكس, ويدور الكشاف أثناء القياس خلال الزاوية 2θ . تتعرض لسقوط الأشعة السينية أحادية الموجة عليها.

طريقة الحيود من المساحيق Powder Diffraction

لقياس حيود معظم المواد المتعددة التبلور تطحن المادة لتصير على شكل مسحوق دقيق يحتوي على بلورات اتجاهاتها موزعة عشوائيا, لأن أكثرية الجوامد المتبلورة يصعب وجودها على هيئة بلورات أحادية. يوضع المسحوق في مركز جهاز الحيود في طريق سقوط حزمة أشعة سينية أحادية اللون. ونظرا للطول الموجي الثابت والاتجاه العشوائي للمستويات البلورية تكون كل مستويات الحيود متاحة. فبعض هذه المستويات يمكن أن تكون في وضع يسمح لها بالانعكاس

الشديد بحيث أنّ زاوية سقوط الأشعة عليها تحقق قانون براج. وحسب طريقة ديبي-شيرر يستخدم شريط من فيلم يلتف حول أسطوانة على محور الكاميرا والشعاع الساقط يتجه عمودياً على محورها. يتم تسجيل انعكاسات براج على شكل دوائر متتالية على شريط التسجيل، يمكن بهذه الطريقة تحديد معاملات ميلر (hkl) بتحليل زوايا الانعكاسات θ وأنصاف أقطار الدوائر.



شكل 24 نمط الحُيود للحديد الفا متعدد التبلور

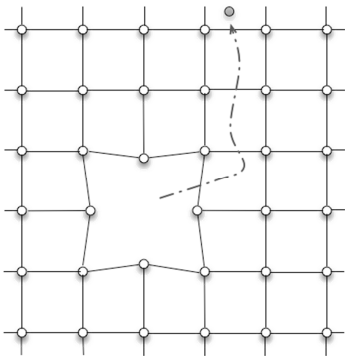
4 العيوب في الجوامد

1.4 تقديم

إنّ الجوامد البلورية الحقيقية لا تتصف في تركيبها بالانتظام الدوري التام والثابت، ففي بعض الأحيان تنحرف بعض المواقع البلورية عن الترتيب المتماثل أو تختل استمرارية التركيب الدوري على مدى القصير أو البعيد. ونتيجة لوجود هذه العيوب في المادة تتأثر أيضا الخواص الفيزيائية الجهرية للمادة المتبلورة. تصنف العيوب defects عموما حسب الهندسة أو البعد الذي حدث فيه الخلل البلوري فهناك عيوب نقطية (ذرات مفقودة أو في أماكن غير نظامية في الشبكة)، وعيوب خطية (أحادية البعد) أو الإنخلاعات، وعيوب سطحية ثنائية البعد تضم الحدود الحبيبية والسطوح الخارجية وغيرها. فلما أخذت هذه العيوب بعين الاعتبار تم تفسير الكثير من نتائج الواقع العملي التي كانت تختلف تماما عن القيم النظرية المبنية على أساس البلورات المثالية.

2.4 العيوب النقطية

الشغور vacancies



إنّ أبسط أنواع العيوب هي تلك المتمثلة في ضياع ذرة من موضعها في البلورة، فيصبح الموقع في الشبكة البلورية خاليا يشار إليه كموقع فراغي أو شاغر.

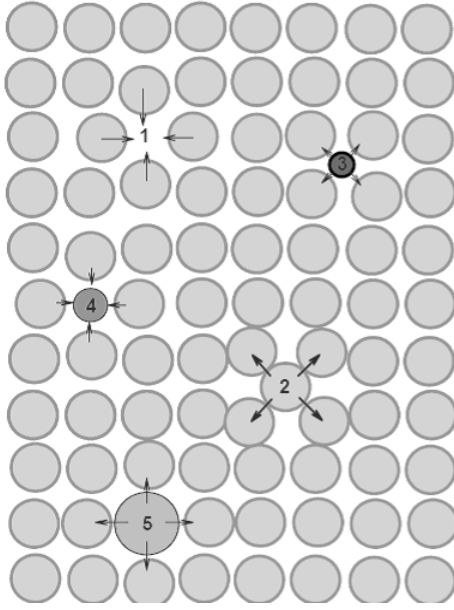
الذرات المقحمة الذاتية self-interstitial

قد تشغل ذرة إضافية حيز ما بين المواقع الأصلية للشبكة، أي مواقع بينية غير نظامية، ويمكنها ان تكون من ذرات نفس العنصر المكون للبلورة.

شكل 25 رسم توضيحي لعيوب نقطي في شبكة بلورية

الشوائب المقحمة البينية *interstitial*

في هذه الحالة تحتل شوائب ذرات من عناصر أخرى، مواقع بينية للشبكة البلورية و تسمى عندئذ الشوائب البينية.



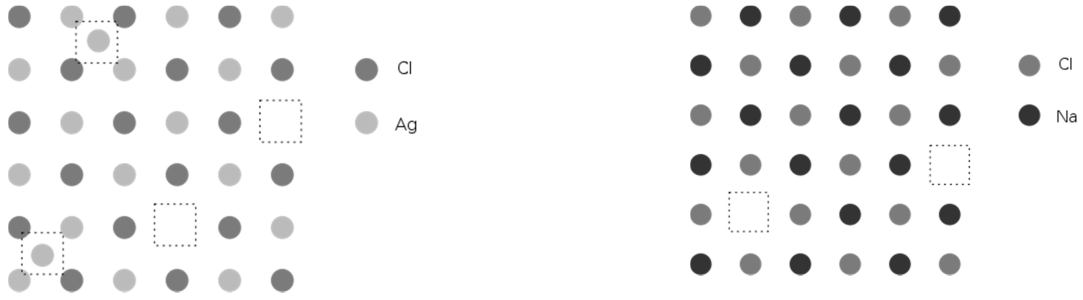
الشوائب الاستبدالية *substitutional*

يمكن أن تحل الشوائب أيضا محل أحد المواقع الشبكية للذرات الأساسية المكونة للمادة المضيفة.

شكل 25 تمثيل العيوب النقطية المختلفة: 1 شاغر، 2 ذرة ذاتية، 3 شائبة بينية، 4 شائبة استبدالية. ويبين الشكل أيضا اتجاه الانفعال الناتج عن العيب النقطي

تتضمن معظم الجوامد الطبيعية بما فيها المعادن النقية شوائب، إذ يمكن إيجاد في كل حيز يتكون تقريبا من 10^6 ذرة شائبة. تتكون هذه الشوائب بشكل طبيعي أو يكون زرعا مقصودا لتغيير خواص فيزيائية معينة. الأمثلة على ذلك، تضاف ذرات الكربون بكميات دقيقة من بلورات الحديد لجعله صلبا و مقاوما للشد، كما يضاف الفسفور أو البورون إلى بلورة السيليكون النقي لتغيير خواصها الكهربائية.

تشهد أشباه الموصلات حالات ديناميكية تنتقل خلالها الذرات أو الأيونات من مواقعها النظامية داخل الشبكة الي مواقع أخرى، فترك وراءها فراغات تعرف بفراغات شوتكي. وهناك حالات أخرى تنتقل الذرات فيها من مواقعها الشبكية الطبيعية إلى مواقع بينية في حيز ما بين الذرات، فكلتا الموقعين الفراغي و البيني يكونان عيب واحدا يسمى عيب فرنكل (شكل 26).



شكل 26

عيب فرنكل في شبكة كلوريد الفضة

Frenkel defect

عيب شوتكي في شبكة كلوريد الصوديوم

Schottky defect

تم البرهنة على وجود العيوب الفراغية عن طريق مبادئ الديناميكا الحرارية، فالعيوب تزيد في درجة العشوائية والتذبذب الغير المنتظم داخل البلورة. يمكن حساب عدد الشواغر الناتجة عن الاهتزازات الحرارية في حالة الاتزان

$$N_v = N_s \exp\left(-\frac{Q_v}{k_B T}\right)$$

حيث N_s هو عدد من المواقع الشبكية العادية، k_B هو ثابت بولتزمان، Q_v هي الطاقة اللازمة لتشكيل موقع شبكة الشاغرة في بلورة مثالية، و T درجة الحرارة بالكلفن. باستخدام هذه المعادلة يمكن تقدير كثافة الشواغر في بلورة النحاس في درجة حرارة الغرفة بشاغر واحد في كل حجم يضم 10^{15} ذرة، بينما في درجات الحرارة العالية القريبة من درجة الانصهار تقدر بشاغر واحد عن كل 10^4 ذرة.

3.4 المحاليل الجامدة solid solutions

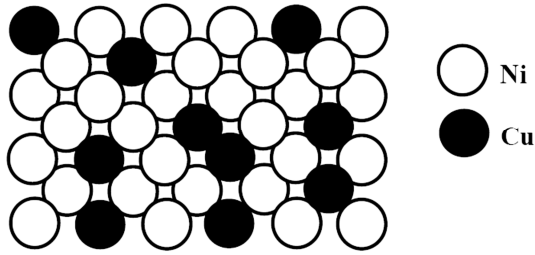
إن المحاليل الجامدة عبارة عن مخلوط جامد تم صهره، ينتج عن طريق تبريده مركب مكون من المذيب solvent وهو العنصر الذي تكون نسبته الأكبر في المحلول، ومن المذاب solute وهو العنصر ذو التركيز الأقل بشرط أن تكون هنالك قابلية لذوبان العنصر بعضها مع بعض في الحالة

الجامدة. وقد تشغل ذرات المذاب مواقع بينية غير تابعة لنمط المذيب البلوري أو تدخل في التركيب على شكل شوائب استبدالية (شكل 27).

لهذا فان تكوين المحاليل الجامدة يعتمد على عدة عوامل من بينها نوعية الإصابات و تركيزها ودرجة الحرارة والضغط. وبالرغم من بعض القواعد، وضعها هيوم- رودري، باتت ظاهرة قابلية ذوبان عنصر ما في عنصر آخر غير كاملة الوضوح. فجل النتائج المعتمدة في هذا الاطار تأتت عن طريق المنهج التجريبي، الأمبيري، تحت ظروف محددة من الضغط ودرجة الحرارة والتركيب لكل محلول على حدة، لهذا الغرض تتم دراسة هذه المحاليل الجامدة بواسطة ما يسمى بمنحنيات الاتزان أو مخططات الأطوار.

المحاليل الجامدة التبادلية *Substitutional*

تُستبدل ذرات العنصر المذيب بذرات العنصر المذاب عن طريق الإحلال لنفس المواقع في شبكة المذيب الأصلية. وتعتمد قابلية ذوبان عنصر في عنصر آخر مذيب على بعض الشروط. من بينها ينبغي أن تكون ذرات كل من المذيب والمذاب متقاربة في الحجم، بحيث لا يزيد الفرق في قطر الذرات 15% و أن يكون العنصران المتبادلان من نفس التركيب البلوري، لكي يتحقق هذا ينبغي أيضا أن يكون تكافؤ ذرتي العنصرين الأساسيين والإبدال متساويتين أو أن يتم ذوبان فلز ذو تكافؤ أعلى في آخر ذي تكافؤ أقل.

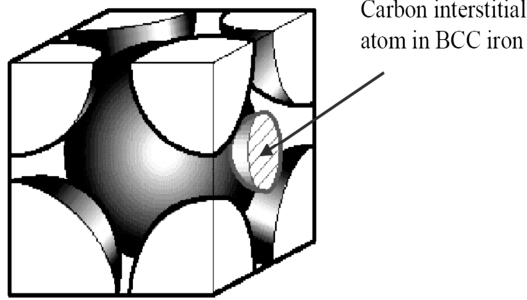


شكل 28

وإضافة إلى ذلك ألا يكون هنالك فرق كبير في السالبية الكهربائية لأن هذا الفرق هو من بين العوامل التي تحرض على تبلور أطوار بين معدنية ثانوية و الحيود عن الذوبان الكلي للعنصر المذاب في المحلول الجامد. تتغير أبعاد الشبكة البلورية للمعدن الأصلي باستمرار

بصورة متناسبة مع عدد الذرات الدخيلة في الشبكة البلورية، ففي حالة المحاليل التبادلية يكون هذا التغير متناسباً أيضاً مع الفرق بين نصف قطر ذرتي العنصرين المكونين للمحلول.

المحاليل الجامدة البينية Interstitial



شكل 29

تتكون هذه المحاليل بإقحام ذرات العنصر المذاب في الفراغات بين ذرات العنصر الأساسي. في هذه الحالة يزداد عنصر جديد في القاعدة الخلية الأساسية ليحل بالتماثل البلوري الأصلي، وإثر ذلك تظهر بعض التشوهات المحلية في الشبكة البلورية وتزداد باستمرار مع ارتفاع عدد الذرات الدخيلة.

عموما لا يتجاوز تركيز العنصر المذاب 10% من المحلول الجامد البيني، لأن البلورات المذبية ربما لا تستوعب تشويها أكبر، ولا يحدث ذوبان ذو أهمية إلا إذا كانت ذرات العنصر المذاب أصغر حجماً من حجم ذرات العنصر المذيب، حتى تتمكن من احتلال الفراغات بين الذرات. ومن بين الأمثلة المعروفة في هذا الباب ذوبان الكربون في بلورة αFe ، فهو لا يتجاوز 2% (شكل 28).

4.4 العيوب الخطية: الإنخلاعات dislocations

إنّ العيوب الخطية ترتبط أساساً بالانفعالات الميكانيكية، وتحدث نتيجة خلل في خط بلوري يتألف من صف علوي من الذرات تزيد فيه ذرة واحدة ومن صف سفلي منتظم. يسمى خط الانخلاع ويرمز إليه عادة برمز التعامد \perp . يدل نصف الخط العمودي في الرمز على خط الانخلاع على نهاية نصف مستوي زائد من الذرات، أما المنطقة المحيطة بهذا العيب الخطي تدعى مركز الانخلاع.

