

کریستالوگرافی متالورژی

مدرس:

مهدی عزیزیه

مقدمه

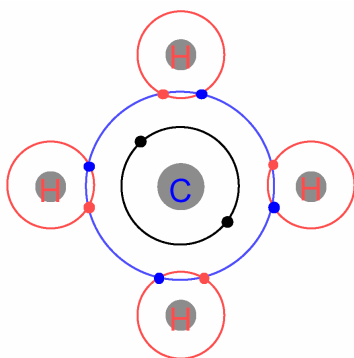
کریستالوگرافی یعنی علم شناخت شبکه های مواد. این درس برای دانشجویان مهندسی متالورژی از این جهت حائز اهمیت است که هرگونه خواص فیزیکی و مکانیکی و یا حتی خواص الکتریکی، مغناطیسی و نوری مواد به ساختار کریستالی مواد وابسته است.

متأسفانه درس به علت نوع و ماهیت خود، با توجه به کتابهای پیچیده ای که دارد، در صورت عدم ایجاد درک درست، در اکثر دانشجویان مشکلاتی ایجاد می کند که تا پایان تحصیلات گریبان گیر آن ها می گردد. همچنین به دلیل وجود کتابهای مختلف و پیچیده که به خصوص از اساتید فیزیک دانشگاه ها وجود دارد و در بسیاری از مواد دارای مطالب مختلف غیر لازم برای متالورژیست ها است، نیاز به نوشتن کتابهایی که نیاز دانشجویان متالورژی را به صورت کامل مرتفع کند ضروری به نظر می رسد. در این مجال سعی شده است که با ساده سازی مطالب، به صورتی مفصل مطالب مربوطه آورده شود. در اینجا لازم است از کمک و مساعدت آقایان مازیار سرخ دینی و محمد علی حیدری نبی تشکر و قدردانی گردد.

پیوندهای اتمی و انواع آنها :

مواد گوناگون با توجه به نوع عناصر تشکیل دهنده چهارنوع پیوند می توانند داشته باشند:

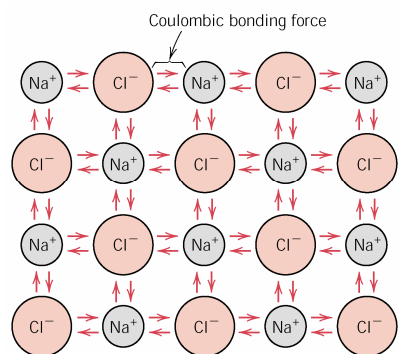
۱- پیوند کووالانسی: در صورتی که دو عنصر تشکیل دهنده پیوند دارای جای خالی الکترون در لایه آخر خود باشند این دو اتم می توانند با به اشتراک گذاشتن الکترونها خود لایه آخر خود را کامل کند. در این حالت اتمهایی مانند O با این پیوند تولید O_2 می نمایند. در اکثر موادی که با این پیوند به وجود آمده اند، استحکام پیوند بسیار قوی تر از بقیه انواع پیوندهاست. در شکل ۱ شمایی از این نوع پیوند در گاز متان دیده می شود که کربن برای پر ظرفیت خالی الکترونی خود با چهار اتم هیدروژن پیوند برقرار می کند.



شکل ۱- شمایی از پیوند کووالانسی در متان

۲- پیوند یونی: در این پیوند عنصری مانند کلر که دارای یک جای خالی الکتریکی در لایه والانس خود است، الکترونی را از عنصری مانند سدیم که یک الکترون تنها در لایه آخر خود دارد، دریافت می کند. این انتقال به صورت کامل باعث ایجاد پیوند یونی بین عنصر کلر و سدیم می گردد.

در این حالت یک پیوند بین اتمها برقرار می شود که مثل پیوند کووالانسی یک پیوند قوی است. به دلیل همین پیوندهای قوی در مواد یونی و کووالانسی است که انعطاف پذیری کمی در مواد جامدی که دارای این پیوندها هستند، وجود دارد.



شکل ۲- شمایی از پیوند یونی در نمک طعام

در شکل ۲ می بینید که با رفتن الکترون از لایه آخر اتم سدیم به لایه آخر اتم کلر کاتیون سدیم و آنیون کلر تشکیل شده است. در این حالت جاذبه بسیار قوی در بین این دو کاتیون و آنیون ایجاد شده و نمک طعام NaCl تولید می شود. در این حالت ماده بدست آمده دارای خواص کاملا متفاوتی نسبت به مواد تشکیل دهنده دارد.

بین کاتیون ها و آنیونها جاذبه ای وجود دارد که به نام پیوند کولومی نامگذاری می شود. میزان این جاذبه با میزان فاصله اتمها نسبت به هم رابطه داشته و به صورت زیر می باشد:

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

همچنین بین هسته های مثبت این کاتیونها و آنیونها و بین الکترون های زیر لایه ظرفیت این دو دافعه ای با هم وجود دارد. میزان این دافعه به صورت زیر است:

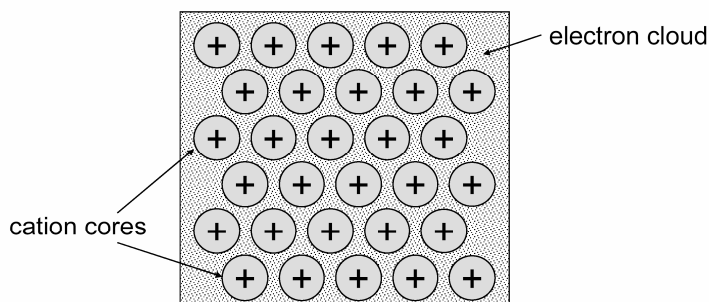
$$E_R = \frac{B}{r^8}$$

در روابط بالا A و B اعداد ثابت مربوط به هر ماده و r فاصله مرکز کاتیون ها و آنیونها از هم می باشد.

همانطور که در مورد نمک طعام هم دیده شد در پیوند یونی یک جزء فلزی با یک جزء غیرفلزی پیوند برقرار می کند. مهمترین موادی که پیوند یونی دارند سرامیک ها هستند که با توجه به قدرت بالای پیوند یونی انعطاف پذیری کمی در دمای محیط دارند. انرژی پیوند یونی بین ۶۰۰ تا ۱۵۰۰ کیلو ژول بر مول است که مقدار بسیار بالایی است. علاوه بر عدم انعطاف پذیری این مواد به دلیل انرژی بالای پیوند، دمای ذوب آنها نیز به همین دلیل بسیار بالاست. همچنین مواد یونی به دلیل نداشتن الکترون آزاد از نظر الکتریکی و حرارتی عایق اند.

۳- پیوند فلزی: در صورتی که تعداد مکانهای خالی الکترونی لایه آخر اتمها بالا باشد، چندین اتم برای پر کردن لایه آخر خود، الکترونها را با آن اتمهای دیگر به اشتراک می گذارند. طبیعی است که این پیوند با توجه به ماهیت اشتراکی خود مانند حالت کووالانسی است. اما با توجه به زیاد بودن اتمهای مشترک با یک اتم، پیوند اتمی ضعیفتر از پیوند کووالانسی است. همانطور که در شکل ۳ دیده می شود در پیوند فلزی بر خلاف پیوند کووالانسی که مکان قرار گیری الکترونها اشتراکی مشخص است، الکترونها اشتراکی دارای مکان مشخص نبوده و کاتیونها در میان دریایی از الکترونها آزاد قرار می گیرند. این حالت به این دلیل است که در پیوند کووالانسی تعداد ظرفیت خالی الکترونی در لایه آخر پایین می باشد. اما در مورد فلزات تعداد ظرفیت

خالی بسیار بیشتر است. در حالت یک اتم فلزی برای پر کردن ظرفیت خالی خود علاوه بر اشتراک گذاردن درصدی از الکترون های خود با اتمهایی که با آنها تماس نزدیک (اتمهای همسایه رده اول) دارند، درصدی از الکترونهای اتمهایی که با اتمهای همسایه رده اول تماس دارند (اتمهای همسایه رده دوم) را به اشتراک می گیرد. در این حالت احتمال وجود الکترون لایه ظرفیت هر اتم در هر کجای ماده وجود دارد و الکترون حالت شناور دارد. این شناور بودن است که موجب رسانایی الکتریکی و حرارتی فلزات می شود.



شکل ۳- شمایی از پیوند فلزی

برای فهم ضعیف تر بودن این پیوند نسبت به حالت کوالانسی می توان این گونه فرض کرد که با ثابت بودن انرژی پیوند در هر دو حالت کوالانسی و فلزی به دلیل اینکه اتم در پیوند فلزی پیوند خود را یا تعداد زیادی (مثلاً ۱۲ اتم) به اشتراک می گذارد، انرژی هر پیوند نسبت به حالتی که اتم فقط با یک اتم پیوند دارد (مانند حالت

کوالانسی) کمتر است. به اتمهایی که در یک فلز با یک اتم مشخص پیوند برقرار می کنند و در نتیجه در کنار آن اتم قرار می گیرند، اتمهای همسایه گفته و به تعداد این اتمها عدد همسایگی اطلاق می شود.

همانطور که گفته شد، در این نوع پیوند، اتم حتی با اتمهایی که در اطراف اتمهای اشتراکی قرار دارند (یعنی لایه دوم) هم پیوند برقرار می کند که پیوند رده دوم نامیده می شود و به این اتمها، اتمهای همسایه رده دوم می گویند.

۴- پیوند واندروالسی: این نوع پیوند ضعیف ترین پیوند در مواد است که به دلیل قطبیت لحظه ای اتمها و ایجاد جاذبه بین اتمها ایجاد می شود.

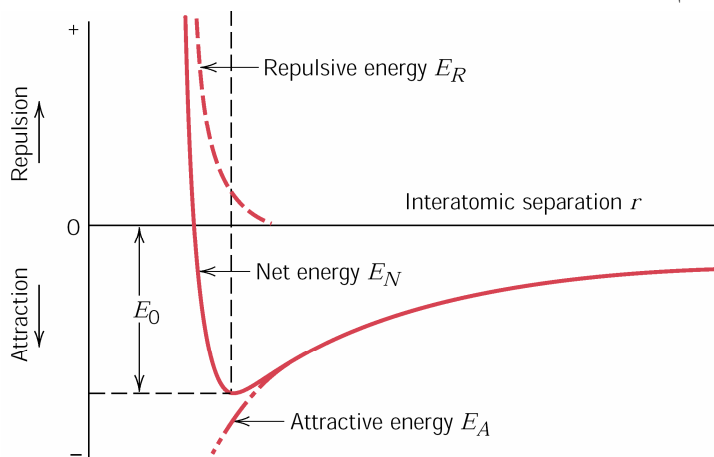
انرژی پیوند

بدون توجه به نوع پیوند، در هر پیوند اتمی، دو اتم در فاصله تعادلی از هم قرار می گیرند، که در این حالت نیروهای جاذبه بین الکترونهای هر اتم با هسته اتم دیگر و نیروهای دافعه هسته ها و الکترونها، به صورت تعادلی درآید.

در اکثر حالات مقدار شعاع اتمی r_0 مساوی با نصف فاصله دو هسته اتم است. اما این حالت همیشگی نیست. با توجه به اینکه در اثر پیوند به چه مقدار انرژی سیستم کاهش می یابد، خواص فیزیکی و مکانیکی ماده تغییر می کند.

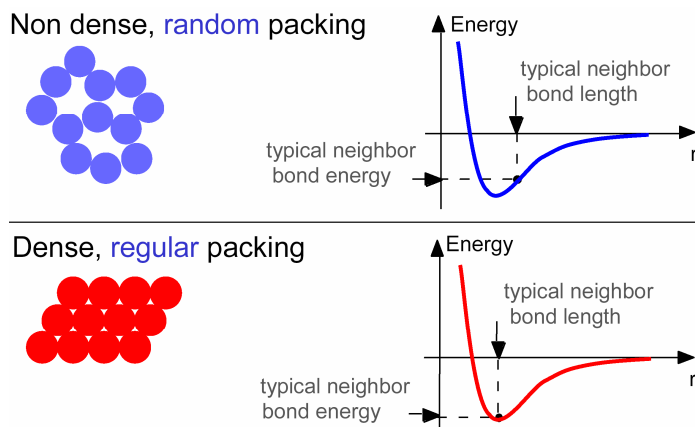
اگر دو اتم از فاصله بینهایت بهم نزدیک شوند دو نیروی جاذبه و دافعه همانطور که گفته شد، از طرف این دو اتم به هم اعمال می شوند. این حالت در شکل ۴ دیده می شود. همانطور که در شکل دیده می شود، تا فواصل خیلی نزدیک نیروی دافعه ای

بین دو وجود ندارد اما با رسیدن دو اتم به یک فاصله مشخص نیروی دافعه به میزان بسیار زیادی ایجاد می شود. اما نیروی جاذبه بین دو اتم در همه فواصل وجود دارد. اگر برای یافتن نیروهای اعمالی روی اتم این دو نیروی جاذبه و دافعه را با هم جمع کنیم به منحنی سومی می رسیم که در شکل ۴ دیده می شود.



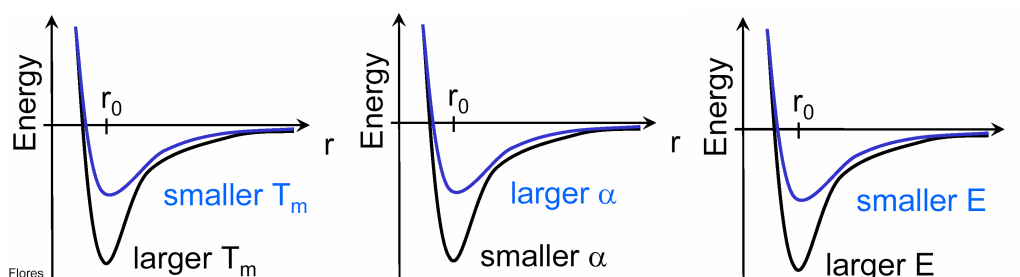
شکل ۴- شمایی از نیروی دافعه و جاذبه بین دو اتم. جمع نیروی های بین دو اتم به صورت خط پر نمایش داده شده است.

