تقرير حلقة بحث بعنوان:

البنية البلورية للألماس

Diamond crystal structure

تقديم الطالبة: آيله بارود

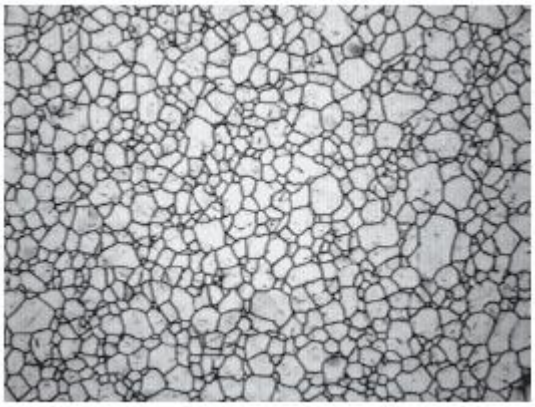
الصف: العاشر

تاريخ: 2014/2015

اشراف: الأستاذ لؤي حمرا

الأستاذ محمود بلال

الآنسة ريم العابد



	الفهرس	
رقم الفقرة	عنوان الفقرة	رقم الصفحة
1	الغلاف	1
2	الفهرس	2
3	مقدمة: بداية أنواع الجوامد البلورية	3 4
4	شبكات برافيه وأنواعها	5
5	أنواع البنى البلورية	7
6	الأشكال البلورية للكربون	10
7 فصل ثاني:	الألماس وبنيته البلورية وبنية بعض الأشكال البلورية للكربون	11
8 فصل ثالث	مقارنة بين البنى البلورية لهذه المواد	14
9 فصل رابع	نتائج المقارنة	16
10	المراجع	17

المقدمة

هذا البحث يقدم بدايات عن علم يدعى بعلم الكيمياء الفراغية، وقد اخترنا للمقارنة بنية بلورية سهلة الدراسة وهي بنية الألماس وقارننا فيما بينها وبين البنية البلورية للجرافيت والفولارينات وتوصلنا لنتائج في الفروق بينها.

ما هي البنية البلورية الكثيفة؟

هي البنية البلورية التي تكون قيمة انغلاق الرابطة فيها أعلى من 3.5

ما معنى البنية البلورية لمادة؟

مادة تكون فيها الذرات متوضّعة في ترتيب مكرر ودوري في مسافات ذرية كبيرة، ويكون موضع الذرات قادر على الارتباط مع الذرات الأقرب المجاورة لها بحيث تكون مكررة في نمط ثلاثي الأبعاد.

تعتمد خصائص المادة البلورية على تركيبها البلوري، ف مثلاً طريقة توضّع الذرات، الأيونات أو الجزيئات مكانيّاً في الخلية الواحدة

يمكن تصنيف الجوامد إلى نوعين رئيسيين هما[1]:

الجوامد البلورية Crystalline Solids

الجوامد غير البلورية Noncrystalline Solids

1. الجوامد البلورية: crystalline solids

وفيها ينتظم ترتيب البلورات في الفراغ بحيث تشكل نمطاً هندسيّاً دوريّاً. وعندما ينتشر هذا النمط أما إذا توقف single crystal "ليشغل كل أجزاء المادّة، فإن هذا يعني أن لدينا "بلورة وحيدة فإن Grain – Boundaries أطراد دورية النمط الهندسي عندما يسمى بتخوم، أو حدود الحسيبات أي تتكون من مجموعات صغيرة جدّاً Poly – crystalline "المادة حينئذ تكون "متعددة البلورات من الحبيبات، أو البلورات الأحادية الصغيرة في اتجاهات مختلفة.

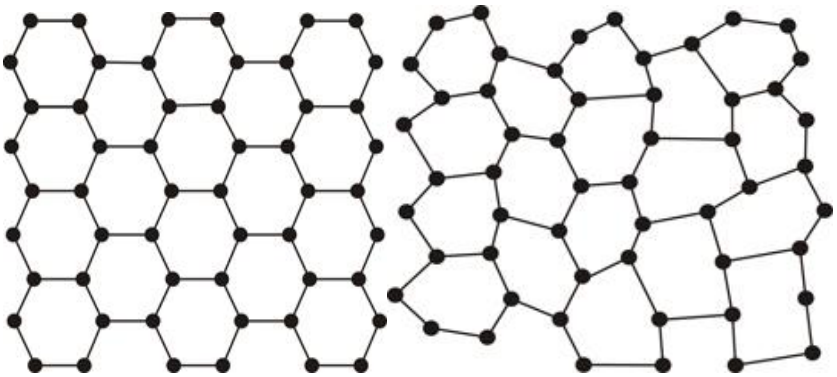
مثال عنها الشكل (2)

2. الجوامد غير البلورية: Noncrystalline solids

وتضم المواد الصلبة التي تتخذ ذراتها أو جزيئاتها توزيعاً عشوائياً، حيثما يتسنى لها، عندما تتحول من الحالة الغازية المائعة (الغازية أو السائلة) إلى الحالة الصلبة وتوصف هذه الجوامد بأنها Amorphous أمورفية

بمعنى أنها لا تتخذ شكلاً موحّداً.

