جمهورية العراق
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
جامعة بابل
كلية التربية للعلوم الصرفة
قسم الفيزياء

العيوب البلورية أنواعها وفوائدها

بحث مقدم الى مجلس عمادة كلية التربية للعلوم الصرفة - قسم الفيزياء

وهو جزء من متطلبات نيل درجة البكالوريوس في الفيزياء

من قبل الطالبة

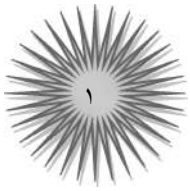
اسراء حمزه مهدي

اشراف الدكتور

أ. د . فؤاد شاكر هاشم

١٤٤٤ هـ ٢٠٢٣ م

﴿ ن وَالْقَلَمِ وَمَا يَسْطُرُونَ ﴾



سورة القلم –الآية ١

الإهداء

لوجه الله تبارك وتعالى والحمد لله الذي هداني لهذا وأعانني فيه...

إلى من أمرني بطلب العلم من المهد إلى اللحد . . .

نبينا محمد صلى الله عليه وآله وسلم

إلى من بنعمه تربيت وبمائه ارتويت وبأرضه سعيت

وطني الجريـــــح

إلى من بذكره عطر دربي و دفعني إلى تقديم المزيد من العطاء...

والدي

إلى من رفعت حاجبها الى السماء و أغدقت عليّ ببركات دعائها . . .

والدتي العزيزة

إلى الذي ساندني ودفعني إلى أعلى درجات التقدم والنجاح

في العلم اساتذتي الاعزاء

إلى زملائي في دراستي لكم ثمرة تعبي...

تقديراً و احتراماً

وأسال الله سبحانه حسن القبول ..

اسراء

بِسْمِ ٱللَّهِ ٱلرَّحْمَٰنِ ٱلرَّحِيمِ

﴿نِّعْمَةً مِّنْ عِندِنَا كَذَٰلِكَ نَجْزِي مَن شَكَرَ﴾

صدق الله العلي العظيم القمر:(٣٥)

شكر وامتنان

باسمه تعالى ابتدأ وافتتح ، و باسمه إن شاء الله أختمُ ما بـه ابتدأتُ ، باسمه الجليل مالك الملك الذي استخلفنا وكلفنا في الأرض لننوب عن جلالته عز شأنه، في كل أمر به

ثم الحمد لله ذي المنة والفضل ، إذ شرفني وسخر لي من أعانني من الأساتذة الأكفاء الادلاء والعلماء الأجلاء لجمع ما تيسر جمعه من المصادر والأقوال.

وأفضل الصلاة وأتم التسليم على صاحب الوحي الأمين محمد (ص) الذي اقتدينا بهديه عبر العصور قائدا ، وتأسينا به معلما وسرنا على نهجه لنعلم الكتاب والحكمة فكان لنا على الدوام داعيا إلى الله وسراجا منيرا.

وعلى آله الطيبين الأطهار الذين ما اقتد بهم مقتد حق الاقتداء إلا اهتدى واستقام. وما أنكر منكر عملهم وفضلهم بظلم إلا ضاع في الظلام.

وعلى صحبه المنتجبين الأخيار الذين كانوا حوله كالنجوم والأقمار. وعلى التابعين وتابعي التابعين ومن تبعهم بإحسان من العلماء والمجاهدين والعاملين إلى يوم الدين. وبعد حمد الله وشكره الذي هداني ووفقني لانجاز هذا العمل وألهمني الصبر والتحمل لما واجهتني من صعوبات واعترافا بالفضل لأهله.

وأتوجه بجزيل الشكر والتقدير إلى الدكتور **(فؤاد شاكر هاشم)**لما بذل من جهود كبيرة من خلال آرائه وتوجيهاته القيمة أثناء مدة إعداد البحث. وفقه الله وأدام عليه نعمة التواضع. لمده يد العون والمساعدة في كتابة واتمام هذا البحث .

اسراء

الخلاصة

من خلال كتابة بحثنا هذا تبين لي هنالك نوعين من العيوب النقطية تكون متأصلة فى المادة، هما الفراغ والذرة المتخللة وتحتل الذرة المتخللة مكان بين الذرات الأصلية، وإذا كانت هذه الذرة أصلية يسمى العيب فى هذه الحالة تخلل ذاتي و إذا كانت الذرة غريبة فإنها تسمى شائبة، وعندما تحتل الذرة مكانا بين الذرات الأصلية فإنها تكون عيبا نقطيا وتسمى بالشائبة المتخللة.

تكون ذرات الشوائب المتخللة عبارة عن ذرات ذات حجم صغير يمكنها من شغل مكان بين المستويات الذرية للبلورة حيث أن الفراغ بين المستويات يكون صغيرا عندما تحل الذرة الغريبة محل ذرة أصلية فى الترتيب البلوري يسمى العيب، فى هذه الحالة، بشائبة تعويضية حيث يكون تركيز الفراغات فى المواد النقية صغيرًا جداً ويزداد التركيز بارتفاع درجة الحرارة.

وتبين ايضا هنالك نوعان من العيوب الفراغية فى البلورات الأيونية هما عيب شوتكى وعيب فرنكل حيث ينشأ عيب شوتكى عندما تترك الذرة مكانها وتنتقل إلى سطح البلورة تاركة خلفها مكانا شاغرا، ويتكون زوج من فراغات الأيونات إحداهما سالب الشحنة والأخر موجب الشحنة.

يوجد ايضا نوعان من عيوب فرنكل تحدث فى نفس الوقت هما: عيب الأيون المزاح وزوج الفراغ الأيوني ويختلف ترتيب الذرات على السطح الحر عن الذرات الموجودة فى عمق البناء وذلك لاختلاف البيئة المحيطة عند درجات الحرارة المنخفضة يكون تركيز الفراغات فى البلورة صغيرًا ويزداد بسرعة مع زيادة درجة الحرارة ويوجد العديد من الطرق العملية لتعيين عدد الفراغات وكلها مبنية على تغير بعض الخصائص الفيزيائية مع تكون العيوب (الفراغات).

المحتويات

ت	العنوان	الصفحة
	الآية	**أ**
	الاهداء	**ب**
	الشكر والتقدير	**جـ**
	الخلاصة	
	المحتويات	**د**
	المقدمة	**١**
	الفصل الاول	**٣ـ ٤**

١ ـ ١	المقدمة	٣
١ ـ ٢	انواع البلورات	٣ ـ ٤
١ ـ ٣	هدف المشروع البحث	٤
	الفصل الثاني	٦ ـ ٢٨
٢ ـ ١	المقدمة	٦
٢ـ ٢	اقسام العيوب البلورية	٦
٢ ـ ٣	انواع العيوب النقطية	٧ ـ ٩
١	العيوب النقطية في البورات الايونية	٩ ـ ١٠
٢	فراغات شوتكي	١١
٣	فراغات فرنكل	١١ ـ ١٣
٤	انواع اخرى من العيوب النقطية	١٤
٢ـ ٣ ـ ٢	العيوب الخطية	١٤ ـ ١٦
١	انخلاع الحافة	١٦ ـ١٧
٢	الانخلاع اللولبي	١٧ ـ ١٨
٣	متجه ودائرة بيرجر	١٨ ـ ١٩
٢ـ ٣ ـ ٣	العيوب المستوية	١٩
١	الاسطح الحره	٢٠ـ ٢١
٢	حدود الحبيبه	٢١ ـ ٢٣
٣	حدود الطور	٢٣ ـ ٢٤
٤	عيوب الرص (التعبئة)	٢٥
٢ـ٤	تعيين تركيز وطاقة التنشيط لتكوين الفراغ	٢٥ ـ ٢٧
٢ ـ ٥	فوائد العيوب البلورية	٢٧ ـ ٢٨
	المصادر	٢٩ ـ ٣٠

المقدمة

يعتبر التنظيم الدوري للذرات في البناء البلوري من أهم الخصائص البلورية ،ولذلك، فإنه عند دراسة التركيب الذرى لبلورات المواد فإننا نهتم بمواضع الذرات في البلورة ونتأكد من وجود هذه الذرات فى أماكنها الدورية. وبالرغم من أن وجود العيوب البلورية في كثير من المواد الصلبة يؤدى إلى تحسين بعض خصائصها الفيزيائية إلاّ أن كثيرا ما راود العلماء حلم الحصول على بلورة تامة لدرجة الكمال المطلق في دوريتها ودقة وانتظام تركيبها وتأتى صعوبة ذلك بسبب الكثير من الصعوبات التي تحدث أثناء التحضير. تؤدى هذه الصعوبات إلى الإخلال في الدورية وعدم تكامل التناسق وإنتاج بلورة تحتوى على عيوب في التركيب.

وبالرغم من تقنيات التحضير المتقدمة إلا انه غالبا ما تحتوى البلورة المحضرة على بعض الذرات الغريبة وحتى عند تحضيرها بواسطة أفضل وسائل النمو البلوري فإنه تبقى بعض الشوائب (بتركيز $\sim$ $cm^{12}01^{-3}$) داخل البلورة وتجعل من الصعب تعيين التركيب البلوري الصحيح. وبناء على ما سبق، لا يكون للبلورات الحقيقية تركيب بنائي تام الانتظام وذلك بسبب وجود عيوب تختلف باختلاف أنواع وأبعاد البلورة. تتعدد العيوب البلورية فمنها: العيوب النقطية والعيوب الخطية والعيوب السطحية. العيوب النقطية هي عبارة عن وجود نقص في بعض نقط الشبيكة البلورية على شكل فراغات تمثل عدم وجود ذرة أو جزئ أو مجموعة من الذرات في نقطة ما بالشبيكة. [1]

من المدهش أن وجود العيوب فى البلورات يؤدى، فى كثير من الأحيان، إلى تحسين الكثير من الخصائص الفيزيائية لبعض المواد حيث **يمكن الحصول على سبائك معدنية جديدة تتميز بمقاومة عالية للأحمال المؤثرة. كما تعود خاصية التوصيل** الكهربي في بعض أشباه الموصلات إلى وجود كمية ضئيلة من الذرات الشائبة، وكذلك تسبب هذه العيوب مراكز لونية (color centers) في بعض المواد مما يجعلها مناسبة للعديد من التطبيقات التكنولوجية هذا بالإضافة إلى ارتباط التألق الضوئي (photo-luminescence) بهذه الشوائب.