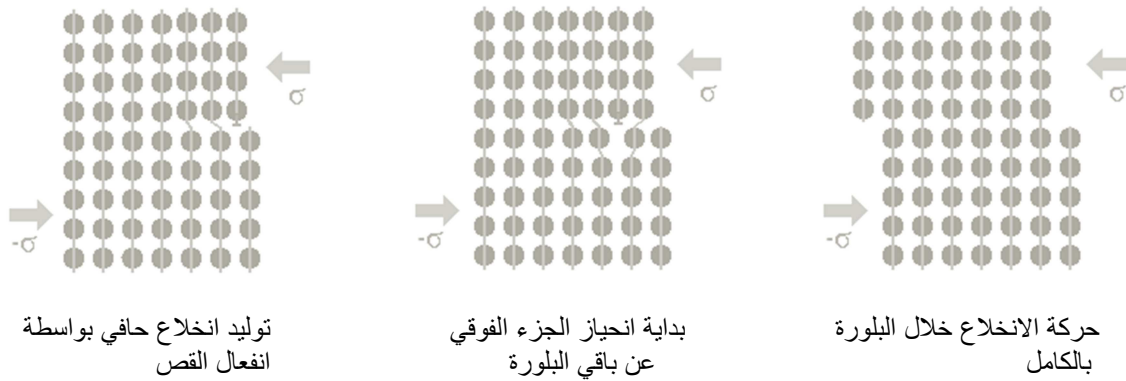
فان المسافة بين الذرية في الصف العلوي بالقرب من مركز الانخلاع تكون أقل من القيمة الثابتة للشبكة النظامية، وعندئذ تكون الشبكة قد انكمشت، في حين أنها في الصف السفلي تكون قد استطالت شيئاً ما. ففي اتجاه خط الانخلاع يقل مدى هذا التشويه البلوري كلما ابتعدنا عن مركز الانخلاع. أما في الاتجاه العمودي على خط الانخلاع فيبقى التشويه ملحوظاً يتخلل جزءاً من البلورة، فيضطرب التماثل الإزاحي للبلورة في هذا الاتجاه وذلك بسبب إقحام مستوى إضافي من الذرات عند مواقع بينية في الشبكة البلورية.

فيزيائيا يقود مثل هذا الترتيب إلى تعبير على الانخلاع بكمية قياسية تسمى مُتَّجِه بـيرجر

Burger vector. يحدد هذا المُتَّجِه مقدار الإزاحة اللازم لفلق عروة متدرجة حول العيب, مع العلم انه في حالة البلورة التامة يساوي قيمة الصفر إذ ستطبق نقطة النهاية للعروة مع نقطة البداية (شكل 31). وواضح أن مُتَّجِه بورجر يلعب دورا أساسيا في إعادة ترميم الشبكية بضم عناصر بلورة بعضها ببعض بعد حدوث التشويه, وبالتالي تحافظ بلورة على تماثلها رغم حدوث إزاحة الإجهاد. ومن هذا يتضح نوعا ما كيف تأثر إزاحة الإجهاد المأثر على الشبكة البلورية بإضافة مستويات ذرية تمثلها خطوط الانخلاع

الانخلاع الحافي *edge dislocation*

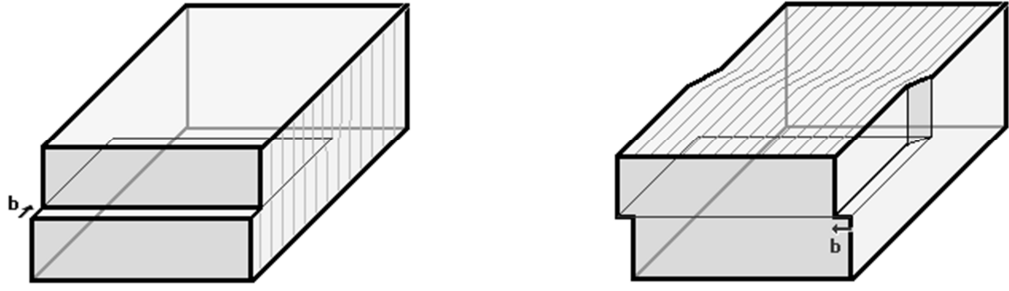
هو عبارة عن اختلال خطي يتم بسحب جزء من البلورة على جانبي خط الانزلاق بمسافة تقدر بمتجه بورجر. وخط الانخلاع عبارة عن الذرات المقحمة في مواقع بينية, تصطف في الاتجاه العمودي على مستوى الانزلاق. في هذه الحالة لا يتحرك مُتَّجِه بورجر إلا في الاتجاه العمودي لخط الانخلاع.



شكل 29

الانخلاع اللولبي *screw dislocation*

يشق اسمه من السطح الذي تحدث فيه الإزاحة, إذ يتخذ شكلا ملتويا. تزاخ شريحة من ذرات المستوى العلوي بالنسبة عن تلك الواقعة في المستوى الأدنى بالابتعاد عن الحد الفاصل الذي يمثل محور الإزاحة, وهو صف من الذرات يتحرك بشكل مستمر على سطح لولبي. وعلى النقيض من انخلاع الحافة يكون الانخلاع اللولبي موازيا لمُتَّجِه بورجر ويمكنه التحرك في أي اتجاه بلوري, لأن الانخلاع الحافي لا يمكنه التحرك إلا في مستوى انزلاقه.



انخلاع حَاقِي

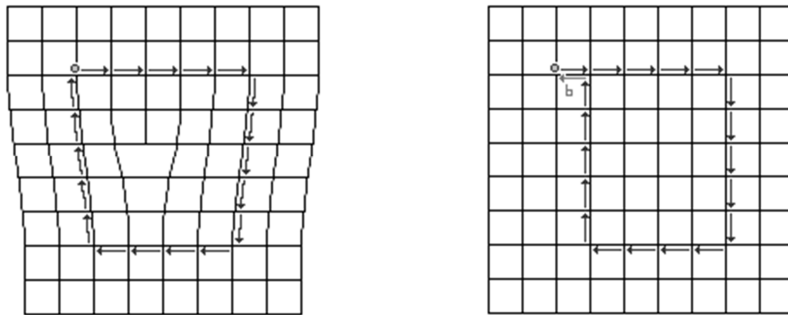
انخلاع اللولبي

شكل 3030 b : متجه بورجر (olterra Construction)

الإنخلاعات المختلفة

يعتبر انخلاع الحافة و الانخلاع اللولبي حالات قصوى للانخلاع, فعموما تحدث الانزلاقات بالدوران حول خط الانخلاع نتيجة امتزاج قوى الإجهاد المؤثر بقوى القص قاصمة.

فليس من الضروري أن تكون الإنخلاعات خطوطا مفتوحة, إذ يمكن أيضا تصورها على أنها منحنيات مغلقة تحدد سطحا بسيطا بداخل البلورة. و عند إزاحة جانب السطح بالنسبة للجانب الآخر بمقدار يحدده متجه بورجر b , فإن مناطق السطح الغير الموازية ل b تُحدث فيها هذه الإزاحة فجوة وحينئذ يجب إضافة جزء من المادة لملاً الفجوة. وعلى النقيض من ذلك, يمكن كذلك للإزاحة أن تسبب تشابكا لأجزاء السطح و حينئذ يجب إزالة جزء من المادة لمنع هذا التشابك.



شكل 31 تمثيل حركة الانخلاع بواسطة متجه بورجر

5.4 العيوب السطحية

1.5.4 الحدود الحبيبية Grain Boundaries

إنّ النمط البلوري للجوامد يكون دوري واتجاهي في طبيعته, لكن هذا النمط لا ينطبق على المادة المتعددة البلّورات إذ تنمو الحُبيبات من نوى متعددة وفي اتجاهات بلورية مختلفة لتلتقي في مناطق التقاء تسمى بالحدود الحُبيبية, فعند هذه الحدود تخفق الدورية و التناظر الخاصة بالنمط البلوري. يصحب هذا الاضطراب خلل في طاقة السطح إذ تزداد قابليتها للتفاعل الكيماوي ولجلب الشوائب.

فللتخفيض من الطاقة السطح الكلية للمادة

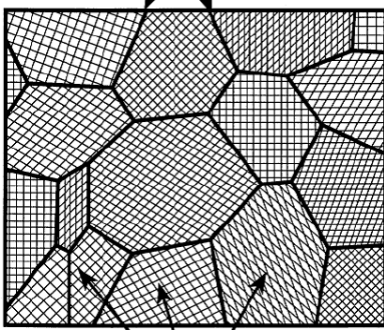
المتبلورة تميل الحُبيبات إلى النمو حجما على

حساب بعضها البعض لتكون بُنيَات أكثر

استقرار, وهذا راجع إلى اعتماد طاقة السطح

على إجمالي مساحة السطوح الخارجية والحدود

الحُبيبية



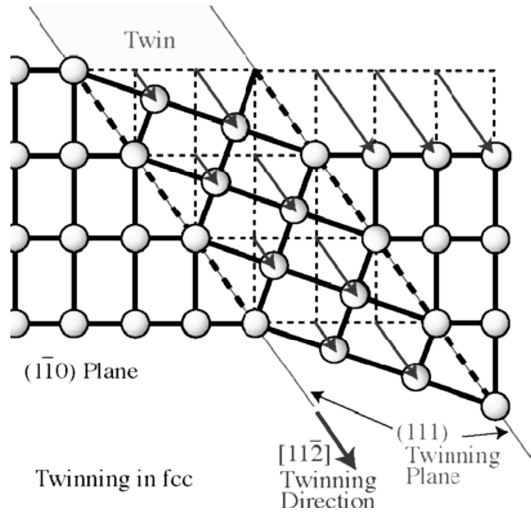
شكل 31

إنّ لحدود الحُبيبات بُنيَات متنوعة تحاول الحُبيبات من خلالها أن تتواصل فيما بينها وفق أشكال متباينة الاتجاه.

حدود منخفضة الزاوية تم تفسيرها بأنها عبارة عن صفوف من انخلاعات حافية, لأنه باستخدام إجهاد مناسب تتحرك حدود الميل في اتجاه عمودي عليها, وتسمى حدود الحُبيبات المائلة. و هذا الميل يكون بين حُبيبتين متجاورتين الواحدة بالنسبة للأخرى بزواوية تبلغ درجات قليلة. أما حدود تويست فتشمل عدداً من الحبيبات المتجاورة ذات توضع وفق زوايا متباينة, توصف مجهرياً بأنها عبارة عن صفوف من الإنخلاعات اللولبية.

2.5.4 حدود التوأمة

حدود التوأمة وهي الحدود التي تفصل بين منطقتين بلوريتين بحيث أن جزء من بلورة يغير اتجاهه عن بقية بلورة فتكون المنطقة



شكل 32 نموذج مبسط لحدود التواءمة

بمثابة صورة منعكسة (مرآة) للأخرى.
 بعبارة أخرى, يزاح كل مستوى ذري مواز لمستوى التواءمة ذاتيا بمسافة تتناسب مع بعده عن مستوى التواءمة, وتتم هذه الإزاحة بمسافة تساوي كسرا من بارامتر الشبكة البلورية. ونتيجة لذلك تبطل في هذه المناطق بعض عناصر التماثل البلوري الأصلي. يلاحظ أنَّ ترابطات بين ذرية مخالفة للاتجاه المفروض تتشكل عن طريق حركات التني بمقدار زاوية محددة لتكون حدود التواءمة.

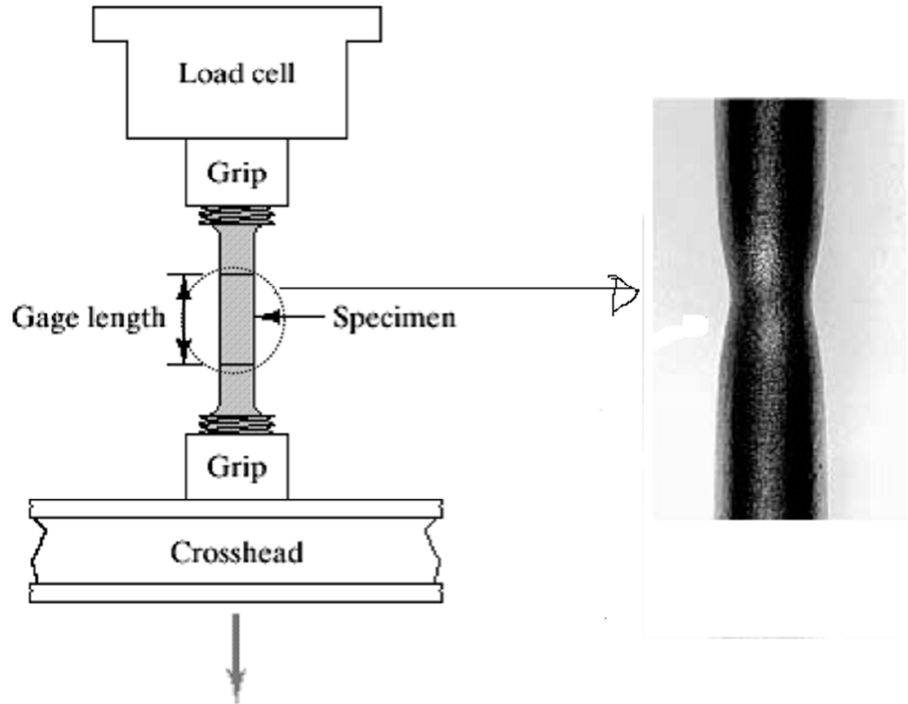
5 الخواص الميكانيكية للمادة

1.5 مفهوم الإجهاد والانفعال

تسهم عدد من القوى أو الأحمال وعوامل أخرى في تحديد أداء المادة وسلوكها وشروط انهيارها، وينتج من هذه القوى ما يطلق عليه مفهوم الإجهاد. يعبر السلوك الميكانيكي المتعلق بطبيعة المواد وبنيتها وشروط تطبيق القوى المؤثرة فيها عن استجابتها لفعل الإجهاد، ويقترن هذا السلوك بعدد من الخواص الميكانيكية، مثل المرونة والمقاومة واللدونة وغيرها.