مثال عنها الشكل (1)



الشكل (2)　　الشكل (1)

[2]ماهي خلية الوحدة؟

الوحدة البنائية الصغرى في المادة البلورية وهي تمثل النمط المبنية عليه الذرات وهي الوحدة التي تتكرر في الأبعاد الثلاثة لتشكّل البنية البلورية ولها خصائص يوضحها الجدول (1.1).

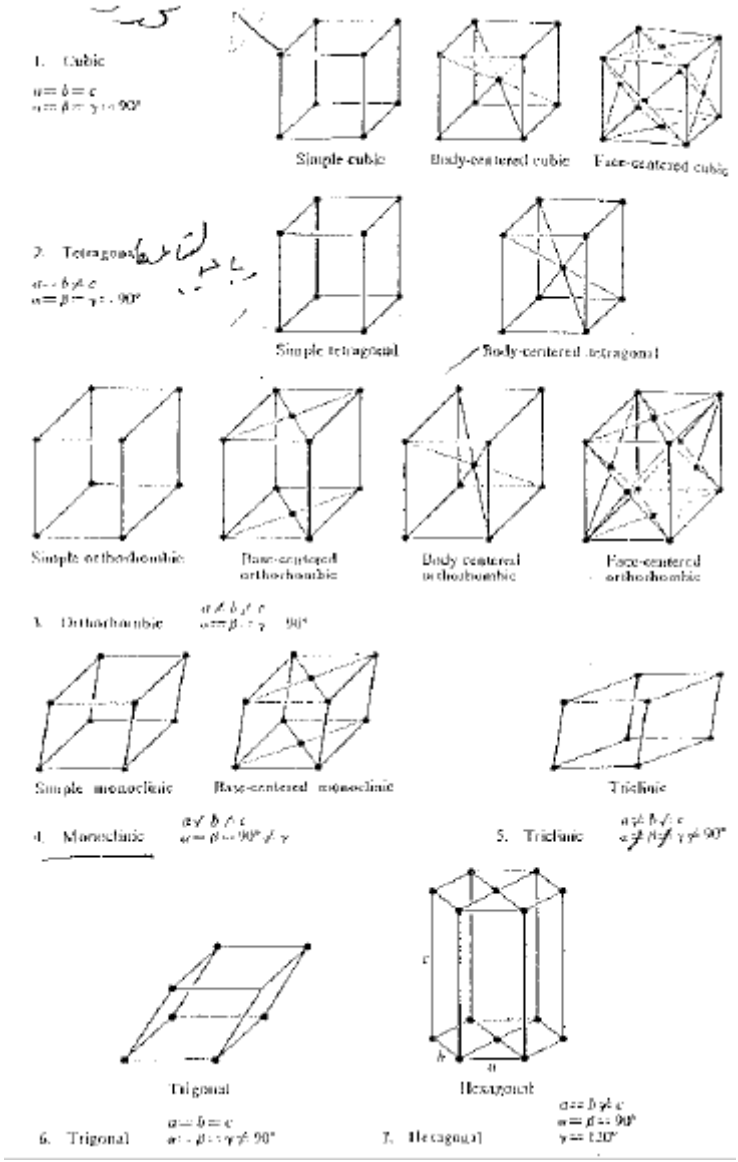
[3]ماهي شبكة برافيه؟

ينسب إلى العالم الفرنسي برافيه قيامه بتصنيف الشبيكات البلورية إلى أربع عشرة شبيكةً موزّعةً على سبعة أنظمة بلورية يوضحها الجدول (1.1)

النظام البلوري	شبيكات برافيه	خصائص خلية الوحدة
ثلاثي الميل	P	$a \neq b \neq c$
Triclinic		$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$
أحادي الميل	P,C	$a \neq b \neq c$
Monoclinic		$\alpha = \gamma = 90° \neq \beta$
مستطيلي متعامد	P, C, I, F	$a \neq b \neq c$
Orthorhombic		$\alpha = \gamma = 90° = \beta$
مربعي	P , I	$a = b \neq c$
Tetragonal		$\alpha = \beta = \gamma = 90°$
مكعب	P, I, F	$a = b = c$
Cubic		$\alpha = \beta = \gamma = 90°$
ثلاثي التماثل	P	$a = b = c$
Trigonal		$\alpha = \beta = \gamma < 120°,$
		$\neq 90°$
سداسي	P	$a = b \neq c$
Hexagonal		$\alpha = \beta = 90°$, $\gamma = 120°$

الجدول (1.1)

