1. البنية البلورية لمعدن الألمنيوم

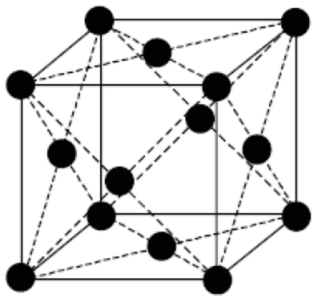
يتبلور الألمنيوم وفق الجملة المكعّبة متمركزة الوجوه. والمطلوب:

1. ارسم الخلية العنصرية لمعدن لبلورة الألمنيوم.
2. ما الأتساق الموافق لهذه البنية البلورية؟
3. احسب نسبة التراص
4. إذا علمت أن بعد الخلية العنصرية هو $a = 404pm$ احسب نصف قطر ذرة الألمنيوم r.
5. احسب الكتلة الحجمية للألمنيوم
6. ما هي القوى المسؤولة عن ترابط هذه البنية

معطيات: $N_A = 6.023\ 10^{23}\ mol^{-1},\ \ M_{Al} = 27\ g.mol^{-1}$

الحل:

1. يوضح الشكل التالي الخلية العنصرية للألمنيوم



الخلية العنصرية المكعّبة متمركزة الوجوه في الألمنيوم

2. عدد الإتساق هو 12 لأن كل ذرة ألمنيوم في البنية السابقة تحيط بها 12 ذرة مجاورة.
3. بمأن أن التراص هو نسبة حجم ذرات الخلية على حجم الخلية نفسها والذي نعبّر عنه بالعلاقة التالية:

$$C = \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{a^3}$$

وبما أن التّماس بين ذرات المعدن يكون وفق قطر وجه الخلية العنصرية المكعّبة لذا يمكننا أن نكتب العبارة التالية:

$$4r = a\sqrt{2}$$

بالتعويض في العبارة السابقة نجد :

$$C = \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{(\frac{4r}{\sqrt{2}})^3} = \frac{\pi\sqrt{2}}{6} = 0.74$$

وبالتالي نستنتج أن نسبة الحيز الذي تشغله ذرات المعدن في هذه البنية هي 74% ونسبة الفراغ في هذه البنية هي 26%.

4. يمكننا حساب نصف قطر ذرة الألمنيوم بالتطبيق العددي المباشر للعلاقة التالية:

$$4r = a\sqrt{2}$$

ومنه نجد:

$$r = \frac{a\sqrt{2}}{4} = 142.83\ pm$$

5. نحسب الكتلة الحجمية للألمنيوم بحساب نسبة كتلة ذرات الخلية العنصرية إلى حجم هذه الخلية أي:

$$\rho_{Al} = \frac{4 \times m_{Al}}{a^3} = \frac{4 \times \frac{M_{Al}}{N_A}}{a^3} = \frac{4 \times \frac{27\ 10^{-3}}{6.02\ 10^{23}}}{(404.\ 10^{-12})^3} = 2720\ kg.m^{-3}$$

وهي قيمة منخفضة إذا ما قورنت بالمعادن الأخرى المشابهة ويستفاد في تطبيقات الطيران والفضاء.

6. الرابطة المعدنية هي المسؤولة عن ترابط ذرات الالمنيوم فيما بينها.

2. البنية البلورية لليورانيوم

تعرّف ظاهرة التآصُل (allotropy) في علم البلورات بوجود العنصر في أكثر من شكل بلّوري[1]، كما يشاهد في الكثير من الحالات مثل الكبريت والفوسفور والقصدير والكربون وغيرها. سنهتّم في هذه التمرين بدراسة ظاهرة التآصل عند اليورانيوم الذي يتمتع بثلاثة أشكال بلورية وفق درجة الحرارة. ينصهر اليورانيوم في الدرجة 1130 C ويبيّن الجدول التالي الشكل البلوري حسب درجة الحرارة:

درجة الحرارة	أقل من 668	775 − 668	1132−775
الشكل البلوري	α	β	γ

1. احسب كثافة اليورانيوم γ
2. أذكر أحد التطبيقات العملية المعتمدة على كثافة اليورانيوم.