الفصل الاول

مقدمة ومفاهيم عامة

إلى ذلك دراسة طرق تحديد البناء البلوري لكل من الأملاح والمعادن، وما يتضمنه ذلك من طرق حيود الأشعة السينية و طرق حيود الإلكترونات، والنيوترونات ويمكن من خلال هذه الطرق تعيين البناء البلوري المغناطيسي، وسيتحدث هذا المقال عن تعريف البلورة. ٠ [2]

وتعرف البلورة بأنّها أي مادة صلبة تترتب الذرات المكونة لها بشكل منتظم ممثلًا الترتيب الداخلي لها، وهذه المواد الصلبة إما أن تكون ذرات أو ذرات تتحد على شكل جزيئات، يمكن أن تتكون البلورات من جميع العناصر التي تتشكل طبيعيًا والبالغ عددها ٩٢ عنصرًا باستثناء عنصر الهيليوم الذي يمكن تبلوره عند درجات حرارة منخفضة مع تعرضه للضغط، وتقسم البلورات حسب عدد العناصر المكونة لها إلى: بلورات ثنائية متكونة من عنصرين، وهناك الآلاف منها مثل بلورة كلوريد الصوديوم NaCl والألومينا Al2O3 والجليد H2O، وبلورات ثلاثية متكونة من ثلاثة عناصر .

١ – ٢ أنواع البلورات

بعد ما تم تعريف البلورة يُذكر بأنّ للبلورة أربعة أنواع مختلفة، يختلف كل نوع منها عن الآخر بطريقة ترتيب الذرات المكونة لها مما يظهر كل منها بترتيب مُحدد وخصائص مختلفة، وسيتم ذكر أنواع البلورات فيما يأتي: [3]

- البلورات التساهمية: ترتبط ذرات البلورات التساهمية بروابط تساهمية تحدث عن طريق اشتراك الذرات في الالكترونات، وتعد هذه الروابط قوية جدًا ويصعب كسرها ولهذا السبب تكون درجات انصهار هذا النوع من البلورات عالية جدًا مثل بلورة الماس.
- البلورات الأيونية: تتحد ذرات البلورات الأيونية بروابط أيونية ويتم ذلك بشحن ذرة سالبة والتي تقوم بجذب ذرات أخرى في البلورة مشحونة بشحنة موجبة حيث يتم ترتيب ذرات هذا النوع اعتمادًا على الشحنات، وتمتلك هذه البلورات الصلبة درجات انصهار عالية، ومن الأمثلة على البلورات الأيونية بلورة ملح الطعام.
- البلورات الجزيئية: تُعرف البلورات الجزيئية بأنّها بلورات تتكون من ترابط ذراتها بالروابط الهيدروجينية التي تعتبر روابط ضعيفة جدًا، ولذلك تكون درجات انصهارها قليلة جدًا، ومن الأمثلة عليها بلورة الجليد وبلورة ثاني أكسيد الكربون المجمد، ويستخدم العلماء البلورات الجزيئية لتحديد شكل البروتينات المجهرية المختلفة داخل الخلايا.
- البلورت المعدنية: تتكون البلورات المعدنية من المعادن، وتظهر هذه البلورات بشكل لامع، كما تعتمد نقطة انصهار هذه البلورات على نوع المعدن المكون لها، ومن الأمثلة على البلورات المعدنية بلورة النحاس التي يمكن من خلالها استخراج النحاس؛ لتشكيل الأسلاك النحاسية المستخدمة لنقل الكهرباء في المنازل. [3]

١ – ٣ هدف مشروع البحث

دراسة نظرية لأسلوب زرع العيوب البلورية داخل المواد بهدف تغيير بعض من خصائصها الفيزيائية (الميكانيكية أو الكهربائية أو الضوئية أو البصرية) واستخداماتها في التطبيقات الصناعية، اضافة الى التعرف على أنواع العيوب البلورية المتضمنة الخطية والسطحية (الشبكية) والحجمية.

الفصل الثاني

☜ العيوب البلورية
انواعها وفوائدها

٢ـ ١ المقدمة

تتعدد أنواع العيوب البلورية طبقا لمنشئها، فمثلا وكما ذكرنا من قبل، يعتبر سطح

عند درجة حرارة أكبر من الصفر المطلق ،تشوها للبلورة بدرجة تعتمد على درجة الحرارة. كما يؤدى وجود ذرات غريبة في التركيب البلوري إلى خلق عيوبا تسمى بالشوائب. [4]

٢ ــ ٢ اقسام العيوب البلورية : [5]

١- عيوب ساكنة، وهى العيوب الدائمة نتيجة تشوه التركيب البلوري،

٢- عيوب مؤقتة يمكن التخلص منها بالمعالجة المناسبة .

٣- عيوب الإثارة وتحدث نتيجة وجود مؤثر خارجي مثل المجال الكهربي، المجال المغناطيسي أو خلافه وتزول هذه العيوب بزوال المؤثر.

كما يمكن أيضا تصنيف العيوب البلورية طبقا لنوع التشوه التي تسببه هذه العيوب ،على النحو الآتي:

١- عيوب تتسبب في تشويه المنطقة المجاورة لها فقط من الشبيكة البلورية تشوها موضعيا محدوداً لا يتعدى بضعة خلايا وحدة وتسمى هذه العيوب بالعيوب النقطية (point defects).

٢- عيوب تؤثر في صف بأكمله من صفوف الذرات الشبيكة البلورية، وتسمى هذه العيوب بالعيوب الخطية (line defects) أو الإنخلاعات (dislocations).

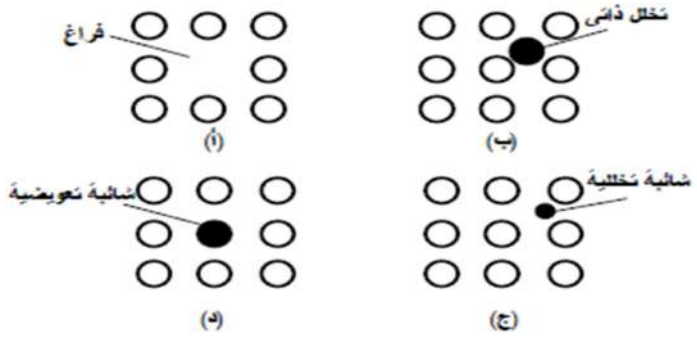
٣- عيوب مستوية وتشترك فيها ذرات مستوى بلوري كامل. سنتعرض في هذا الباب بالتفصيل لدراسةالأنواع المختلفة من هذه العيوب البلورية وتأثيرها على خصائص البلورة الفيزيائية.

٢-٣ انواع العيوب البلورية

العيوب النقطية هي عيوب موضعية تنشأ من غياب ذرة عن مكانها فى الشبيكة البلورية أو عن وجود ذرة زائدة في غير مكانها. يوجد نوعان من العيوب النقطية تكون متأصلة في المادة، بمعنى أنها تنشأ أثناء نمو البلورة ومن دون أي تدخل خارجي هما الفراغ (vacancy) والذرة المتخللة (interstitial)، كما هو مبين بالشكل 4-1.

ينشأ الفراغ عندما تغيب الذرة عن مكانها في الترتيب الدوري للشبيكة البلورية، كما هو مبين بالشكل 4-1(أ). يكون النوع الثاني من العيوب النقطية عبارة عن وجود ذرة زائدة متخللة في التركيب البلوري، أي تحتل ذرة ما مكانا بين الذرات الأصلية، سواء كانت هذه الذرة أصلية (من نفس نوع ذرات البلورة) ويسمى العيب في هذه الحالة تخلل ذاتي) (interstitial) ، كما هو مبين بالشكل 4-1(ب) أو كانت ذرة غريبة وتسمى الشائبة. [1]

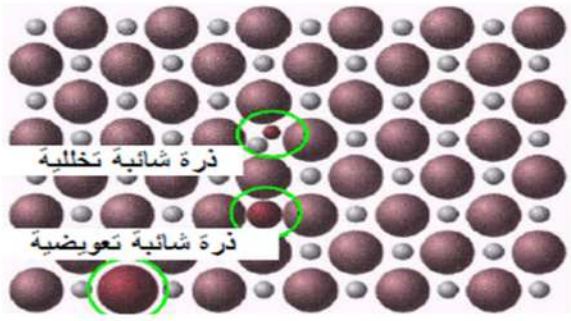
فى الحالة الأخيرة، تحتل الذرة الشائبة مكانا بين الذرات الأصلية (بين المستويات البلورية)، ويسمى العيب النقطي في هذه الحالة بالشائبة المتخللة (interstitial impurity)، كما هو مبين بالشكل 4-1(ج). غالبا ما تكون مثل هذه الشوائب عبارة عن ذرات ذات حجم أصغر من الذرات الأم ويمكنها من شغل مكان بين المستويات الذرية للبلورة من دون إخلال ملحوظ في أبعاد البلورة، كما في حالة الهيدروجين في بلورة الكربون. عندما تحل الذرة الغريبة محل ذرة أصلية في الترتيب البلوري يسمى العيب، في هذه الحالة، بشائبة تعويضية (substitutional)، كما هو مبين بالشكل 4-1(د). يحدث هذا النوع من العيوب عندما تكون حجم الذرة الشائبة كبير ويقارب حجم ذرات البلورة الأصلية، كما في حالة ذرة النيكل في بلورة الحديد. في هذه الحالة لا يضطرب الترتيب البلوري ولكن فقط نوع الذرات في الشبيكة البلورية يكون مختلف.