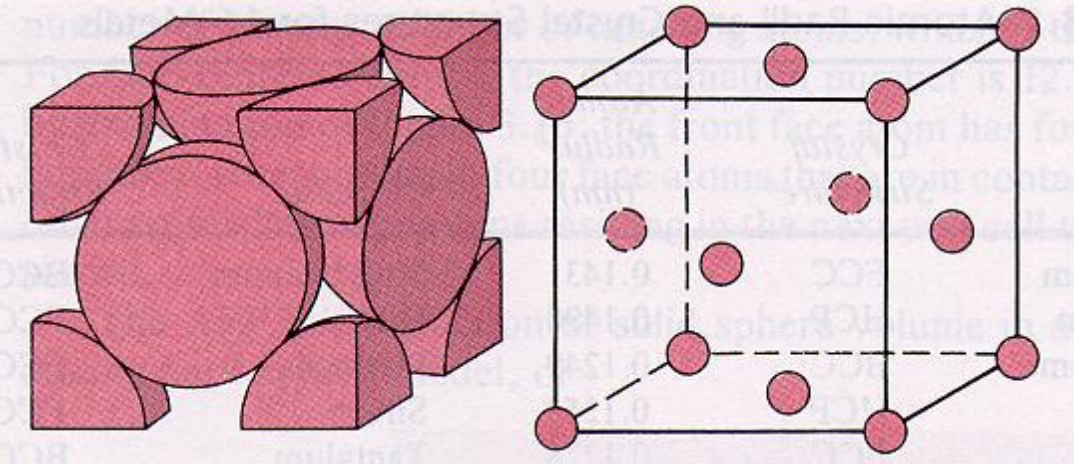
وعدد شبيكات برافيه الأربع عشرة والنظم البلورية السبعة محدود بعدد الطرق الممكنة لترتيب النقاط الشبيكية بحيث تكون البيئة المحيطة بأي نقطة منها مماثلة تماماً للبيئة المحيطة بأية نقطة أخرى. وتكون "شبيكة برافيه" بسيطة إذا كانت نقاطها عند الأركان فقط، وعندما تشتمل على نقاط إضافية في مواضع خاصة فإنها تكون ممركزة الأوجه أو ممركزة الجسم أو ممركز القاعدة



الجدول (2.1)

أنواع البنى البلورية

The face centered cubic crystal structure [FCC]

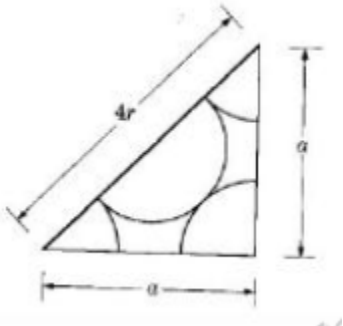


حيث تكون الذرات مرتبة على زوايا ومراكز الوجوه الخارجية للمكعب

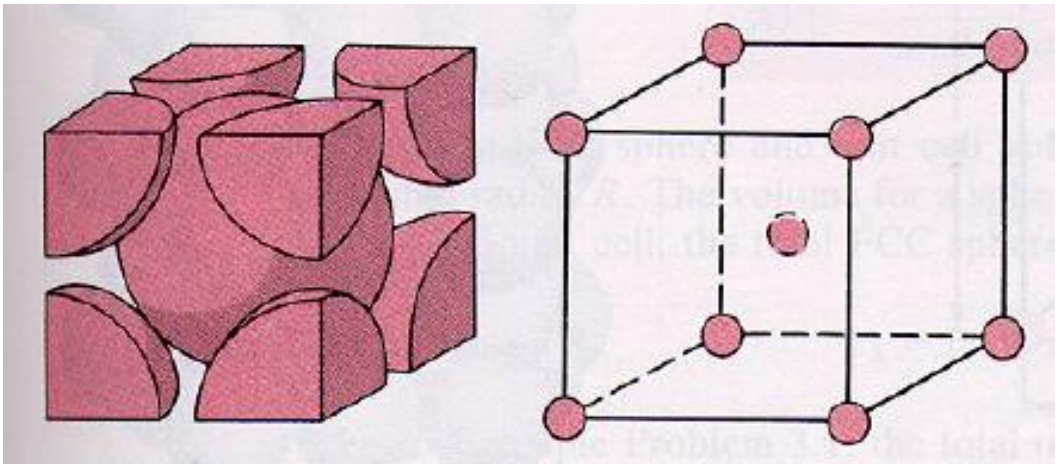
الرّص المتلاصق فيها: على كل وجه من أوجه المكعّب

من المفترض أن تلامس الذرات على طول أقطار الوجه فيكون عدد الذرات في خلية الوحدة الواحدة 4 ذرات ويحسب طول ضلع خلية الوحدة بالعلاقة