معطيات $a = 350pm, N_A = 6.023\ 10^{23}\ mol^{-1},\ \ M_U = 238\ g.mol^{-1}$

الحل:

3. حساب الكثافة : لحساب الكثافة نحسب الكتلة الحجمية لليورانيوم γ والذي يتبلور وفق الجملة البلّورية المكعّبة متمركزة الوجوه وبالتالي يكون لدينا:

$$\rho_U = \frac{4 \times \frac{M_U}{N_A}}{a^3} = \frac{4 \times \frac{238\ 10^{-3}}{6.02\ 10^{23}}}{(350.10^{-12})^3} = 36\ 865\ kg.m^{-3}$$

وتكون الكثافة :

$$d_U = \frac{\rho_U}{\rho_{H_2O}} = \frac{436\ 865}{1000} = \ 36.87$$

وهي قيمة عالية جداً مقارنةً مع المعادن الأخرى تجعل اليورانيوم المستنفذ خياراً جيداً لصنع رؤوس القذائف

3. البنية البلورية للحديد

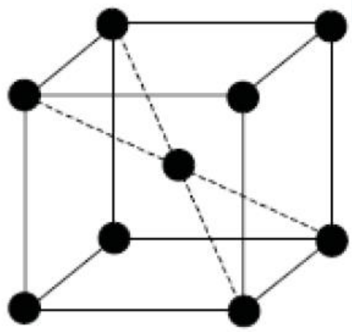
يتبلور معدن الحديد وفق شكلين: الحديد α ذو بنية مكعبة متمركزة والحديد β ذو بنية مكعبة متمركزة الوجوه. والمطلوب:

1. ارسم شكلاً توضيحياً لبنى الحديد السابقة.
2. احسب التراص وقارن بين البنيتين
3. احسب نصف قطر ذرة الحديد في كل بنية. ماذا تلاحظ؟

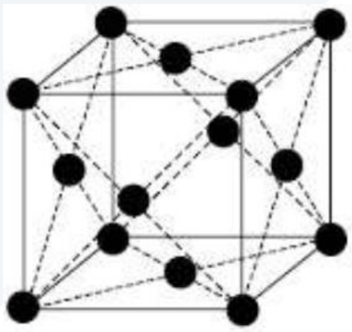
معطيات : $a_\alpha = 291pm, a_\gamma = 365pm$

الحل:

1. الشكل التوضيحي لبنى الحديد:



رسم توضيحي البنية ألفا للحديد



رسم توضيحي البنية غاما للحديد

2. حساب التراص:

التراص هو نسبة حجم ذرات الخلية على حجم الخلية نفسها والذي نعبّر عنه بالعلاقة التالية:

$$C = \frac{\text{عدد الذرات} \times \frac{4}{3}\pi r^3}{a^3}$$

1. البنية ألفا : يكون التّماس بين ذرات المعدن يكون وفق قطر الخلية العنصرية المكعّبة

لذا يمكننا أن نكتب العبارة التالية: $4r = a\sqrt{3}$

بالتعويض في العبارة السابقة نجد :

$$C = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{(\frac{4r}{\sqrt{3}})^3} = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} = 0.68$$

2. البنية غاما يكون التّماس بين ذرات المعدن يكون وفق قطر وجه الخلية العنصرية المكعّبة لذا يمكننا أن نكتب العبارة التالية: $4r = a\sqrt{2}$

بالتعويض في العبارة السابقة نجد :

$$C = \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{(\frac{4r}{\sqrt{2}})^3} = \frac{\pi\sqrt{2}}{6} = 0.74$$

التراص أكبر في حالة البنية المكعّبة متمركزة الوجوه منه في البنية المكعّبة المتمركزة.

3. حساب نصف قطر ذرة الحديد:

a. البنية ألفا : لدينا العلاقة التالية والناتجة من تطبيق شرط التماس بين الذرات وفق **قطر وجه الخلية المكعّبة:**

$$4r_\alpha = a_\alpha\sqrt{2}$$

$$r_\alpha = 103\ pm$$

بالتطبيق العديد نجد :

$$r_\gamma = \frac{a_\gamma\sqrt{3}}{4} = 126pm$$

ومنه نستنتج ان نصف قطر ذرة الحديد يختلف حسب البنية البلورية التي يتبللور وفقها المعدن.