سية

الشوائب في

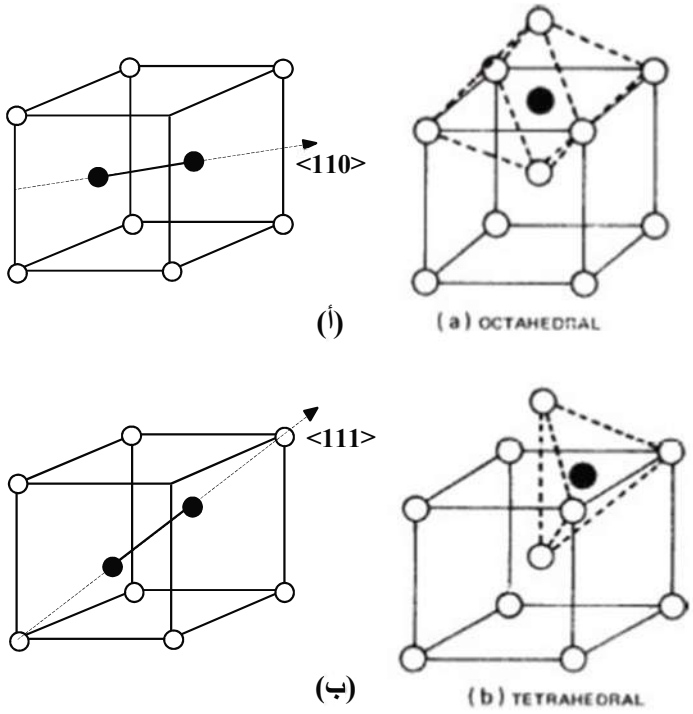
الترتيب البلوري بقصد المقارنة.



الشكل 4-2 مقارنة العيوب النقطية الناتجة عن الشوائب.

بالإضافة إلى تطابقها مع الذرات المضيفة (الأم) فإن الشوائب التخلليه والذرات التخلليه الذاتية تختلف في الطريقة التي تكمن بها في الشبيكة. يبين الشكل 4-3، بلورة متمركزة الجسم، على سبيل المثال، تحتوى على ذرة متخللة. لكي تحتل الذرة المتخللة ذاتيا هذا المكان فإنها تزيح الذرة المضيفة عن مكانها الطبيعي في البلورة مكونة معها ما يسمى بزوج من الذرات على شكل الدمبل (dumbbell-shaped pair) (الدمبل هو كرتان حديديتان بينهما قضيب معدني)، كما هو مبين في يسار الشكل 4-3. يتعين كل من اتجاه الدمبل المتكون والمسافة بين الذرتين بواسطة الحالة التي معها تكون طاقة وضع الشبيكة نهاية صغرى. [1]

على الجانب الآخر، تحتل ذرات الشوائب المتخللة، أحيانا، مواضع محددة دون إحداث تشوه في البلورة المضيفة. يمكن تسمية هذه المواضع طبقا للشكل المتعدد الأسطح المتكون من التوصيل بين الذرات المضيفة التي تحيط بالذرة المتخللة. يبين الشكل كيف أن الذرات المتخللة، في البلورة المتمركزة الجسم، تحتل مركز شكل سداسي الأسطح (كما في الجزء (أ)) أو تحتل مركز شكل رباعي الأسطح (كما في الجزء (ب)). يوفر أحد هذين الشكلين (سداسي الأسطح أو رباعي الأسطح) معظم الفراغ لكي تكمن فيه الذرة الشائبة. يعتمد نوع متعدد الأسطح المتكون على طاقة التفاعل بين الذرة الشائبة والذرات المضيفة اعتمادا أساسيا وبشكل حساس.



الشكل 4-3 الشوائب المتخللة في بلورة متمركزة الجسم.

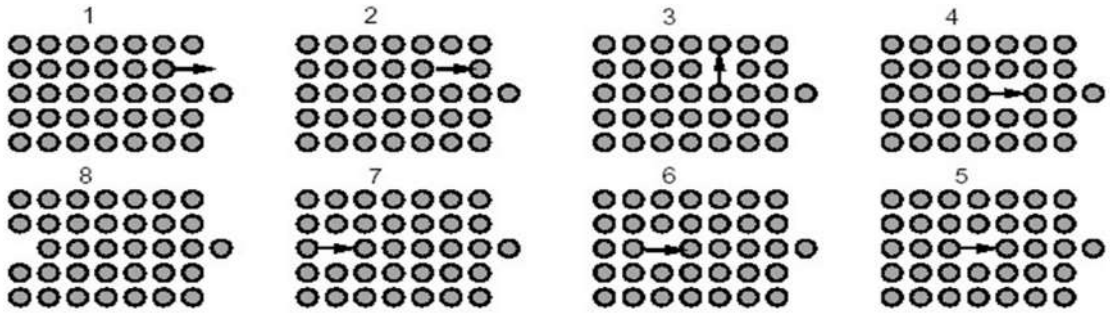
١ ـ العيوب النقطية في البلورات الأيونية Point defects in ionic crystals

تتكون الشوائب المتخللة والفراغات بشكل طبيعي في البلورات الأيونية كما تحدث في بلورات العناصر الصلبة. ومن ناحية أخرى، بسبب أن الكاتيونات والأنيونات في البلورات الأيونية تحمل شحنات كهربية، فإن عمليات تكون الفراغات أو التخللات هي عمليات غير مستقلة، نظرا لأن القوى الكولومية (Columbic forces) بين الأيونات في هذه البلورات تكون كبيرة جدا. لذلك، لكي يتكون فراغ أنيون، عن طريق تحريكه إلى السطح، مثلا، فإن السطح سوف تظهر علية شحنة سالبة، بينما تظهر شحنة موجبة حول الفراغ المتكون داخل البلورة، وذلك للمحافظة على التعادل الكهربي للبلورة. يمكن تطبيق نفس المفهوم على فراغات كاتبون الذرة المتخللة ذاتيا. [7]

يكون تركيز الفراغات في المواد النقية صغيرا جدا (حوالي فراغ لكل 10^8 ذرة) ويزداد هذا التركيز بارتفاع درجة الحرارة (حوالي فراغ لكل 10^3 ذرة بالقرب من درجة الانصهار). تعتبر الفراغات مهمة لأنها تحكم معدل الانتشار (أو الإحلال) الذرى في الهيكل البنائى للمادة، بمعنى أن مقدرة الذرات على الحركة في الجسم الصلب يرجع، في المقام الأول، إلى وجود الفراغات. تكون حركة الفراغ داخل المادة عن طريق الإزاحة والإحلال محل الذرات المجاورة. يبين الشكل 4-4 ديناميكية حركة الفراغ داخل بلورة جسم صلب ذو عبوة متراصة (لتبسيط المفهوم، يمكن تشبيه حركة الفراغ بحركة فراغ في جراج سيارات مزدحم).

يوجد نوعان من العيوب الفراغية في البلورات الأيونية هما عيب شوتكى(Schottky defect) وعيب فرنكل (Frenkel defect). فيما يلى سندرس

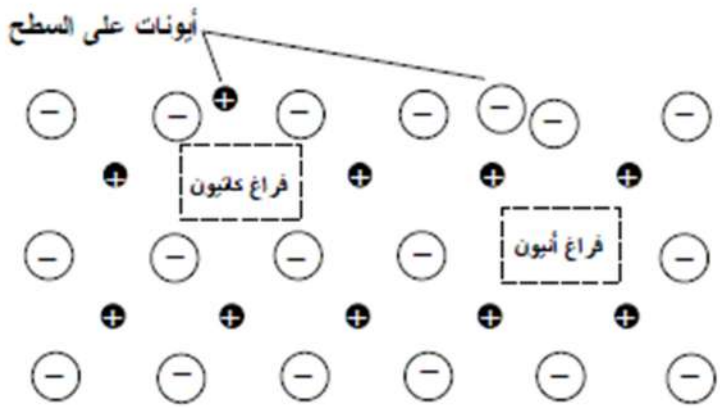
بشيء من التفصيل كل نوع من هذه العيوب وذلك بقصد ترسيخ المفهوم وتسهيل المقارنة بينهما.



الشكل 4-4 ديناميكية حركة الفراغ داخل بلورة جسم صلب ذو عبوة متراصة.