$a = 2R\sqrt{2}$

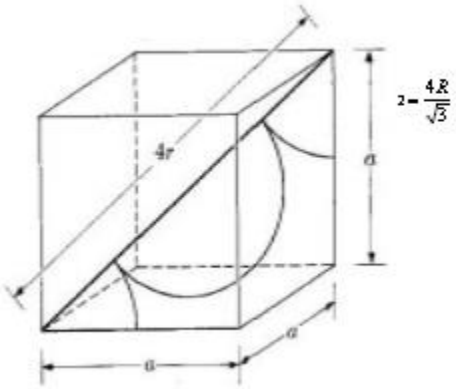


Body centered cubic [BCC]



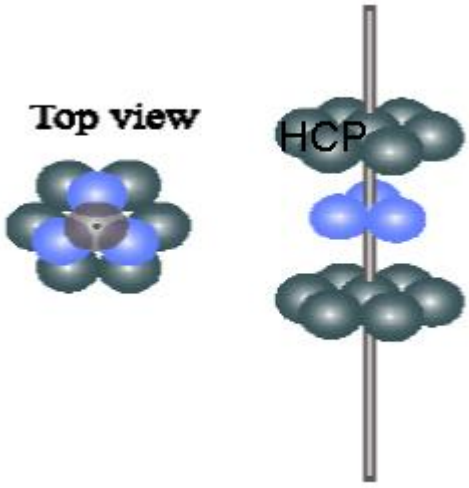
نمط مركز جسم المكعب

حيث تكون الذرات مرتبة في زوايا المكعب مع ذرة في مركزه



الرص المتلاصق: يقطع المكعب إلى النصف بالأقطار

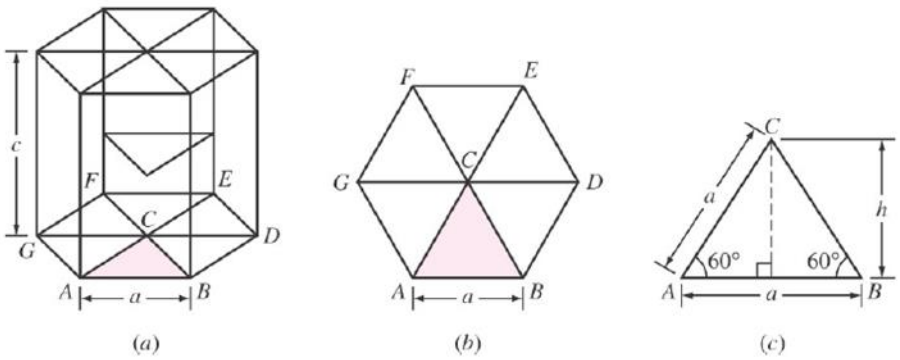
يكون عدد الذرات في وحدة الخلية هو 2



Hexagonal close packed:
حلقي هكساني

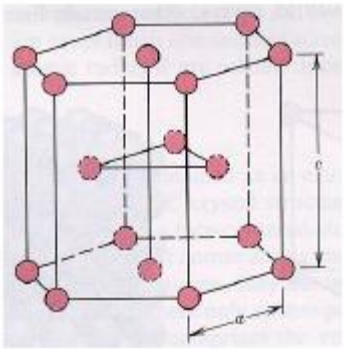
من المتصوّر أنّ الشبكة مؤلفة من 7 ذرات في طبقتها العلوية مشكّلةً بذلك سداسي نظامي حول الذرة مركزية

وبين الطبقة العلوية والسفلية (الطبقة السفلية لها ذات تركيب العلوية) يوجد نصف حلقي سداسي (حلقي ثلاثي HCP)



هناك نوعين من الشبكات البارامترية فيHCP

حيث لدينا a & c يمثّلان القاعدة والارتفاع على الترتيب



Volume $\frac{3\sqrt{3}\,a^2c}{2}$

6 atoms per unit cell

ونذكر هنا أن عدد التناسق: هو عدد الذرات أو الأيونات المجاورة لذرة أو أيون

وبالنسبة لHCP & FCC فهو 12

أما

BCC فهو 8

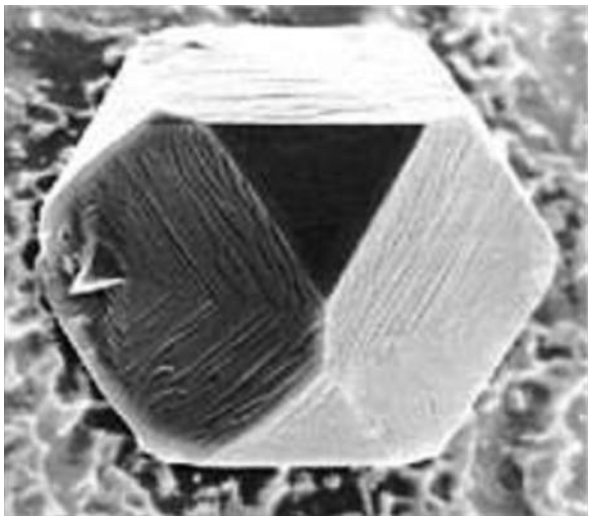
Atomic Packing Factor

عامل الربط الذري

نسبة حجم الفراغ الذري بالنسبة لحجم الخلية بفرض لدينا نموذج المجال الصعب فإن

FCC=HCP=74% (26% void space in unit cell)