این منحنی سوم مانند یک گودی است که اگر توپی در هر طرف این گودی قرار دهیم، توپ تمایل دارد به سمت پایین این گودی حرکت کرده و انرژی پتانسیل خود را کاهش دهد. حالت انرژی دو اتم هم به همین شکل می باشد. دو اتم سعی می کنند در فاصله ای نسبت به هم قرار گیرند که دارای انرژی مینیمم شوند. یعنی فاصله بین دو اتم به اندازه r_0 می باشند. با قرار گیری این دو اتم در این فاصله انرژی دو اتم به اندازه E_0 کاهش می یابد. به همین دلیل است که اتمهای مواد سعی می کنند در فواصل مشخص در کنار هم قرار گرفته و علاوه بر ایجاد نظم دوربرد در ماده، حالتی با چگالی بالاتر ایجاد کند. این حالت در شکل ۵ دیده می شود.



شکل ۵- تمایل ایجاد نظم در مواد برای رسیدن به حالت با انرژی درونی کمتر

با توجه به میزان کاهش انرژی E_0 در هنگام ایجاد پیوند خصوصیات فیزیکی و مکانیکی ماده تعیین می شود. ماده ای که در آن کاهش انرژی بیشتر می باشد دارای دمای ذوب بالاتری می باشد. همچنین ماده ای که E_0 بالاتری دارد به دلیل پایدارتر بودن دارای ارتعاشات کمتر اتمی است و در نتیجه ضریب انبساط حرارت کمتری خواهد داشت. همچنین به دلیل افزایش قدرت پیوند با بالا رفتن E_0 میزان مدول الاستیک ماده بالا می رود. این سه مطلب در شکل ۶ دیده می شود.



شکل ۶- بالا رفتن دمای ذوب و مدول الاستیک و کاهش ضریب انبساط حرارتی با بالا رفتن انرژی پیوند

انرژی پیوند و دمای ذوب را برای مواد مختلف که دارای پیوندهای متفاوت هستند در جدول ۱ دیده می شود.

جدول ۱- دمای ذوب و انرژی پیوند در مواد با پیوندهای مختلف

Bonding Type	Substance	Bonding Energy		Melting Temperature (°C)
		kJ/mol (kcal/mol)	eV/Atom, Ion, Molecule	
Ionic	NaCl	640 (153)	3.3	801
	MgO	1000 (239)	5.2	2800
Covalent	Si	450 (108)	4.7	1410
	C (diamond)	713 (170)	7.4	>3550
Metallic	Hg	68 (16)	0.7	-39
	Al	324 (77)	3.4	660
	Fe	406 (97)	4.2	1538
	W	849 (203)	8.8	3410
van der Waals	Ar	7.7 (1.8)	0.08	-189
	Cl ₂	31 (7.4)	0.32	-101

سوال: با توجه به روابط داده شده در مورد نیروی جاذبه و دافعه پیوند یونی میزان شعاع r_0 و نیروی E_0 را محاسبه کنید.

تاریخچه کریستالوگرافی

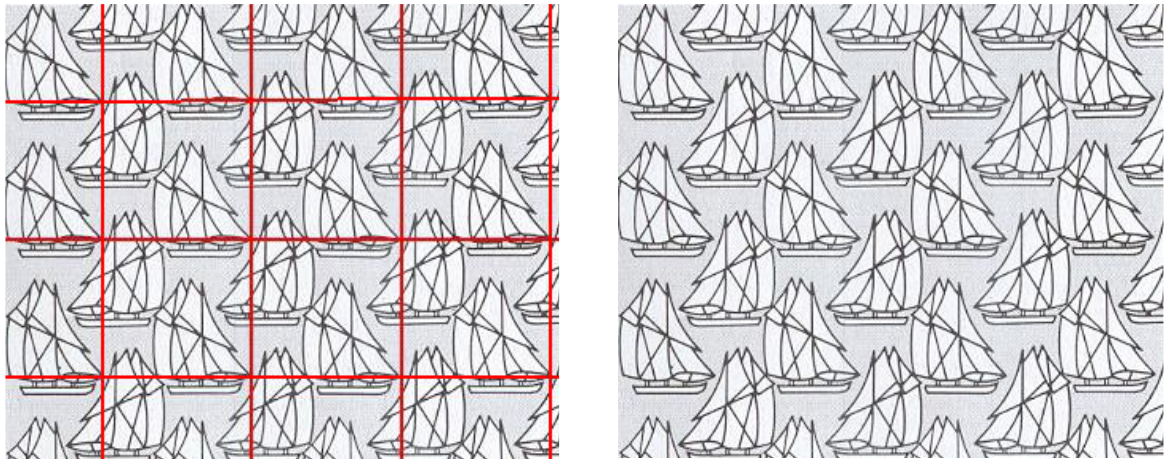
اکثر کانی‌های شناخته شده دارای اشکال منظم با سطوح صاف و گوشه‌های تیز هستند. این حالت حتی در تکه‌های نمک طعام و یا نبات قابل مشاهده است. در این مواد صفحات شکست کاملاً صاف و در جهتی خاص هستند. اگر در زیر میکروسکوپ هم به دانه‌های برف نگاه کنید، ساختاری شش گوشه می‌بینید که دارای نظم بسیار زیبایی است.



در قرن ۱۸ دانشمندان وجود آجرهایی منظم که به صورت سلولهایی واحد با قرار گرفتن کنارهم، یک نظم گسترده را ایجاد میکنند را پیشنهاد دادند. به این آجرها سلول واحد یا Unite Cell می‌گویند. این سلولهای واحد علاوه بر ساده بودن طرح، دارا بودن تقارن و دارا بودن ثابتهای طول، عرض و ارتفاع مشخص، دارای حالتی هستند که با کنار هم قرار گرفتن خود بدون ایجاد جای خالی، یک سطح یا حجم را پر کنند. ما برای سادگی ابتدا به سلولهای واحد در دو بعد می‌پردازیم.

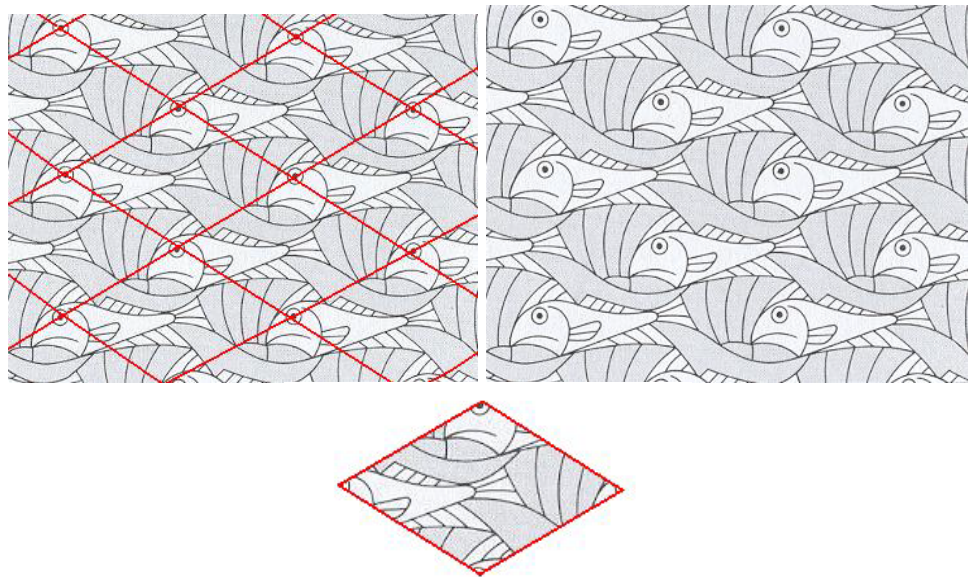
سلولهای واحد دو بعدی

فرض کنید قصد داریم دیواری را با طرح زیر ایجاد کنیم. در ابتدا نیاز داریم کاشیهایی را طراحی کنیم که با قرارگرفتن در کنار هم، همه دیوار پوشیده شده و طرح مورد نظر به صورت یکسان در تمام دیوار ایجاد شود.



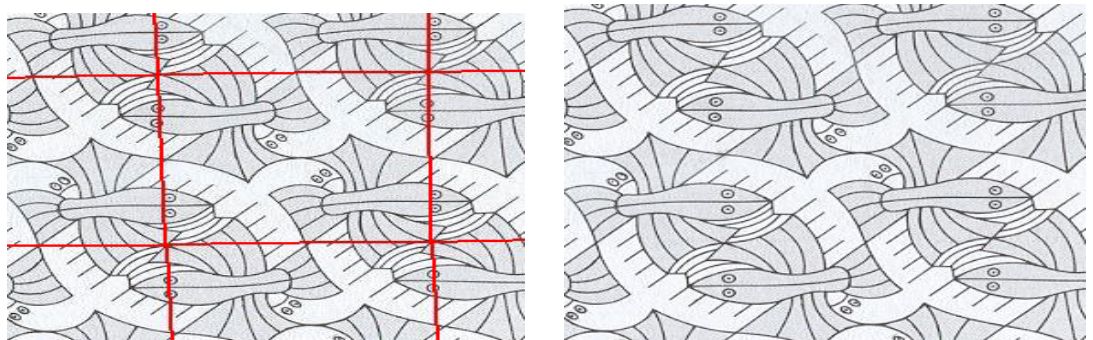
شکل ۱- کاشی کردن یک دیوار با طرح مشخص. در پایی شکل کاشی طراحی شده را مشاهده می کنیم.

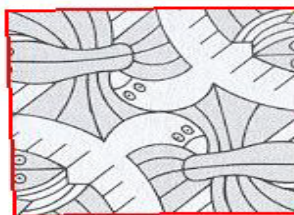
در شکل بالا کاشی طراحی شده برای پوشاندن دیوار، به صورت مربعی شکل می باشد. در کریستالوگرافی به هر کدام از این واحدهای تشکیل دهنده، سلول واحد Unite Cell گویند. سلول واحد کوچکترین واحدی است که با کنار هم قرار دادن این واحدها بتوان به اشکال مورد نظر رسید. در شکل بالا سلول واحد به صورت مربعی است.



شکل ۲- پوشاندن یک دیوار با کاشیهایی با طرح ماهی

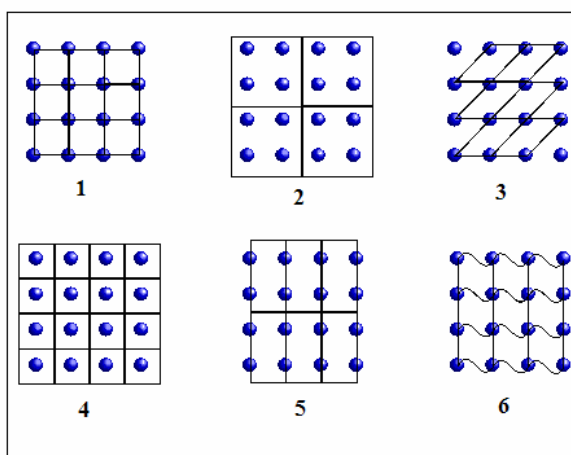
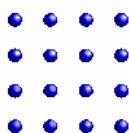
همانطور که در شکل بالا می بینیم، در نظر گرفتن کاشی مربعی نمی تواند کارساز باشد. برای ایجاد طرح مورد نظر باید کاشی را به صورت لوزی در نظر گرفت. در کریستالوگرافی به این سلول واحد مورب گویند. در شکل ۳ نیز کاشی کردن یک دیوار با طرح کبوتر دیده می شود. در این شکل سلول واحد در نظر گرفته شده به صورت مستطیلی است.





شکل ۳ - پوشاندن یک دیوار با کاشیهایی با طرح کبوتر

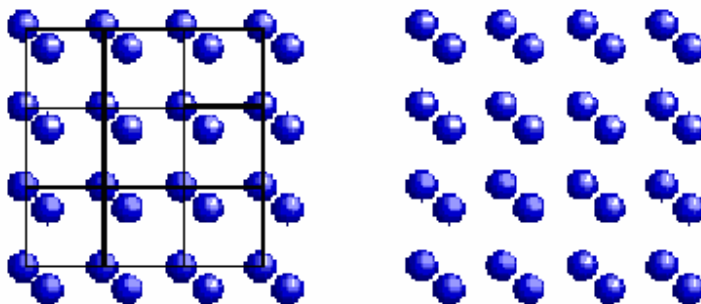
حال به سراغ شبکه های اتمی مواد می رویم. فرض کنید اتمهایی داریم که به صورت شکل ۴ کنار هم قرار گرفته اند. برای انتخاب واحدهایی که با کنار هم قرار دادن آنها بتوان به شکل مورد نظر رسید، چگونه باید عمل کرد؟ در شکل ۴ شش حالت برای سلول واحدی که بتوان برای طرح نشان داده شده در نظر گرفت آورده شده است.



شکل ۴ - سلولهای واحد در نظر گرفته شده برای یک ساختار مشخص

همانطور که گفته شد مهمترین مشخصه سلول واحد این است که کوچکترین واحد قابل تصور برای ایجاد طرح باشد. مشخصه دیگر سلول واحد سادگی طرح و نشان دادن تقارن موجود در طرح می باشد. با توجه به این موارد از میان سلولهای واحد شکل ۴ تنها دو طرح اول و چهارم را می توان انتخاب نمود و بقیه طرحها را نمی توان به عنوان کوچکترین واحد تشکیل دهنده شکل انتخاب کرد. هر کدام از دو طرح اول و چهارم را می توان به عنوان سلول واحد در نظر گرفت. اما در طرح اول به این دلیل که محل قرار گیری اتمها روی رئوس مربع است بهتر به نظر می رسد. به این مکانها که در سلول واحد محل قرار گیری اتم یا اتمها را مشخص می کند، مکانهای شبکه ای یا Lattice Points گویند. به سلول واحد شکل ۴ سلول واحد مربعی می گویند.

