

دراسة آلية الارتباط بين الذرات في بعض المركبات المعدنية الثنائية للغاليوم

الدكتور عاصم محمد أصلان

(قبل للنشر في 1998/9/27)

□ الملخص □

تمت دراسة المركبات التي تنتمي إلى النماذج البنيوية Mg ، $AuCu_3$ ، $CsCl$ و $CuGa_2$ وذلك عن طريق تحديد الأعداد التساندية ومتعددات الوجوه التساندية للذرات في هذه المركبات وحساب مقدار التقلص أو الزيادة في أبعاد الذرات عن بعضها بعضا بالمقارنة مع أنصاف أقطارها. لقد أظهرت الدراسة ما يلي: 1- تسود الرابطة المعدنية في هذه المركبات باستثناء المركب $CuGa_2$. 2- عدم تجانس الارتباط ضمن متعدد الوجوه التساندي الواحد. 3- لا يتحدد الارتباط (التأثير المتبادل بين الذرات) في هذه المركبات بالضرورة بالذرات الأقرب للذرة المدروسة (متعدد الوجوه) فقط.

The study of mechanism of bonding between atoms in some of binary intermetallic compounds of Gallium

Dr. Asem Mouhamad ASLAN*

(Accepted 27/9/1998)

□ ABSTRACT □

The definition of compression or increase of distances between atoms in comparison with their radiuses, and the study of the coordination numbers and coordination polyhedrons of atoms in compounds have following structure types Mg, AuCu₃, CsCl and CuGa₂ show that:

- 1- The bonding in these compounds except CuGa₂ is metal bonding.
- 2- The bonding in the same coordination polyhedron is not equal.
- 3- We can not define the bonding in these compounds always depending on the coordination polyhedron only.

*prof at Department of Chemistry, Faculty of Science, TISHREEN University.

1- مقدمة:

تستقطب المركبات المعدنية (Intermetallic Compounds) الآن اهتماماً كبيراً من الكيميائيين والفيزيائيين على حد سواء، لما لهذه المركبات من أهمية تطبيقية وصناعية. يصادف في المراجع حتى يومنا هذا أكثر من 312/ مركباً معدنياً ثنائياً للغاليوم تشتمل على مركبات الغاليوم مع عناصر المجموعتين IA و IIA ومع معادن المجموعات IIIA و IVA و VA وكذلك مع جميع عناصر المجموعات B. لم يتوفر حتى الآن في المراجع دراسة شاملة ومنظمة لآليات الارتباط في المركبات المعدنية الثنائية للغاليوم باستثناء دراسة بعض المركبات كل على حده مثل GaAs و GaSb و Cu_9Ga_4 و Cu_3Ga [2]. إن النماذج والأشكال المختلفة للإرتباط في البلورات ما هي إلا نتيجة لتصوراتنا غير المتعمقة ومعلوماتنا غير الكافية في هذا المجال من المعرفة [3]، لذا فإن دراسة العوامل المؤثرة على تشكيل بلورات هذه المركبات (التأثير المتبادل بين الذرات) ستؤدي قيمة أكاديمية هامة وستشكل خطوة أساسية في دراسة التطبيقات الصناعية الممكنة لهذه المركبات.

2- دراسة بعض النماذج البنيوية:

لقد تمت دراسة المركبات التي تنتمي إلى النماذج البنيوية Mg ، $AuCu_3$ ، $CsCl$ و $CuGa_2$.