BCC=68%



الأشكال البلورية للكربون[4]

هناك شكلان رئيسيان معروفان للكربون وهما الألماس المكعب والجرافيت السداسي، وهما أمثلة كلاسيكية للتآصل الذي يكتب عنه في كل كتاب دراسي كيميائي. يوجد كلٌّ من الألماس والجرافيت أيضاً في أشكال متبلورة بسيطة أخرى: ألماس سداسي وجرافيت على شكل منشور سداسي منتظم. إلى هذين الشكلين يجب أن نضيف شكلاً جديداً مايدعى بالفولارينات. يقال بأن الفورلاينات هو المتآصل الثالث للكربون.

فصل ثاني: الألماس وبنيته البلورية وبنية بعض الأشكال البلورية للكربون

الألماس: عبارة عن متآصل للكربون ذو تركيب بلوري تكعيبي ويتخذ أشكال مضاعفة لذلك البناء التكعيبي ذو الثمانية أوجه

وبخاصة الاثني عشر وجه، وتحدث طفرات في تكوينه أحيانا فيبدو كروي الشكل إلا أن العوامل الخارجية تساعد على ذلك التشكيل.

البنية البلورية للألماس من النوع البسيط FCCمركزية الأوجه، كل ذرة كربون تتحد مع 4 ذرات أخرى على شكل رباعي سطوح (موشور مثلثي)[5]، بناءً على الشكل المكعبي وترتيبه المتماثل بشدة للذرات، كريستالات الألماس يمكن تطويرها لعدة أشكال، معروفة باسم "العادات البلورية". وأكثرهم شهرةً هي الثمانية أوجه ذات الثمانية سطوح أو شكل الألماس. يمكن أيضاً لبلورات الألماس تكوين مكعبات، ومجموعات هذه الأشكال أيضاً.

ماعدا نوعين من الأشكال، هذه الأشكال هي الأشكال التوضيحية لنظام المكعب البلوري.

وأحد هذه الاستثناءات ما يدعى Macle أو مزدوج الكريستال (توأم الكريستال)، لأنه تمثيل حقيقي لما يدعى ب المركّب الكيميائي، والاستثناء الآخر هو نوع البلورات المحفورة، لديه أوجه أقرب للاستدارة وأشكال مطوّلة.
الألماس الحقيقي ليس له سطح مثالي تماماً، ولكن يمكن له أن يتشكّل بشكل مثلثي يدعىtrigons أو ثلاثي التماثل

في الصورة الآتية رسم لنظامي تبلور الألماس الرئيسيين الأول وهو المكعبي والثاني وهو السداسي.