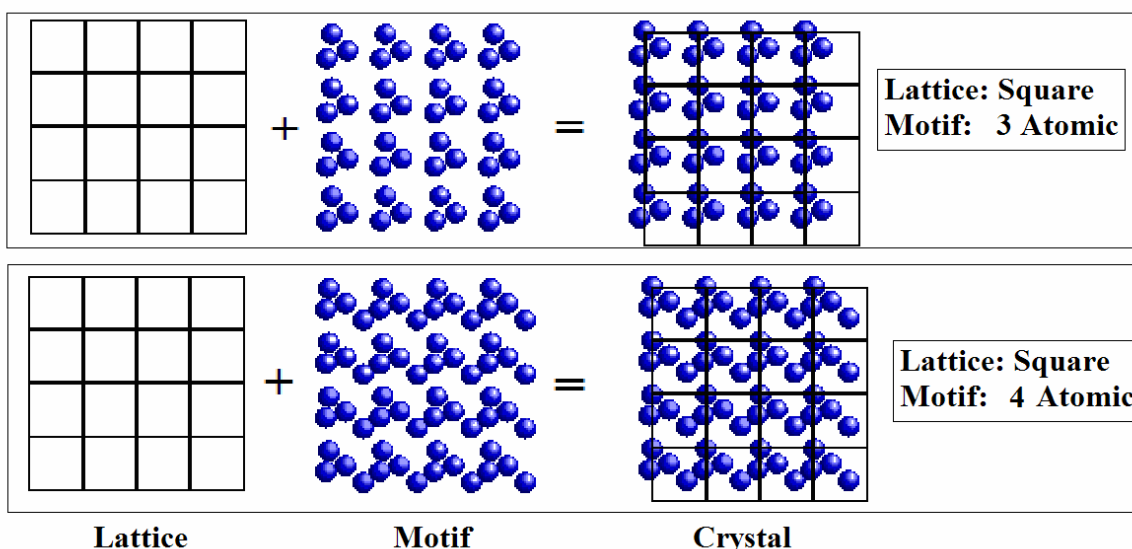
حال اگر بخواهیم برای شکل زیر یک سلول واحد در نظر بگیریم، چگونه باید عمل کنیم؟



شکل ۵- سلول واحد مربعی با یک مولکول دو اتمی در مکان شبکه ای

تنها تفاوت شکل ۵ با شکلی قبلی در این مورد است که در مکان شبکه ای به جای قرار گرفتن یک اتم، یک مولکول دو اتمی قرار گرفته است. به اتم یا مولکولهایی که در مکان شبکه ای قرار می گیرند، موتیف Motif گویند. قرار گیری موتیفها در مکانهای شبکه ای است که موجب تولید یک شبکه می شود. برای مثال اگر یک کارتن تخم مرغ را در نظر بگیرید شانه های تخم مرغ مکان شبکه ای را تشکیل داده و تخم مرغها موتیف هستند. از قرار گیری این تخم مرغها در مکانهای شبکه ای است که یک کارتن تخم مرغ ساخته می شود.

در شکل ۵ همانند شکل قبلی مکان شبکه ای سلول واحد مربعی است اما موتیف بر خلاف شکل ۴ که تک اتمی بود، در شکل ۵ دو اتمی است. در شکل ۶ مکان شبکه ای سلول واحد مربعی با موتیفهای سه اتمی و چهار اتمی دیده می شود.



شکل ۶- موتیفهای سه اتمی و چهار اتمی در مکانهای اتمی مربعی

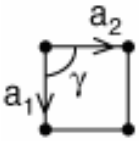
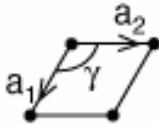
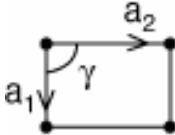
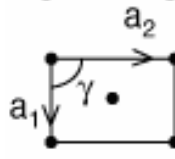
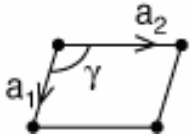
برای فهم بیشتر مفهوم مکان شبکه ای و موتیف می توان به نظم قرارگیری دانشجویان در یک کلاس توجه کرد. مکانهای شبکه ای مانند صندلی های یک کلاس هستند که به صورت منظم چیده شده اند.

روی این صندلیها می تواند یک دانشجو بنشیند. اما حالتی وجود دارد که چند دانشجو که اهمیتی به سلامت صندلی و هزینه صرف شده برای آن نمی دهند، از یک صندلی استفاده کنند. به طوری که یک نفر روی صندلی بنشیند، یک نفر روی دسته صندلی و یک نفر دیگر مثلاً روی پشتی صندلی. اگر تمام صندلی های خالی توسط این حالت نشستن سه تایی پر شوند، باز هم همان نظم طولانی را در کل کلاس داریم. بدیهی است که اگر یک اتم بنشیند موتیف یک اتمی است و اگر n اتم بنشیند، موتیف n اتمی است. برای مثال اگر دانشجویان یک کلاس صندلی های چیده شده در یک کلاس را که اکثراً دارای نقاط شبکه ای مستطیلی هستند را پر کنند به صورتی که هر دانشجو روی یک صندلی بنشیند، نقاط شبکه ای $Lattice Point$ از نوع مستطیلی و موتیف ما یک دانشجویی است. در حالتی که سه دانشجو بر روی یک صندلی قرار گیرند، به طوری که در روی تمام صندلی ها قرار گیری دانشجویان مشابه باشد نوع شبکه مستطیلی و نوع موتیف سه دانشجویی است.

به طور کلی جهت کریستالوگرافی و شبکه های دو بعدی و سه بعدی، فرضیاتی است که دانشمندان برای شناخت نظم موجود در مواد پیشنهاد کردند. فرض کنید شما بخواهید یک سطح را کف پوش کنید، به طوری که اجزاء یا موزائیک های مورد استفاده به طور منظم در کنار هم قرار گیرند و نیاز به چرخش اشکال برای پیدا کردن فضاهای سطح مورد نظر نباشد. در این حالت سه حالت کلی مربع، مستطیل و متوازی الاضلاع می توان با کنار هم قرار گرفتن و بدون چرخش تولید یک سطح بدون حفره بکند. اشکال دیگر، مانند مثلث پنج ضلعی و n ضلعی های دیگر بجز شش ضلعی، نمی تواند نیاز ما را برآورده سازند. اگر دقت شود شش ضلعی از سه متوازی الاضلاع تشکیل شده است که باز هم یکی از سه حالات بالا را دارد.

توضیح داده شده در بالا برای کف پوش کردن سطح خیلی سطحی است. چون در مواد، با اتمها و یا مولکولهایی سرو کار داریم که باید با قرار دادن آنها به صورت کامل یا جزئی در یک سلول واحد و تکرار سلول واحد به طرح نهایی که خداوند برای آن ماده ایجاد کرده برسیم. یعنی ایجاد یک الگوی علمی برای فهمیدن نظمی که خداوند در مواد قرار داده است.

در دو بعد علاوه بر سه حالت گفته شده و حالت شش ضلعی، یک حالت دیگر هم مطرح می شود، در شکل ۷ این پنج حالت دیده می شود.

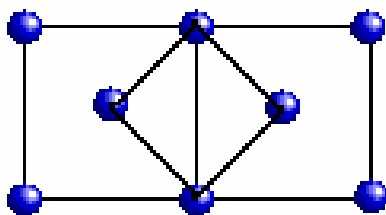
	square	$a_1 = a_2$	$\gamma = 90^\circ$
	hexagonal	$a_1 = a_2$	$\gamma = 120^\circ$
	rectangular	$a_1 \neq a_2$	$\gamma = 90^\circ$
	centered rectangular	$a_1 \neq a_2$	$\gamma = 90^\circ$
	oblique	$a_1 \neq a_2$	$\gamma \neq 90^\circ, 120^\circ$

شکل ۷- سلولهای واحد دوبعدی

توجه داشته باشید که همه سلولهای واحد به صورت چهار وجهی هستند. همانطور که در شکل ۷ مشاهده می شود، در حالت هگزاگونال و مستطیلی مرکزدار، با اینکه از نوع متوازی الاضلاع اند، اما به صورت دو حالت مستقل مطرح می شوند. دلیل جدا مطرح کردن این سلولهای واحد به دلیل مشخص کردن تقارن ها در شکل سلولهای واحد این حالات می باشد. با داشتن هر کدام از این سلولهای واحد و از کنار هم قرار دادن این اشکال می توان قرارگیری آنها را تا بینهایت تعریف شود و نظم آنها را پیشبینی نمود. این پنج حالت، ماکزیمم حالاتی است که سلول واحد می تواند در دو بعد داشته باشد. اما چرا اینگونه است.

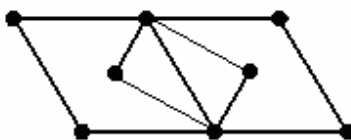
سوال: آیا نمی توان مربع مرکزدار داشت و یا هگزاگونال مرکزدار؟

مربع مرکزدار نمی تواند یک سلول واحد جدید باشد. چون از کنار هم قرار دادن دو مربع مرکز دار در کنار هم یک سلول واحد مربعی کوچکتر می توان به دست آورد. پس دیگر سلول واحد مربعی مرکزدار نیست بلکه مربعی ساده است.



شکل ۸- عدم امکان داشتن سلول واحد مربعی مرکزدار به دلیل امکان تجزیه به سلول واحد مربعی

همچنین همانطور که در شکل ۹ دیده می شود از یک سلول واحد هگزاگونال مرکز دار امکان تجزیه به سلول واحد مستطیلی وجود دارد که از سلول واحد هگزاگونال کوچکتر است.



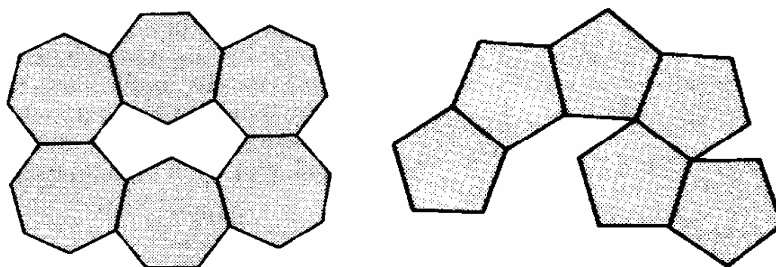
شکل ۹- عدم امکان داشتن سلول واحد هگزاگونال مرکزدار به دلیل امکان تجزیه به سلول واحد مستطیلی

اما چرا می توان سلول واحد مستطیلی مرکزدار داشت. با توجه به شکل ۱۰ از یک سلول واحد مستطیلی مرکز دار می توان یک سلول مورب (متوازی الاضلاع) بدست آورد. اما این سلول واحد نه از سلول مستطیلی مرکزدار کوچکتر است و نه نشان دهنده تقارن موجود در سلول واحد مستطیلی مرکزدار می باشد.



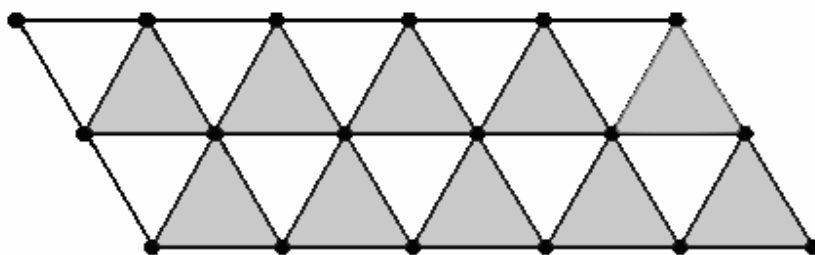
شکل ۱۰- امکان پذیر نبودن تبدیل سلول واحد مستطیلی مرکزدار به مورب

علاوه بر این علاوه بر این پنج سلول واحد دو بعدی که همگی چهار ضلعی هستند، چند ضلعی دیگری امکان داشتن شرایط سلول واحد را نخواهد داشت. برای مثال نمی توان سلول واحد پنج ضلعی داشت. با توجه به شکل زیر نمی توان با پنج ضلعی و یا هر n ضلعی به جز چهار و شش ضلعی منظم، یک سطح را پر نمود و مکانهایی به صورت خالی باقی می ماند.



شکل ۱۱- عدم امکان داشتن سلول واحد پنج ضلعی

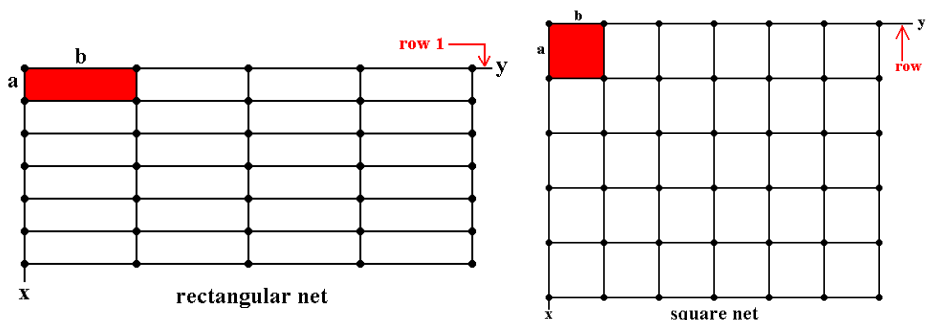
و یا مثلث را نمی توان یک سلول واحد در نظر گرفت. با اینکه با مثلث می توان یک سطح را به طور کامل پر نمود اما با توجه که امکان چرخش سلول واحد در هنگام چیدن وجود ندارد باز نمی توان کل سطح را پر نمود.

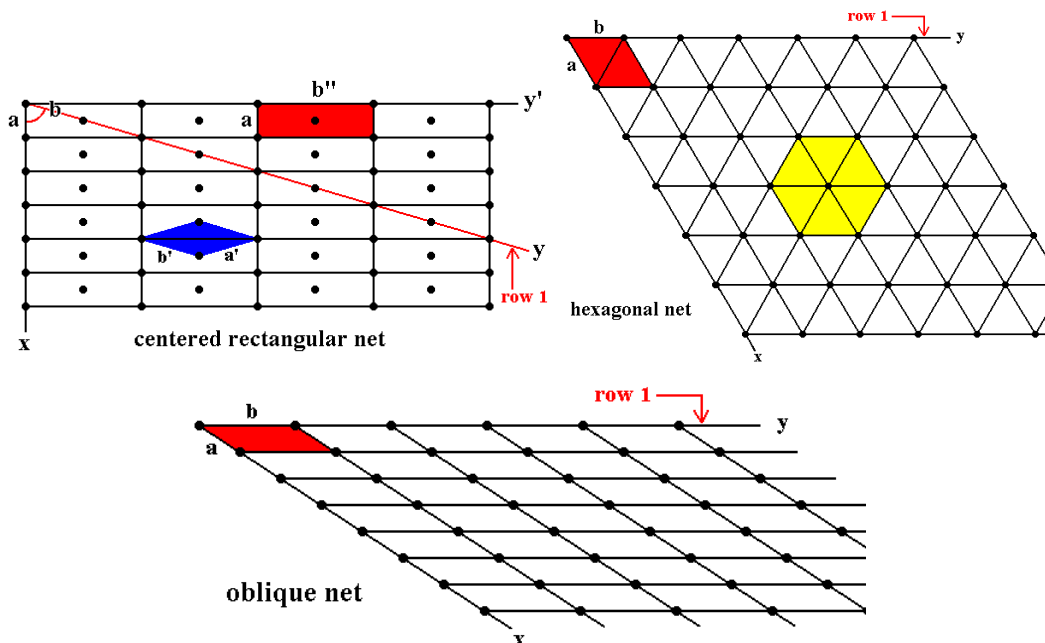


شکل ۱۲- عدم امکان داشت سلول واحد مثلثی

توجه شود که هدف از کریستالوگرافی یافتن نوع شبکه و تعداد اتمهای یک موتیف است برای توجیه نظم قرارگیری اتمها در مواد.