2-1- المركبات التي تنتمي إلى النموذج البنيوي Mg:

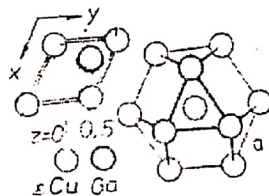
يبين الجدول 1/ المركبات التي تنتمي إلى النموذج البنيوي Mg وخصائصها البلورية [4]، في حين يظهر الشكل (1) مسقط الخلية البلورية العنصرية ومساقط متعددات الوجوه التساندية على المستوي XY [4].

| Comp | S.G | a (Å) | c (Å) | Co-ord | | | Site | |
|------------------|------------|--------|-------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|------|----|
| | | | | $\frac{x_A}{x_{Ga}}$ | $\frac{y_A}{y_{Ga}}$ | $\frac{z_A}{z_{Ga}}$ | A | Ga |
| $Ag_3Ga(\beta)$ | $P6_3/mmc$ | 2.882 | 4.693 | $\frac{0}{\frac{1}{3}a}$ | $\frac{0}{\frac{2}{3}a}$ | $\frac{0}{\frac{1}{2}c}$ | 1a | 1d |
| $Cu_3Ga(\beta')$ | $P6_3/mmc$ | 2.6005 | 4.241 | $\frac{0}{\frac{1}{3}a}$ | $\frac{0}{\frac{2}{3}a}$ | $\frac{0}{\frac{1}{2}c}$ | 1a | 1d |

الجدول 1/

Site - هي مجموعة النقاط المتكافئة (الموقع). S.G = المجموعة الفراغية للتناظر. a, b, c - أطوال أضلاع الخلية العنصرية.

يدل الرمز A على ذرات العنصر الأول في المركب المدروس.



الشكل (1) مسقط الخلية البلورية العنصرية للمركب $Cu_3Ga(\beta')$ ومساقط متعددات الوجوه التساندية على المستوي XY (يتشابه متعدد الوجوه التساندي لـ Ga و Cu إذ يمكن الحصول على كل منهما من الآخر باستبدال مواقع ذراتهما في الشكل a). بالاعتماد على المعطيات المرجعية المبينة أعلاه تم تحديد الأعداد التساندية لذرات الغاليوم وشريكه الآخر (A) في المركبين المدروسين بالإضافة إلى مقدار الزيادة أو التقلص في البعد A-Ga حيث تتألف كرة التساند لكل من ذرات Ga وذرات العنصر A من مجموعتين.

تتألف المجموعة الأولى من ست ذرات من نفس العنصر وتقع على بعد a من الذرة المركزية والمجموعة الثانية تتألف من ست ذرات من الشريك الثاني في المركب وتقع على بعد يختلف بقليل عن بعد ذرات المجموعة الأولى وهذا البعد مبين في الجدول /2/ كما تم تحديد النسبة c/a .

| Comp | $d_{A-Ga} (\text{Å})$ | C.n | | Compr % | increas % | c/a |
|------------------|-----------------------|----------|----------|-----------------------|-----------------------|-------|
| | $r_A + r_{Ga}$ | A | Ga | $d_{A-Ga} (\text{Å})$ | $d_{A-Ga} (\text{Å})$ | |
| $Ag_3Ga(\beta)$ | 2.877 | 12 | 12 | | 1.65 | 1.628 |
| | 2.83 | (6A+6Ga) | (6A+6Ga) | | | |
| $Cu_3Ga(\beta')$ | 2.598 | 12 | 12 | 2.684 | | 1.631 |
| | 2.68 | (6A+6Ga) | (6A+6Ga) | | | |

الجدول /2/

C.n - العدد التساندي.

- أخذت أنصاف أقطار الذرات في هذا الجدول وما يليه من المرجع [5].

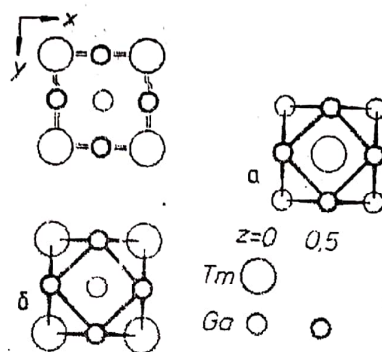
2-2- المركبات التي تنتمي إلى النموذج البنيوي $AuCu_3$:

يبين الجدول /3/ المركبات التي تنتمي إلى النموذج البنيوي $AuCu_3$ وخصائصها البلورية [4] في حين يبين الشكل