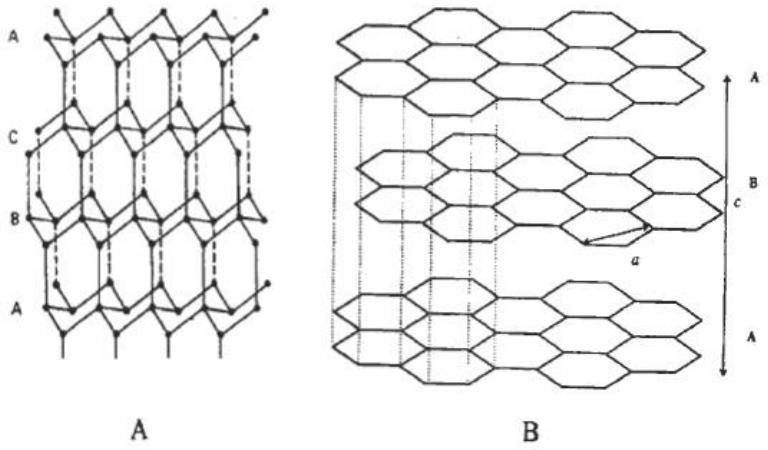


Fig. 2. The crystal structures of: A, cubic diamond; B, hexagonal graphitc

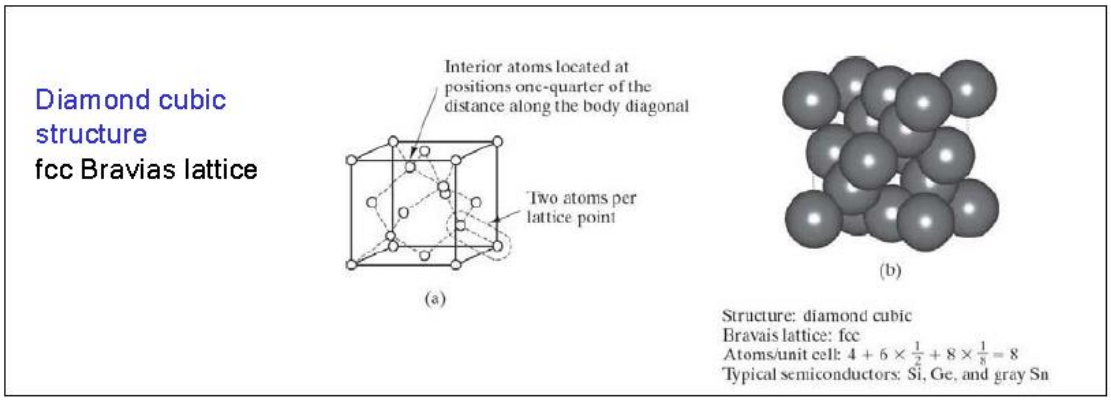
وهنا شرح لبنية الألماس حيث يقول بأن للألماس بنية مكعبة مركزية الوجه face centered cubic

والذرات الداخلية فيها متوضّعة بمسافة ربع القطر ولكل نقطة شبكية هناك ذرتي كربون والزوايا المحصورة بين محاور المكعب الألماسي تكون على الترتيب:

الزاوية غاما بين المحور a & b

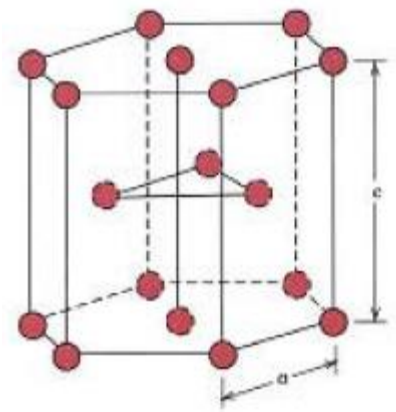
الزاوية بيتا بين المحور a & c

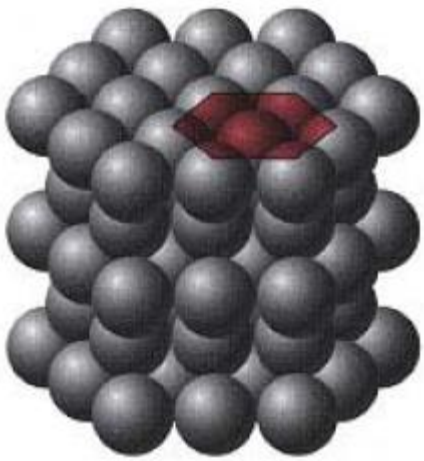
الزاوية ألفا بين المحور b & c



وقياسات هذه الزوايا جميعها تساوي 90 بالنسبة للألماس، ولا ننسى ذكر أن ذرات الكربون تتصل ببعضها بروابط تساهمية.

الغرافيت: ghraphite





او المعروف بالفحم الحجري ذو تركيب بلوري سداسي أوجه له تركيب بلوري يختلف بوضوح عن الألماس وأكثر استقراراً أيضاً من الماس في درجة الحرارة والضغط البيئي.

سداسي مغلق مكتظ hexagonal close-packed

وجوه خلية الوحدة تشمل ست ذرات التي تشكل السداسيات المنتظمة وتحيط بذرة وحيدة في المركز. الطبقة الأخرى التي تزود ثلاث ذرات إضافية إلى خلية الوحدة الواقعة بين الطبقات العليا والسفلية. الذرات في الطبقة النصفية تكون ك ذرات الجيران الأقرب ل الطبقتين الخارجيتين.

فإن كل ذرة كربون تربط إلى 3 ذرات بروابط تساهمية قوية. والإلكترون الرابع الأخير يشارك في نوع ضعيف مشكلاً روابط فان دير فالس للربط بين الطبقات