4. البنية البلورية للمغنزيوم

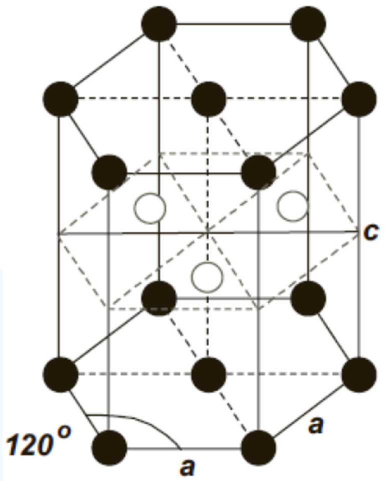
يتبللور المغنزيوم وفق البنية السداسية المتراص والتي سنفترض بأنها مثالية $(a = 320pm)$

المطلوب:

1. ارسم شكلاً توضيحياً للخلية العنصرية لهذه البنية.
2. احسب تراص هذه البنية
3. احسب الكتلة الحجمية لهذه البنية.
4. قامت شركة فولسفاكن لصناعة السيارات باستبدال 30kg من الحديد بمعدن المغنزيوم. مكّنت هذه العملية من تحميل راكب إضافي في السيارة. بيّن ذلك.

الحل:

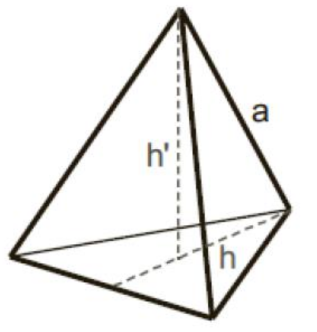
1. الشكل التوضيحي للبنية البللورية للمنغنيز :



رسم توضيحي البنية السداسية للمنغزيوم

2. حساب التراص لحساب التراص نحتاج لحساب حجم الخلية العنصرية

لحساب ارتفاع الخلية العنصرية أو البعد الثاني لها $(c = 2h')$ حيث h' هو المسافة بين مستوي القاعدة والمستوى المنصّف:

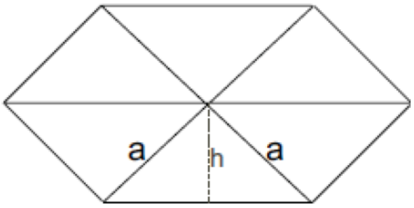


رباعي الوجوه المنتظم

لحساب ارتفاع رباعي الوجوه h' نكتب حسب فيثاغورث :

$$a^2 = (\frac{2}{3}h)^2 + (h')^2 \qquad (أ)$$

ولحساب h نستنتج العلاقة التري تربطه بالبعد a من خلال مثلث القاعدة كما هو موضح في الشكل:



القاعدة السداسية للخلية العنصرية

من المثلث المنتظم يمكننا أن نكتب :

$$a^2 = (\frac{a}{2})^2 + (h)^2$$

ومنه نجد عبارة ارتفاع مثلث القاعدة h :

$$h = \frac{a\sqrt{3}}{2}$$

ومنه يمكن حساب ارتفاع رباعي الوجوه h' بالتعويض في العبارة (أ) فنجد :

$$a^2 = (\frac{2}{3}\frac{a\sqrt{3}}{2})^2 + (h')^2$$

ومنه نجد :

$$h' = \sqrt{\frac{2}{3}}a$$

حجم الخلية

$$V = 6 \times h' \times \frac{ah}{2}$$

$$V = 6 \times \sqrt{\frac{2}{3}}a \times \frac{a\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}\right)}{2}$$

$$V = 3\sqrt{2}a^3$$

بالعودة لتعريف التراص يمكن أن نكتب:

$$C = \frac{6 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{3\sqrt{2}a^3}$$

وبما أن التماس بين الذرات يكون وفق طول ضلع القاعدة السداسية أي : $2r = a$

نكتب:

$$C = \frac{6 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{3\sqrt{2}(2r)^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0.74$$

وهي القيمة نفسها التي وجدناه من أجل البنية المكعبة متمركزة الوجوه.