(2) مسقط الخلية البلورية العنصرية [4] ومساقط متعدّدات الوجوه التساندية على المستوي xy .

| Comp | S.G | $a (\text{Å})$ | Co-ord | | | Site | |
|----------|------|----------------|--------------|--------------|--------------|------|----|
| | | | x_A/x_{Ga} | y_A/y_{Ga} | z_A/z_{Ga} | A | Ga |
| $ScGa_3$ | Pm3m | 4.095 | 0/0 | 0/a/2 | 0/a/2 | 1a | 3c |
| La_3Ga | Pm3m | 5.660 | 0/0 | a/2/0 | a/2/0 | 3c | 1a |
| Ce_3Ga | // | 5.400 | // | // | // | // | // |
| Pr_3Ga | // | 5.510 | // | // | // | // | // |
| Nd_3Ga | // | 5.430 | // | // | // | // | // |
| Sm_3Ga | // | 5.390 | // | // | // | // | // |
| $TbGa_3$ | // | 4.285 | 0/0 | 0/a/2 | 0/a/2 | 1a | 3c |
| $DyGa_3$ | // | 4.271 | // | // | // | // | // |
| $HoGa_3$ | // | 4.226 | // | // | // | // | // |
| $ErGa_3$ | // | 4.210 | // | // | // | // | // |
| $TmGa_3$ | // | 4.202 | // | // | // | // | // |
| $LuGa_3$ | // | 4.160 | // | // | // | // | // |
| UGa_3 | // | 4.247 | // | // | // | // | // |
| $NpGa_3$ | // | 4.254 | // | // | // | // | // |
| Fe_3Ga | // | 3.711 | 0/0 | a/2/0 | a/2/0 | 3c | 1a |
| Ni_3Ga | // | 3.575 | // | // | // | // | // |
| Pt_3Ga | // | 3.832 | // | // | // | // | // |

الجدول /3/



الشكل (2) مسقط الخلية البلورية العنصرية للمركب $TmGa_3$ ومساقط متعدّدات الوجوه التساندية على المستوي xy .

بالاعتماد على المعطيات المرجعية المبينة أعلاه تم تحديد الأعداد التساندية لذرات الغاليوم وشريكه الآخر في التفاعل (A) في المركبات AGa_3 :

$$(C \cdot n)_{Ga} = 12 = (4A + 8Ga)$$

$$(C \cdot n)_A = 12Ga$$

وكذلك في المركبات A_3Ga :

$$(C \cdot n)_{Ga} = 12A$$

$$(C \cdot n)_A = 12 = (4Ga + 8A)$$

كما تم تحديد الأبعاد بين ذرات الغاليوم وشريكه في التفاعل (A) ومقدار التقلص أو الإزدياد فيها كما يظهر في الجدولين /4/ و /5/.

| Comp | $d_{A-Ga} (\text{Å})$ | $r_A + r_{Ga} (\text{Å})$ | Compr % | increas % |
|-------------------|-----------------------|---------------------------|---------|-----------|
| ScGa ₃ | 2.896 | 3.03 | 4.422 | |
| TbGa ₃ | 3.030 | 3.16 | 4.114 | |
| DyGa ₃ | 3.020 | 3.16 | 4.430 | |
| HoGa ₃ | 2.988 | 3.15 | 5.143 | |
| ErGa ₃ | 2.977 | 3.14 | 5.191 | |
| TmGa ₃ | 2.970 | 3.13 | 5.12 | |
| LuGa ₃ | 2.9415 | 3.13 | 6.022 | |
| UGa ₃ | 3.003 | 2.92 | | 2.842 |
| NpGa ₃ | 3.002 | 2.89 | | 3.875 |