وإن عدد التناسق وعامل الربط الذري لتركيب الغرافيت ألا وهو HCPالبلوري هو 12

Fullerenesالفولاريينات

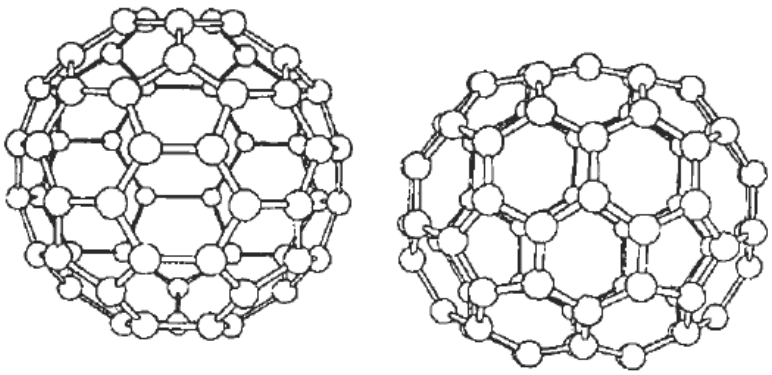
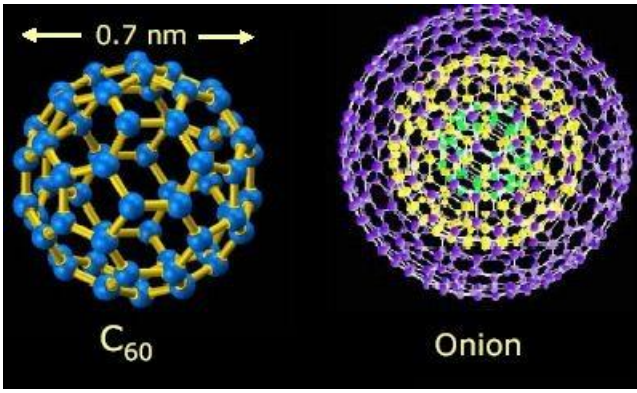


Fig. 4. Fullerene molecules: A, C_{60}; B, C_{70}.

إكتشف عام 1985 يوجد في شكل جزيئي دوماً وعندما نقول شكلاً جزيئي نقصد بذلك مايدعى بكرات باكي كروية الشكل المجوفة وإن كرات باكي مؤلفة من مجموعات ذرات كربون تلتصق ببعضها البعض على الشكل الهندسي التالي:



سداسي(6 ذرات كربون متصلة ببعضها البعض)

خماسي(5 ذرات كربون متصلة ببعضها البعض)

وإن جزيئة واحدة منه كما في الشكل التالي تحتوي 20 سداسي و12 خماسي حيث وعندما تصفُّ الجزيئات لا يشترك أية مخمسان برابطة. وإن السطح الجزيئي يعرض تناظراً كشكل كرة القدم.

وكما نلاحظ؛ إن كل ذرة في هذه الجزيئة تتصل ب ثلاث ذرات أخرى، ولكن التساؤل الحقيقي هو هل يبقى الإلكترون الأخير حرّاً أم أنّه يشكّل رابطة؟ وبماذا؟ اكتشف العلماء مؤخّراً وجود غمامة من الهيدروجين المحيطة بالكربون 60ومنه فإن كل ذرة كربون تشكل رابطة مع ذرة هيدروجين في الكربون 60.

الفصل الثالث: مقارنة بين البنى البلورية لهذه المواد

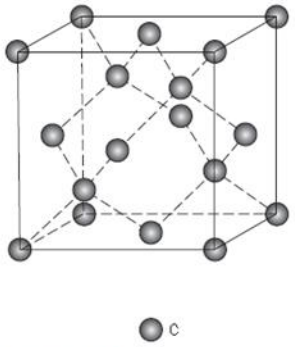


Figure 3.16 A unit cell for the diamond cubic crystal structure.

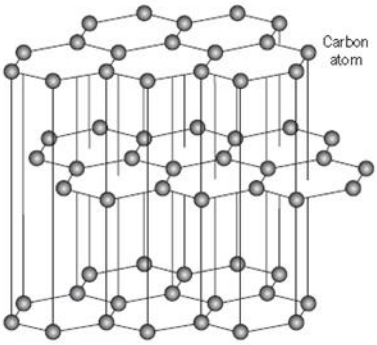


Figure 3.17 The structure of graphite.

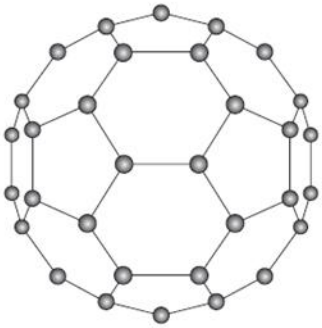


Figure 3.18 The structure of a C_{60} molecule.

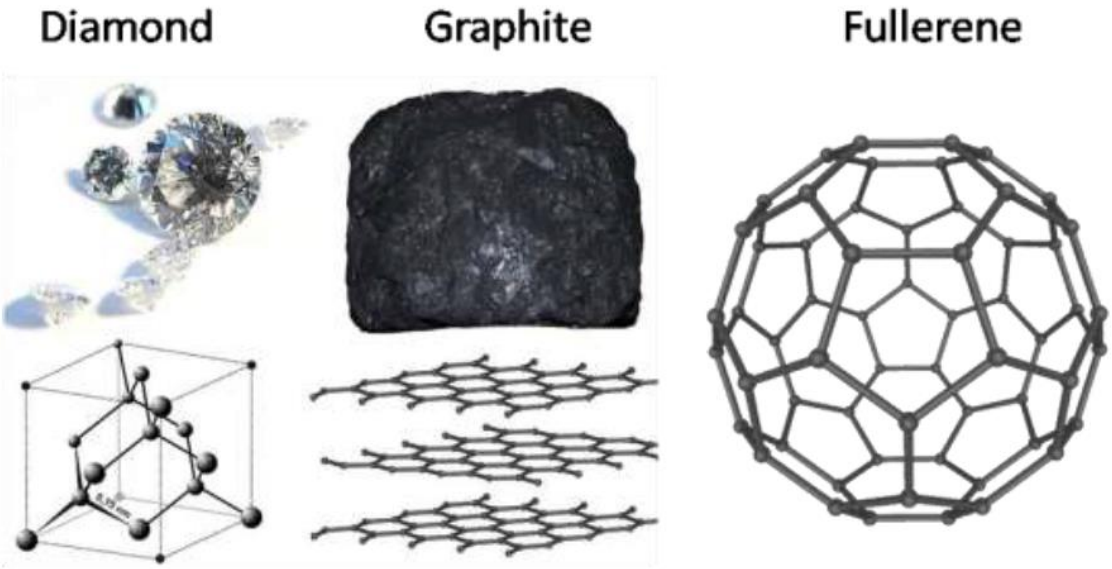
	الألماس diamond	الفحم coal	الكربون 60 fullerenes
المادة المكونة	الكربون	الكربون	الكربون