اختبار الشد

يعتبر اختبار الشد من اهم الاختبارات المستخدمة لبيان خواص المواد الجامدة، ويكون بتحميل العينة بحمل شد في اتجاه محوري.



شكل 33 ماكينة اختبار الشد

الإجهاد الهندسي Engineering stress

ويتم توصيف السلوك الميكانيكي من خلال صياغة علاقة تربط بين معاملات القوى أو الحمولات F من جهة ومعاملات تغير الشكل الهندسي للأجسام، أي التشوه ϵ deformation, من جهة أخرى. وينتج من هذه القوى ما يطلق عليه إجهادات التحميل loading stress, ومفهوم الإجهاد stress المستخدم يعبر عن القوة المطبقة على وحدة السطح. يكون الإجهاد الناظمي σ المطبق على سطح مقطعها العمودي على اتجاه القوة مساوياً إلى

$$\sigma = F / A_0$$

حيث:

A_0 : مساحة المقطع العرضي للعينة $[m^2]$, F : الحمل المطبق بالنيوتن

ومهما كانت طبيعة هذه القوى؛ فهي تسبب انفعال في الأجسام المعرضة لها، أو تشوهها. والتشوه النسبي strain الذي يعبر عن استطالة وحدة الطول. فعندما تتعرض عينة طولها الابتدائي l_0 لقوة شد موازية لمحورها؛ ويكون التشوه النسبي Engineering strain ϵ الناجم عن استطالة قدرها Δl مساوياً إلى

$$\epsilon = \Delta l / l_0 \times 100$$

إجهاد القص Shear stress

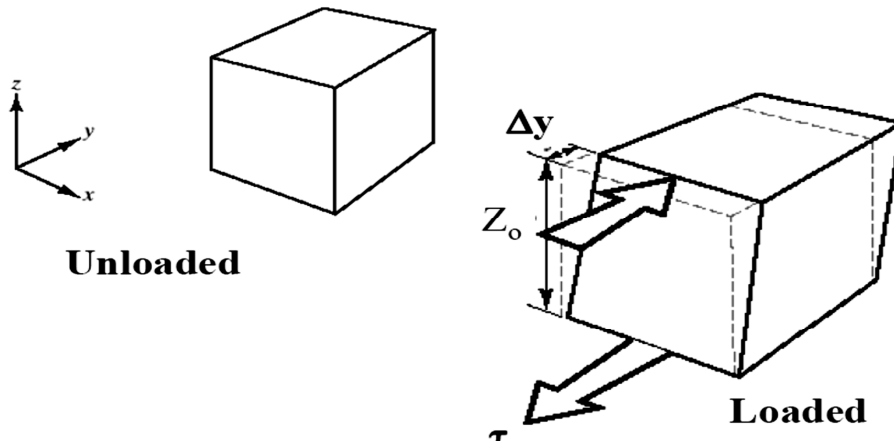
في حالة إجهاد القص تكون القوة المطبقة F موازية للمساحة A_0

$$\tau = F / A_0$$

انفعال القص Shear strain

$$\gamma = \Delta Z/y_0 \quad \text{أو} \quad \gamma = \tan\theta$$

Δy هي الإزاحة الجانبية النسبية، θ هي زاوية الانفعال، Z_0 سماكة العينة.

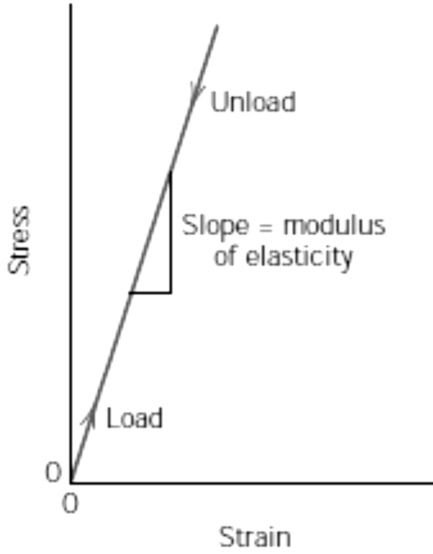


شكل 34 عينة اختبار القص

2.5 المنحنى إجهاد-انفعال

إن هذا المنحنى ناتج من توقيع نقط الحمل للإجهاد المأثر مع الاستطالة المقابلة لها والدالة على الانفعال أثناء الاختبار. المنطقة الخطية تشير إلى النطاق الذي تخضع فيه المادة إلى تشويه مرن حسب قانون هوك للمرونة.

$$\sigma = E \cdot \varepsilon$$



شكل 35

يشير هذا المجال إلى أن الكمية التي يتغير بها الجسم مرتبطة خطياً بالقوة المسببة لهذا التغير (الإجهاد) ، E يشير إلى معامل يونغ *Young's modulus* وهو خارج قسمة الإجهاد على الانفعال في حدود المرونة (شكل 36). ميكانيكياً، فإن المواد التي ينطبق عليها قانون هوك تقريباً هي مواد خطية المرنة، وإن المادة لا تحتفظ بتشوه دائم، وإنما تعود إلى أبعادها وشكلها الابتدائيين.

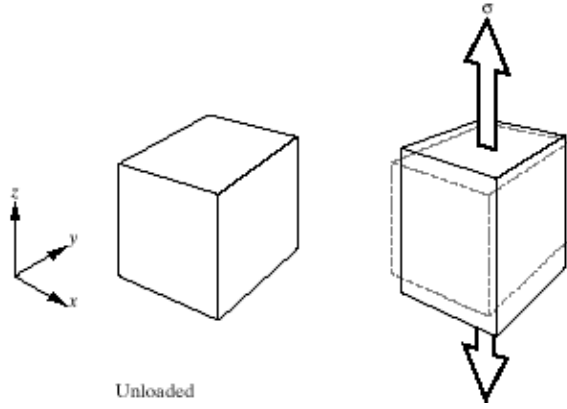
3.5 خواص المرونة للمواد

يستنتج مما سبق أن المرونة *elasticity* سمة تصف السلوك الميكانيكي للمواد كاملاً أو جزئياً وفق استجابتها لفعل القوى المؤثرة فيها. وتعتبر المرونة عن قابلية المادة للتشوه *deformation* العكوس الذي يزول عند تحررها من الإجهادات.

نسبة بواسون (ν) Poisson's ratio وهي النسبة بين الانفعال العرضي ϵ_x أو ϵ_y إلى الانفعال الطولي ϵ_z عندما يؤثر إجهاد تجانسي isotropic على العينة ضمن حدود المرونة.

$$\nu = -\frac{\epsilon_x}{\epsilon_z} = -\frac{\epsilon_y}{\epsilon_z}$$

في العادة عندما تشد / تضغط المادة في أحد الاتجاهات، فإنها تميل إلى التقلص / التمدد في



شكل 36

الاتجاهين الآخرين، وتكون نسبة بواسون (ν) هي المقياس لهذا الميل للتمدد أو التقلص. تخضع هذه الخاصية الميكانيكية للتطبيق حتى على صعيد الشبكة البلورية. القيمة النظرية لنسبة بواسون في المواد التجانسية هي 0.25، إلا أن القيمة التقننية لمعظم المواد المعدنية تتراوح بين 0.25 و 0.35

معامل القص G shear modulus هو كمية فيزيائية ويدعى في علم المواد كذلك بمعامل الجسوء و تمثل هذه الخاصية للمادة بالنسبة بين إجهاد القص τ وانفعال القص γ . وحدة قياس معامل القص هي جيجا باسكال (Units: N/m²)

$$\tau = G \gamma$$

تمثيل معامل القص

$$G \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\tau_{xy}}{\gamma_{xy}} = \frac{F/A}{\Delta x/l} = \frac{Fl}{A\Delta x}$$

τ_{xy} : إجهاد القص على المستوى xy ;

F : القوة ;

A : المساحة التي تطبق عليها القوة

الإزاحة الجانبية النسبية هي الزاوية θ ;

$$\tan\theta = l / \Delta x = \gamma_{xy}$$

Δx الإزاحة الجانبية; و l هي السماكة

والصيغة التي يرتبط بها معامل القص بمعامل يونج E ونسبة بواسون ν هي كالتالي:

$$G = \frac{E}{2(1 + \nu)}$$

تقدر قيمة G للمواد غير المتباينة ميكانيكيا (اللاإزوتروبية):

$$G \sim 0.4E$$

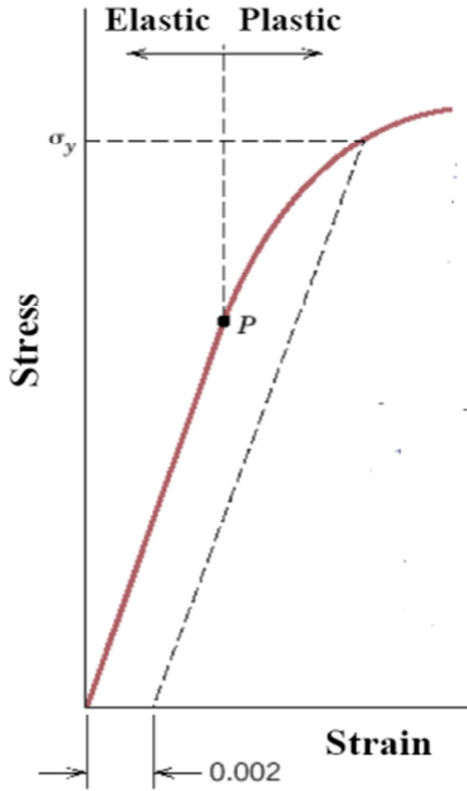
4.5 الانفعال اللدن

يلي المنطقة الخطية منطقة تمثل منحنى من الدرجة الثانية ويتم الحصول على الثوابت من التجارب المعملية و ثم اقصى إجهاد يليها الانهيار للمادة. هذه المنطقة الخطية تنتهي عند ما يسمى بنقطة الخضوع. تتصرف المادة فوق هذه النقطة بشكل لدن بحيث لا يمكنها أن تعود إلى طولها الأصلي بعد زوال الحمل.

مقاومة الخضوع

أما إذا احتفظ الجسم بنشوه دائم - بعد تحميله قوة تفوق عتبة معينة وإزالة هذه القوة - ؛ فيقال: إنه يتميز بسلوك لدن (الشكل 37). وقد تسمى النقطة P حيث ينتهي عندها السلوك المرن ويبدأ السلوك اللدن بنقطة الخضوع أيضا بحد المرونة.

قد يصعب تحديد نقطة الخضوع لبعض المواد فحينئذ يمكن اللجوء إلى تعريف مفهوم آخر يدعى بمقاومة الخضوع σ_y yield strength.



ومقاومة الخضوع تعني الإجهاد الذي تبدأ عنده المادة ببعض التشوهات اللدنة وغالبا عند تشويه بمقدار قيمته 0,002. تبدأ المادة بالخضوع عند إجهاد محدد يتمثل في نقطة الخضوع العليا, بعد ذلك يستمر التشوه رغم الخفض من الإجهاد إلى أن يصل الإجهاد لقيمة ثابتة تدعى نقطة الخضوع الدنيا.

أكبر حمل تتعرض له مادة الاختبار يسمى مقاومة الشد tensile strength أو الإجهاد الأقصى للشد.

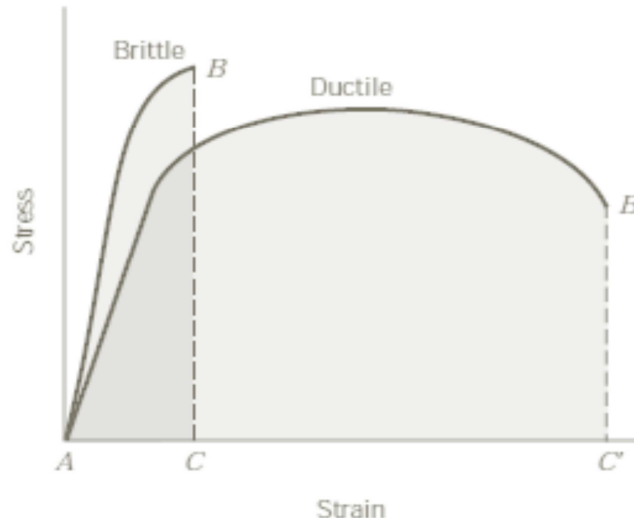
شكل 38 منحنى إجهاد-انفعال

المُطيلية Ductility

وهي قياس للانفعال عند الإخفاق, ويمكن تعريفها كمياً على أساس نسبة الاستطالة وهي مقدار الزيادة في طول قياس التشويه اللدن عند الإخفاق, ونسبة الاستطالة:

$$\%EL = (l_f - l_0 / l_0) \cdot 100$$

l_f طول العينة عند الإخفاق و l_0 طول العينة الأصلي.



شكل 39

| Material | Yield Strength | | Tensile Strength | | Ductility, %EL [in 50 mm (2 in.)] ^a |
|---------------------------------|----------------|-----|------------------|-----|---|
| | MPa | ksi | MPa | ksi | |
| Metal Alloys^b | | | | | |
| Molybdenum | 565 | 82 | 655 | 95 | 35 |
| Titanium | 450 | 65 | 520 | 75 | 25 |
| Steel (1020) | 180 | 26 | 380 | 55 | 25 |
| Nickel | 138 | 20 | 480 | 70 | 40 |
| Iron | 130 | 19 | 262 | 38 | 45 |
| Brass (70 Cu-30 Zn) | 75 | 11 | 300 | 44 | 68 |
| Copper | 69 | 10 | 200 | 29 | 45 |
| Aluminum | 35 | 5 | 90 | 13 | 40 |

جدول 6 بعض الخصائص الميكانيكية لمواد معدنية

الرجوعية Resilience

هي قياس لقدرة المواد على امتصاص وتحرير طاقة الانفعال المرن. و القيمة العظمى للطاقة في وحدة الحجم التي يمكن تخزينها بمرونة. وتعرف بمعامل الرجوعية، U_r ، الذي يمثل بالمساحة تحت الجزء المرن من منحنى الإجهاد-الانفعال. هذه المساحة المثلثة لها القيمة

$$U_r = 1/2 \sigma_y \cdot \varepsilon_y = \sigma_y^2 / 2E$$

حيث σ_y هو إجهاد الخضوع و ε_y هو انفعال لحد التناسب, E معامل يونغ.