در شکل های زیر شبکه های پنج گانه مربعی دیده می شوند.



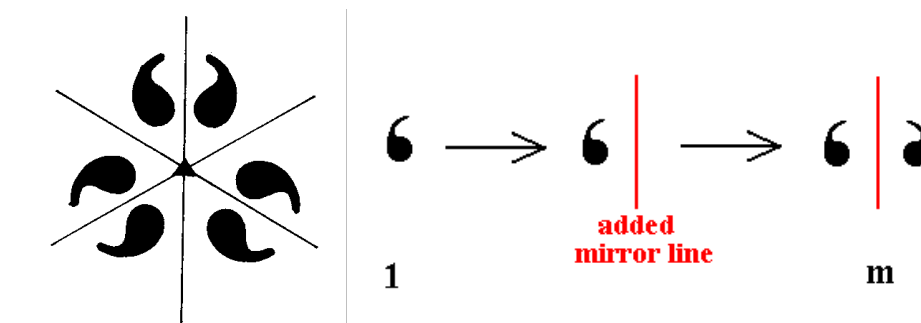


شکل ۱۳- سلولهای واحد پنجگانه دوبعدی

تقارن در شبکه دو بعدی

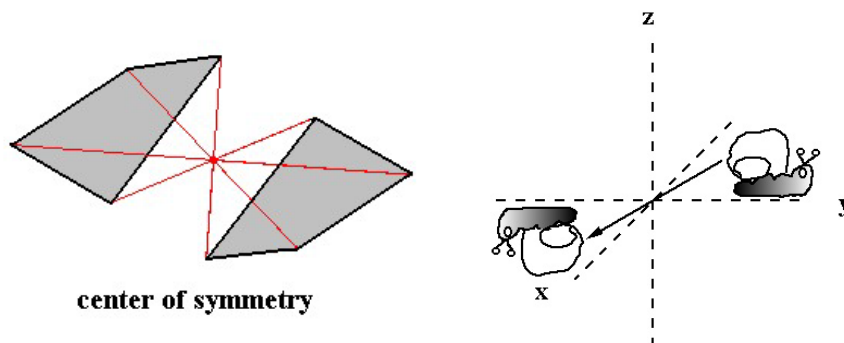
به طور کلی در کریستالوگرافی سه نوع تقارن صفحه ای (آئینه ای)، محوری و نقطه ای وجود دارد.

تقارن صفحه ای: یا تقارن آئینه ای حالتی است که در آن جسم نسبت به یک صفحه تقارن دارد یعنی این صفحه جسم را به دو قسمت مساوی و متقارن تقسیم کرده است. برای مثال برای یک کره بینهایت صفحه تقارن وجود دارد. و یا در یک مربع چهار صفحه تقارن موجود است. در شکل زیر طرحی را که دارای چند تقارن صفحه ای است دیده می شود.



شکل ۱۴- تقارن صفحه ای

تقارن نقطه ای: تقارنی است که با کشیدن هر نقطه از شبکه به طرف نقطه تقارن و ادامه دادن آن با همان فاصله، به نقطه دیگری از شبکه می‌رسیم. در شکل زیر طرحی که دارای تقارن نقطه ای است دیده می‌شود.

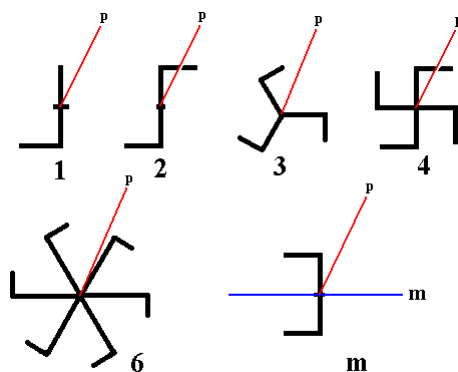


شکل ۱۵- تقارن نقطه ای

تقارن محوری: این تقارن مهمترین نوع تقارن می‌باشد. در تقارن محوری اگر یک طرح را با زاویه ای مشخص حول محور تقارن بچرخانیم به شکل قبل از چرخش می‌رسیم. به زاویه چرخش، زاویه تقارن یا α گویند. با تقسیم 360° درجه بر زاویه تقارن عددی بدست می‌آید که درجه تقارن نامیده می‌شود.

$$n = \frac{360}{\alpha}$$

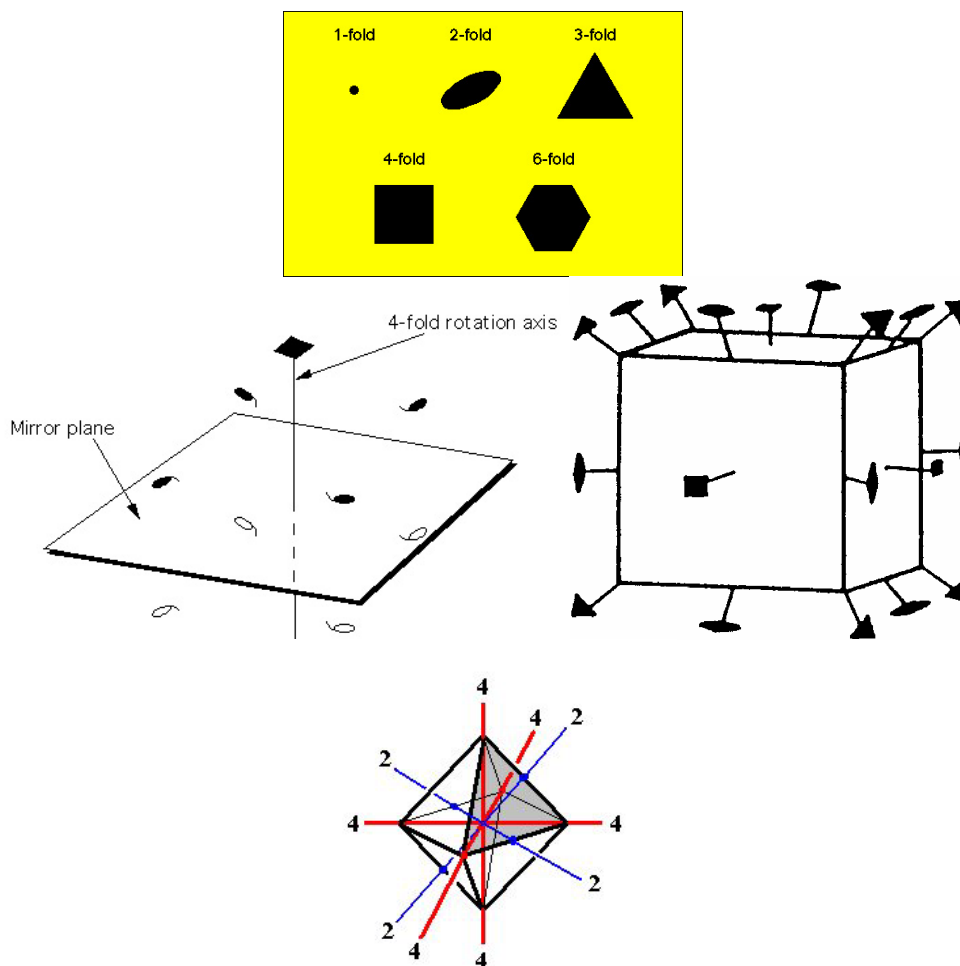
(درجه تقارن)



شکل - محورهای درجه تقارن ۱، ۲، ۳، ۴، ۶ و تقارن صفحه ای

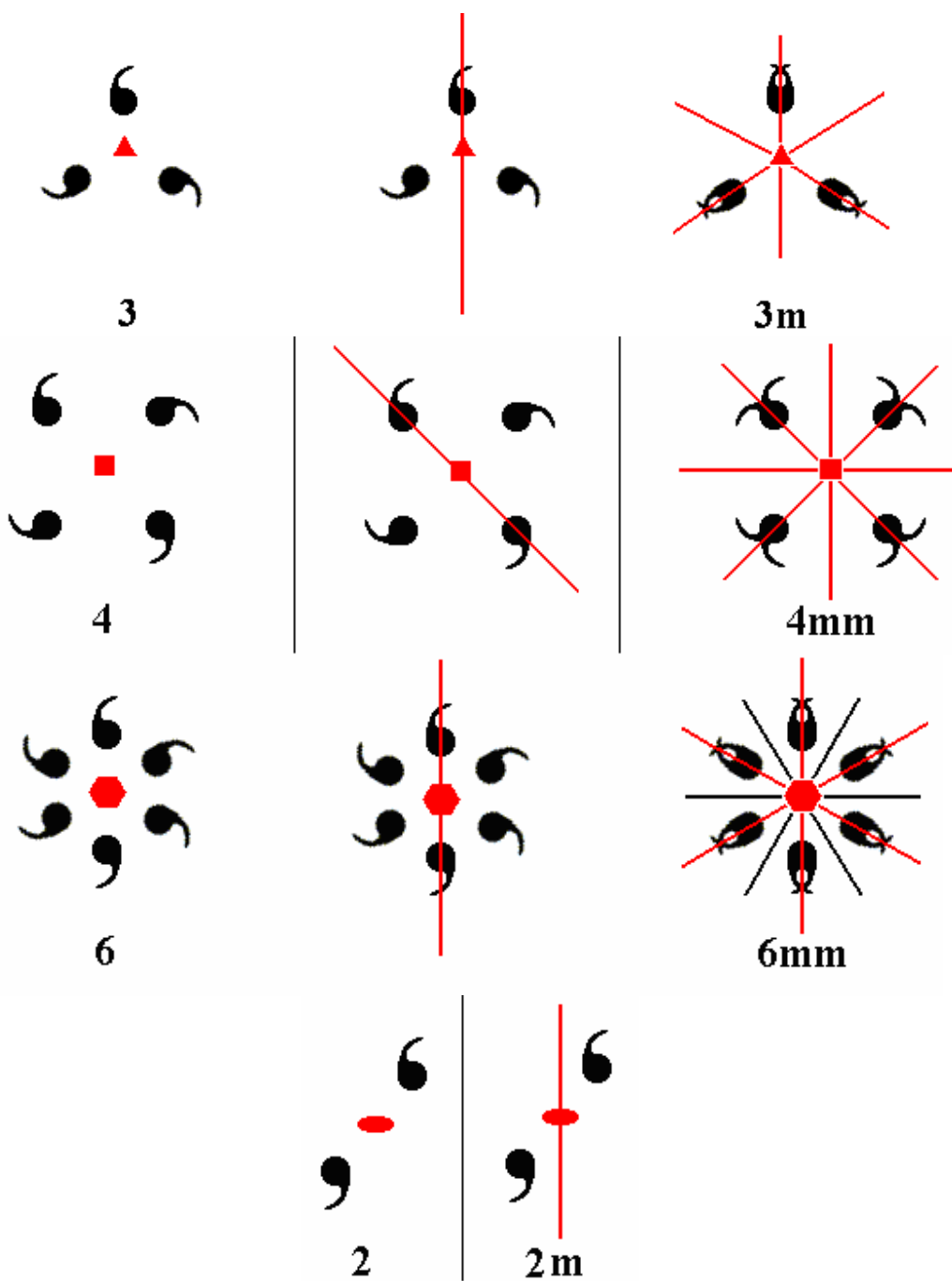
برای مثال: برای شبکه مربعی درجه تقارن ۴ است. چون با چرخش حول محور مرکزی به اندازه 90° درجه دوباره به همان حالت قبل می‌رسیم. و یا در شبکه هگزاگونال تقارن نوع ۶ داریم. به این دلیل که با چرخش شبکه به اندازه 60° درجه به حالت قبل از چرخش می‌رسیم.

در کریستالوگرافی چهار محور تقارن مهم وجود دارد. برای هر کدام از این محورها یک علامت تعریف شده است. این علامات در شکل ۱۶ دیده می شود.