٢- فراغات شوتكىSchottky vacancies

يتكون فراغ شوتكى في المركبات الكيميائية ذات النظام البلوري الأيوني والذي يتطلب فيه اتزان الشحنة بين الأيونات المتجاورة. ينشأ فراغ شوتكى عندما تترك الذرة مكانها وتنتقل بخطوات متتابعة حتى تستقر في النهاية على سطح البلورة تاركة خلفها مكان شاغرا، كما هو موضح في الشكل 4-5، وكنتيجة لذلك يتكون زوج من فراغات الأيونات إحداهما سالب الشحنة والأخر موجب الشحنة للحفاظ على هذا الاتزان . [9]

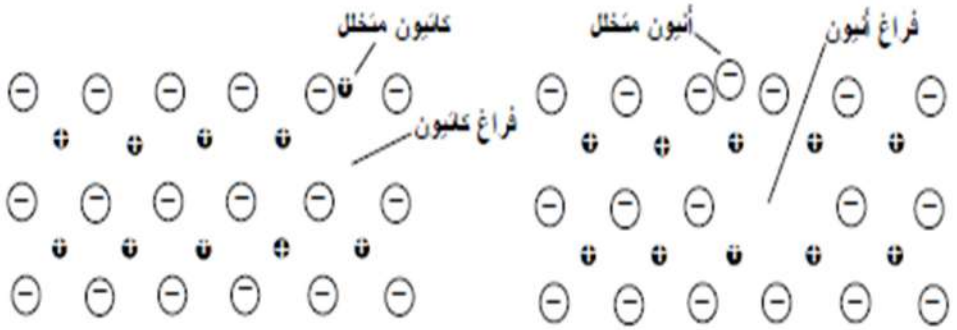


الشكل ٤- ٥ انواع فراغات شوتكي

ونظرا لمخالفة شحنة الفراغ المتكون لشحنة الايون الذي ترك مكانه وتحركه إلى السطح فإن ذلك يكافئ زوج من الايونات المختلفة الشحنة ولذلك يسمى عيب شوتكى ،أحيانا، بعيب الزوج الأيوني. يلعب هذا النوع من العيوب دورا كبيرا في تغير بعض الخصائص الفيزيائية للمادة وخاصية سرعة انتشار (diffusion) الذرات داخل البلورة.

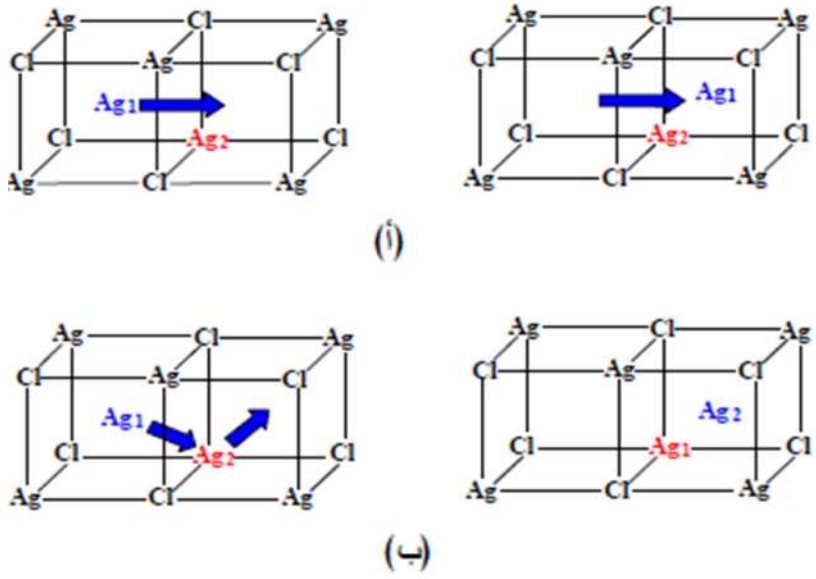
٣ – فراغات فرنكل Frenkel vacancies

تنشأ عيوب فرنكل في المركبات الكيميائية ذات الرابطة الأيونية ويوجد نوعان من هذه العيوب تحدث في نفس الوقت: النوع الأول هو أن تترك الذرة مكانها الطبيعي في الترتيب الدوري وتنحشر بين الذرات الأخرى، أي تستقر بين المستويات الذرية مكونة ذرة تخللية. بينما يكون النوع الثاني عبارة عن الفراغ الناتج عن ترك الذرة لمكانها في الترتيب. يحمل الفراغ المتكون دائما شحنة مشابهه للشحنات المحيطة به، كما هو مبين في الشكل 4-6. يسمى عيب فرنكل، أحيانا، بعيب الأيون المزاح. [3]



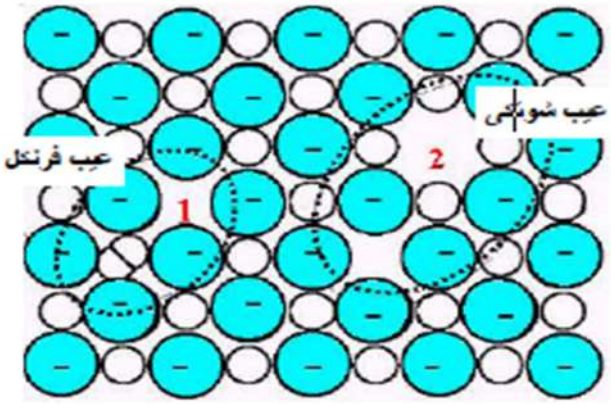
الشكل 4-6 أنواع فراغات فرنكل.

من الممكن أن يتحد الفراغ مع الذرة المتخللة ويختفي العيبان معا، كما إنه من الممكن أن يتحد فراغين لتكوين فراغ ثنائي (divacancy) وتكون حركته أسهل من الفراغ المفرد، كما يمكن أن يتجمع عدد كبير من الفراغات معا وينشأ عن ذلك فجوة. تتحرك عيوب فرنكل في البلورة الأيونية بأحد طريقتين: بالقفز المباشر للذرة المتخللة، كما هو مبين بالشكل 4-7(أ)، أو بميكانيكية التخلل، كما هو مبين في الشكل 4-7(ب).



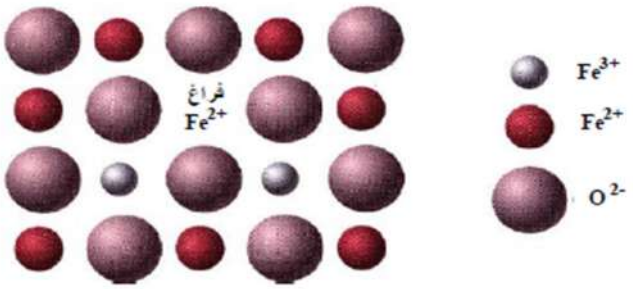
الشكل 4-7 حركة عيوب فرنكل في بلورة كلوريد الفضة

عادة تتكون الفراغات بالقرب من الأسطح الحرة (free surfaces) وبالقرب من حدود الحبيبات (grain boundaries) وأيضا بالقرب من الإنخلاعات. يمكن المقارنة بين عيوب شوتكى وعيوب فرنكل بالرجوع إلى الشكل 4-8.



الشكل 4-8 مقارنة بين عيوب شوتكى وفرنكل.

لا تغير عيوب شوتكى وفرنكل النسبة بين الأنيونات والكاتيونات في المواد الأيونية معروفة الصيغة الكيميائية (stoichiometric compounds)، بينما من الممكن أن تؤدى إلى تغيير التركيب الكيميائي في المواد غير المعروفة الصيغة الكيميائية (non-stoichiometric compounds). تحتوى المواد غير المعروفة الصيغة الكيميائية على عناصر انتقالية، مثل الحديد والذي يمكن أن يوجد على إحدى الحالتين: Fe^{+2} أو Fe^{+3}ولذلك فهي غير معروفة الصيغة الكيميائية. على سبيل المثال، في بلورة أكسيد الحديد ،FeO، يكون تكافؤ الحديد 2+. فإذا تحول زوج من ايونات الحديد ذو تكافؤ +2 إلى حديد ذو تكافؤ 3+، فإن ذلك يتطلب وجود فراغ للمحافظة على تعادل الشحنة، وبذلك يتغير التركيب الكيميائي، كما يتضح في الشكل 4-9. [10]



الشكل 4-9 تكون الفراغ في بلورة أكسيد الحديدوز.

٤- أنواع أخرى من العيوب النقطيةOther types of point defects

بالإضافة إلى الأنواع السابقة توجد أنواع أخرى من العيوب النقطية، حيث تترك ذرة أصلية مكانها في الترتيب المنتظم وتنحشر بين الذرات الأصلية الأخرى وتسمى فى هذه الحالة ذرة تخلليه ذاتية. يحدث هذا النوع من العيوب في المواد البلورية التي لها كثافة تعبئة ذرية منخفضة. تحتاج هذه العملية إلى طاقة كبيرة لكي تحدث فهي تتمفقط عند درجات الحرارة العالية أو عند التأثير على المادة الصلبة بشعاع من الطاقة مثل شعاع النيوترونات. [7]

٢- ٣ – ٢ العيوب الخطية LINE DEFECTS

يعتبر الإنخلاع أكثر العيوب الخطية شيوعا. والانخلاع هو عبارة عن خط منتظم من الذرات التي غابت عن مكانها (misplaced atoms) فى الشبيكة البلورية. غالبا، يمتد هذا الخط مسافة كبيرة نسبيا داخل الشبيكة. يمكن تقسيم الإنخلاعات إلى إنخلاع الحافة و الإنخلاع اللولبي. سنشرح هذه الأنواع بشيء من التفصيل في الفصل التالي .[7].

يوجد العديد من الشواهد العملية على وجود العيوب الخطية في المواد البلورية منها:

١- اختلاف الخصائص الميكانيكية للمواد الصلبة عما هو متوقع، حيث وجد أن قيم العديد من الخصائص الميكانيكية للمواد الصلبة أقل بآلاف المرات من القيم المتوقعة بالنسبة للبلورات المثالية.

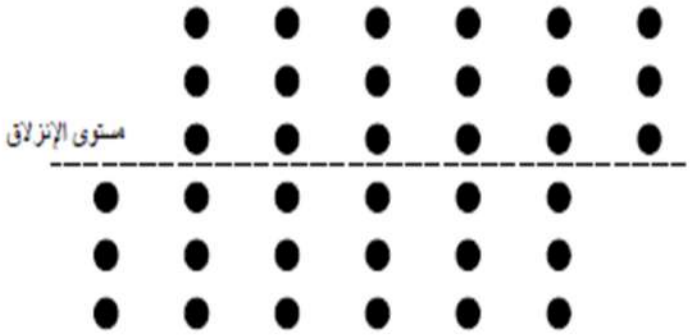
٢- في تجارب تشتت الأشعة السينية وجد أن شدة الحيود في البلورات الحقيقية يختلف كثيرا عن شدة الحيود المحسوبة على أساس افتراض أن التركيب البلوري مثالي يتضمن عيوب خطية.