المتانة Toughness

تعتبر هذه الخاصية عن قدرة المادة على امتصاص الطاقة خلال تحميلها حتى الكسر أو بعبارة أخرى عن الطاقة المستهلكة في كسر العينة. وتساوي المتانة المساحة تحت المنحنى إجهاد-انفعال منذ بداية التحميل إلى الكسر, ويجري اختبار المتانة على قطع اختبار قياسية محزوزة تتعرض لقوى صدم تكسرها, ثم تعين قيمة الشغل المبذول في الكسر e.g. J/m^3 .

5.5 الإجهاد الهندسي والإجهاد الحقيقي

إن المساحة الفعلية للعينة الخاضعة للانفعال تتغير خلال عملية الانضغاط. في الواقع, تكون المساحة المنفصلة تابعة للحمل المطبق, يمكننا أن نعرّف الإجهاد بأنه القوة مقسمة على مساحة العينة عند بداية التجربة. وبالتالي سيشير إجهاد الانضغاط إلى نقطة الانهيار على المنحنى إجهاد-انفعال الحقيقي (شكل 40), يعرّف σ_T ; ε_T (True) كما يلي:

$$\sigma_T = F/A_i$$

ومن الأفضل أن نعرّف على الانفعال الحاصل بواسطة الانفعال الحقيقي

$$\varepsilon_T = \ln l_i / l_0$$

حيث: F الحمل المطبق قبل الانهيار تمامًا.

l_0 : طول العينة الأصلي [m]

l_i : طول العينة قبل الانهيار تمامًا.

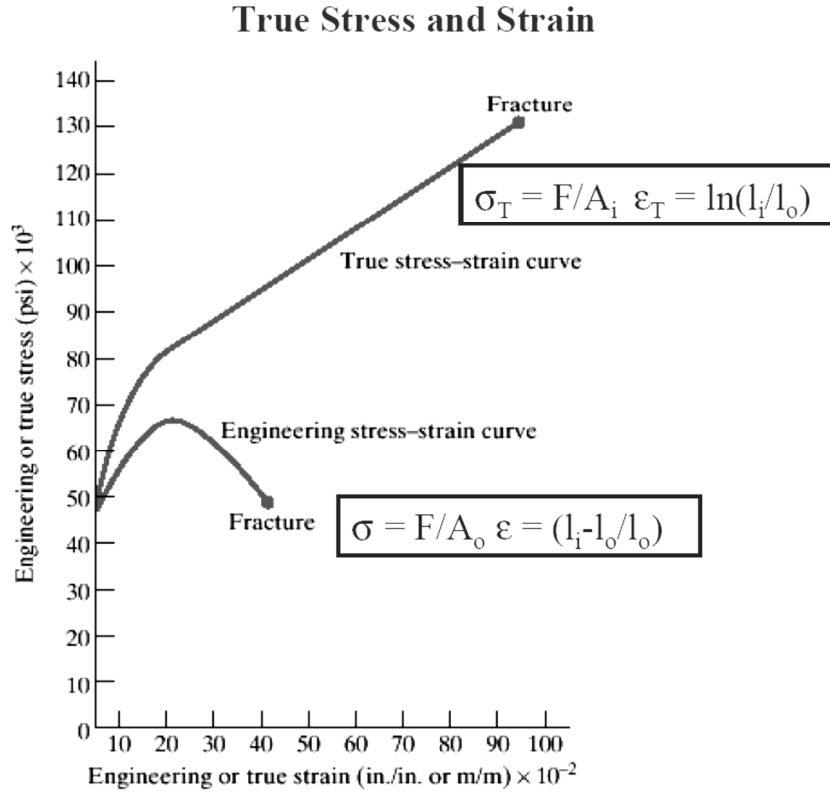
باعتبار أن حجم العينة يبقى ثابتا خلال الاختبار أي:

$$A_i l_i = A_0 l_0$$

فالعلاقة بين الإجهاد الهندسي والإجهاد الحقيقي هي كالتالي:

$$\sigma_T = \sigma (1 + \epsilon)$$

$$\epsilon_T = \ln(1 + \epsilon)$$



شكل 40 مقارنة بين منحنى إجهاد- انفعال الهندسي والحقيقي.

6.5 الصلادة Hardness

تعرف الصلادة بانها قدرة المادة الجامدة على مقاومة التشويه اللدن المحلي أو على مقاومة الخدش بعبارة أخرى, ويتم ذلك بفحص قدرة مادة صلبة على خدش مادة أقل صلابة منها. ووضع مقياس ترتيبي يدعى مقياس موه Mohs scale , فحسب هذا المقياس يعتبر الألماس diamond هو

اصلد جامد طبيعي بالرتبة 10 الذي يليه الكورندم corundum بالرتبة 9 وهكذا إلى معدن الطالك talc ذا الرتبة 1, وهذا الأخير يُعدّ هو الجامد الطبيعي الأكثر نعومة.

يتم اختبار صلادة مادة ما hardness بضغط كرة فولاذية مفسّاة (اختبار برينيل Brinell) أو مخروط من الفولاذ أو الألماس (اختبار روكويل Rockwell) على سطح القطعة التي يجري عليها الاختبار. وتحسب الصلادة بقياس عرض الأثر أو عمقه فكلما زاد قيمة القياس كلما كانت المادة لقل صلادة والعكس صحيح. وتجري معظم اختبارات الصلادة باستخدام آلات تسجل قيماً اختيارية تتناسب عكساً مع عمق تغلغل الكرة أو المخروط في العينة.

اختبار روكويل Rockwell hardness tests

تحدد قيم الصلادة باستخدام اختبار روكويل لمادة ما عن طريق التأثير عليها بحمل صغير وهو عبارة عن كرة دقيقة أو مخروط له حرف مستدير من الماس ثم يليه حمل كبير. يتميز اختبار روكويل بقدرته على عرض قيم مباشرة للصلادة، وبالتالي تفادي الحسابات ويتميز أيضاً بسرعة القياس خاصة في الأوراش لأنها تعطي نتائج مباشرة وفورية لفحص المنتج.

اختبار برينيل Brinell hardness tests

يتم الاختبار بضغط كرة من الفولاذ المصلد ذات قطر معين على سطح عينة مستوية من المادة المراد اختبار صلادتها، وقد تكون الكرة أيضاً مصنّعة من مادة كربيدات التنجستن الملبد. بعد إجراء الاختبار يقاس قطر الأثر الكروي، ثم تحسب صلادة برينيل بتقسيم قوة الفحص على مساحة الأثر الكروي.

اختبارات كنوب وفيكرز Knoop and Vickers microindentation hardness tests

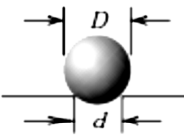
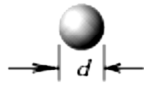
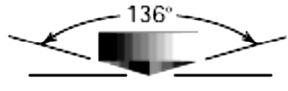

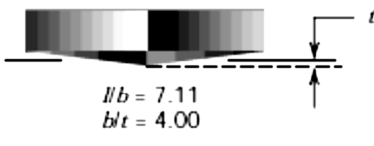
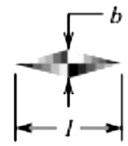
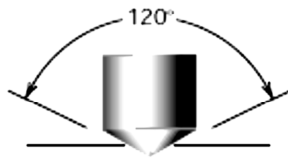



تستخدم تقنية قياس صلادة فيكرز و صلادة كنوب للعينات رقيقة السمك أو للمعادن المغلفة بطرق التصليد بالترسيب. وتختلف الطريقتين للقياس عن بعضها بحسب قيمة الحمل المستخدم أو شكل أداة الخدش. باستخدام طريقة فيكرز يضغط على العينة بواسطة هرم ماسي قاعدته مربعة فينتج من ذلك اثر هرمي الشكل فتحسب الصلادة بواسطة متوسط قطر الأثر وبالإجهاد الحادث نتيجة الضغط.

ويمكن بجداول التحويل خاصة لاستخراج قيم الصلادة التي قيست بطرق أخرى.

العلاقة بين الصلادة ومقاومة الشد

والجدير بالذكر فان مقاومة الشد تتعلق تناسيبيا بالصلادة, وبذلك يمكن تعيين مقاومة الشد دون إتلاف العينة عن طريق اختبار الشد, فكلا الخاصيتان يتعلقان بمقاومة المادة للتشوه اللدن. ففي حالة عيّنات الفولاذ مثلا يمكن استخدام العلاقة بين صلادة برينيل HB و مقاومة الشد TS

$$TS \text{ (MPa)} = 3.45 \cdot HB$$

| Test | Indenter | Shape of Indentation | |
|-----------------------------------|---|--|--|
| | | Side View | Top View |
| Brinell | 10-mm sphere of steel or tungsten carbide |  |  |
| Vickers microhardness | Diamond pyramid |  |  |
| Knoop microhardness | Diamond pyramid |  |  |
| Rockwell and Superficial Rockwell | <ul style="list-style-type: none"> ⎧ Diamond cone ⎧ 1/8, 1/4, 1/2, 1/4, 1/2 in. diameter ⎧ steel spheres |   |   |

جدول 7 تقنيات قياس الصلادة

6 الانخلاعات و تقوية المواد

1.6 الانخلاع و أساسيات اللدونة

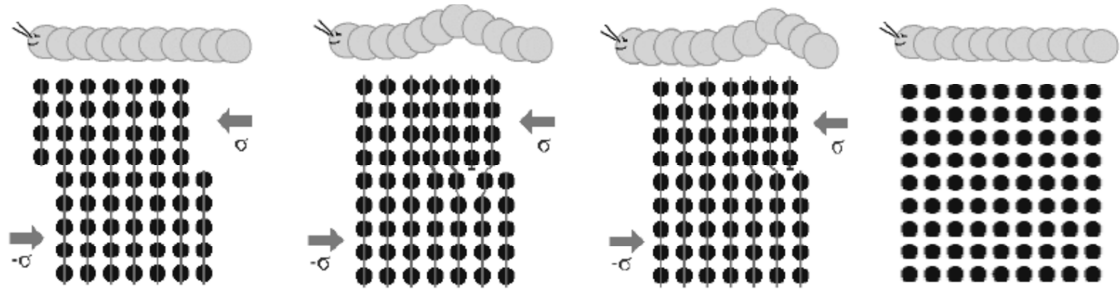
1.1.6 اللدونة plasticity

اللدونة هي خاصية ميكانيكية تعبر عن قابلية المادة للتشوه الدائم بفعل الإجهاد stress, وينتج عن هذه الخاصية سلوك قابلية التشغيل والتشكيل الميكانيكي للمادة دون حدوث الانكسار ودون أن تغير من تركيبها الكيميائي؛ أي تغيير أبعادها تحت تأثير الإجهادات والمحافظة على الأبعاد الجديدة بعد زوال هذه الإجهادات. عموماً يحدث هذا التشويه اللدن تحت إجهاد أقل بكثير من الإجهاد اللازم لكسر كل الروابط الذرية لمستويات الانزلاق. فاستناداً إلى الفكرة التي طرحها تايلور وأوروفان و بولياني في عام 1934 يعتبر التشويه اللدن أمر راجع إلى حركة عدد كبير من الإنخلاعات.

2.1.6 خواص الإنخلاعات

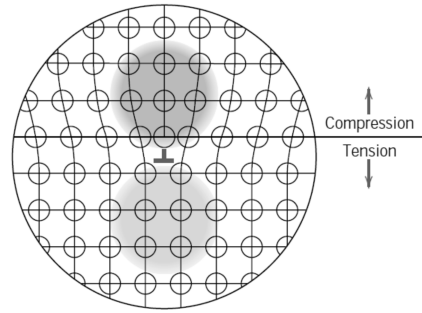
تتنافر الإنخلاعات إذا كان لديها نفس الإشارة (أي نفس الاتجاه لمتجه بورجر), وتجذب أو أحياناً تباد إذا كان لديها إشارات مضادة. وهذا التفاعل راجع إلى أن الإنخلاعات تؤثر كل منها على الآخر بواسطة مجالات جهد حولها, فان الذرات المتجاورة تتقارب بعضها عن بعض فوق خط الانخلاع أما تحته فتنباعد. وهذا الاضطراب في المسافات بين ذرية يولد مجالات جهد تظهر بشكل واضح في حالة الإنخلاعات الحافية (شكل 42), أما الإنخلاعات اللولبية فلا ينجم عنها إلا جهد قص قاصم في الاتجاه الموازي لمستوى الانزلاق.

يُعبّر عن عدد الإنخلاعات في المواد بكثافة الانخلاع, وتحدّد هذه الكثافة بعدد خطوط الانخلاع التي تقطع وحدة المساحات بالبلورة. ففي بلورات الجيرمانيوم و السيلكون تتراوح الكثافة بين من 10^5 انخلاعا في سم² أما في بلورات المعادن البالغة في التشويه فقد تصل كثافة الانخلاع إلى 10^{12} انخلاعا في كل سم³.