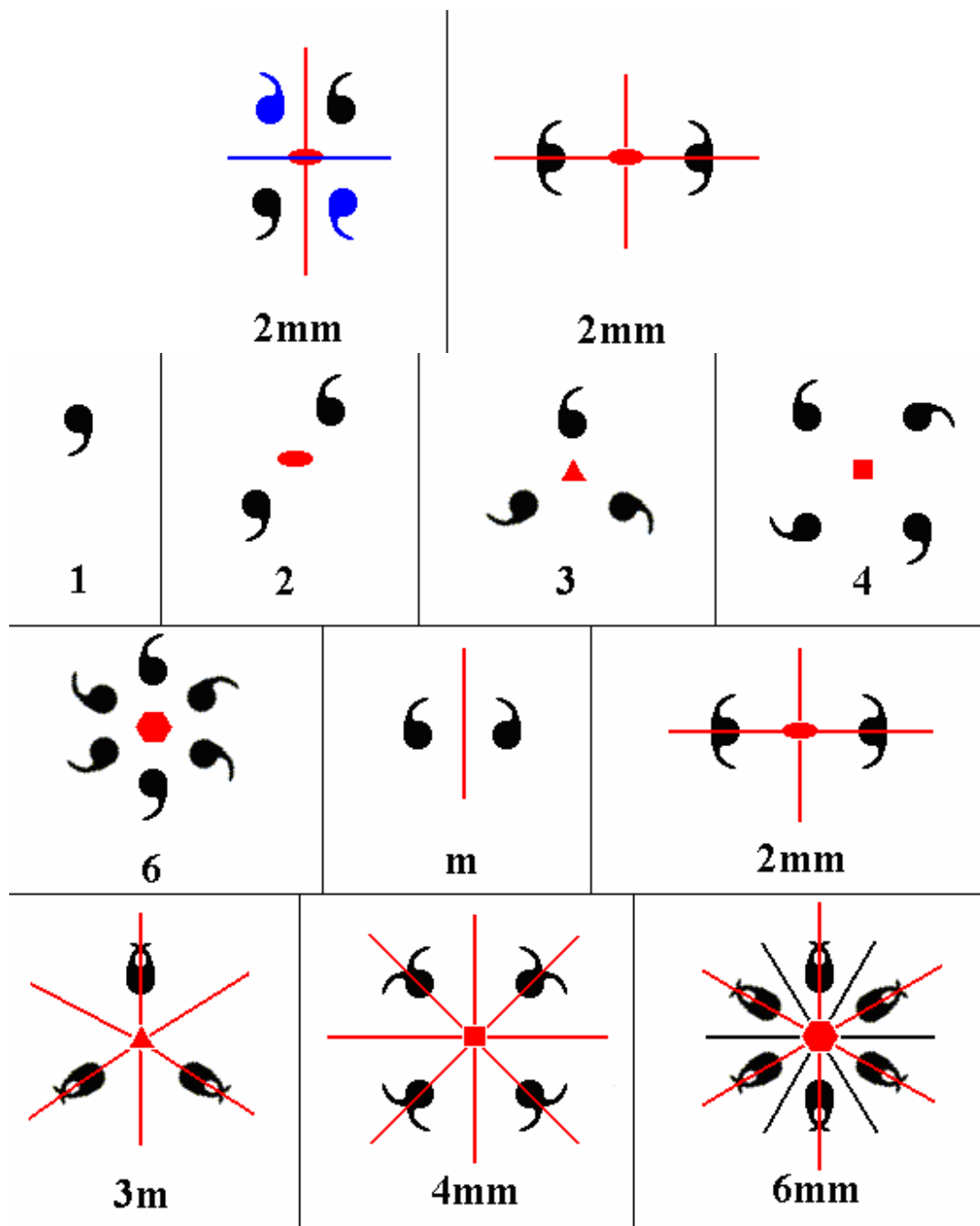


شکل ۱۶- علامت محوره‌های تقارن و محوره‌های تقارن در اشکال مختلف

در شکل‌های زیر چند طرح همراه با محورها و صفحه‌های تقارن دیده می شود. در این طرح‌ها m علامت تقارن صفحه ای (آینه ای) است و اعداد نشان دهنده نوع تقارن محوری است. در طرح‌ها خطوط نشان دهنده صفحه تقارن که عمود بر صفحه کاغذ است می باشد.



شکل ۱۷- تقارنهای محوری و صفحه ای

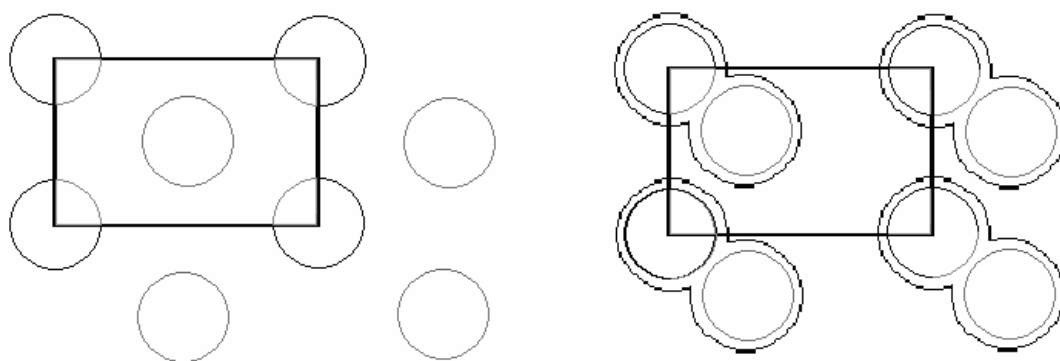


شکل ۱۷- تقارنهای محوری و صفحه ای (ادامه)

مهمترین شاخص سلولهای واحد اندازه اضلاع و یا زوایای آنها نیست. بلکه نوع تقارنی است که در هر سلول واحد وجود دارد. در جدول ۲ نوع تقارن را در هر کدام از سلولهای واحد پنجگانه دوبعدی دیده می شود. جدول ۲- نوع تقارن در سلولهای واحد دوبعدی

نوع شبکه	نوع محور تقارن
	محور تقارن درجه چهار
	محور تقارن درجه شش
	محور تقارن درجه دو
	محور تقارن درجه دو
	محور تقارن درجه دو

سوال: چرا در شکل ۱۸ تصویر سمت چپ سلول واحد مستطیلی مرکزدار با موتیف تک اتمی است در حالی که در تصویر سمت راست که اتم میانی تنها کمی به سمت بالا رفته سلول واحد مستطیلی با موتیف دو اتمی است. یا به عبارت دیگر چرا سلول واحد مستطیلی مرکزدار را نمی توان به صورت سلول واحد مستطیلی با موتیف دو اتمی در نظر گرفت؟

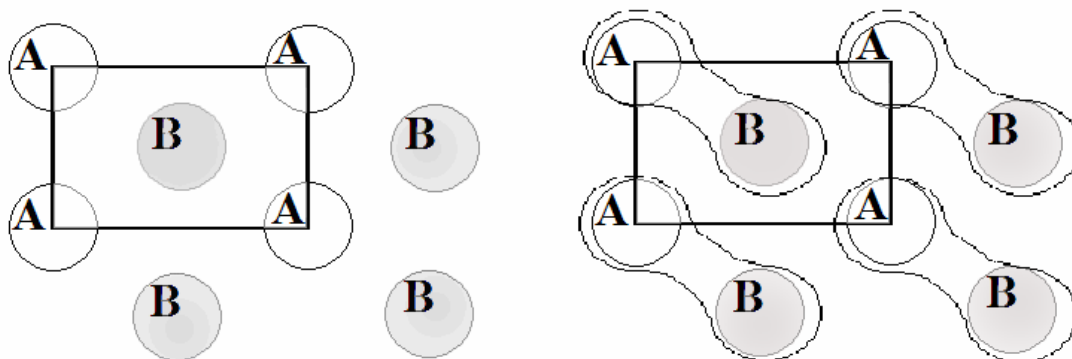


شکل ۱۸

مهمترین شاخصه سلول واحد مستطیلی تقارن درجه دو است. در تصویر سمت راست شکل دارای تقارن درجه دو نمی باشد. اما در صورتی که دو اتم علامت زده شده را به عنوان یک واحد مولکولی در نظر بگیریم آنگاه سلول واحد دارای تقارن درجه دو

شده و مستطیلی مرکزدار است. این در حالی است که قرار گیری اتم در مرکز و تشکیل سلول واحد مستطیلی مرکزدار تقارن درجه دو سلول واحد مستطیلی را از بین نمی برد.

اما آیا شبکه نمایش داده در شکل ۱۹ هم سلول واحد مستطیلی مرکزدار است؟



شکل ۱۹- موتیف دو اتمی در شبکه مستطیلی

در شبکه هایی که تا کنون مورد بررسی قرار گرفت تمامی اتمها از یک نوع بودند. ولی در شکل ۱۹ دیده می شود که اتمها از دو نوع A و B می باشند. در این حالت با اینکه اتمها به صورت سلول واحد مستطیلی مرکزدار چیده اند، اما چون اتمها از یک جنس نیستند، این شبکه را نمی توان به صورت سلول واحد مستطیلی مرکزدار در نظر گرفت. در این شبکه سلول واحد از نوع مستطیلی با موتیف دو اتمی اتمهای A و B می باشد. در این حالت اگر موتیف را به صورت یک اتم A و یک اتم B در نظر گرفته و به صورت یک واحد در نظر بگیریم تقارن درجه دو مختص سلول واحد مستطیلی خواهیم داشت. در شکل ۲۰ هم یک شبکه مستطیلی با موتیف سه اتمی دیده می شود.

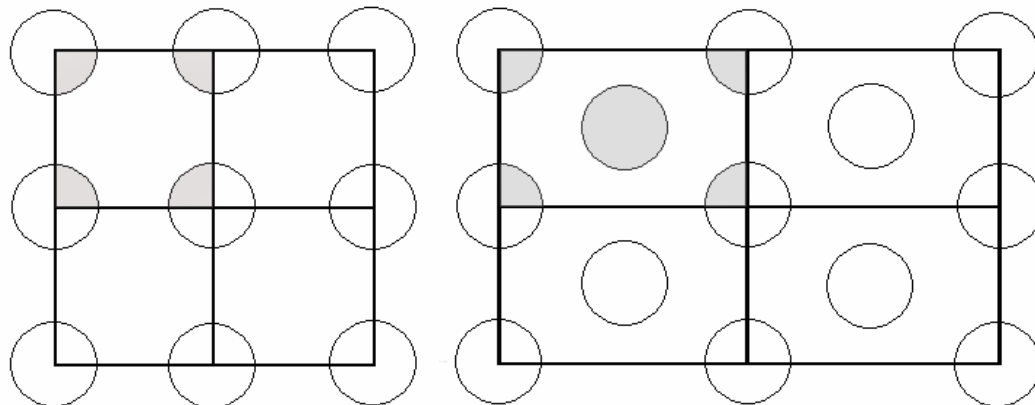
سلول واحد مستطیلی	موتیف سه اتمی	شبکه ماده

شکل سلول مستطیلی با موتیف سه اتمی

تعداد اتمها در شبکه دو بعدی

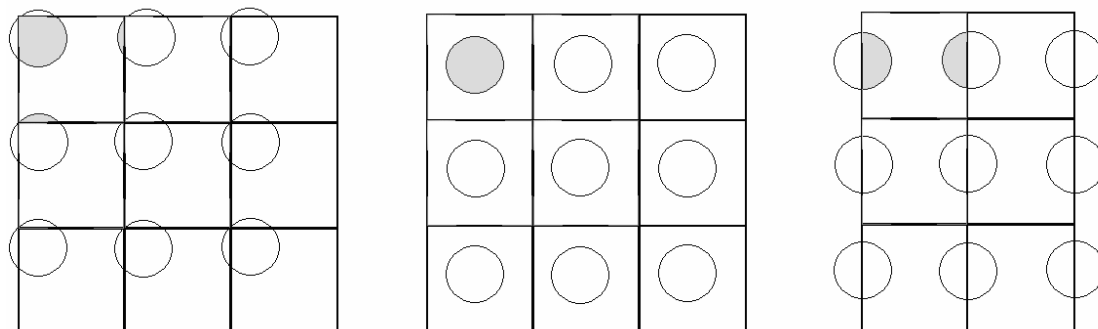
با در نظر گرفتن شبکه های گفته شده برای حالت دو بعد و قرار دادن اتم در مکان های شبکه ای، می توان تعداد اتم موجود در هر سلول واحد را مشخص کرد. با توجه شکل ۱۸ می بینیم که برای شبکه مربعی با قرار دادن یک اتم در مکانهای مشخص شده، با توجه به اینکه مقدار یک چهارم از هر اتم درون یک سلول قرار می گیرد و بقیه سه چهارم باقیمانده در سه سلول واحد مجاز

قرار دارد. تعداد اتم قرار گرفته در هر سلول واحد $4 \times \frac{1}{4}$ اتم است. پس در هر سلول واحد دو بعدی مربعی یک اتم قرار دارد. با توجه به این مطلب تعداد اتم در یک سلول واحد مستطیل مرکزدار به میزان $4 \times \frac{1}{4} + 1$ یعنی دو اتم می‌رسد.



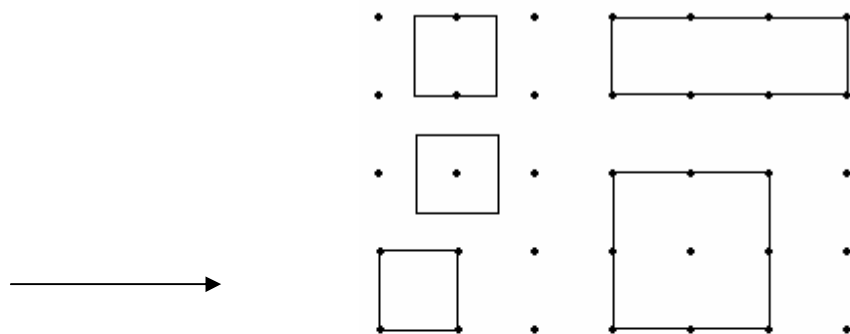
شکل ۱۸- تعداد اتمهای قرار گرفته در یک سلول واحد

در همه سلولهای واحد به غیر از سلول واحد مستطیلی مرکزدار تعداد اتمهای موجود در سلول واحد یک اتم است. در صورتی که سلول واحد را برای هر شبکه به فرمهای دیگر هم در نظر بگیریم باز هم جواب تغییر نمی‌کند (شکل)



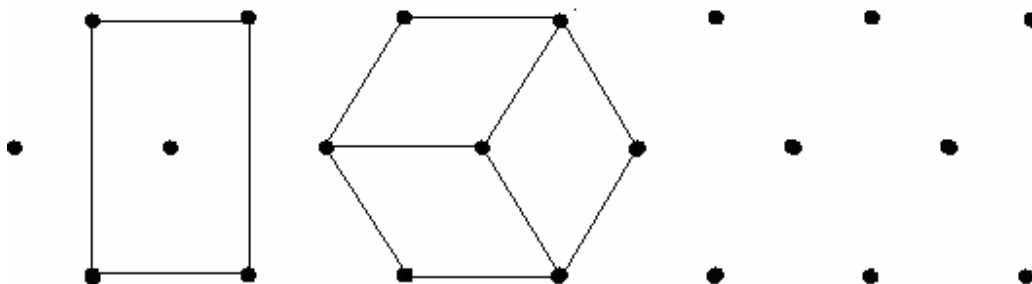
شکل عدم تغییر تعداد اتم با تغییر مکان قرار گیری اتم در سلول واحد مربعی

توجه داشته باشید که برای اتمهای قرار گرفته در یک سطح می‌توان بینهایت سلول واحد تعریف کرد (شکل ۱۹) اما قاعده بر این است که این سلول های واحد دارای کمترین اندازه اضلاع و بیشتر درجه تقارن باشد.