الجدول /4/

| Comp | $d_{A-Ga} (\text{Å})$ | $r_A + r_{Ga} (\text{Å})$ | Compr % | increas % |
|------|-----------------------|---------------------------|---------|-----------|
|------|-----------------------|---------------------------|---------|-----------|

| | | | | |
|--------------------|-------|------|-------|--------|
| | | | | |
| La ₃ Ga | 4.002 | 3.26 | | 22.761 |
| Ce ₃ Ga | 3.818 | 3.22 | | 18.57 |
| Pr ₃ Ga | 3.896 | 3.21 | | 21.371 |
| Nd ₃ Ga | 3.840 | 3.21 | | 19.61 |
| Sm ₃ Ga | 3.811 | 3.20 | | 19.094 |
| Fe ₃ Ga | 2.624 | 2.65 | 0.981 | |
| Ni ₃ Ga | 2.527 | 2.63 | 3.916 | |
| Pt ₃ Ga | 2.710 | 2.77 | 2.166 | |

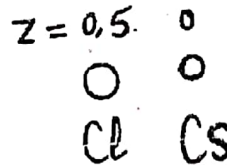
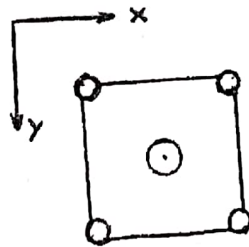
الجدول /5/

2-3- المركبات التي تنتمي إلى النموذج البنيوي CsCl :

يبين الجدول /6/ المركبات التي تنتمي إلى النموذج البنيوي CsCl وخصائصها البلورية [4] في حين يظهر الشكل (3) مسقط الخلية البلورية العنصرية للنموذج البنيوي CsCl على المستوي xy.

| Comp | S.G | a (Å) | Co-ord | | | Site | |
|------|------|-------|-------------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|------|----|
| | | | x _A / x _{Ga} | y _A / y _{Ga} | z _A / z _{Ga} | A | Ga |
| CoGa | Pm3m | 2.865 | a/2/ 0 | a/2/ 0 | a/2/ 0 | 1b | 1a |
| NiGa | // | 2.895 | // | // | // | // | // |
| RuGa | // | 3.010 | // | // | // | // | // |
| RhGa | // | 3.010 | // | // | // | // | // |
| IrGa | // | 3.004 | // | // | // | // | // |

الجدول /6/



الشكل (3) مسقط الخلية البلورية العنصرية للنموذج البنيوي CsCl على المستوي xy.

بالإعتماد على المعطيات المرجعية المبينة أعلاه تم تحديد الأعداد التساندية لذرات الغاليوم وشريكه (A) في المركب بالإضافة للأبعاد الصغرى بين الذرات ومقدار التقلص في هذه الأبعاد (كرة التساند الأولى) كما يظهر في الجدول /7/.

| Comp. | $d_{A-Ga} (\text{Å})$ | $r_A + r_{Ga} (\text{Å})$ | C .n | | Compr % |
|-------|-----------------------|---------------------------|-------------|-------------|---------|
| | | | A | Ga | |
| CoGa | 2.481 | 2.64 | 14(8Ga+6Co) | 14(8Co+6Ga) | 6.021 |
| NiGa | 2.507 | 2.63 | 14(8Ga+6Ni) | 14(8Ni+6Ga) | 4.047 |
| RuGa | 2.607 | 2.73 | 14(8Ga+6Ru) | 14(8Ru+6Ga) | 4.516 |
| RhGa | 2.607 | 2.73 | 14(8Ga+6Rh) | 14(8Rh+6Ga) | 4.516 |
| IrGa | 2.6015 | 2.74 | 14(8Ga+6Ir) | 14(8Ir+6Ga) | 5.055 |

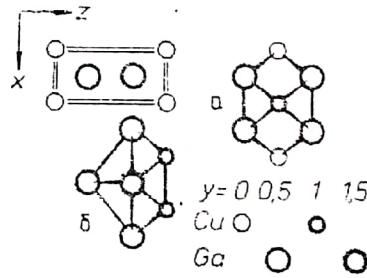
الجدول /7/

2-4- المركبات التي تنتمي إلى النموذج البنيوي $CuGa_2$:

يتبلور وفق النموذج البنيوي $CuGa_2$ المركب $CuGa_2$ فقط، أي أن النموذج البنيوي $CuGa_2$ لم يكتشف قبل في أي مركب آخر. تعطى الخصائص البلورية لهذا المركب بالشكل الآتي [4].

| S.G | $a (\text{Å})$ | $c (\text{Å})$ | Co-ord | Site |
|--------|----------------|----------------|-----------------------------|----------------|
| P4/mmm | 2.830 | 5.839 | Cu(000), Ga(a/2,a/2,0.295c) | Cu(1a), Ga(2g) |

ويبين الشكل (4) مسقط الخلية البلورية العنصرية للمركب $CuGa_2$ ومساقط متعددة الوجوه التساندية لكل من ذرات الغاليوم وذرات النحاس على المستوي xz [4].



الشكل (4) مسقط الخلية البلورية العنصرية للمركب $CuGa_2$ ومساقط متعددة الوجوه التساندية على المستوي xz .

تعطى الأعداد التساندية لكل من ذرات الغاليوم وذرات النحاس حسب [4] وفق ما يلي:

$$(C \cdot n)_{Cu} = 12(8Ga + 4Cu)$$

$$(C \cdot n)_{Ga} = 9(1Ga + 4Cu + 4Ga)$$

بالاعتماد على المعطيات المرجعية المبينة أعلاه تم تحديد الأبعاد بين الذرات ومقدار التقلص أو الازدياد كما هو مبين في الجدول /8/.

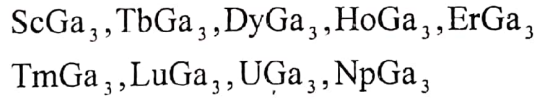
| | $d_{\text{Cu-Ga}} (\text{Å})$ | $d_{\text{Cu-Cu}} (\text{Å})$ | $d_{\text{Ga-Ga}} (\text{Å})$ |
|------------------------|-------------------------------|-------------------------------|-------------------------------|
| exp | 2.640 | 2.830 | 2.390 |
| $r_1 + r_2 (\text{Å})$ | 2.67 | 2.56 | 2.78 |
| Compr % | 1.12 | | 14.03 |
| increas % | | 10.55 | |

الجدول /8/

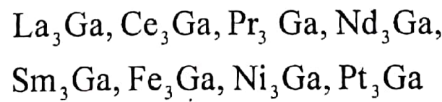
3- المناقشة والاستنتاجات:

إن الأعداد التساندية الكبيرة /12/ لكل من الغاليوم والفضة في المركب $\text{Ag}_3\text{Ga}(\beta)$ والغاليوم والنحاس في المركب $\text{Cu}_3\text{Ga}(\beta')$ بالإضافة إلى تقارب قيمة النسبة c/a في كلا المركبين المدروسين مع القيمة المثالية للتراص الأعظمي للكرات وفق شبكة سداسية والتي تساوي /1.633/ [2] تؤكد على الطبيعة المعدنية للإرتباط بين الفضة والغاليوم في المركب $\text{Ag}_3\text{Ga}(\beta)$ وبين كل من النحاس والغاليوم في المركب $\text{Cu}_3\text{Ga}(\beta')$. إن القيم الصغيرة لمقدار التقلص أو الازدياد في الأبعاد بين الذرات بالمقارنة مع مجموع أنصاف أقطارها لا تتناقض مع هذه النتيجة أيضاً. أنظر الجدول /2/.