شكل البنية البلورية	مكعبة مركزية الأوجه BCC	سداسية الأوجه HCP	كروية الشكل (كرات باكي)
الروابط بين الذرات	تساهمية	لكل ذرة 3 روابط تساهمية ويشارك الالكترون الرابع بروابط فان دير فالس الضعيفة (رابطاً الطبقات)	تساهمية أيضاً
الزوايا المحصورة بين محاور البنية البلورية وقياساتها			
آلفا b & c	90 درجة	90 درجة	لا يمكننا التحديد
بيتا a & c	90 درجة	90 درجة	لا يمكننا التحديد
غاما a & b	90 درجة	120 درجة	لا يمكننا التحديد
القساوة	قاسية (ثاني أقسى مادة في العالم)	هشّة	قاسية(أقسى مادة في العالم
	كل ذرة كربون ترتبط مع 4 ذرات أخرى	كل ذرة كربون ترتبط مع 4 ذرات أخرى	كل ذرة كربون ترتبط مع 3 ذرات كربون أخرى وذرة هيدروجين

الفصل الرابع: نتائج المقارنة:

بعد المقارنة نستنتج أنه رغم كون المواد الثلاثة من ذات المنشئ واحد وهو الكربون إلى أن اختلاف التركيب البلوري (وذلك يعود لاختلاف ظروف التشكّل) يحدث اختلافاً كبيراً في الخواص الفيزيائية للمادة.

ومن ذلك اختلاف الخصائص اللونية ككون لون الألماس شفافاً والفحم أسوداً



واختلافات القساوة حيث أنه وقبل اكتشاف الكربون 60 كان يعتبر الألماس أصلب مادةٍ في العالم ولذلك كانت الدول الصناعية الكبرى تتنافس على محاولة تصنيعه ولكنهم للأسف فشلوا في ذلك الأمر، وكان اكتشاف الكربون 60 نقلةً نوعيةً في العلم فقد تحوّلت الدول الكبرى والمصانع الكبرى عن محاولة تصنيع الألماس إلى محاولة تصنيع الكربون60، لكن ما الذي حال بينهم وبين تصنيعه؟ وما سبب عدم انتشاره في العالم بعد؟ أولاً السبب الرئيسي والأهم وهو كلفةُ تصنيعه وثانياً الحاجة الملحّة إلى الأيدي العاملة الخبيرة وأخيراً دقّة العمل والوقت المطلوب لتصنيعه. واليوم تبحث الدول الكبرى عن طرق تصنيع الكربون 60 الغير مكلفة فهل سيستطيع العالم إيجاد طرق بديلة لتصنيعه؟ وهل سينخفض سعر الألماس عالمياً أو ستقل أهميته؟ هل للألماس أهمية أكبر من كونه أقسى مادة في العالم؟

References المراجع

(1) كتاب فيزياء الجوامد للدكتور سعود بن حميد اللحياني، جامعة أم القرى كلية العلوم التطبيقية شعبة الفيزياء الطبية، الصفحة 5

(2) Fundamentals of materials science and engineering (an integrated approach), 4th edition, William D. Callister & JR. David G. Rethwisch, chapter3 page 42

(3) كتاب فيزياء الجوامد للدكتور سعود بن حميد اللحياني، جامعة أم القرى كلية العلوم التطبيقية شعبة الفيزياء الطبية، الصفحة 10

(4) Carbon materials for advanced technologies, Oak Ridge national laboratory, Oak Ridge TN 37831-6088 U.S.A, 1999, Pergamon, edited by Timothy D. Burchell, page 4

(5) Carbon materials for advanced technologies, Oak Ridge national

laboratory, Oak Ridge TN 37831-6088 U.S.A, 1999, Pergamon, edited by Timothy D. Burchell, page 4