شکل ۱۹- امکان انتخاب سلولهای واحد بیشمار برای یک شبکه مشخص

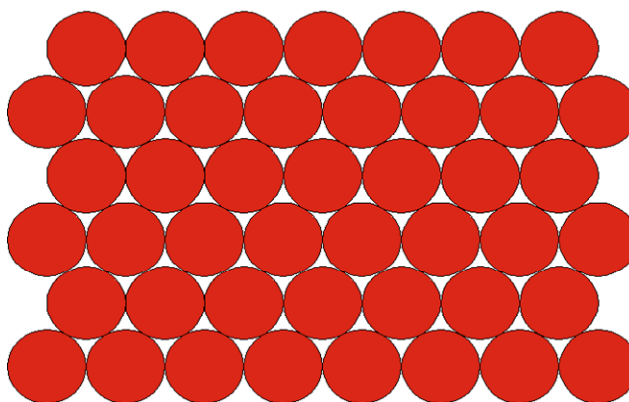
برای مثال یک شبکه هگزاگونال را می توان به صورت شبکه مستطیل مرکز دار در نظر گرفت اما به دلیل کوچکتر بودن اضلاع هگزاگونال و مشخص شدن تقارن درجه شش در این سلول واحد، حالت هگزاگونال انتخاب می شود. توجه داشته باشید که سلول واحد مستطیل مرکز دار دارای طول اضلاع بزرگتر و تقارن درجه دو است. بنابراین نمی تواند به عنوان سلول انتخاب گردد.

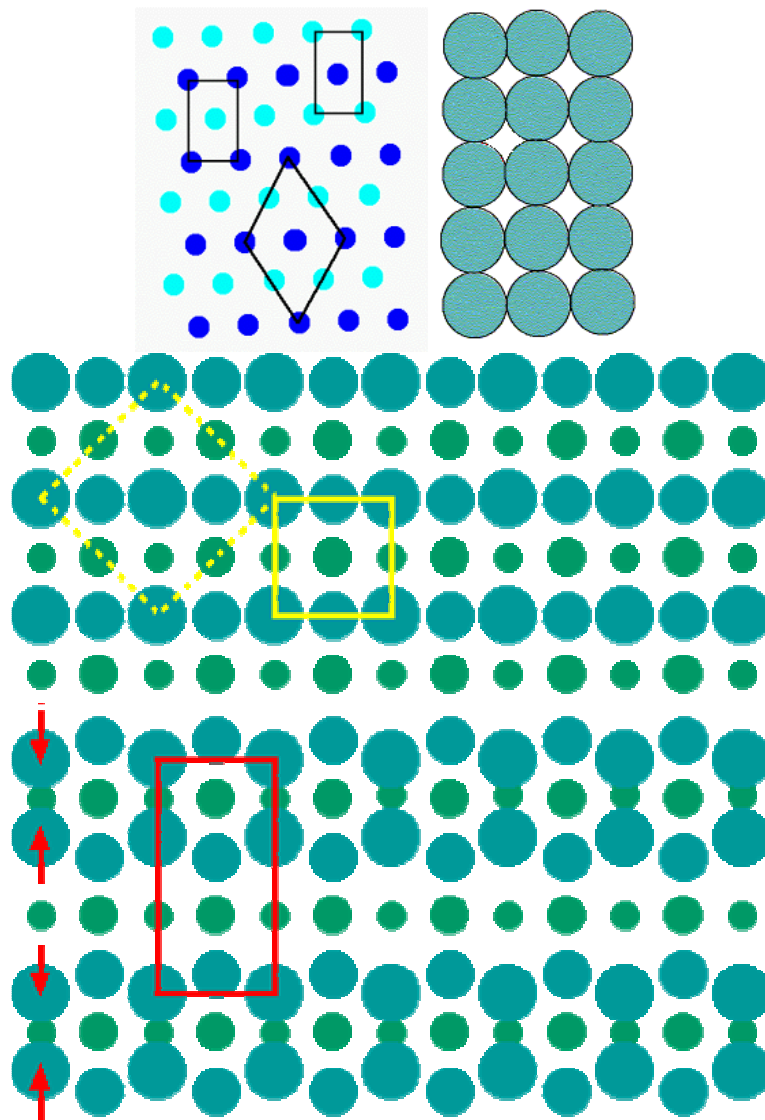


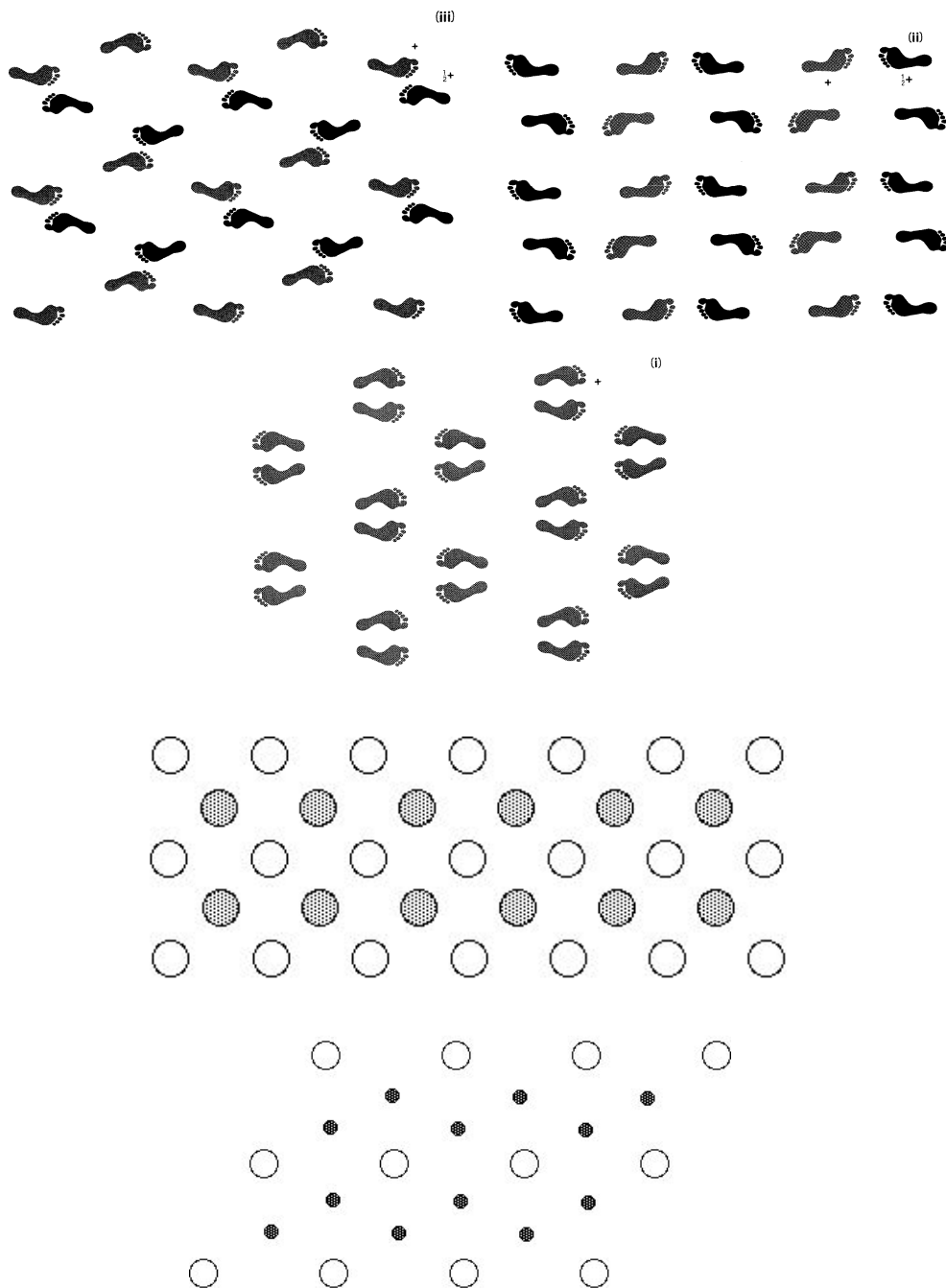
شکل ۲۰

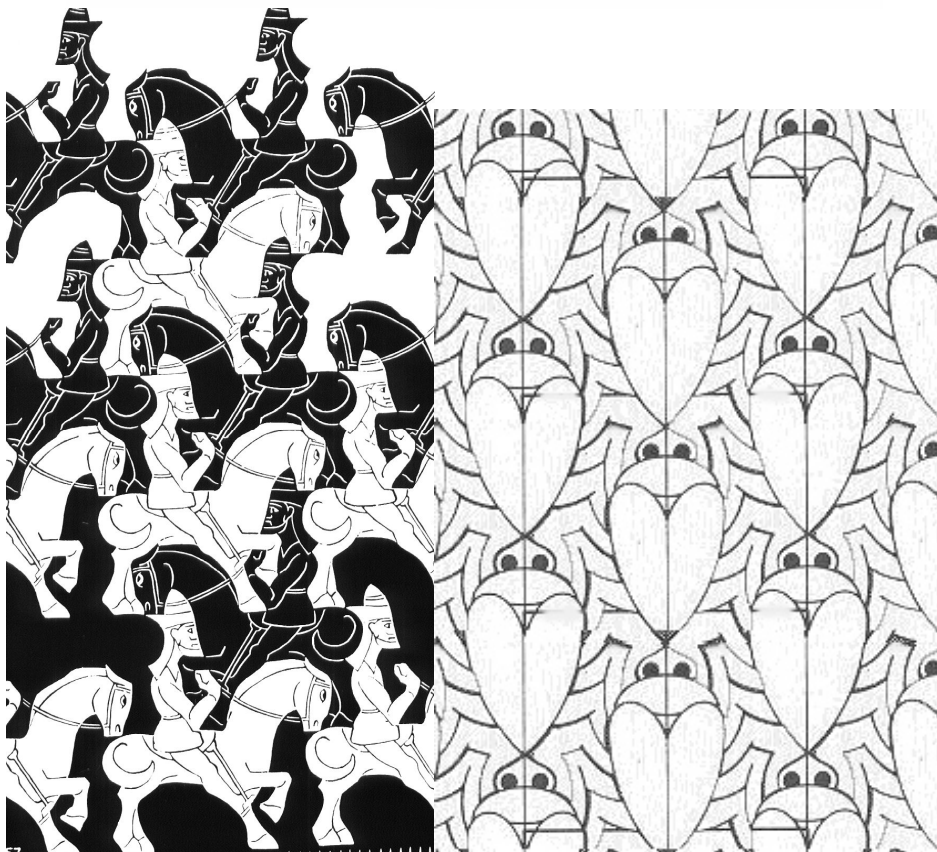
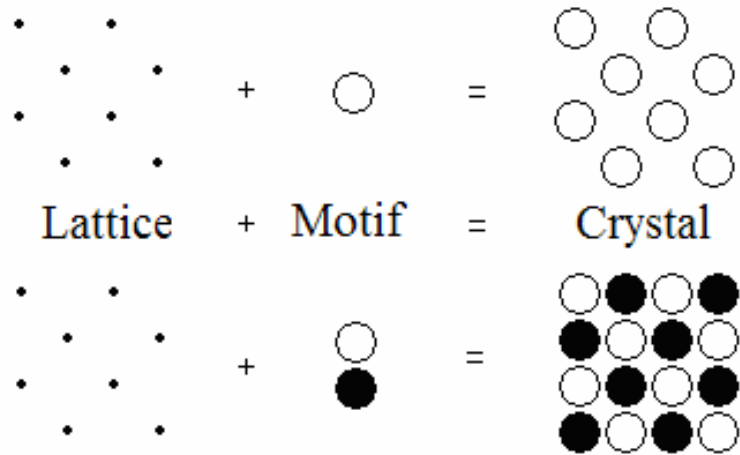
همچنین در سلول واحد هگزاگونال همیشه به جای ترسیم این شبکه به صورت چهارگوشه آنرا به صورت شش گوشه رسم می کنند. در این حالت هدف فقط نشان دادن این مطلب است که شبکه هگزاگونال تقارن شش دارد. لازم به یادآوری است که هیچگاه نمی توان از یک سلول واحد یک سلول واحد دیگر که دارای اضلاع کوچکتر و یا تقارن بیشتر است، بدست آورد. به همین دلیل است که نمی توان مکعبی مرکزدار را به عنوان یک سلول واحد در نظر گرفت. چون این با کنار هم قرار دادن دو سلول واحد و وصل کردن نقاط به سلول واحد مکعبی ساده با اضلاع کوچکتر رسید.

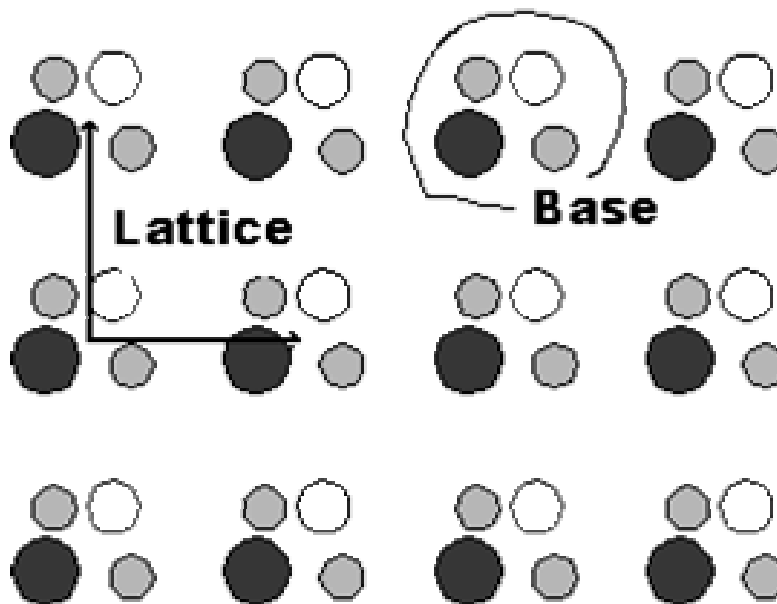
تمرین: نوع سلول واحد و تعداد موتیف و تقارنهای موجود در هر کدام از طرح های زیر را مشخص کنید.