٣- وجد أن بعض المحاليل الكيميائية تؤثر على مناطق معينة من سطح البلورة (على صورة تآكل) أكثر من تأثيرها على المناطق الأخرى، حيث وجد أن المناطق التي تتأثر أكثر هي تلك التي تتجمع عندها العيوب الخطية.

٤- وجد اختلافا كبيرا بين معدل نمو البلورة المقاس ومعدل النمو المحسوب على أساس افتراض وجود بلورة مثالية.

٥- يمكن باستخدام الميكروسكوب الالكتروني رؤية العيوب الموجودة في العينة مباشرة حيث تظهر الإنخلاعات كخطوط معتمة على شاشة فلورسينية.

الإنخلاع، كما ذكرنا من قبل، هو عيب خطى يوجد في البلورة ويتضمن عدد كبير من الذرات مرتبة حول خط. عند التأثير بقوة خارجية على بلورة فإنها تتعرض لإجهاد يحدث تشوها من الممكن أن يكون هذا التشوه مرنا أو غير مرن. في حالة التشوه المرن تعود البلورة إلى شكلها الأصلي بعد إزالة القوة المؤثرة. ولكن عند تعريض البلورة لإجهاد أكبر فإنه يحدث للبلورة تشوها غير مرن (دائم) عن طريق الانزلاق. يؤدى الإجهاد إلى حدوث انفعال في الشبيكة البلورية ينتج عنه إزاحة للذرات عن مواضع اتزانها الأصلية وعندما يكون الإجهاد كبيرا فإن الانفعال يكون على صورة زحفا ملموس العدد كبير من الذرات مكونا تشوها غير مرن يسمى بالإنخلاع. يبين الشكل 4-10 عملية انزلاق للمستويات البلورية بمقدار خطوة مقدارها ذرة واحدة. [4]

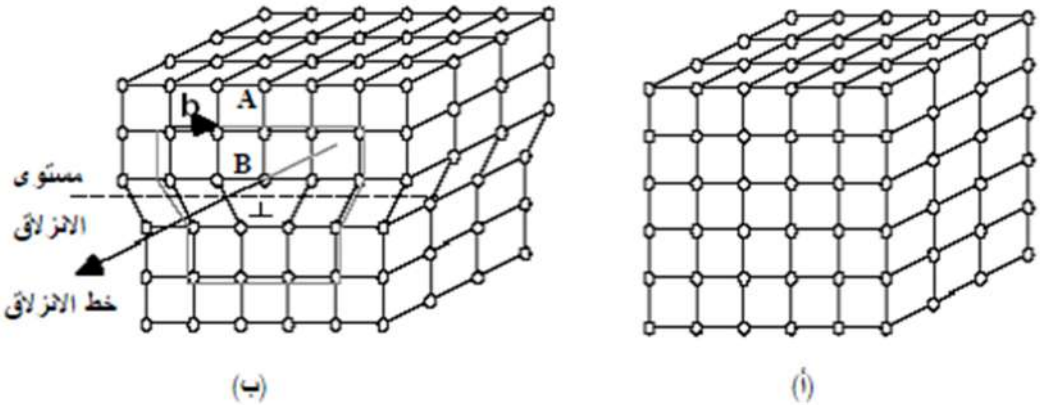


الشكل 4-10 عملية انزلاق للمستويات البلورية بمقدار ذرة واحدة.

عادة تتكون الفراغات الناتجة عن الإنخلاع بالقرب من الأسطح الحرة وبالقرب من حدود الحبيبات وأيضا بالقرب من الإنخلاعات. فيما يلى سنناقش النوعين الأساسين من الإنخلاعات وهما: إنخلاع الحافة أو النهاية والإنخلاع اللولبي (Screw dislocation).

١- إنخلاع الحافة Edge dislocation

يجمع الشكل 4-11 رسم تخطيطي لبلورة غير مشوهه بمعنى لا تحتوى على عيوب (الجزء (أ)) وبلورة مشوهة يوجد بداخلها إنخلاع حافة(الجزء (ب) من الشكل) بقصد توضيح المفهوم وتسهيل المقارنة.[9]



الشكل 4-11 إنخلاع الحافة داخل الشبيكة البلورية.

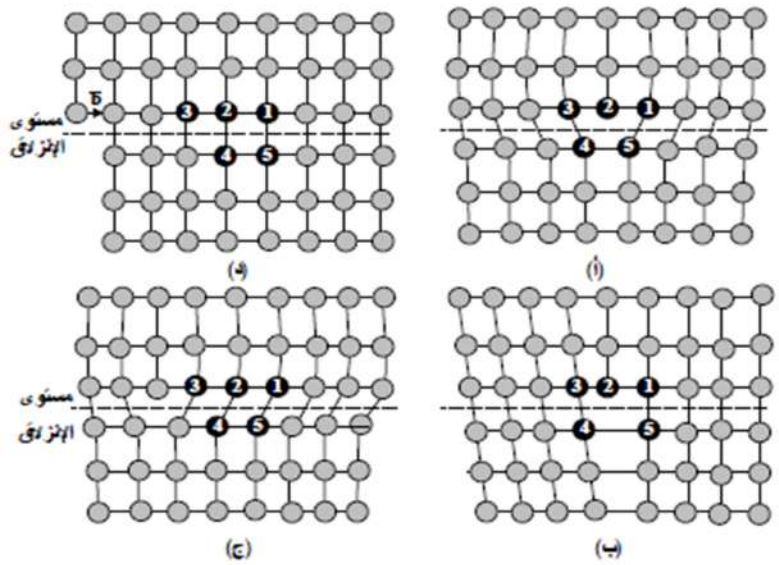
يمكن تفسير إنخلاع الحافة على أساس أن هناك جزء من مستوى زائد محشور داخل البلورة (الجزء AB في الشكل 4-11(ب)). ينتج عن هذا الجزء تولد إجهاد ضغط على بعض مناطق

الجوار وإجهاد شد على المناطق الأخرى وهذا يؤدى إلى زيادة طاقة الوضع على امتداد خط الإنخلاع. يلاحظ أن جزء البلورة الذي يوجد فيه جزء المستوى الزائد يحدث له ضغط، أي تكون ذراته مضغوطة بعضها مع بعض ، بينما يحدث للجزء السفلى تمدد بسبب غياب جزء من المستوى. يرمز لإنخلاع الحافة بالرمز ⊥.

ينزلق الإنخلاع على المستويات الواقع عليها خط الإنخلاع أثناء عملية تشكيل المواد البلورية عند التأثير عليها بإجهادات قص، وبذلك يمكن تخفيض سمك أو أقطار المواد المعدنية عند تشكيلها. يوصف الإنخلاع بمقدار الانزلاق الحادث وذلك بواسطة متجه يعرف بمتجه بيرجر (Burger vector) أو متجه الانزلاق (slip vector). يعرف هذا المتجه بأنه الخطوة التي يخطوها الإنخلاع عند الانزلاق. [9]

يرمز لمتجه الانزلاق بالرمز b، ويكون مقداره هو المسافة التي ينزاحها الإنخلاع في الخطوة الواحدة وتتحدد بدلالة البعد الذرى، فعلى سبيل المثال فى البلورة المكعبة من الممكن أن تكون الإزاحة عبارة عن مضاعفات صحيحة لمتجهات انتقال الشبيكة، أي خطوة واحدة (a) أو خطوتين (2_a) أو ثلاث خطوات (3_a).... وهكذا، حيث a هي المسافة البينية للذرات (طول ضلع المكعب). يكون اتجاه حركة الإنخلاع أو متجه الانزلاق عموديا على خط الإنخلاع.

يبين الشكل 4-12 حركة إنخلاع حافة بمقدار خطوة واحدة وذلك عند التأثير عليالإنخلاع بإجهاد قص. تم تمييز 5 ذرات بلون أسود وذلك لسهولة تتبع حركة الإنخلاعمن خلال سياق الأشكال من (أ) إلى (د). يسمى إنخلاع الحافة أحيانا بالإنخلاع الطرفي.



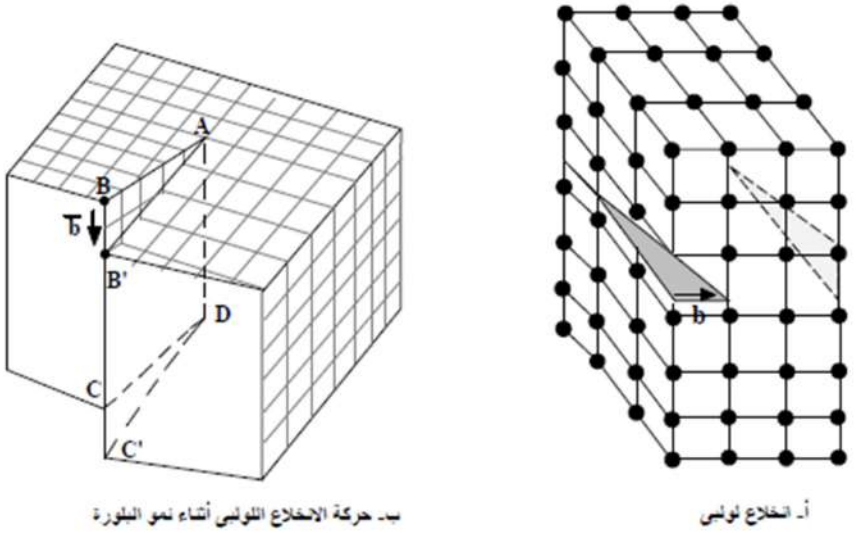
الشكل 4-12 سياق حركة إنخلاع حافة عند التأثير عليه بإجهاد قص بمقدار خطوة واحدة b.