يمكن أن نقسم المركبات المتبلورة وفق النموذج البنيوي AuCu_3 إلى مجموعتين هما:
 أ- المركبات AGa_3 وهي:



ب- المركبات A_3Ga وهي :



تعطى الأعداد التساندية لكل من ذرات الغاليوم وذرات A في مركبات المجموعة الأولى بالشكل التالي:

$$(C \cdot n)_{\text{Ga}} = 12 = (4A + 8Ga)$$

$$(C \cdot n)_A = 12Ga$$

تدل الأعداد التساندية الكبيرة (12 على نفس البعد) على الطبيعة المعدنية للإرتباط بين ذرات الغاليوم وذرات شريكه الآخر في المركب (A). إذا ما درسنا متعدد الوجوه التساندي للغاليوم في هذه المركبات (AGa_3) بشيء من التفصيل، فكما يبدو في الشكل (2) فإنه يتألف من مكعب تشغل مركزه ذرة الغاليوم المدروسة بينما تشغل رؤوسه ثماني ذرات غاليوم بالإضافة إلى مربع تشغل رؤوسه أربع ذرات من العنصر (A) بحيث يقع هذا المربع على المستوي المتعامد مع الوجهين الأمامي والخلفي للمكعب ويمر من مركز ثقل المكعب (ذرة الغاليوم المركزية). إن الذرات 4A و 8Ga تقع

على نفس البعد من ذرة الغاليوم المركزية ولدى حساب الأبعاد بين ذرة الغاليوم المركزية والذرات المتساندة معها الجدول /4/ تبين وجود تقلص في البعد A-Ga (في المربع التساندي) يتراوح بين (4.2 - 6.02%) من مجموع نصفي قطري الذرتين Ga و A بإستثناء المركبين UGa_3 و $NpGa_3$ وهذا يدل على اختلاف طبيعة الارتباط ضمن متعدد الوجوه التساندي ذاته ويدل بالتحديد على مساهمة الارتباط المشترك في تشكيل بلورة هذه المركبات (ضمن المربع المذكور).

إن إحلال ذرات العنصر A محل ذرات الغاليوم Ga كما يحصل في مركبات المجموعة الثانية (تركيز A أكبر بثلاث مرات من تركيز Ga) لن يغير من النموذج البنوي لهذه المركبات، إذ تبقى محافظة على النموذج البنوي $AuCu_3$ وتأخذ ذرات الغاليوم وذرات A في هذه المركبات الأعداد التساندية التالية:

$$(C \cdot n)_{Ga} = 12A$$

$$(C \cdot n)_A = 12 = (4Ga + 8A)$$

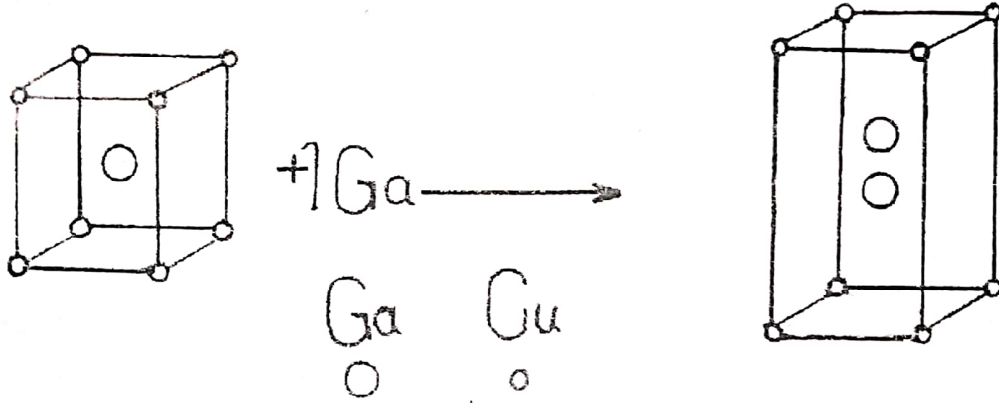
في حين يتم المحافظة على نفس النموذج البنوي في هذه المركبات إلا أن الأبعاد A-Ga تزداد بشكل كبير بالمقارنة مع مجموع نصفي قطري الذرتين Ga و A (18.57% → 22.7%) بإستثناء المركبات $FeGa_3$ ، Ni_3Ga و Pt_3Ga والتي تتقارب الأبعاد فيها من مجموع أنصاف الأقطار الذرية. انظر الجدول /5/ إن الأعداد التساندية الكبيرة والأزدياد الكبير في الأبعاد A-Ga في هذه المجموعة تؤكد على الطبيعة المعدنية للارتباط بين الغاليوم وشريكه A في المركب ومنه نخلص إلى النتيجة التالي:

إن تخفيض تركيز المعدن الأكثر فعالية (A) ثلاث مرات عن طريق زيادة تركيز المعدن الأقل فعالية (Ga) العنصر الذي يميل أكثر لتشكل روابط مشتركة) يؤدي إلى تقلص الأبعاد A-Ga بالمقارنة مع أنصاف أقطارها وبالتالي إلى مساهمة الارتباط المشترك كما هو الحال في مركبات المجموعة الأولى (AGa_3) بإستثناء المركبين UGa_3 و $NpGa_3$ اللذان يسود فيهما الارتباط المعدني وذلك بكون العناصر A في هذين المركبين ينتميان إلى فصيلة أخرى هي اللاكتينيدات، في حين يؤدي تخفيض تركيز الغاليوم (العنصر الأقل فعالية) ثلاث مرات عن طريق زيادة تركيز المعدن الأكثر فعالية (A) إلى ازدياد الأبعاد A-Ga بالمقارنة مع أنصاف أقطار الذرات Ga و A بشكل كبير وبالتالي يؤدي إلى الطبيعة المعدنية للارتباط ضمن هذه البلورات، ويستثنى من هذه المركبات $FeGa_3$ ، Ni_3Ga و Pt_3Ga وذلك لكون العناصر A تنتمي إلى مجموعة أخرى هي المجموعة VIII B علماً من أن الأعداد التساندية الكبيرة والتقلص البسيط في الأبعاد A-Ga بالمقارنة مع أنصاف أقطار الذرات A و Ga يدلان على الطبيعة المعدنية للارتباط في هذه المركبات الثلاث أيضاً.

تساند كل من ذرات الغاليوم وذرات شريكه (A) في المركب في المركبات التي تتبلور وفق النموذج البنوي CsCl مع ثماني ذرات للشريك تقع على رؤوس مكعب وتبعد $\frac{\sqrt{3}}{2}a$ وتشكل كرة التساند الأولى ويضاف أيضاً ست ذرات من نفس العنصر تقع على رؤوس ثماني الوجوه وعلى بعد a وتشكل كرة التساند الثانية كما هو مبين في الجدول /7/. إن الأعداد التساندية الكبيرة لهذه المركبات بالرغم من التقلص الملحوظ في الأبعاد بين الذرات الجدول /7/ تدل على الطبيعة المعدنية للارتباط بين الغاليوم والكوبالت والنيكل والروتينيوم والروديوم والايридиوم. تتبادل الذرات الواقعة في كرة التساند الأولى والذرات الواقعة في كرة التساند الثانية التأثير فيما بينها [6] وبالفعل فإن كل ذرة من كرة التساند الثانية في هذه المركبات تقع في مركز مكعب تشكل رؤوسه ثماني ذرات لشريك التفاعل يكافئ تماماً المكعب التساندي (كرة التساند الأولى) للذرة المركزية الأولى وبالتالي يتعد علينا عزل ذرات كرة التساند الأولى عن ذرات كرة التساند الثانية في هذه المركبات، لذا لا شك في أن هذه الذرات تتبادل التأثير مع بعضها البعض الأمر الذي يؤدي إلى التقلص

في حجم الخلية البلورية العنصرية أو في اتساعها وذلك تبعاً للطبيعة الخاصة لمنحني التأثير المتبادل بين الذرات. لذا نستطيع أن نعزي التقلص في الأبعاد بين الذرات في هذه البلورات إلى التأثير المتبادل بين الذرات الواقعة في كرات التساند المتجاورة.