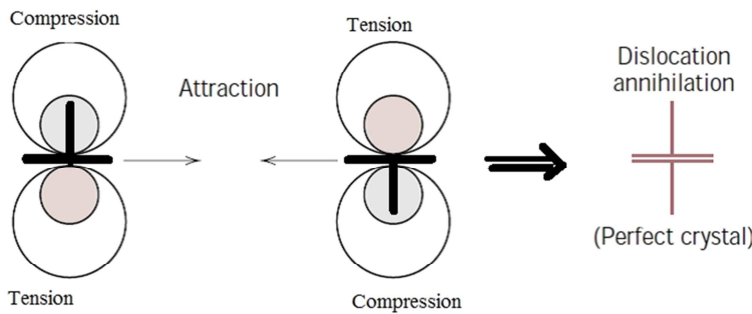


شكل 40 حركة الانخلاع على مستوى بلوري للانزلاق

معظم المواد البلورية، ولا سيما المعادن، تحتوي على انخالات إزاء تشكيلها وعدد الإنخالات يزيد أساسا بشكل كبير نتيجة الإجهاد اللدن. في الواقع يلاحظ أنّ توزيع الإنخالات في البلورة لا يكون متجانسا، فالانخالات في طبيعتها تمثل ظاهرة ديناميكية أي أنّ هناك نطاقات أو مصادر في البلورة تتولد و تنبعث منها الإنخالات و نطاقات تجتذب نحوها أو تلاشى فيها.



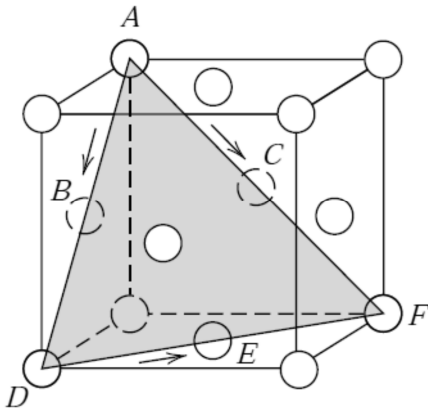
مناطق ضغط (معتمة) ومناطق شد (مفتوحة) حول انخلاع حافة



شكل 41 انخالعين حافيين بإشارات متعكسة وعملية إبادتهما (C منطقة ضغط و T منطقة شد)

3.1.6 مستويات الانزلاق

عند دراسة ظاهرة اللدونة على البلورات الأحادية، وُجد أنّ العينات بعد التشكيل تحدث بها انزلاقات على مستويات معينة مستويات تدعى *مستويات الانزلاق*، وعليها تتحرك الإنخالات في اتجاهات مفضلة تسمى *اتجاهات الانزلاق*. فكل مادة بلورية لها نظام انزلاق يمكن بواسطته أن نحدد السطح والاتجاه الذي تتحرك فيه الإنخالات.



شكل 42 أحد نظم الانزلاق في الخلية الوحدة FCC

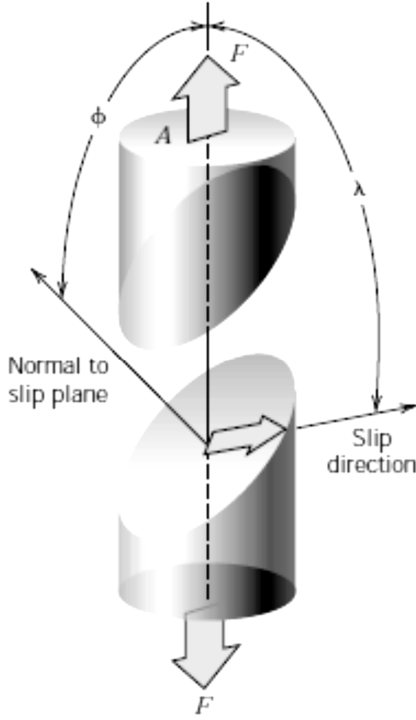
ينتشر الانخلاع في المعادن خلال أنظمة انزلاق تتمثل في المستويات عالية الرص. ففي البلورات fcc، التي تحظى بتمائل بلوري عالي، يمكن للانخلاع أن ينزلق على كل المستويات المتكافئة للمستوى عالي الرص. نتيجة لذلك فالمعادن المتبلورة في النظم البلورية المكعبية تعتبر أكثر قابلية للسحب وذات مُطيلية متميزة.

4.1.6 الإجهاد الناتج عن نظام الانزلاق

يعتبر مفهوم الانخلاع من أهم العوامل التي فسرت الظواهر الميكانيكية الناشئة عن الإجهاد وبالتالي تعميم نظرية المرونة لتشمل تأثير كل الإجهادات بما فيها المتناهية في الضعف. إذ أثبت أن الانزلاق يحدث في مستوى معين عندما تصل مركبة جهد القص القيمة المناظرة إلى القيمة الحرجة

$$\tau_R = \sigma \cos \phi \cos \lambda$$

ويمكن تفسير القيم المنخفضة نسبياً لإجهاد القص بواسطة حركة الانخلاع، ولذلك يمكن القول بأن الإنخالات قد تزيد من لدونة البلورة وبالخصوص عند درجات الحرارة العالية، وإن تغيير أشكال



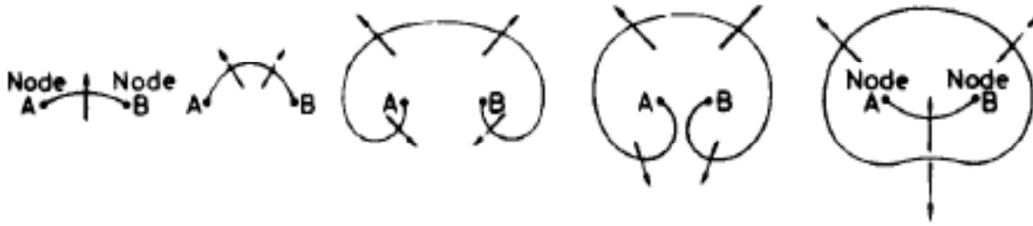
شكل 43 العلاقة الهندسية بين نظام الانزلاق وإجهاد القص الناتج في بلورة أحادية

الجوامد تغييراً لُدناً يزيد من كثافة الانخلاع.

إذا انتقل انخلاع في مستوى انزلاقه فالإزاحة الحادثة تساوي نظرياً قطر ذرة واحدة بينما الإزاحة الحقيقية قد تبلغ مئات الأضعاف لقطر ذرة. فهذا التناقض لا يكمن في نظرية الانخلاع الانسيابي، ولكن في الطريقة التي يتم بها تصوّر الشكل الهندسي العام للانخلاع. فالانخلاع لا يكون بالضرورة على شكل مستوي أو منحني مفتوح، وإنما يمكن أيضاً اعتباره كمنحني مغلق داخل الشبكة البلورية.

فعند إزاحة المادة بمقدار ثابت أي b ، لا يكون من الضروري أن يوازي متجه بورجر سطح الانزلاق. ففي هذه الحالة يمكن للإزاحة أن تُحدث فجوة أو تشابكا في الشبكة البلورية، ولتحصل المادة على توازنها الديناميكي يستوجب ذلك إضافة جزء من المادة لملء الفجوات أو إزالتها لمنع التشابك.

من المعروف أن الإنخلاعات تنمو مع التشوه اللدن الذي يتولد عن إجهاد القص نفسه، ومن بين الآليات التي تم بواسطتها تفسير توليد الإنخلاعات بمصادر فرانك- ريبيد Frank - Read Source. فهذا الميكانيزم تأخذ فيه الإنخلاعات شكل خلايا شبه دائرية مقلدة، وتميل إلى الاتساع إذا طُبّق جهد قص في اتجاه الذي يحدث فيه الانزلاق. ويمكن تصور ذلك بعملية غمس أنبوبة في محلول صابون، والنفخ فيها لتوليد فقاعات تصدر من فوهة الأنبوبة. فأغشية الفقاعات تمثل في هذا التصور خلايا الانخلاع ذات طول قطر محدد. فالخلايا التي يكون طول قطرها اقل من الخلية الحرجة تنكمش تلقائياً والأخرى التي يفوق طول قطرها الخلية الحرجة تتسع. فتحت تأثير إجهاد خارجي يستمر الانخلاع في الانحاء وبعده يحدث الانخلاع التالي وينتج عن ذلك تكوين عروتين ترتبطان فيما بينهما لتكونا قطاع جديد يمكن بواسطته تكرار نفس العملية، أما الجزء الخارجي فيقفل مكوناً دائرة خارجية تنمو إلى أن تصل سطح البلورة.



شكل 44 المراحل المتتابعة لنظرية مصدر الانخلاع لفرانك_ريد Frank - Read Source, باعتبار سطح الورقة هو مستوى الانزلاق.

5.1.6 تشوه البلورات المتعددة

كل حبيبة في المواد لها اتجاه بلوري واستطالة حسب ظروف نموها البلوري, فعندما يطبق إجهاد على العينة في اتجاه معين تسعى الحبيبات لكي تستطيل حول اتجاه مفضل. فأثناء التشوه اللدن تؤدي الحبيبات حركة انزلاقية و دورانية حول اتجاه مفضل, وذلك بالشكل الذي يمكن به أن تقاوم الإجهاد المأثر بشكل فعال. يمكن ملاحظته بوضوح هذا النوع من الأنسجة البلورية الناتج عن التشويه اللدوني في الأسلاك أو شرائح المعدنية.

2.6 آليات تقوية المعادن

تقوى المواد لتكتسي متانة عالية ومقاومة أكثر للتشوه أو الإخفاق, و يجري ذلك عموماً على حساب قابليتها المادة للسحب, وهناك عمليات مختلفة لتقوية المواد.

التقوية بالحد من الحجم الحبيبي

رغم الزيادة في شدة الإجهاد يصعب على الانخلاعات أن تجتاز السطح الخارجي للحبيبية فتصطف أو "تراكم" هناك. فالحدود الحبيبية هي التي تفرض نفسها على الانخلاعات لتعمل كحاجز يعترض حركتها, وذلك بسبب عدم الاتساق في مستويات الانزلاق بين البلورات.

فالمواد ذات حبيبات دقيقة هي اشد قوة و صلادة من تلك ذات الحبيبات الخشنة، لأن إجمالي مساحة الحدود الحبيبية يزداد ليزيد من تقييد حركة الإنخلاعات, وبالتالي تصبح المادة اقوى واكثر مقاومة للتشكيل.

وفقا لما يعرف بمعادلة هول بيتش *Hall-petch equation* ، تعتمد مقاومة الخضوع على حجم الحبيبات

$$\sigma_y = \sigma_0 + k_y d^{-1/2}$$

يصف d متوسط قطر الحبيبات، و σ_0 و k_y تعتبر ثوابت معينة للمادة. وتجدر الإشارة إلى أن هذه المعادلة غير صالحة للتطبيق على حبيبات الأنسجة الخشنة أو الدقيقة جداً.

الحدود الحبيبية ذات الزاوية الصغيرة

subgrains لا تتفاعل بشكل جيد لتقييد

حركة الانخلاع نظرا للاختلال الطفيف في

الاتجاهات البلورية للحبيبات المتجاورة.

اقترح بورجر أن الحدود الحبيبية ذات

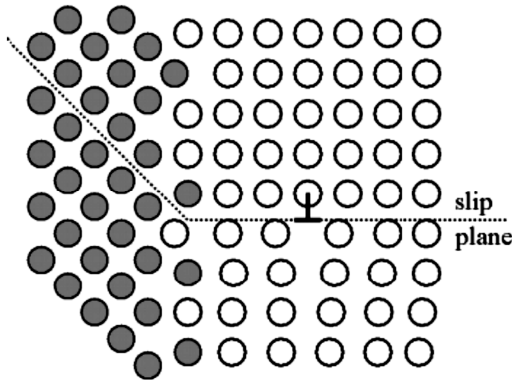
الزاوية الصغيرة تتكون من إنخلاعات

مصطفة سماها بحدود الميل, فاذا استُخدم

إجهاد مناسب يمكن تحريك هذه الحدود

بدورها في الاتجاه العمودي عليها

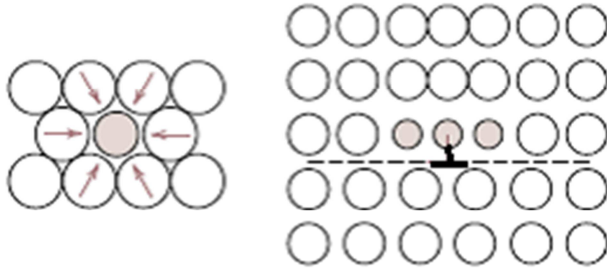
. *grain boundaries migration*



شكل 45 تغيير اتجاه مستوى الانزلاق بسبب حاجز الحد الحبيبي

التقوية بالمحاليل الجامدة

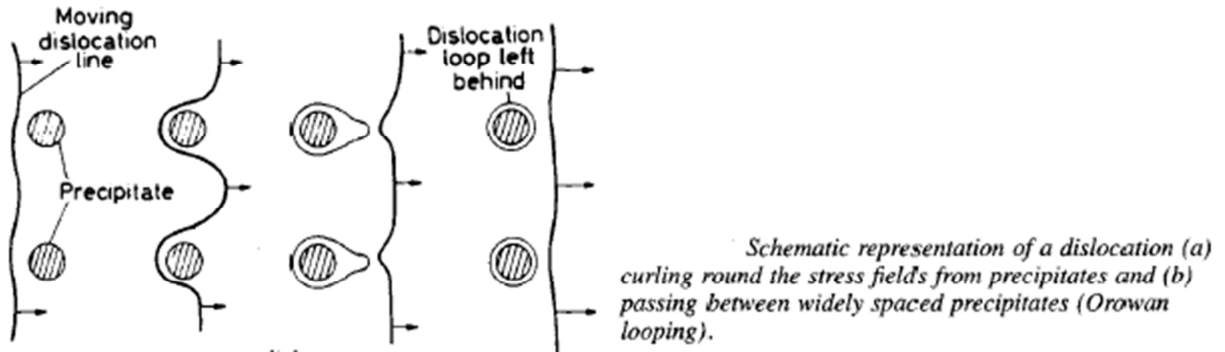
تُتبع في تصليد المعادن أساليب كيميائية حرارية وذلك بإضافة مباشرة لشوائب تزيد في شدة المعدن لتحمل الإجهادات, وهذه الإضافات تدخل في التركيب البلوري بشكل استبدالي أو فراغي (شكل 47).