٢- الإنخلاع اللولبي Screw dislocation

في الإنخلاع اللولبي تكون فيه إزاحة الذرات أثناء حركتها على امتداد خط الإنخلاع ويكون متجه الانزلاق موازيا لخط الإنخلاع على عكس ما هو الحال عليه في إنخلاع الحافة،

كما يبين الشكل 4-13 (أ). بالإضافة إلى ما سبق، تكون الطاقة الناتجة من هذا الإنخلاع أكبر منها في حالة الإنخلاع الطرفي. [2]

بالرجوع إلى الشكل 4-13 (ب)، وحتى يمكن تخيل الإنخلاع اللولبي، نعتبر أنه حدث قطع في البلورة في المستوى ABCD، كما هو موضح، وأن الجانب الأيسر من البلورة انزلق أعلى الجانب الأيمن. يكون الخط AD هو الإنخلاع الذي تنتهي عنده الخطوة $BA_B¢$ والتي تكونت من الانزلاق. وجاءت تسمية هذا الإنخلاع باللولبي من أنه إذا تحركنا من المستوى الذرى حول الإنخلاع فإننا نجد أن المستوى يكون حلزوني. ينشأ الإنخلاع اللولبي نتيجة تطبيق إجهاد قصي جزئي ويكون خط الإنخلاع موازيا لمتجه الخطوة. [2]



الشكل 4-13 الإنخلاع اللولبي.

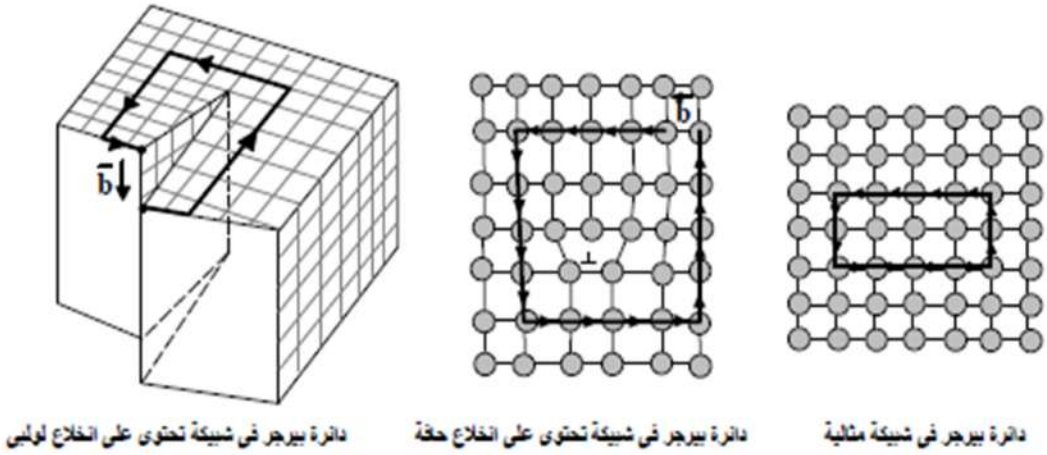
تتكون الإنخلاعات، بشكل عام، في الشبيكة البلورية أثناء تجمد مصهور المادة وتكون النظام البلوري. فعندما يحدث اختلال بسيط في اتجاه نمو صفوف الذرات المجاورة نجد أن جزء زائد من الصفوف أو جزء ناقص يفرض نفسه داخل البلورة ويكون إنخلاعا.

٣ – متجه ودائرة بيرجر Burgers vector and circuit

يمكن وصف الإنخلاع سواء كان إنخلاع حافة أو إنخلاع لولبي بواسطة متجه إزاحة يسمى متجه بيرجر وهذا المتجه يغلق المسار الذي يحيط بخط الإنخلاع والذي يسمى دائرة بيرجر (Burger circuit). وتتكون دائرة بيرجر عن طريق الانتقال خلال المنطقة ذات الترتيب المنتظم حول الإنخلاع بخطوات عبارة عن مضاعفات صحيحة لمتجهات انتقال الشبيكة في الاتجاهات الأربعة. [6]

كما هو موضح في الشكل 4-14 في البلورة المثالية فإن دائرة بيرجر تغلق نفسها ولا يتواجد متجه بيرجر. أما في حالة البلورة غير المثالية والتي يوجد بها عيوب فإن دائرة بيرجر تكون مفتوحة ويكون متجه بيرجر هو المتجه الذي يغلق الدائرة. يكون متجه بيرجر عموديا

على خط إنخلاع الحافة ويقع في مستوى الانزلاق وتكون قيمته محددة وتتوقف على طبيعة دورية الشبيكة البلورية وتعتمد أيضا على ميكانيكية الانزلاق. تكون قيمة متجه بيرجر لوحدة الإنخلاع مساوية لثابت الخلية.



الشكل 4-14 خصائص دائرة ومتجه بيرجر في شبيكة بلورية.

يلخص الشكل 4-14 خصائص دائرة ومتجه بيرجر في شبيكات بلورية مثالية (تامة) وأخريات تحتوى على إنخلاعات.

٢-٣ – ٣ العيوب المستوية Planer defects

العيوب المستوية هي العيوب الواقعة بين سطحين، (Interfacial). يمكن تصنيف العديد من أنواع الأسطح في المواد الصلبة إلى الفئات الآتية: [10]

١- الأسطح بين المواد الصلبة والغازات وتسمى أسطح حرة.

٢- الأسطح بين المناطق التي يوجد فيها تغير في التركيب الذرى مع الحفاظ على دورية ترتيب الذرات وتعرف هذه الأسطح بحدود المناطق (domain boundaries).

٣- الأسطح بين بلورتين أو حبيبتين لهما نفس الطور حيث يوجد فرق في اتجاه ترتيب الذرات عبر هذا السطح، وتسمى هذه الأسطح حدود الحبيبة (grain boundaries).

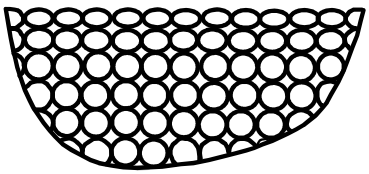
٤- الأسطح بين الأطوار المختلفة للمادة وتسمى حدود الطور (phase boundaries)، حيث يوجد، بشكل عام، تغير في التركيب الكيميائي والترتيب الذرى عبر السطح بين الأطوار.

٥- العيوب الناتجة عن أخطاء التعبئة (الرص).

تتكون حدود الحبيبات على وجه الخصوص فى المواد الصلبة المتبلورة، بينما تتواجد كل من الأسطح الحرة و حدود المناطق و حدود الطور في كل من المواد الصلبة المتبلورة وغير المتبلورة.

١- الأسطح الحرة Free surfaces

تملك جميع المواد الصلبة أسطح حرة بسبب حجمها وشكلها المحدد. يختلف ترتيب الذرات على السطح الحر عن الذرات الموجودة في عمق البناء وذلك لاختلاف البيئة المحيطة بذرات السطح لعدم وجود ذرات مجاورة في أحد الجوانب. عادة، يكون للذرات القريبة من السطح نفس التركيب البلوري ولكن يوجد اختلاف صغير في متغيرات الشبيكة عنها في حالة الذرات الموجود في العمق، وهذا يمثل نوعا من التشوه ،كما يوضح الشكل 4 – 15 [3]



الشكل 4-15 تصور مبسط للتشوه الذي يحدث عند سطح المادة المتبلورة.

ربما تكون أهم سمة للأسطح الحرة هي طاقة السطح المصاحبة لأسطح أي جسم صلب. يمكن رؤية مصدر طاقة السطح هذه باعتبار بيئة كل من الذرات على السطح والذرات الموجودة في الداخل. فمثلا، لكي يتم جلب ذرة من الداخل إلى السطح يجب إحداث كسر أو تشوه بعض الروابط وبذلك تزداد الطاقة. ويمكن تعريف طاقة السطح بأنها مقدار الزيادة في الطاقة لكل وحدة مساحة من السطح الجديد المتكون. في المواد المتبلورة تعتمد طاقة السطح على الاتجاه البلوري للسطح. الأسطح التي تكون عبارة عن مستويات ذات تعبئة ذرية كثيفة يكون لها طاقة سطح صغيرة، وذلك بسبب صغر نسبة روابط الذرات المكسورة والموجودة على هذه الأسطح. وهذا يعنى أن للذرات عدد كبير من أقرب الجيران في مستوى السطح. تتروح قيم طاقة السطح في المواد الصلبة من 10جول/م^2 إلى 1 جول/م^2. بشكل عام، يمكن القول أنه كلما كانت الروابط قوية في البلورة فإن طاقة السطح تكون أعلى.