3. حساب الكتلة الحجمية: بما أن عدد الذرات في الخلية السداسية هو 6 وهي كالتالي:

3 في المستوي المنصّف +12في رؤوس الخلية السداسية وينتمي كل منها لستّة خلايا لذا يكون عددها مضروباً بـ $\frac{1}{6}$ + 2 في منتصف القاعدتين تنتمي كل منها لخليتين متجاورتين لذا لذا يكون عددها مضروباً بـ $\frac{1}{2}$

وبالتالي يكون العدد الكلي = $12 \times \frac{1}{6} + 3 + 2 \times \frac{1}{2} = 6$

فتكون الكتلة الحجمية للمغنزيوم هي:

$$\rho_{Mg} = \frac{6 \times \frac{M_{Mg}}{N_A}}{3\sqrt{2}a^3} = \frac{6 \times \frac{24.3\ 10^{-3}}{6.02\ 10^{23}}}{3\sqrt{2}(320.\ 10^{-12})^3} = 1742.1\ \ kg.m^{-3}$$

نلاحظ أنه قيمة منخفضة إذا ما قورنت ببقية المعدن الصناعية مثل الحديد.

4. استبدال الحديد بالمغنزيوم

حساب حجم 30kg من المغنزيوم :

$$\rho_{Mg} = \frac{m}{v} \Rightarrow v = \frac{m}{\rho_{Mg}} = \frac{30}{1742.1} = 1.72\ 10^{-2} m^3$$

نحسب الكتلة المكافئة للحجم نفسه من الحديد فنجد أن:

$$m = \rho_{Fe} v = 7860 \times 1.72\ \ 10^{-2} = 136.1\ kg$$

نلاحظ أنها الفرق في الكتلة قريب من كتلة راكب إضافي.

5. البنية البلورية للكوبالت

بفرض أن الكوبالت يتبللور وفق الجملة السداسية المتراصة المثالية فإذا علمت أن أبعاد الخلية هي:

$$a = 252pm, c = 452pm$$

المطلوب:

1. تحقق من الفرضية السابقة.
2. أحسب نصف قطر ذرة الكوبالت في البنية السابقة.

الحل

1. في البنية السداسية المتراصة تكون النسبة $\frac{c}{a}$ مساوية لـ 1.633 بنسبة الأبعاد السابقة نجد 1.635 وهي قيمة مساوية للنسبة السابقة بفرق أقل من 0.12%
2. نعلم أن التماس في هذ البنية السداسية المتراصة يمون وفق طلع القاعدة السداسية أي :

$$a = 2r$$

ومنه نجد $r = 126pm$

6. البنية البلورية لخليطة النحاس والفضة Cu−Ag.

يتبللور النحاس وفق الجملة البلورية المكعبة متمركزة الوجوه.

1. ارسم شكلاً توضيحياً لهذه البنية
2. احسب نصف قطر ذرة النحاس في هذه البنية

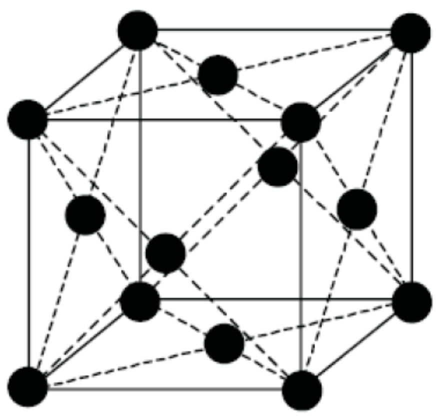
بنية الخليطة المعدنية نحاس− فضة هي أيضاً مكعبة متمركزة الوجوه ويمكن اشتقاقها من بنية النحاس السابقة باستبدال ذرات النحاس الثمانية المتواجدة في رؤوس الخلية المكعبة بذرات فضة.

3. ما اسم هذا النوع من الخلائط؟
4. احسب بعد الخلية العنصرية المكعبة a' للخليطة المعدنية نحاس− فضة علماً أن نصف قطر ذرة الفضة هو $144pm$
5. احسب الكتلة الحجمية للخليطة والنسبة الكتلية للفضة فيها

معطيات: $M_{Cu} = 36.5\ g.mol^{-1}, M_{Ag} = 108\ g.mol^{-1}, \rho_{Cu} = 8920\ kg.m^{-3}$

الحل

1. الرسم التوضيحي للبنية البللورية المقترحة للنحاس



رسم توضيحي بنية النحاس البلورية

2. حساب نصف قطر ذرة النحاس في هذه البنية: انطلاقاً من عبارة الكتلة الحجمية علماً أن عدد ذرات النحاس في الخلية هو 4 نجد:

$$\rho_{Cu} = \frac{4 \times \frac{M_{Cu}}{N_A}}{a^3} \Longrightarrow a = \sqrt[3]{\frac{4 \times \frac{M_{Cu}}{N_A}}{\rho_{Cu}}}$$

نستنتج :بالتطبيق العددي قيمة a :

$$a = 361.7pm$$

وبما أن التماس بين ذرات النحاس يكون وفق قطر وجه الخلية المكعبة أي : $a\sqrt{2} = 4r_{Cu}$

أي : $r_{Cu} = \frac{a\sqrt{2}}{4}$

بالتطبيق العددي نجد : $r_{Cu} = 127.9pm$

3. يسمى هذا النوع من الخلائط بخلائط الإستبدال Substitution حيث تحل فيها ذرات معدن محل ذرات معدن آخر.