شكل 47 تأثير الشبكة البلورية على الشوائب الاستبدالية

عندما يتحرك الانخلاع تاركاً وراءه الذرات المذبذبة التي تكون قد تجمعت حوله أثناء التخمير الحراري مثلاً، تزداد طاقة البلورة. ومصدر ذلك مقاومة حركة الانخلاع بواسطة مجالات جهد حول الشوائب المترسبة، التي تحدث تثبيتها للانخلاعات و ترفع من قوة ومن شدة التحمل للمادة. (شكل 48).

إن خلائط الفولاذ مثلاً التي تقل نسبة الفحم فيها عن 0.2% تعد غير قابلة للتصليد، إذ أن النسب الضئيلة للشوائب لا تكون كافية لإكساب البلورية جهد مقاومة داخلي يثبت حركة الانخلاعات.



شكل 46

التقوية الانفعالية أو التشغيل على البارد Strain hardening, Work Hardening

وعندما يتجاوز الإجهاد المطبق حد الخضوع، وذلك باستمرار تشغيلها على البارد، تبدأ أجزاء كل بلورة من بلورات البنية بالانزلاق بعضها على بعض. والزيادة في الإجهاد تؤدي إلى تقاطع الإنخلاعات و إلى تشابكها، و من المتوقع ان تتولد عن ذلك انخلاعات جديدة تعيق بعضها حركة بعض، مما يزيد من مقاومة المادة للتشكيل وتزداد قساوته. الإنخلاعات قلماً تقع في مستوى واحد من مستويات الانزلاق، ولكنها في الغالب تقفز من مستوى انزلاق إلى آخر حتى تتقابل سوياً في نطاقات عقدة الانخلاع. ولوحظ أيضاً أن تقييداً وتثبيتها لحركة الانخلاع أكثر شدة ينشأ في مستويات الانزلاق التي سبق أن تحركت عليها الإنخلاعات.

3.6 الاستعادة, إعادة التبلور, النمو البلوري

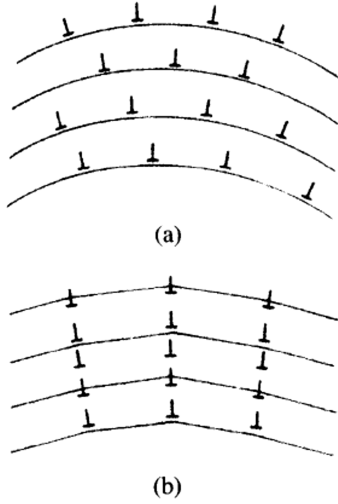
إذا تعرضت المعادن لعملية التشغيل على البارد تتغير بعض خواصها البنيوية و الميكانيكية فتكتسب المادة نسيجا تشويهيًا. فإذا تم علاج المادة حراريا بأساليب معينة فإن تركيب الحبيبات الجديدة يكون له أيضا اتجاه مفضل يختلف عن السابق.

1.3.6 الاستعادة recovery

الاستعادة هي حالة معالجة حرارية تغيب اثرها كل أنواع الإجهاد الخارجية، خلالها تتخلص المادة مما أصابها من إرهاق. فنتيجة لارتفاع درجة الحرارة، عملية الإحماء الانتشاري، يسهل الانتشار الذري و تنشيط الإنخلاعات، اذ تتقابل الإنخلاعات ذات الإشارات المضادة لإبادة بعضها البعض، أما الإنخلاعات المتبقية فيعاد توزيعها وتكديسها في نطاقات ضيقة قصد الخفض من طاقة الانفعال الإجمالية في البلورة. ولهذا تكون هذه العملية هي مجرد عكس عملية التصليد الانفعالي والاهم من هذا هو إمكانية استرجاع جل الخصائص الفيزيائية مثل الموصلية الكهربائية والحرارية إلى حالة ما قبل التشغيل على البارد.

2.3.6 إعادة التبلور Recrystallization

القوة الدافعة لإعادة هي نطاقات شبه خالية من الإجهاد بجانب نطاقات ذات كثافة انخلاع مرتفعة نسبيا مما يسبب حالة لا اتزانية بالمفهوم الديناميكي. ففي هذه الحالة تتكون نوى جديدة التي يمكنها أن تنمو في الحجم بواسطة انتشارات قصيرة المدى. إن التركيب يتضمن الحبيبات جديدة خالية من الانفعال لها كثافة انخلاع منخفضة (أي لها أبعاد واتجاهات بلورية متساوية وحدود منتظمة) وان المادة تحاول استرجاع نسيجها الأصلي الذي كانت عليه قبل التشغيل. إن عملية الاستعادة لا تستطيع أن تنقص من كثافة الانخلاع بشكل كبير فتبقى الحبيبات رغم ذلك في حالة انفعال.



شكل 47

a. ترتيب عشوائي للانخلاعات الحافية
b. انخلاعات مصطفة على هيئة جدران متعددة
الأوجه, Polygonization

3.3.6 النمو الحبيبي grain growth

إذا تركت مادة مشوهة متعددة البلورات على درجة الحرارة التلدين (الانصهار)، تعاد بلورتها بالكامل ثم يعقبها النمو الحبيبي ومعدل النمو يعتمد على الظروف الحرارية وعلى عمليات الانتشار قصيرة المدى. تنمو البلورات حجماً عن طريق تحريك حدودها الحبيبية. تمتد حركة الحدود بواسطة الانتشار الذرية عبر العينة فتتو الحبيبات الكبيرة على حساب الحبيبات الصغيرة لتلتقي مع بعضها في نسيج حالة الاستقرار. القوة الدافعة لهذا النمو هي الخفض من الطاقة الكلية لنظام المادة الذي يعتمد على المساحة الإجمالية للحدود الحبيبية.

7 الإخفاق

1.7 تقديم

إن إخفاق المواد الهندسية failure هو شيء غير مرغوب فيه و ذلك لعدة أسباب منها الخسائر الاقتصادية وتعرض الأرواح البشرية لوضع خطر. وتقع على عاتق المنتجين مسؤولية توقع الإخفاق الممكن والتخطيط له واتخاذ تدابير وقائية مناسبة ضده في المستقبل. على الرغم من أن أسباب هذا السلوك للمواد قد تكون معروفة, لكن من الصعب ضمان الوقاية ضد الإخفاق. فبالفهم الكافي لأساسيات ميكانيكا الكسر وللخواص الفيزيائية للمادة كأنماط الانتقال و الكلال والزحف يمكن تقادي بعض المظاهر المؤدية للإخفاق.

2.7 أسس الكسر

الكسر البسيط هو فصل الجسم إلى قطعتين أو أكثر ردا على الإجهاد المفروض عليه الذي قد يكون ستاتيكي (ثابت أو يتغير ببطء مع الزمن) عند درجات حرارة منخفضة نسبة لدرجة حرارة الانصهار للمادة. وقد يكون الإجهاد المؤثر شدا, أو انضغاطا مع العلم أن هناك أنماطا مركبة تدعى إجهادات القص أو الإلواء.

يحدث الإخفاق استجابة لإجهاد مفروض على المادة ويعتمد نمط الكسر على آليتي تكوين التشقق وانتشار الصدع. ويتميز الكسر المطيل بتكوين نطاقات إستطالة ومد بجوار التشققات, اذ ستقاوم المادة بواسطتها أي تمديد آخر ما لم تكن هناك زيادة في الإجهاد. وتعتبر التشققات المطيلة في الغالب على أنها مستقرة. من ناحية أخرى, توصف الشقوق الهشة بانها غير مستقرة, لأن توليدها يكون مفاجئ و انتشارها سريع و تلقائي دون الحاجة للزيادة في الإجهاد المأثر بحيث لا يكون امتصاص كبير للطاقة المصاحبة للكسر. تعد معظم السبائك المعدنية مطيلة الانكسار عند درجات حرارة الغرفة, أما غالبية الخزفيات فتتكسر بشكل قصف او هش, بينما البوليمرات قد تشهد انكسارات مركبة يمتزج فيها النمطان القصف والمطيل.

1.2.7 الانكسار المطيل

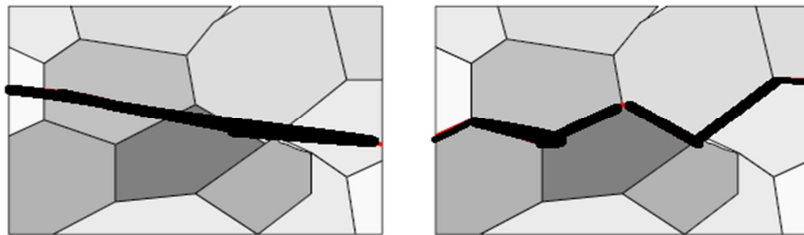
بعض المعادن النقية مثل الذهب الخالص يمكن مدها أو تنيها لتصل إلى تشويه يقارب 100 % قبل الانكسار. الانكسار المطيلي يتضمن درجة عالية من التشوه اللدن بين 50 % إلى 100 % بالنسبة للكثير من المعادن المطيلة، ومع ارتفاع درجات الحرارة يلاحظ أيضا ازدياد في مطيلية المواد القصفة كالبوليمرات والزجاج. يرتبط الانفعال الذي يحدث عنده الانكسار بنقاوة المادة، فالحديد النقي عند درجة حرارة الغرفة يمكن أن يبلغ مقدار الانفعال قرابة 100 %، في حين أن أنواع الحديد الزهر أو الفولاذ عالي الكربون لا يمكنها أن تنفعل إلا بقيمة 3 % فقط.

تجري عملية الانكسار بخطوات أساسية، إذ تزداد الاستطالة تدريجيا مع الحمل حتى تصل إلى حد المرونة، ثم يبدأ تكوين العنق فتتشكل تجايف صغيرة نتيجة تركيز الإجهادات عند أصغر مقطع عرضي أو عنق الانكسار، وبعد ذلك تتشكل الفراغات و تتحد وتلتحم مع بعضها لتشكل صدع بيضاوي الشكل عند زيادة التشويه. وفي المراحل الأخيرة ينمو التشقق ويبدأ في الانتشار إلى أن يحدث الكسر.

2.2.7 الانكسار القصف

يحدث الانكسار القصف أو الانكسار الهش من دون تشوه ملحوظ وبانتشار سريع للصدع. ونتيجة لسرعة انتشار الصدع العالية، لا يوجد وقت كافي لحدوث أي تشوه لدوني قبل الانكسار. ينتشر التشقق في معظم المواد البلورية بالانفلاق على طول مستويات بلورية متتالية، ذات الارتباط الذري الأضعف نسبيا، تدعى مستويات الانفلاق *cleavage*.

ينتشر الصدع القصف على أساس أن يحافظ عن الاتجاه العمودي لإجهاد الشد المؤثر، فإذا تمكن الكسر من عبور الحدود الحبيبية فهو كسر عبر حبيبي *transcrystalline*، أما إذا اتخذ مسار الحدود الحبيبية كنقاط ضعف بنيوية ينتشر عليها، يسمى حينئذ كسر بين حبيبي *intergranular*.



شكل 48 مسار كسر عبر حبيبي وكسر بين حبيبي

3.7 مبدأ ميكانيكا الانكسار

قوة الكسر للجوامد الهشة ترتبط بقوى التماسك بين الذرات, فبالنسبة للمواد القصفة يمكن أن تقدر هذه القوى نظريا لكنها تكون قيمتها في معظم الأحيان اكبر من قوة الانكسار التقنية. فإن قيم القوى النظرية, تنبني على القوة المطلوبة لتمزيق الروابط الذرية في وحدة المساحة وتقدر تقريبا $E \cdot 0.1$ (E هو معامل المرونة).

1.3.7 تركيز الإجهاد

في بداية العشرينات من القرن الماضي اظهر جريفيت Griffith أن قوة المادة ليست نتيجة مباشرة لقوة روابطها الذرية بل هي نتيجة لنقاط ضغط ناتجة عن عيوب في بنيتها. قد تكون هذه العيوب أو الشروخ مجهرية أو بادية بالعين المجردة, تدعى أحيانا مناطق تركيز الإجهاد. وتبين أن القوة التقنية للانكسار تكون بمقدار 2 إلى 3 رتب اقل عن قوة الانكسار النظرية.

إذا ما افترضنا ظهور شرخ عرضي ، وظهور الشرخ يكون مصحوبا بتكوين سطح حر طوله l (شكل 51) ويؤثر على العينة بإجهاد شد σ_t , والإجهاد المفروض على المساحة المتعامدة مع اتجاه الحمل هو σ_0 , أما الإجهاد الأقصى عند اطراف الشرخ فهو σ_m

$$\sigma_m = 2\sigma_0 (l/\sigma_t)^{1/2}$$

معامل تركيز الإجهاد

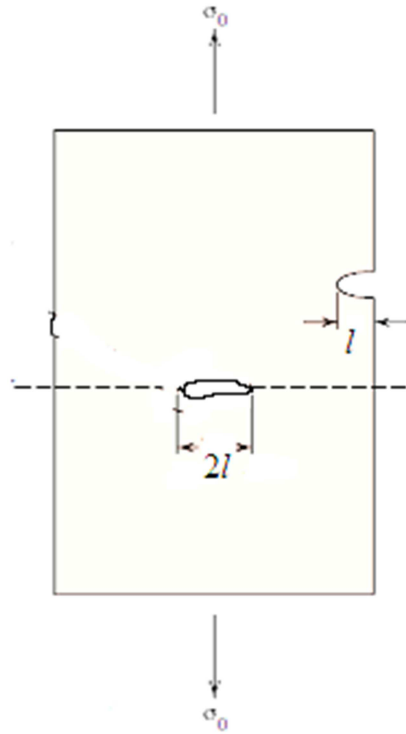
$$K = \sigma_0/\sigma_m$$

ولقد عالجت نظرية جريفيت القوة الحقيقية بواسطة مؤشر يصف انتشار الكسر في شريحة تحتضن شرخا إهليجي الشكل 51.