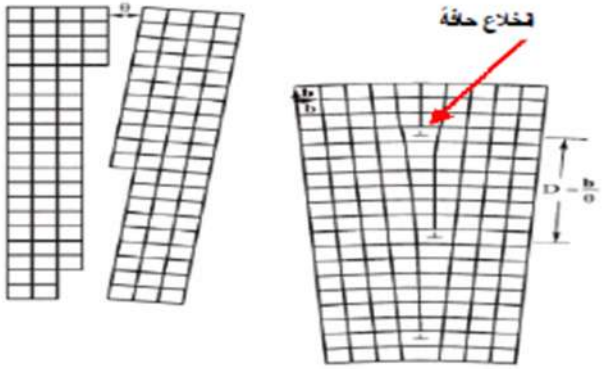
يمكن تقليل طاقات السطح عن طريق إمتزاز ذرات أو جزيئات غريبة من الهواء ، على سبيل المثال، في مادة الميكا تكون طاقة السطح المقطوع تحت ضغط مخلخل أعلى بكثير منها في حالة نفس السطح المقطوع في الهواء. يقوم الأكسيجين الممتز من الهواء بواسطة السطح المقطوع بتعويض الروابط المكسورة نتيجة القطع. من المستحيل حفظ أسطح المواد الصلبة نظيفة بشكل تلقائي بسبب عملية إمتزاز السطح لذرات الشوائب ،ويترتب على ذلك أن خصائص السطح مثل الانبعاث الالكتروني، معدلات التبخر ومعدلات التفاعلات الكيميائية تعتمد، إلى حد بعيد، على وجود أي شوائب ممتزة. سوف تختلف هذه الخصائص إذا تمت القياسات تحت ظروف تعطى إمتزاز مختلف على السطح. [3]

٢ - حدود الحبيبة Grain boundaries

الحبيبة هي تجمع بلوري بحيث تكون جميع وحدات خلايا الحبيبة الواحدة منتظمة في نسق إتجاهى خاص بها ولها حدود خارجية (سطح) تفصلها عن الحبيبات المجاورة وهكذا فإن

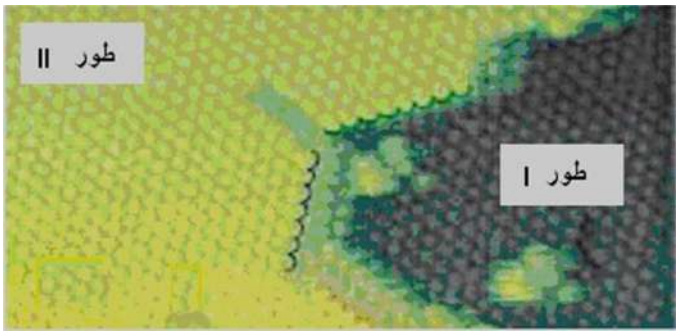
حدود الحبيبة تفصل بين مناطق ذات توجيه بلوري مختلف. أبسط شكل لحدود الحبيبة يكون عبارة عن سطح بيني يتكون من صفوف متوازية من إنخلاعات حافة.

يسمى هذا النوع الخاص من الحدود بالحد المائل وذلك لأن عدم التوجيه يكون في شكل ميل صغير على محور موازى للإنخلاعات، كما يوضح الشكل 4-16. يكون التركيب الناتج مكافئ لإنخلاعات حافة مفصولة بمسافة تساوى $\frac{b}{\theta}$، حيث b هو طول متجه بيرجر و θ هي زاوية ميل الإنخلاعات. يشار إلى الحد المائل بحد الزاوية المنخفضة عندما تكون زاوية عدم التوجيه أقل من 10°.



الشكل 4-16 تركيب حد حبيبة مبسط يسمى بالحد المائل لأنه يتكون عندما تميل حبيبتين متبلورتين على بعضهما بعض بزاوية مقدارها بضع درجات.

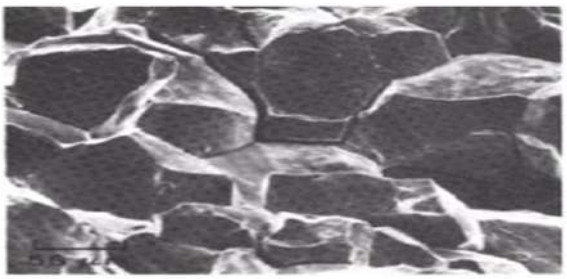
عندما يكون لحد الحبيبة عدم توجيه أكبر من 10° أو من 15° درجة، فإنه من الناحية العملية لا يمكن التفكير بأن الحد مركب من إنخلاعات لأن المسافة الفاصلة بين الإنخلاعات سوف تصبح صغيرة، الأمر الذي معه تفقد الإنخلاعات تماثلها الخاص. يمثل حد الحبيبة منطقة لها إتساع يساوى ثخانة مقدارها بضع ذرات، حيث يوجد انتقال (تغير) في الدورية الذرية بين البلورات أو الحبيبات المتجاورة لحدود الحبيبة طاقة سطح بيني (interfacial energy) ناتج عن الاضطراب فيالدورية الذرية للمنطقة المجاورة للحد أو بسبب الروابط المكسورة التي توجد على السطح البيني. عموما، تكون طاقة السطح البيني أقل من طاقة السطح الحر وذلك لأن الذرات فيحدود الحبيبة تكون محاطة من كل الجوانب بذرات أخرى وعدد الروابط المكسورة أو المشوهة فيه يكون أقل. يطلق على المواد الصلبة التي تحتوى على حدود حبيبات بالمواد المتعددة التبلور، حيث أن البناء التركيبي يتكون من العديد من المناطق (البلورات) يكون لكل منها توجيه بلوري مختلف، كما يبين الشكل 4-17.



الشكل 4-17 سطح مكون بين طورين.

٣- حدود الطور Phase boundaries

يعرف الطور بأنه جزء أو منطقة من المادة قابلة للانفصال وتكون متجانسة ولها تركيب فيزيائي وكيميائي معين. توجد الأطوار في شكل سائل متجمد تخللي، أو سائل متجمد تعويضي أو سبيكة منتظمة التركيب أو مركبات ومواد أمورفية (غير متبلورة) أو حتى على شكل بخار عناصر نقية. يوجد الطور المتبلور في الحالة الصلبة في شكل بلورة واحدة أو فى شكل متعدد التبلور. يبين الشكل 4-18 صورة لسطح كسر فولاذ لا يصدأ مأخوذة بواسطة ميكروسكوب الكتروني ماسح يظهر وجود أطوار عديدة. [2]



الشكل 4-18

تتركب المواد الصلبة التي تتكون من أكثر من عنصر، عادة، من عدد من الأطوار. تجد مثل هذه المواد الكثير من التطبيقات، فعلى سبيل المثال، يتركب مثقاب الأسنان، الذي لا ننسى الألم الذي سببه لمعظمنا، من خليط من بلورات كربيد السليكون الصغيرة تحيط هيكل من معدن الكوبالت. هنا، يكون الكوبالت طور متصل وطور أخر يتماسك مع بلورات كربيد السليكون التي تتميز بصلابتها العالية. وعموما، يشار إلى المواد المتعددة الطور، مثل المادة السابق ذكرها بمواد مركبة (composite materials)،وتجد هذه المواد أهمية كبيرة في مجال الهندسة وذلك لأن لها العديد من الخصائص المميزة التي تجعلها أفضل من المواد وحيدة الطور في الكثير من التطبيقات. [2]

يؤثر التركيب البلوري والكيميائي على طبيعة الأسطح البينية للأطوار. عندما تكون الأطوار مختلفة في التركيب الكيميائي والبلوري فإن طبيعة السطح تكون شبيهه إلىحد كبير بسطح الحبيبة (حدود الحبيبة). وعندما تكون الأطوار لها نفس التركيب والتوجيه البلوري فإن الأسطح التي تفصل بينها ربما تكون مماثلة في الطاقة والتركيب لحدود الحبيبة ذات زاوية الميل الصغيرة.

يؤدى مفهوم أن المادة تتركب من أطوار متصلة وأطوار متقطعة إلى تصنيف بسيط لمختلف أنواع المواد المركبة. يقدم الجدول 4-1 بعض الأمثلة مصنفة طبقا للتركيب البنائى (مواد متبلورة أو مواد غير متبلورة) وطبيعة كل طور. [1]

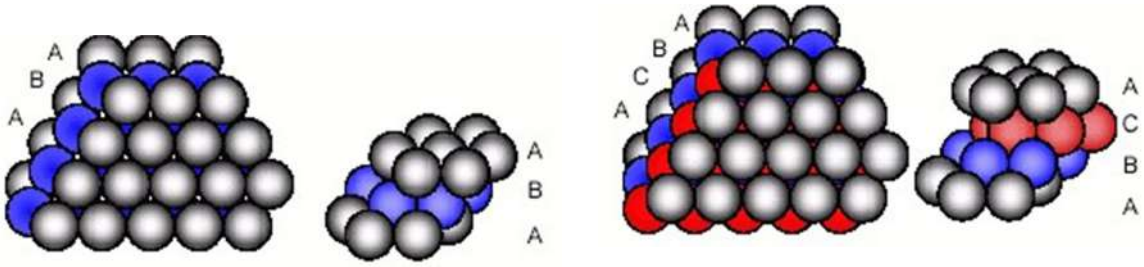
جدول 4-1 تصنيف المواد المركبة (المتعددة الأطوار)

طور متصل	طور (أطوار) متقطعة	أمثلة
متبلور	متبلور	كل الأنظمة المعدنية مثل الحديد الزهر ، الصلب، سبيكة اللحام، معظم الصخور الطبيعية مثل الجرانيت والرخام.
متبلور	غير متبلور	مواد ليس لها أهمية تطبيقية.
غير متبلور	متبلور	معظم المواد السيراميكية الصناعية، مثل قرميد البناء ،البور سلين العازل كهربيا، البوليمرات المتماسكة جزئيا، بعض المركبات المتبلورة- البوليمريه.
غير متبلور	غير متبلور	الألياف الزجاجية، الزفت (الإسفلت)، الخشب، الأسمنت المتميع.

٤- عيوب الرص (التعبئة)Packing defects

بفرض أن البلورة عبارة عن رصات لمستويات تتكون من ذرات بعضها فوق بعض، وكان أحد المستويات مزاحا عن المستوى المجاور بإزاحة لا تساوى متجه في الشبيكة البلورية فإنه يتكون عيبا في التركيب يسمى خطأ رص. تحدث هذه الأخطاء في البلورات المتراصة مثل البلورة المكعبة المتمركزة الأوجه التي سوف تدرس لاحقا. يكون الرص في هذه البلورة ذات أنماط متعددة مثل الرص على الهيئة ABCABC أو الرص على الهيئة ABAB، كما هو موضح بالشكل4-19.