يتألف متعدد الوجوه التساندي للجاليوم في المركب CuGa_2 من كرتي تساند، الأولى عبارة عن هرم رباعي الوجوه مشوه يتألف من $(4\text{Cu}+1\text{Ga})$ انظر الشكل (4) في حين تتألف كرة التساند الثانية من أربع ذرات جاليوم تتوزع على رؤوس مربع تقع على بعد a من الذرة المركزية. إن البنية البلورية للمركب CuGa_2 يمكن أن تتشكل وفق المخطط المبين في الشكل (5).



الشكل (5): مخطط تشكل المركب CuGa_2 .

إذ أن إدخال ذرة جاليوم ثانية إلى خلية بلورية مكعبية أدى إلى تشكيل خلية بلورية رباعية وإذا ما أخذنا بعين الاعتبار التقلص الكبير في البعد Ga-Ga في الخلية الناتجة، أي في البنية البلورية للمركب CuGa_2 والتي تساوي /14.03% بالنسبة لمجموع نصفي قطري ذرتي الجاليوم وكذلك التقلص البسيط جداً في البعد Cu-Ga يدل على عدم استقلال كل من ذرتي الجاليوم عن بعضهما البعض (تداخل كبير للغمامات الالكترونية التكافؤية لذرات الجاليوم يؤدي إلى مساهمة كبيرة للرابطة المشتركة بين Ga و Ga).

إذاً تتشارك ذرتا الجاليوم في تشكيل متعدد وجوه تساندي وحيد، حيث تتساند كل من ذرتي الجاليوم مع أربع ذرات نحاس أخرى تتوزع على رؤوس متوازي مستطيلات قائم (الخلية البلورية العنصرية للمركب CuGa_2) يمكن بتكراره في الفراغ في الاتجاهات الثلاث ملئ الفراغ بشكل كامل أي تشكيل البلورة من متعدد وجوه تساندي واحد.

وبمعنى آخر فإن متعدد الوجوه التساندي لذرات الجاليوم المحددة وفق [4] والذي يجمع الذرات الأقرب إلى ذرة الجاليوم المدروسة $(1\text{Ga} + 4\text{Cu} + 4\text{Ga})$ لن يحصر لنا الذرات التي يؤدي التأثير المتبادل فيما بينها إلى تحقيق القيمة الصغرى للطاقة الكامنة لهذه الجملة (أي تشكيل المركب CuGa_2) بل أن الجملة التي يؤدي التأثير المتبادل بين ذراتها إلى تحقيق القيمة الصغرى للطاقة الكامنة هي $(4\text{Cu}) \text{Ga Ga} (4\text{Cu})$.

نخلص مما سبق إلى النتيجتين الهامتين التاليتين:

- عدم تجانس الارتباط ضمن متعدد الوجوه التساندي الواحد ، كما هو الحال في المركبات التي تنتمي إلى النماذج البنيوية AuCu_3 و CuGa_2 .

- لا يتحدد الارتباط (التأثير المتبادل بين الذرات) في بلورات هذه المركبات بالضرورة بالذرات الأقرب للذرة المدروسة (متعدد الوجوه التساندي) فقط، بل قد يتعدى حدود هذه الوحدة الهندسية كما هو الحال في المركب CuGa_2 .

المراجع:

.....

- [1] - P. G. Levshetse, Metallography, MOSCOW, 1970, P-227.
- [2] - T. Penkalea, Crystallochemistry, Trans from Poland, Leningrad 1974, P-466, P-84.
- [3] - V. C. Yrycof, The theoretical crystallochemistry, Moscow University Pub, 1987, P-89.
- [4] - U. N. Green, P. E. Gladeshevsky,, Galledy - Moscow, Metalogy Pub, 1992, P-23, P-24, P-66, P-104.
- [5] - G. P. Pokee, The crystallochemistry, Moscow, 1971, P-119, P-285.
- [6] - Twelfth European Crystallographic Meeting, Collected Abstracts, Vol. 1 Moscow, USSR, August 20-29, 1989, P-15.