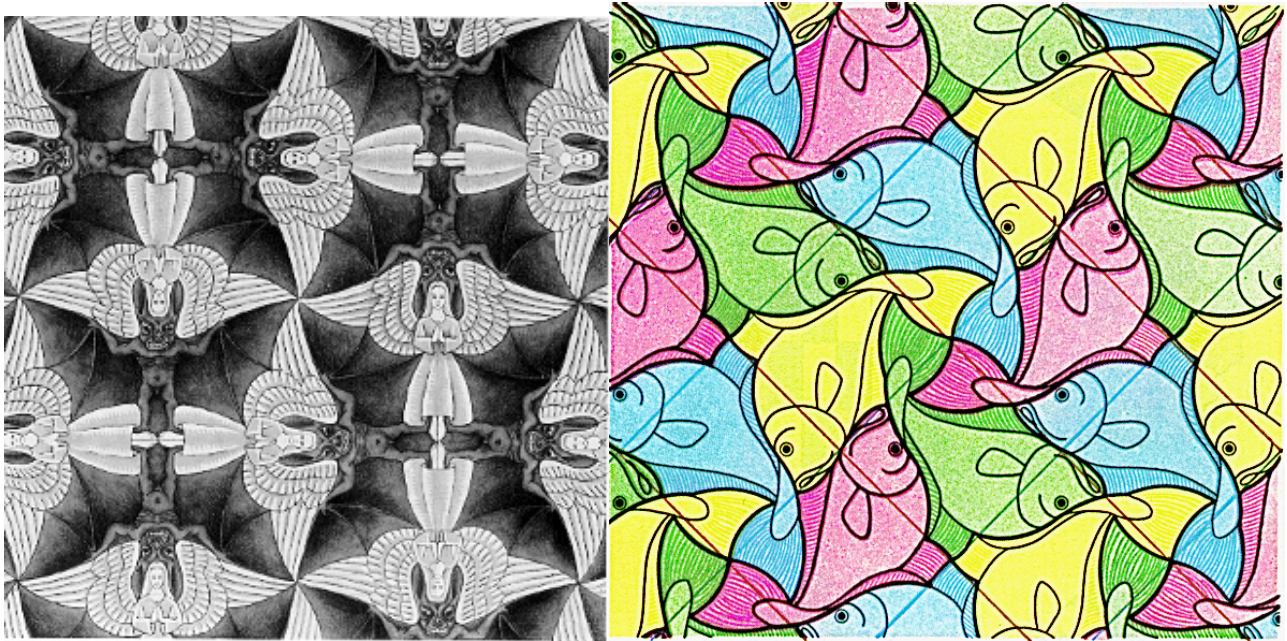






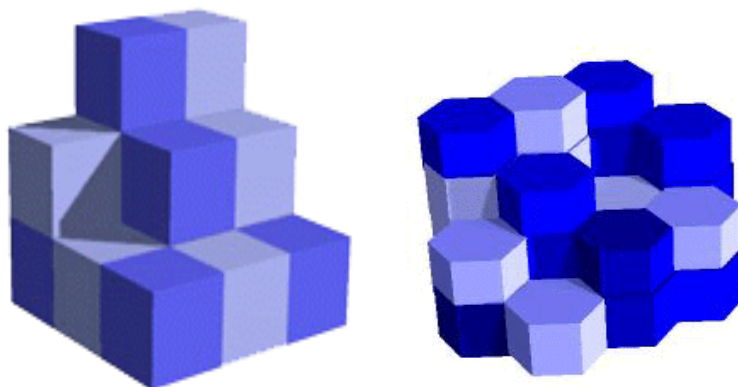




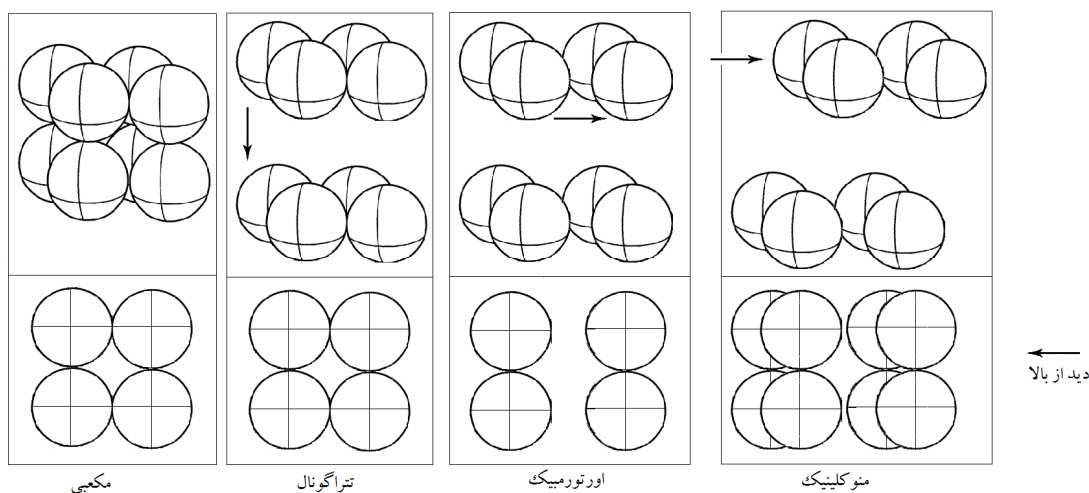


شبکه های سه بعد

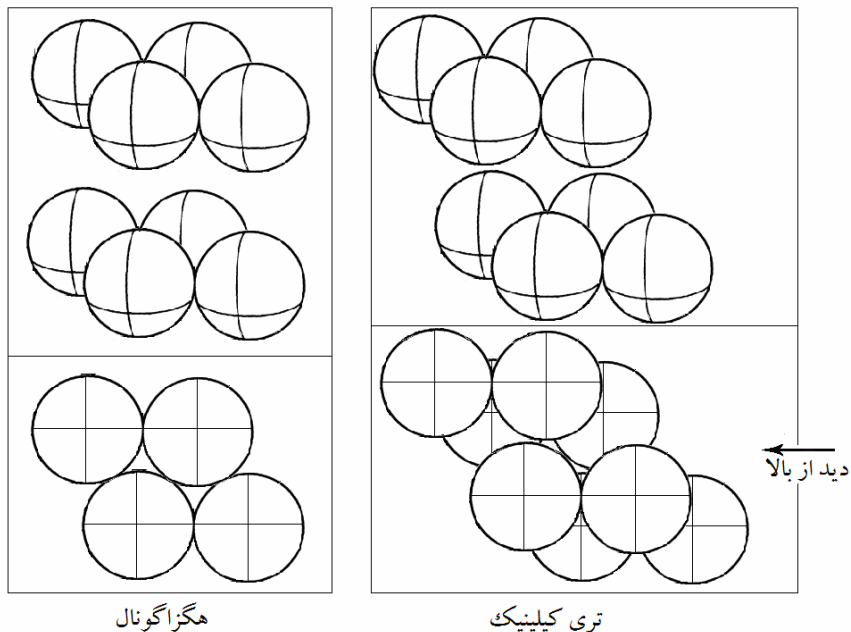
آرایش دو بعدی اتمها کنار همدیگر، هیچگاه به ما یک حجم از اتمهای سازنده را نشان نمی دهد. بنابراین برای درک نظم وجود در مواد باید به سراغ ترتیب قرار گیری اتم ها در سه بعد برویم. ابتدا با همان شبکه های دو بعدی شروع می کنیم و از کنار هم قرار دادن آنها شبکه های سه بعدی را بدست می آوریم. در سه بعد هم مانند دوبعد احتیاج به واحدهای سازنده ای داریم که بتواند یک حجم را به صورت کامل پر کند.



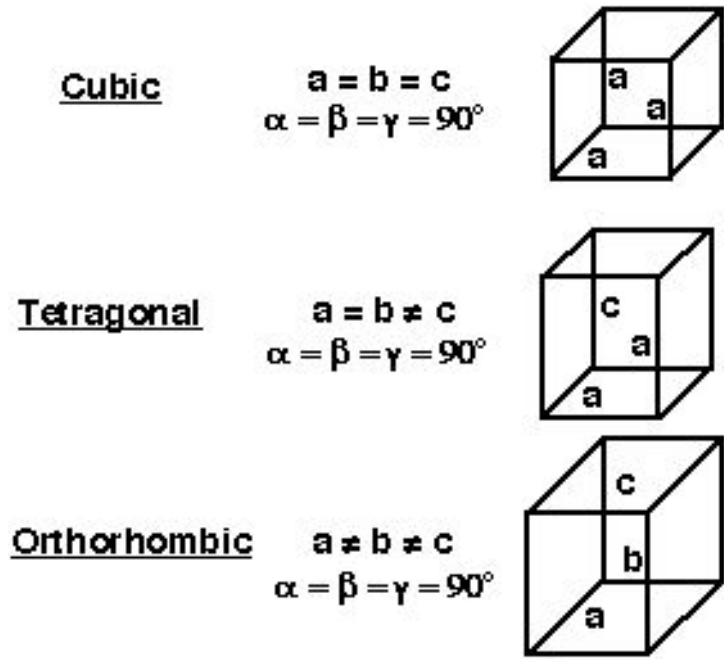
ساده ترین شبکه فضایی، شبکه مکعبی است که از روی هم قرار دادن صفحات مربعی ایجاد می شود. در صورت ایجاد فاصله بین صفحات مربعی به طوریکه ارتفاع صفحات برابر با ضلع مربع نباشد موجب تولید شبکه ای به نام تتراگونال می شود. اگر صفحات مستطیلی را طوری روی هم قرار دهیم که فاصله صفحات مساوی یکدیگر نباشند، شبکه اورتورمبیک ساخته ایم. در صورت حرکت دادن صفحه بالایی به صورتیکه اتمهای صفحه بالایی روی صفحه پایینی مطابقت نداشته باشند حالت منوکلینیک خواهیم داشت. در شکل پایین می بینیم که اگر دو صفحه مربعی سلول واحد مکعبی را از هم دور کنیم به تتراگونال می رسیم و اگر سلول واحد تتراگونال را از کنار بکشیم اورتورمبیک خواهیم داشت. همچنین اگر صفحه بالای اورتورمبیک را به صورتی حرکت دهیم که دیگر دقیقاً روی صفحه پایینی نباشد به منوکلینیک می رسیم. در شکل پایین همچنین نمای اشکال را از بالا می بینیم.

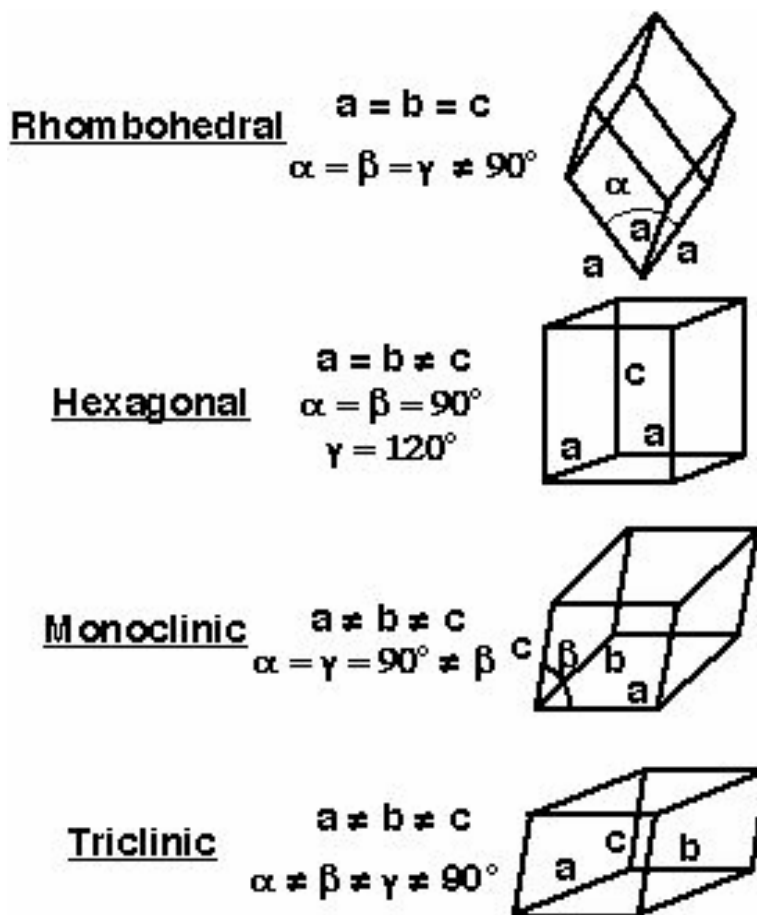


در صورت قرار دادن صفحات هگزاگونال روی یکدیگر شبکه سه بعدی هگزاگونال داریم. اگر صفحات مورب را طوری روی هم قرار دهیم که نقاط روی هم واقع نشوند و ارتفاع صفحات برابر با طول و ارتفاع مورب نباشد، تری کلینیک داریم.



شبهه آخر شبهه رمبوهدرال (لوزی رخ) است. این حالت در صورت کشیدن سلول واحد مکعبی در جهت قطر آن بدست می‌آید. در این حالت اضلاع مساوی اند ولی زوایا نود درجه نیست. این هفت شبهه مانند هفت نوع آجر مختلفی است که می‌توان با این آجرها می‌توان یک حجم را پر نمود به طوری که هیچ جایی از این حجم خالی نماند. این هفت حالت به صورت آجرهایی در شکل زیر دیده می‌شوند.





الگوی ساختن این سلولهای واحد در آخر فصل آمده است. همانطور که در شکل دیده می شود هر کدام از این شبکه ها با توجه به شکلشان طول، عرض و ارتفاع و زوایای مشخصی دارند. برای راحتی کار این شبکه ها را برای هر سلول واحد، به صورت مختصات سه بعدی با بردارهای x, y, z و زوایای بین بردارهای α, β, γ رسم می کنیم و طول و عرض و ارتفاع آنها را با a, b, c نشان می دهیم. اما همانطور که در سلولهای واحد دوبعدی داشتیم، مهمترین مشخصه سلول واحد نوع تقارنهای موجود در این سلولها وجود دارد. برای مثال شبکه مکعبی شبکه ای است که چهار محور تقارن درجه سه و سه محور تقارن درجه چهار دارد. در جدول زیر تقارنهای موجود در هر شبکه را مشاهده می کنیم.