عندما ينتج ترتيب ABABC مثلا بدلا من الترتيب ABCABC فإننا نقول أنه حدث خطاء في الرص. [5]



أ - ترتيبABCABC ٢- ترتيب ABABA

الشكل 4-19 رسم توضيحي لرص مستويات من الذرات في بلورة مكعبة متمركزة الأوجه.

عندما ينتج ترتيب ABABC مثلا بدلا من الترتيب ABCABC فإننا نقول أنه حدث خطاء في الرص.

٤-٢ تعيين تركيز وطاقة التنشيط لتكوين الفراغ

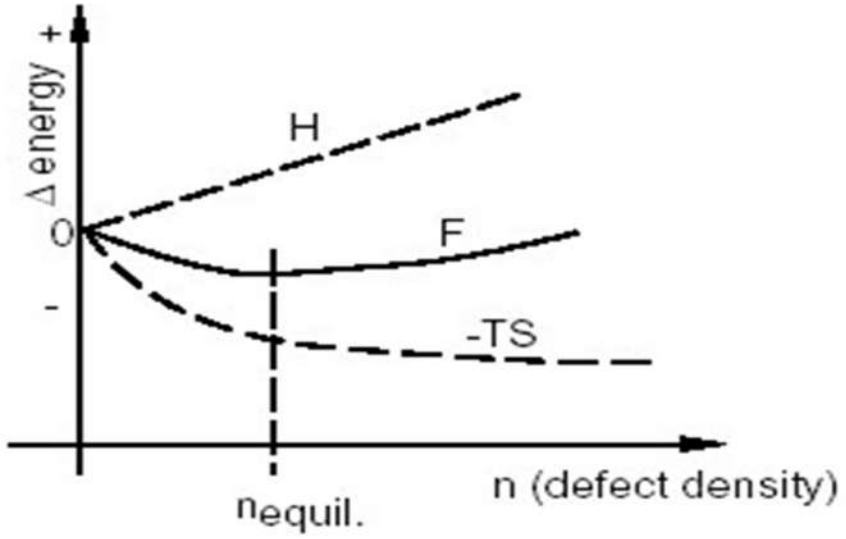
Determination of vacancies concentration and the activation energy

لتعيين العلاقة بين طاقة تكوين الفراغ وعدد الفراغات عند درجة حرارة معينة يجب اعتبار أن البلورة في حالة اتزان حراري ديناميكي بمعنى أن عدد الفراغات التي تتكون في البلورة في وحدة الزمن يساوى عدد الفراغات التي تختفي من البلورة في نفس الزمن تماما مثل ما يحدث لسائل فى حالة اتزان ديناميكي مع بخاره. سوف نعتبر فيما يلى تكون عيب شوتكى. من القانون الثاني للديناميكا الحرارية نجد أن إجمالي الطاقة الحرة للنظام (طاقة هولمولتز)، يكون على الصورة، [9]

$$F = H - TS \,, \qquad 4\text{-}1$$

حيث F هي الطاقة الحرة للنظام قيد الدراسة، H هو المحتوى الحراري (الانثالبى enthalpy) و S هو الأنتروبيا أو الفوضى (entropy) و T هي درجة الحرارة المطلقة.

إذا حدث التفاعل عند درجة الحرارة T، يحدث تغير في قيمة F مقداره D_F طبقا للتغير في DH ويكون التغير المحتمل في الأنتروبيا هو TDS. هذه هي الحالة التي تصف تكون العيوب في الجسم الصلب التام. طبقا لتوزيع الطاقة (ماكسويل-بولتزمان) فإنه يعتقد أن عددا من الذرات الفردية يمكن أن تكتسب طاقة حرارية تكون كافية لإزاحتها عن موضع الاتزان في الشبيكة إلى مكان بيني وتعتبر بمثابة عيب نقطي. تحتاج عملية تكوين العيب النقطي هذه إلى طاقة وتؤدى إلى تكون إجهاد في الشبيكة و بالتالي إلى زيادة فيالمحتوى الحراري للنظام (D_H تكون موجبة وتزداد خطيا مع عدد العيوب المتكونة).
يؤدى الانحراف عن الكمال بتوليد العيوب النقطية إلى زيادة العشوائية أو الفوضى (D_Sموجبة). يكون مقدار الفوضى المتولدة (D_S) كبيرا جدا خلال الخطوة الأولى من الكمال(التركيب المثالى) فى الاتجاه إلى إفساد ترتيب النظام، ولكن يتناقص (مع تكون عدد معين من العيوب) كلما ازدادت الفوضى الكلية في النظام. وبناء على ذلك فإن الحد TD_Sيتناقص بسرعة عند البداية ثم يميل إلى الثبات. [10]
يبين الشكل 4-20 النتيجة النهائية، حيث تظهر الطاقة الحرة قيمة صغرى عند تكون عدد معين من العيوب في الجسم الصلب. تكون كثافة العيوب $(_n)$ عند الاتزان دالة في درجة الحرارة. وتخبرنا النهاية الصغرى للطاقة الحرة F أن التحول من الكمال إلى التركيب ذي العيوب (أي في اتجاه الفوضى) عند الاتزان يحدث تلقائيا، أي بشكل طبيعي. تعتبر عملية تكون الفراغات الذرية في المواد الصلبة غير واضحة ومازالت ميكانيكية التكوين هدفا للأبحاث المكثفة.



الشكل 4-20ديناميكية تكون العيوب النقطية فى الجسم الصلب.

أظهرت حسابات الطاقة الحرارية المصاحبة للذرات في الشبيكة أن متوسط طاقة اهتزاز ذرات الشبيكة تكون أقل بكثير من 1 eV (أقل كمية من الطاقة تلزم لتكون فراغ) عند درجة حرارة الغرفة. ولهذا، فإن ذرة الشبيكة ستحتاج فقط إلى طاقة ΔH_d، وهى الطاقة اللازمة لتكون العيب (أثناء حدوث تأرجح كبير في الطاقة). الاحتمال النسبي لأن يكون لذرة ما مقدار طاقة ΔH_d أعلى من طاقة المستوى الأرضي لها هو $\Delta H_d kT$، ، وحيث أنه يمكن تكوين فراغ عندما تكون طاقة الذرة مساوية لطاقة تكوين الفراغ، فإن احتمال تكون فراغ مكان الذرة هو نفس الاحتمال السابق. [4]

٢ ـ ٥ فوائد العيوب البلورية

بالرغم من التأثير السلبي للعيوب البلورية في تغيير الخواص الفيزيائية والبصرية والميكانيكية للمواد الصلبة إلا أن إهتمام العلماء انصب في الحصول على بلورات مشوبة لعدة أسباب منها:

١- أن إضافة Mg الى بلورة LiF استعملت كمجس لقياس كمية الإشعاع الذي يتعرض له العاملون في مجال الاشعاع لعدة مرات بدلاً من الباج التقليدي الذي يستخدم مرة واحدة.

٢- بلورة LiF/Mg تستعمل لقياس جرعات التألق الحراري في الطب الذري وذلك لمعرفة كمية اشعة گاما أي الجرعة التي يتعرض لها المريض. [7]

٣- إضافة شوائب الى اشباه الموصلات لتصنيع الترانزستور والدوائر المتكاملة والتي أحدثت ثورة علمية جبارة.

وأيضاً هناك عدة فوائد من إضافة الشوائب للمواد الصلبة منها:

١- التحكم بالتوصيلية الكهربائية والحرارية والخواص الميكانيكية للمواد الصلبة.

٢- التحكم في درجة الانصهار والانجماد في البنية البلورية للمواد.

٣- التحكم في مركز اللون حيث يعتمد على نوع الشوائب المضافة وتركيزها.

٤- التحكم بالتألق الضوئي أو التألق الحراري بواسطة الشوائب المختلفة.

المصادر

1. "Crystal", www.britannica.com, Retrieved 5-8-2019. Edited.
2. "Crystal: Definition, Types, Structure & Properties", study.com, Retrieved 5-8-2019. Edited.
3. Crystal Healing: Stone-Cold Facts About Gemstone Treatments", www.livescience.com, Retrieved. Lieb ،Klaus-Peter؛ Keinonen ،Juhani

(2006). "Luminescence of ion-irradiated α quartz". Contemporary Physics..

4. Waldmann ،T. (2012). "The role of surface defects in large organic molecule adsorption: substrate configuration effects". Physical Chemistry Chemical Physics.
5. Properties and interactions of atomic defects in metals and alloys, volume 25 of Landolt-Börnstein, New Series III, chapter 2, p. 88,
6. Kendrew ،J. C.؛ Bodo ،G.؛ Dintzis ،H. M.؛ Parrish ، R. G.؛ Wyckoff ،H.؛ Phillips ،D. C. (1958). "A Three-Dimensional Model of the Myoglobin Molecule Obtained by X-Ray Analysis". Nature. ج. doi:10.1038/181662a0. PMID 13517261.
7. Prince ،E. (2006). International Tables for Crystallography Vol. C: Mathematical, Physical and Chemical Tables. Wiley. ISBN 978-1-4020-4969-9.
8. UN announcement "International Year of Crystallography". iycr2014.org. 12 July 2012
9. Will Kleber, Hans-Joachim Bautsch und Joachim Bohm (1990): Einführung in die Kristallographie. Verlag Technik.
10. Siegfried Haussühl (1993): Kristallgeometrie. Weinheim Verlag.