4. حساب بعد الخلية العنصرية المكعبة a' للخليط :

شرط التماس بين الذرات وفق وجه الخلية المكعبة يبقى متحققاً ونكتب هذا الشرط وفق العبارة التالية:

$$a'\sqrt{2} = 2r_{Cu} + 2r_{Ag}$$

ومنه نجد أن :

$$a' = \frac{2r_{Cu} + 2r_{Ag}}{\sqrt{2}}$$

بالتطبيق العددي نجد : $a' = 384.5pm$ وهي قيمة أكبر من قيمة البعد السابق a في النحاس مما يدل أن الخلية العنصرية أصبحت أكبر حجماً.

5. حساب الكتلة الحجمية للخليطة:

$$\rho = \frac{\frac{M_{Ag}}{N_A} + 3 \times \frac{M_{Cu}}{N_A}}{a'^3}$$

بالتطبيق العددي نج $\rho = 8722\ kg.m^{-3}$

النسبة الكتلية للفضة في الخليطة تعطى بالعبارة التالية:

$$w_{Ag} = \frac{\frac{M_{Ag}}{N_A}}{\frac{M_{Ag}}{N_A} + 3 \times \frac{M_{Cu}}{N_A}}$$

بالتطبيق العددي نجد: $w_{Ag} = 36.12\%$

7. البنية البلورية لخليطة الذهب والنيكل Au−Ni

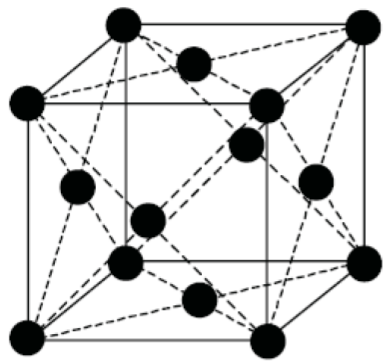
يتبلور معدن الذهب وفق البنية البلورية المكعبة المتمركزة الوجوه ويبلغ نصف قطر ذرة الذهب $r_{Au} = 144.2pm$ ويمكن للذهب أن يشكّل نوعين من الخلائط بالإستبدال Substitution أو الإدراج Insertion.

1. عرّف ما هي خلائط الإستبدال وخلائط الإدراج.
2. ارسم شكلاً توضيحياً للخلية العنصرية لمعدن الذهب.
3. احسب بعد الخلية العنصرية لمعدن الذهب.
4. تحوي البنية البلورية لمعدن الذهب نوعين من المواقع البللورية. ما هما؟ أرسم شكلاً يوضح كل من هذين النوعين في الخلية العنصرية.
5. استنتج نصف القطر الأعظمي R_O للذرة الغريبة التي يمكن لها أن تحتل موقع ثماني وجوه ونصف القطر الأعظمي R_T للذرة الغريبة التي يمكن لها أن تحتل موقع رباعي وجوه .
6. الذهب الأبيض هو عبارة عن خليطة من النيكل $(r_{Ni} = 124.6pm)$ والذهب . بيّن أنه لايمكن للنيكل أن يشكّل خلائط إدراج (Insertion) مع الذهب.
7. إذا علمت أن النيكل يستبدل ذرة ذهب واحدة في رأس الخلية العنصرية، احسب بعد الخلية العنصرية للخليطة a'

معطيات : $M_{Au} = 197\ g.mol^{-1}, M_{Ni} = 58.7\ g.mol^{-1}, \rho_{Cu} = 1763\ kg.m^{-3}$

الحل

1. تحتل ذرات المعدن الضيف في خلائط الإستبدال محل ذرات المعدن المضيفة وتحل محلها في حين تحتل ذرات المعدن الضيف في مواقع بلورية متاحة في الخلية العنصرية في خلائط الإدراج.
2. الرسم التوضيحي للخلية العنصرية الكعبة متمركزة الوجوه