من ناحية أخرى فان الإجهاد المروني الحرج المؤدي لانتشار الصدع في الجوامد القصفة هو

$$\sigma_c = (2 E \gamma_s / l)^{1/2}$$

تمثل الطاقة الحرة لسطح العينة و l نصف طول الشرخ داخل العينة γ_s هو معامل المرونة, E



شكل 49 هندسة سطح شرخ داخلي

ففي المواد الهشة عندما يصل الإجهاد المأثر إلى قيمته الحرجة σ_c تحدث عملية التدمير، وتحت هذه الظروف يتعلق معامل تركيز الإجهاد K_{Ic} على طول الشرخ لما يصل إلى القيمة الحرجة. هذه الأخيرة القادرة على إحداث كسر هش تسمى متانة الكسر *fracture toughness*

$$K_{Ic} = Y \sigma_c (l)^{1/2}$$

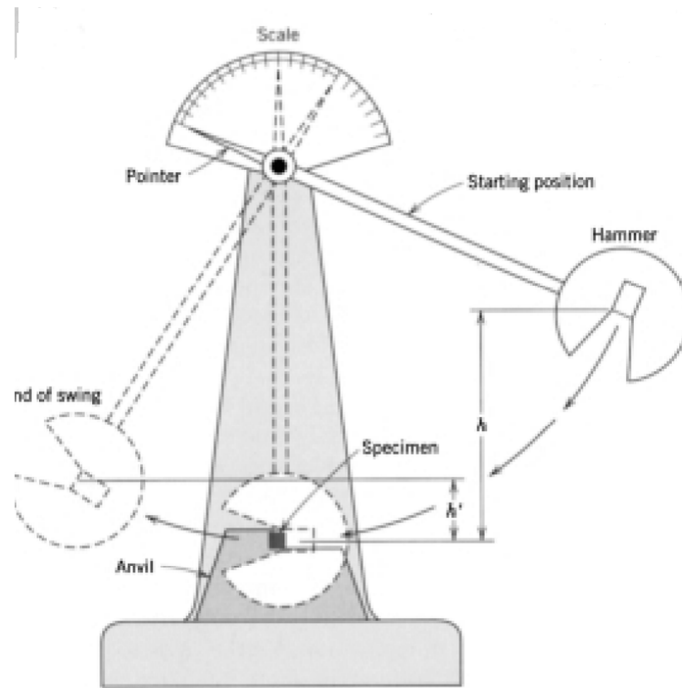
هذه المعادلة تنطبق بالخصوص على العينات السميكة، يمكن اعتبار الشروخ متناهية في الضيق وسطها الحر منبسط. وعلاوة على ذلك، البارامتر Y يعتبر معلمة لا أبعاد لها أو دالة مركبة تعتمد على طول الشرخ وسمك العينة وأحجام العينات وشكلها الهندسي، فضلا عن طريقة الحمل المأثر. ويُفسر ذلك أنّ كلما قلت أبعاد العينة كلما قل احتمال تكون شروخ يبلغ طولها القيم الحرجة، فهناك آليات لإنتاج الشروخ من بينها تفاعل الإنخلاعات ذات الإشارات المتشابهة وتجمعها حول عائق ما، فإذا بلغت شدة مجال القوة قيمة معينة تجتاز بواسطتها حاجز الجهد المقابل لتمزيق الروابط الكيميائية وبالتالي زيادة احتمال حدوث التشقق. فبتقدير عدد الروابط التي يمكن كسرها في

وحدة حجوم وعملية دمجها لتكوين النوى يمكن إصدار فكرة أولية على احتمال ظهور الشروخ. من ناحية أخرى يعتمد طول الصدع على معدل تمزق الروابط الذي يلعب فيه الزمن دورا أساسيا، وبالتالي يعتبر الإخفاق أيضا ظاهرة ديناميكية طبيعية.

2.3.7 اختبار الصدم

هناك نوعين هامين إيزود و شاربي ، تقاس طاقة التصادم أو الطاقة اللازمة لكسر قطعة الاختبار تحت تأثير حمل التصادم، وتسمى أحيانا درجة المتانة. وتعتبر تلك الطاقة أساسا لمقارنة متانة المواد بعضها البعض. عند اختبار الصدم يؤثر حمل على العينة المختبرة بثقل متأرجح من ارتفاع محدد، وتسمى تقنية (Charpy V-Notch) CVN. تستخدم العينات المحزوزة notched في كل من اختبائي ايزور وشاربي لتحديد مكان كسر العينة و تسهيل الكسر خاص في المواد المطيلة نتيجة وجود تركيز إجهاد عند قاع الحز يضعف من مقاومتها للصدم.

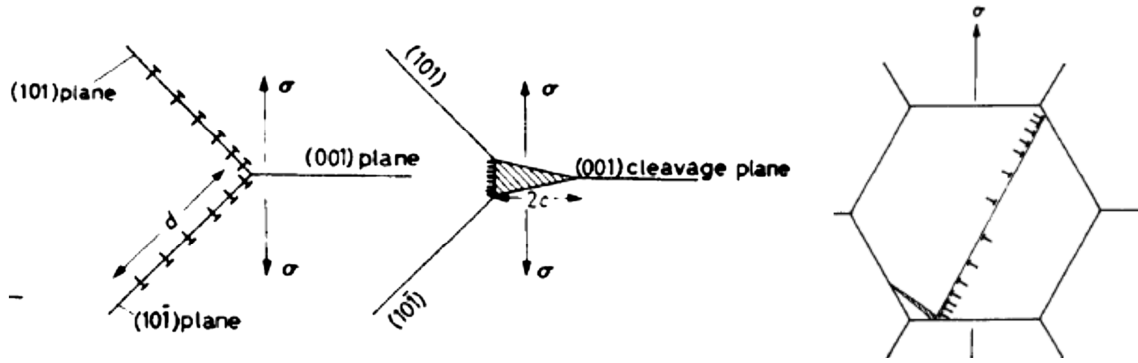
و يراعى عند تشغيل العينات أن يكون مستوى تماثل الحز عموديا على المحور الطولي لقطعة الاختبار وان يكون محور التماثل في مستوى تأرجح مركز ثقل المطرقة. فعند اطلاق البندول تصطدم مطرقة بقطعة الاختبار فتكسر العينة وتمر متأرجحة إلى الجهة الأخرى حتى تصل إلى الوضع النهائي. عندئذ تتم القراءة للمؤشر والتي تدل على مقدار الطاقة التي بذلت في كسر العينة.



شكل 50 رسم بياني لالة اختبار الصدم

3.3.7 الانتقال مُطيل- قصف Cleavage and the ductile- brittle transition

إنَّ معادن fcc يمكن أن تحافظ على مُطيليتها وليونتها في درجات حرارة نسبيا منخفضة, على عكس معادن bcc و hcp التي تنتقل إلى حالات قصفة. وتفسير هذه الانتقالات, يعتمد بالخصوص على تفاعل الحدود الحبيبية مع العوائق أو مع الإنخلاعات (شكل 53).



شكل 53

4.3.7 دراسات فركتوغرافيك

تنتج الشقوق المجهرية من عمليات التصنيع أو التشغيل وتكون على شكل تشققات سطحية وداخلية, أو إجهادات متبقية داخل المادة, وقد أولت الدراسات fractography أهمية كبيرة لهذه الناحية مستخدمة طرق جديدة في اختبار المواد تختلف عن الطرق التقليدية, وتعرف بما يسمى ميكانيك التصدع. ويفضّل المجهر الإلكتروني, نظرا لعمق حقله الضوئي و لجودته الفائقة للكشف عن ملامح سطوح الكسر و غيرها. اذ يتم عن طريق هذه الدراسات فحص أسطح الانكسار واستنتاج معلومات عن طبيعة الإجهادات والعوامل البنيوية التي كانت سببا في الإخفاق كالكشف على اصل الصدع والكيفية التي تم بها انتشار التشقق.

وهناك طرق اختبار السطوح لإجراء قياسات بالغة الدقة لتضاريس السطوح ولاختبار نعومة سطح, ويمكن للحاسوب تحديد ارتفاع السطح بالتحليل الميكرو طوبوغرافي.

5.3.7 الاختبارات غير المتلفة (NDT) non-destructive test

هناك عدد من تقنيات الاختبار الغير متلفة أو اللاتدميرية التي تسمح لكشف وقياس الخلل على الصعيدين الداخلي و السطحي للعينة. وهذا يعني أن الاختبار لا يتلف العينة، ويتم التحليل بالتنشيط الإشعاعي، أو بالأشعة السينية، أو بالتصوير بالنيوترونات، أو بالموجات فوق الصوتية، وغيرها من التقنيات الكهربائية والمغناطيسية. وتستخدم هذه التقنيات لاختبار المكونات البنيوية (أيضا خلال التشغيل) للكشف عن العيوب التي يمكن أن يؤدي إلى قصور الأداء أو إخفاق سابق لأوانه، وبالإضافة إلى ذلك، يتم استخدام هذه الأساليب في مراقبة الجودة لعمليات التصنيع.

4.7 الكلال Fatigue

الكلال هو شكل من أشكال الإخفاق الذي يحدث في البنيات المتعرضة لديناميكية إجهاد متقلب (على سبيل المثال المحركات، ومكونات الآلات). في ظل هذه الظروف، فمن الممكن أن يحدث الإخفاق على مستوى إجهاد أقل بكثير من ذلك إجهاد الشد الناتج الاستاتيكي. الكلال هو نزعة المادة الجامدة إلى أن تنكسر تحت أثر إجهاد متكرر أو دوري و من سماته انه يحدث بشكل كارثي وغدري مفاجئ.

1.4.7 الإجهاد الدوري

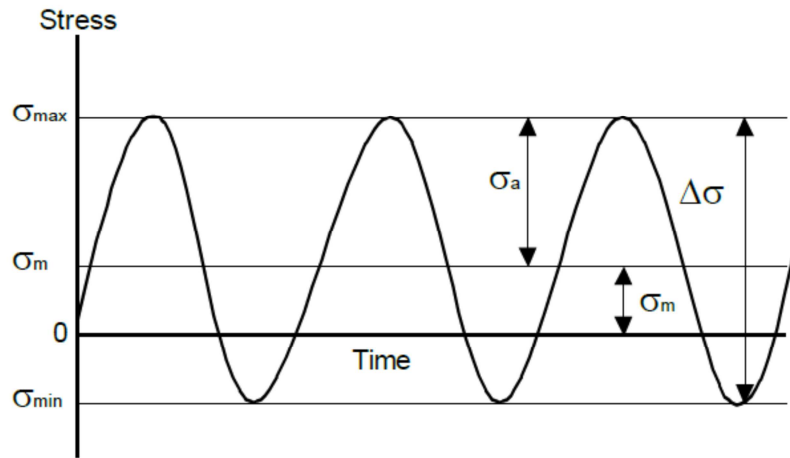
ان الإجهاد الدوري يتميز بقيمة قصوى و قيمة دنيا و إجهاد معنوي ونطاق وسعة للإجهاد. عموما تحسب قيم إجهاد الشد إيجابية، و قيم إجهاد الضغط سلبية حسب ما تحدده الاتفاقيات.

| | | |
|---------------|--------------------|--|
| متوسط الاجهاد | <i>Mean stress</i> | $\sigma_m = (\sigma_{max} + \sigma_{min}) / 2$ |
|---------------|--------------------|--|

| | | |
|--------------|------------------------|--|
| مجال الاجهاد | <i>Range of stress</i> | $\sigma_r = (\sigma_{max} - \sigma_{min})$ |
|--------------|------------------------|--|

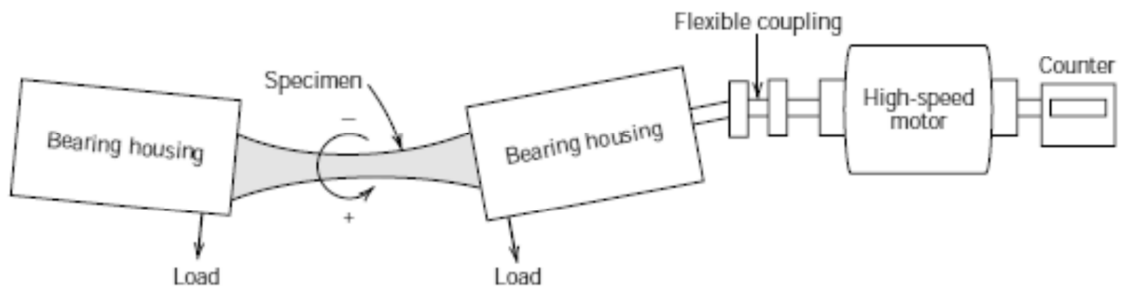
| | | |
|-------------|-------------------------|---|
| سعة الاجهاد | <i>Stress amplitude</i> | $\sigma_a = \sigma_r / 2 = (\sigma_{max} - \sigma_{min}) / 2$ |
|-------------|-------------------------|---|

| | | |
|--------------|---------------------|-----------------------------------|
| نسبة الاجهاد | <i>Stress ratio</i> | $R = \sigma_{min} / \sigma_{max}$ |
|--------------|---------------------|-----------------------------------|

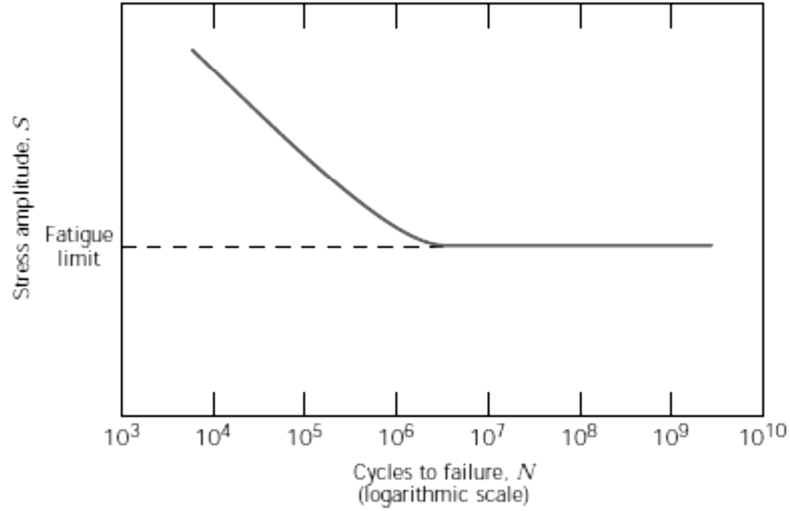


شكل 51 S-N curve منحني التعطيل

2.4.7 منحني S-N

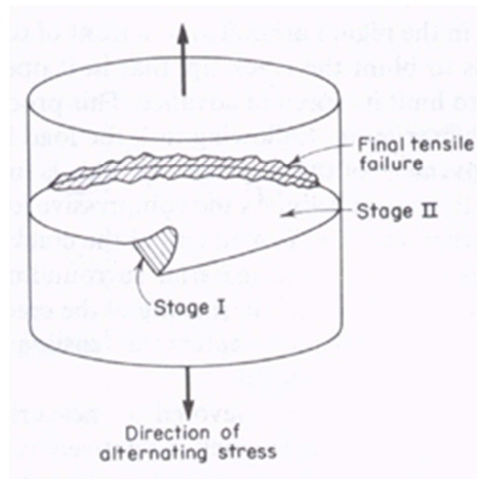


شكل 52 رسم لالة اختبار الكلال



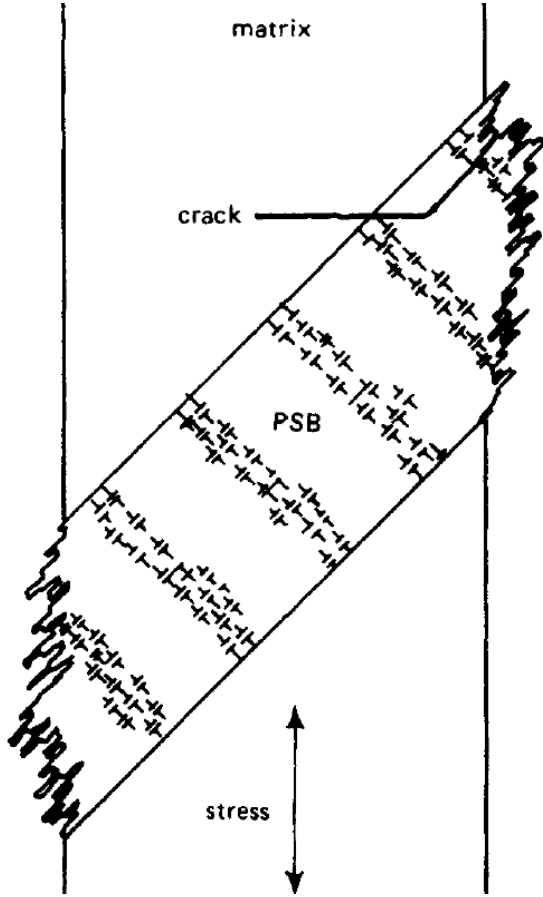
شكل 53 منحنى سعة الإجهاد بدلالة عدد الدورات

يعرّف الكلال بأنه انهيار المواد نتيجة تطبيق الإجهادات عليها تطبيقاً متكرراً. ويقاس باختبارات ميكانيكية تتضمن تطبيقاً متكرراً لإجهادات مختلفة تتراوح بين قيمتين صغرى وعظمى على نحو دوري، وتستخدم معظم آلات اختبار الكلال ثقلاً دواراً غير منتظم لتوليد هذا الحمل الدوري. كما يقاس في الاختبار ذاته عدد الدورات المسبب للإخفاق N_f وبالتالي زمن الانهيار أو زمن الكلال، وتتخذ قيمته من منحنى الكلال الناتج من الإجهاد (S-N curve). يستفاد من هذا المنحني في استقراء سلوك المواد والتنبؤ به مستقبلاً.



شكل 54 رسم يوضح المراحل الثلاث للإخفاق تحت إجهاد شد

تكون الإجهادات التي تتعرض لها المادة عادة ذات طبيعة عشوائية وليست دورية ولهذا تم تطوير عدة نظريات للإخفاق الناتج من الكلال التراكمي cumulative fatigue damage لتمكن من استقرار سلوك المادة تحت تأثير إجهادات عشوائية اعتماداً على معطيات الاختبار الدوري.



يتضمن كلال المواد عدداً من الظواهر منها الانزلاق الذري atomic slip وابتداء التشقق وانتشاره. ولهذا فإن اختبار الكلال قد يقيس عدد الدورات المطلوب لإحداث التشقق. وقد وضعت العديد من الأساليب الإحصائية لإجهادات كلال عشوائية موافقة للشروط الفعلية لتحديد حد الكلال على أساس احتمالي.

يتضمن اختبار الكلال معلومات على الخطوات التي أدت إلى الإخفاق وأهمها تكوين نوى الصدع وابتداء التشقق وانتشار التدريجي للتشقق. ويحدث الإخفاق النهائي بسرعة كبيرة و مرة واحدة عندما يصل الصدع حجمه الحرج.

شكل 55

Persistent slip band (PSB) formation in fatigue
I stage I and stage II crack growth.

3.4.7 العوامل التي تؤثر في الحد الزمني للكلال

الآثار السطحية: قد لوحظ أن العلاجات السطحية للمادة المعدنية و التحسين الإنهائي للسطح بالصقل يزيد بشكل كبير في عمر الكلال.

التقوية بالترسيب الكيماوي: يحدث نتيجة لتفاعل كيميائي مباشر على سطح المادة ويتم إنجاز هذا الترسيب بواسطة بيئة بخارية كربونية أو نيتروجينية لزرع طبقة على السطح الخارجي تسمى "حالة" (شكل 59).



شكل 56

يعتبر الترسيب بمثابة ميكانيزم قصير المدى بحيث تتفاعل مجالات القوة للجسيمات المترسبة مباشرة مع مجالات الانخلاع ونتيجة لذلك يتم معادلة جزء من الإجهاد المتبقي الناتج عن تشغيل المادة.

الظروف الحرارية: تحدث الصدمات الحرارية عندما تتمدد الأجزاء المختلفة من الجسم بدرجات متفاوتة، هذا التمدد يمكن أن يؤدي إلى توتر في نسيج المادة، فاصل التمدد أو الانكماش هو ناتج عن التقلب الحراري. فحجم الإجهاد الحراري المتكون من خلال التمدد الحراري يعتمد على معامل التمدد الحراري و معامل المرونة.

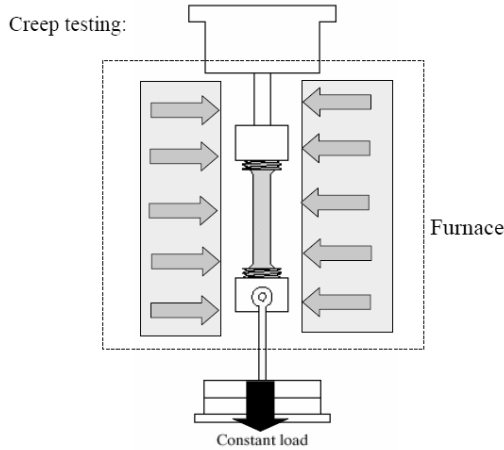
التآكل: يُسمى بـ كلال التآكل، إذ تتشكل حفيرات صغيرة نتيجة لتفاعلات كيميائية بين البيئة والمادة وبالخصوص في البيئات الأكالة، فتتسبب عنها نقاط تركيز الإجهاد و نوى التشقق.

5.7 الزحف creep

كثيراً ما توضع المواد في الخدمة في درجات حرارة مرتفعة وتتعرض لإجهاد ميكانيكي استاتيكي كمحركات الطائرات أو تواجه إجهاد الطرد المركزي كمولدات البخار. يدعى الانفعال الطارئ في ظل هذه الظروف الزحف فهو سلوك للمادة غير مرغوب فيه عملياً.

1.5.7 سلوك الزحف

الاختبار النموذجي للزحف يقاس فيه التشوه بوصفه دالة من الزمن المنقضى والعينة تكون فيه خاضعة لإجهاد بحمل مستمر مع الحفاظ على درجة حرارة ثابتة بناء على تطبيق التحميل. وتجرى اختبارات الزحف على المواد المعدنية الهشة بواسطة ضغط أحادي المحور، لأنها تعطي معلومات أفضل عن خصائص الزحف الجوهريّة (شكل 60). يتكون منحني الزحف الناتج من ثلاث مناطق، لكل منها سلوك مميز للانفعال بدلالة الزمن:



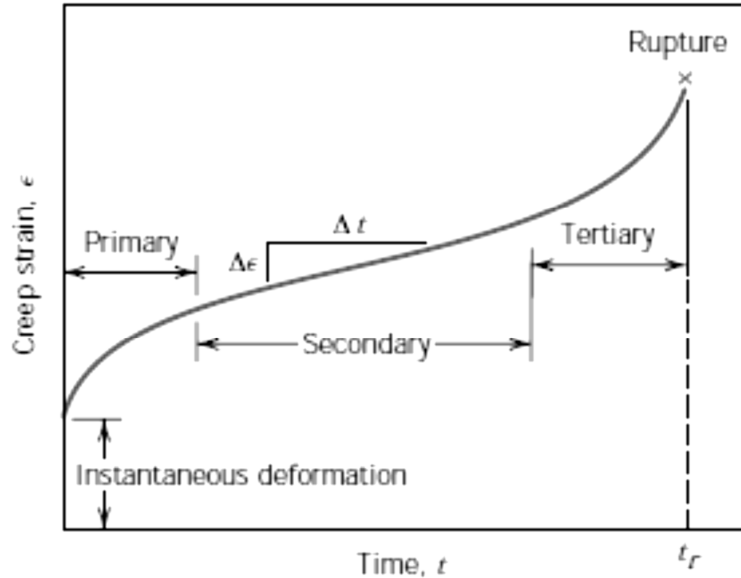
شكل 57 آلة اختبار الزحف

الزحف الابتدائي: أو الزحف العابر هو الأسبق و يتميز من خلال انحدار المنحنى ، فمعدل الزحف يتضاءل مع الزمن مما يزيد من مقاومة المادة للزحف, اذ يصبح التشوه أكثر صعوبة نظرا لتوتر المادة.

الزحف الثانوي: فهو يصف حالة الاستقرار، أي أن معدل الزحف يصبح مستمرا و ثابتا, وعندئذ يمكن تحديد المعدل الزمني لانفعال الزحف (شكل 61)

$$\epsilon_s^{\circ} = \Delta\epsilon / \Delta t$$

زحف المرحلة الثالثة: حينها يُلاحظ تسارع في الزحف ثم الإخفاق في نهاية المطاف عند اللحظة t_r .



شكل 61 منحنى الزحف (نموذج)

2.5.7 آثار الضغط ودرجة الحرارة

كل من درجة الحرارة ومستوى الإجهاد المؤثر له تأثير على خصائص الزحف بعد التشويه الأولي. عند درجة حرارة أقل بكثير من $T_m 0.4$ ، درجة حرارة الانصهار، يكون الانفعال مستقلاً تقريباً عن الزمن. فمع ارتفاع درجة الحرارة أو الإجهاد يزداد الانفعال اللحظي ومعدل زحف، وبالتالي يتناقص عمر الكلال. وتم اقتراح آليات عديدة للتعبير عن سلوك الزحف لمواد مختلفة، فمن بينها الانتشار الفراغي وطاقة التنشيط وديناميكا الانخلاعات.

دعوآكم

والحمد لله رب العالمين

المراجع

نعيمة عند القادر أحمد, محمد أمين سليمان, علم البلورات والأشعة السينية, دار الفكر العربي, الطبعة الأولى, القاهرة, م 2005.

عبد الفتاح أحمد الشاذلي, فيزياء الجوامد, الجزء الأول, كتب عربية.

محمد احمد الجلاي, سلسلة محاضرات فيزياء الجوامد, جامعة الطائف.

الإدارة العامة لتصميم وتطوير المناهج, علم المواد, السعودية

الموسوعة العربية, دمشق, سوريا, www.arab-ency.com.

www.wikipedia.org

Callister, William D., “Materials Science and Engineering an introduction”, John Wiley& sons, 2006

Askeland, D. R., *The Science and Engineering of Materials*, 3rd edition, Brooks/Cole Publishing Co., Pacific Grove, CA, 1994.

Shackelford, J. F., *Introduction to Materials Science for Engineers*, 5th edition, Prentice Hall, Inc., Upper Saddle River, NJ, 2000.

Buerger, M. J., *Elementary Crystallography*, John Wiley & Sons, New York, 1956.

Wyckoff, R. W. G., *Crystal Structures*, 2nd edition, Interscience Publishers, 1963. Reprinted by Krieger Publishing Company, Melbourne, FL, 1986.

Read, W. T., Jr., *Dislocations in Crystals*, McGraw- Hill Book Company, New York, 1953.

Hirth, J. P. and J. Lothe, *Theory of Dislocations*, 2nd edition, Wiley-Interscience, New York, 1982. Reprinted by Krieger Publishing Company, Melbourne, FL, 1992.

ASM Handbook, Vol. 11, *Failure Analysis and Prevention*, ASM International, Materials Park, OH, 1986.

ASM Handbook, Vol. 12, *Fractography*, ASM International, Materials Park, OH, 1987.

Paufler, P.: *Physikalische Kristallographie*, Akademie-Verlag, Berlin, 1986.

Hausühl, S.: *Kristallgeometrie 64*, Verlag Chemie – Physik Verlag, 1983.

Kleber, W, Bautsch, H.J.: *Einführung in die Kristallographie*, VEB Verlag Berlin, 1998.