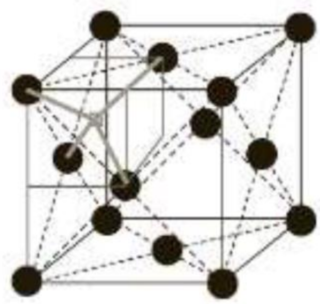


3. وبما أن التماس بين ذرات الذهب يكون وفق قطر وجه الخلية المكعبة أي : $a\sqrt{2} = 4r_{Au}$

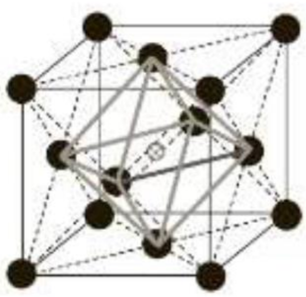
أي : $\frac{4r_{Au}}{\sqrt{2}} = a$

بالتطبيق العددي نجد : $a = 407.9pm$

4. المواقع البلورية المحتواة في الخلية المكعبة متمركزة الوجوه هي نوعين: رباعية الوجوه وعددها 8 وثمانية الوجوه وعددها 4. ويوضح الشكلان التاليان تموضع هذه المواقع



رسم توضيحي موقع بللوري رباعي الوجوه



رسم توضيحي موقع بللوري ثماني وجوه

نصف القطر الأعظمي R_T في الموقع الرباعي: عند احتلال ذرة ما نصف قطرها R_T مركز موقع رباعي تشكله ذرات الذهب يكون لدينا:

$$\frac{a\sqrt{3}}{2} = 2r_{Au} + 2R_T$$

وبما أن التماس بين ذرات الذهب يكون وفق قطر وجه الخلية المكعبة أي : $a\sqrt{2} = 4r_{Au}$

نعوض في العلاقة السابقة فنجد :

$$R_T = r_{Au}\left(\sqrt{\frac{3}{2}} - 1\right) = 0.225\ r_{Au}$$

بالتطبيق العددي نجد أن $R_T = \mathbf{32.4\ pm}$

نصف القطر الأعظمي R_O في الموقع الثماني: عند احتلال ذرة ما نصف قطرها R_O مركز موقع ثماني تشكّله ذرات الذهب يكون لدينا:

$$a = 2r_{Au} + 2R_T$$

وبما أن التماس بين ذرات الذهب يكون وفق قطر وجه الخلية المكعبة أي : $a\sqrt{2} = 4r_{Au}$

نعوض في العلاقة السابقة فنجد :

$$R_O = r_{Au}(\sqrt{2} - 1) = 0.414\ r_{Au}$$

بالتطبيق العددي نجد أن $\boldsymbol{R_O = 59.7pm}$ بالمقارنة نجد أنّ الموقع الثماني أوسع من الموقع الرباعي

5. بمقارنة نصف قطر النيكل $r_{Ni} = 124.6pm$ مع أنصاف أقطار الذرات المتاح استضافتها في المواقع الرباعية أو الثمانية نستنتج أن النيكل لا يمكن أن يشغل أي نوع من المواقع المتاحة نظراً لكبر ذرات النيكل وبالتالي لايمكن أن يشكّل خلائط إدراج مع الذهب.

6. حساب بعد الخلية العنصرية للخليطة a' : نحسب عدد ذرات الذهب والنيكل في الخلية العنصرية.

النيكل يشغل رأس واحد في الخلية ($n_{Ni} = 1/8$) والذهب يشغل باقي الرؤوس ($7/8$) فيكون لدينا بالإضافة لمراكز الوجوه (3) وبالتالي نكتب عبارة الكتلة الحجمية على الشكل التالي:

$$\rho = \frac{3.875 \times \frac{M_{Au}}{N_A} + 0.125 \times \frac{M_{Ni}}{N_A}}{a'^3}$$

ومنه نجد عبارة بعد الخلية العنصرية للخليطة

$$a' = \sqrt[3]{\frac{3.875 \times \frac{M_{Au}}{N_A} + 0.125 \times \frac{M_{Ni}}{N_A}}{\rho}}$$

بالتطبيق العددي نجد: $a' = 417.2\ pm$

جَـامعة
المَـنارة
MANARA UNIVERSITY