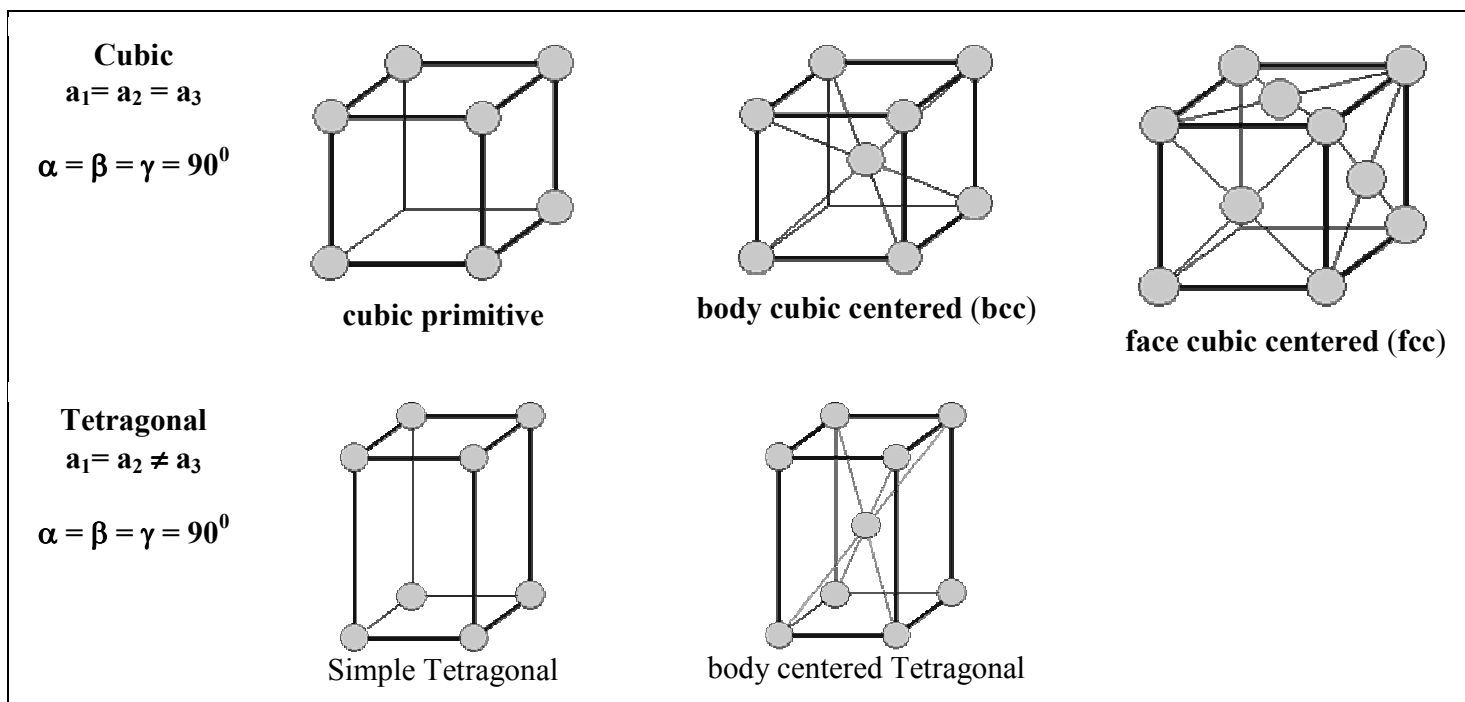
نوع سلول و نوع و تعداد تقارن	مکعبی	تتراگونال	اورتورومبیک	مؤکلینیک	تری کلینیک	هگزاگونال	تری گونال
صفحه تقارن	۹	۳	۳	ندارد	ندارد	۷	۶
محور تقارن درجه ۲	۶	۴	۳	ندارد	ندارد	۶	ندارد

محور تقارن درجه ۳	۴	ندارد	ندارد	ندارد	ندارد	ندارد	۱
محور تقارن درجه ۴	۳	۱	ندارد	ندارد	ندارد	ندارد	ندارد
محور تقارن درجه ۶	ندارد	ندارد	ندارد	ندارد	ندارد	ندارد	ندارد

توجه داشته باشد که سلول واحد همگزاگونال چون دارای تقارن شش است تقارن سه هم دارد. اما همیشه تنها درجه تقارن بزرگتر در نظر گرفته می شود. همانطور که دیده می شود تمامی سلولهای واحد سه بعدی دارای نقطه تقارن هستند. که در مرکز هر کدام واقع شده است.

چهارده شبکه براوه:

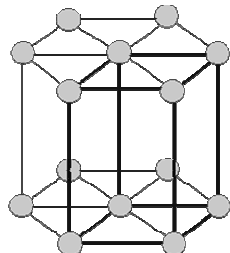
با توجه به شش وجهی های هفتگانه ای که مورد بررسی قرار گرفت، در صورت در نظر گرفتن مکانهای علاوه بر گوشه های سلول واحد، در مرکز سلول و یا در مرکز وجود شش وجهی های می توان سلولهای واحد مختلفی را در نظر گرفت. آقای براوه اثبات کردند که تنها چهارده حالت برای چیدن منظم اتمها وجود دارد. این حالات در شکل زیر دیده می شود.



Hexagonal

$a_1 = a_2 \neq a_3$

$\alpha = \beta = 90^\circ,$
 $\gamma = 120^\circ$

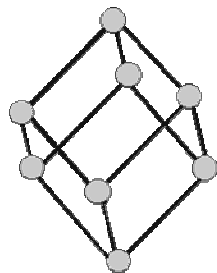


Hexagonal

Rhombohedral

$a_1 = a_2 = a_3$

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

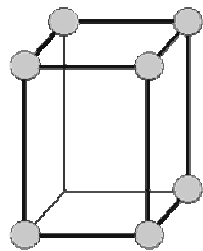


Rhombohedral

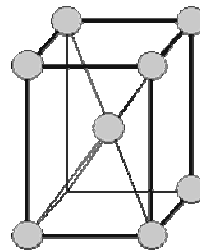
Orthorhombic

$a_1 \neq a_2 \neq a_3$

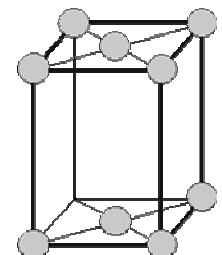
$\alpha = \beta = \gamma$
 $\neq 90^\circ$



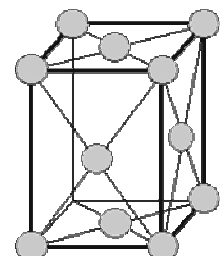
Simple Orthorhombic



body centered Orthorhombic



base face centered
Orthorhombic

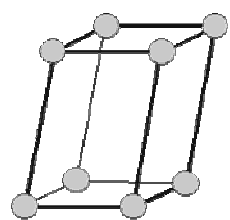


face centered
Orthorhombic

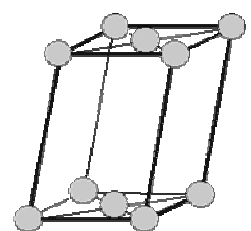
Monoclinic

$a_1 \neq a_2 \neq a_3$

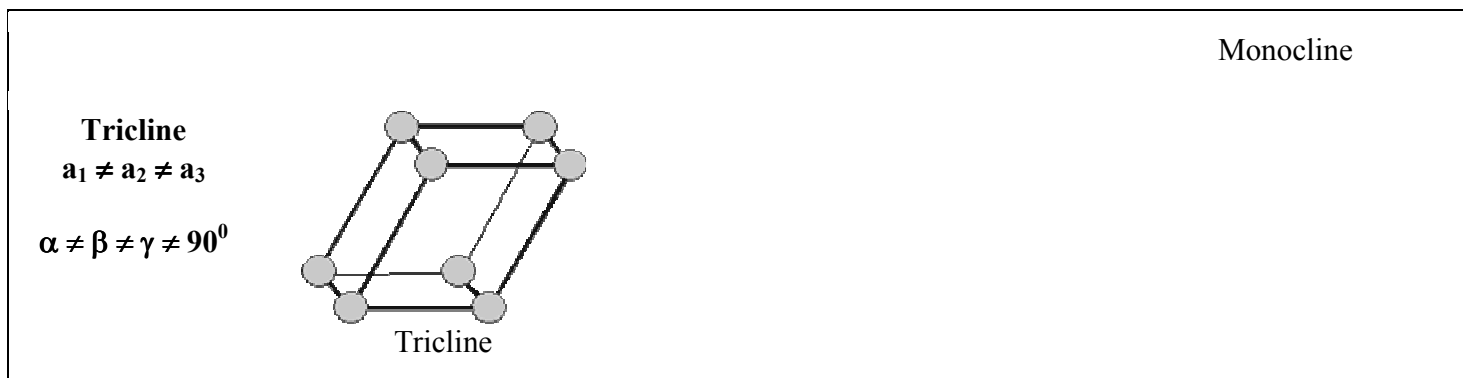
$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma$
 $\neq 90^\circ$



Simple Monocline



base face centered



نکته مهمی که باید به آن توجه شود این است که تعداد سلولهای واحد قابل ساخت به طور منظم برای مواد به هیچ عنوان از ۱۴ حالت نمی توان بالاتر باشد.

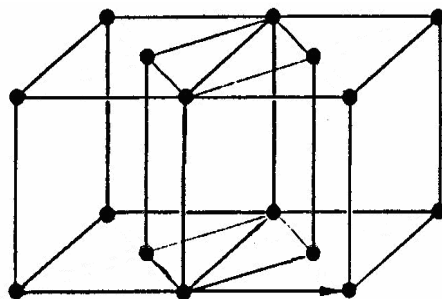
به حالتی که مکان قرار گیری اتمها فقط روی کنج سلول واحد است حالت P و یا حالت ساده Simple می گویند. برای مثال به مکعب ساده (Simple Cubic) S.C. و یا به تتراگونال ساده (Simple Tetragonal) S.T. می گویند.

وقتی علاوه بر گوشه های یک اتم در مرکز سلول واحد قرار گیرد حالت I گویند. به این شبکه ها، شبکه مرکز دار و یا Body Center می گویند. برای مثال به مکعب مرکزدار (Body Center Cubic) b.c.c. و به تتراگونال مرکزدار (Body Center Tetragonal) b.c.t. می گویند.

حالتی را که اتمها علاوه بر گوشه های سلول واحد در روی ۶ سطح سلول قرار گیرد حالت F و یا سلول واحد با وجوه مرکزدار و یا Face Center گویند. برای مثال به مکعب با وجوه مرکزدار به (Face Center Cubic) F.C.C. می گویند. همچنین به حالتی که علاوه بر قرار گیری اتمها در گوشه در مرکز دو وجه روبروی هم دو اتم قرار گیرد سلول واحد C گویند. این حالت در شکل در مورد اورتورومبیک دیده می شود.

سوال: چرا نمی توان مکعب C داشت؟

دلیل اول: اگر دو اتم در صفحات بالایی و پایینی مکعب قرار دهیم از به هم وصل کردن این اتمهای مرکز سطح به اتمهای گوشه و ادامه دادن این خطوط در سلول بعدی یک تتراگونال ساده بدست می آید. پس دیگر مکعب C سلول واحد نیست و سلول واحد اصلی تتراگونال s.t. است. در این سلول واحد تتراگونال ساده ارتفاع به اندازه a و طول و عرض به اندازه a می باشد.



دلیل دوم: مهمترین دلیل برای وجود نداشتن سلول واحد مکعب C این است که اصلی ترین مشخصه یک سلول مکعبی داشتن چهار محور تقارن درجه ۳ است. آیا مکعب C این حالت را دارد؟ در این حالت ما تنها یک عدد محور تقارن درجه چهار و چهار محور تقارن درجه دو داریم که از مهمترین مشخصه سلول واحد تتراگونال است.

سؤال: به سلول های واحد برای حالت تتراگونال توجه کنید. چرا نمی توان در تتراگونال حالت F داشته باشیم؟

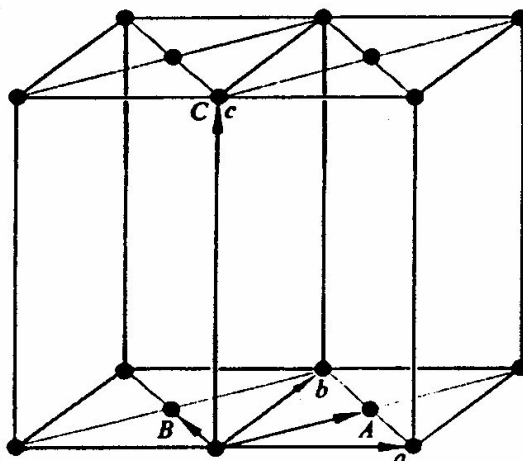
با توجه به شکل در صورت در نظر گرفتن سلول واحد کناری، با وصل کردن اتمهای A, B, C, D در بالا و اتمهای A, B, C, D در پایین و اتصال این دو وجه به هم همان حالت تتراگونال i را خواهیم داشت. البته مشخص است که حالت F تتراگونال منافاتی با اصول تقارن گفته شده برای تتراگونال ندارد (یعنی یک تقارن درجه چهار و چهار تقارن درجه دو).

سؤال: چرا برای ارتورومبیک چهار حالت C, F, I, P وجود دارد؟

جواب: بدلیل مساوی نبودن اضلاع ارتورومبیک، نمی توان از حالت های فرض شده برای این سلول واحد حالت دیگری را بدست آورد.

سؤال: چرا برای تتراگونال حالت C وجود ندارد؟

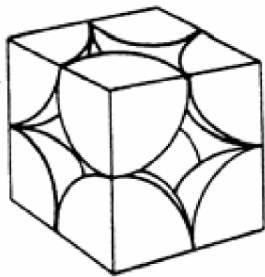
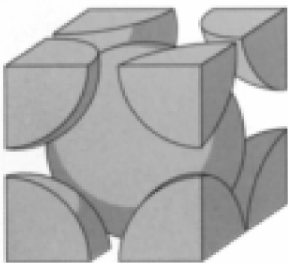
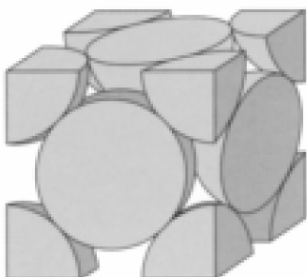
جواب: چون می توان از این حالت به حالت تتراگونال ساده رسید.

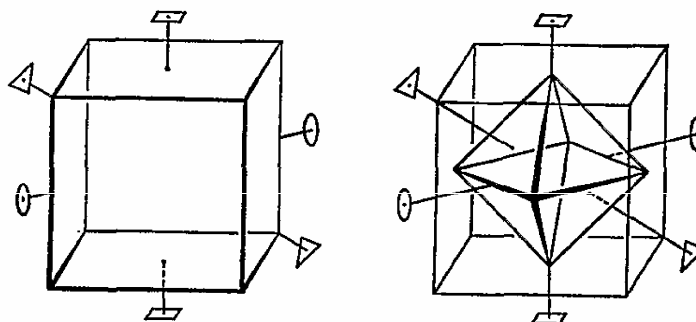


تعداد اتم در هر سلول واحد

با توجه به مطالبی که گفته شد می‌توان تعداد اتمها را برای هر سلول واحد بدست آورد. برای این کار باید توجه کنیم که هر اتم قرار گرفته در گوشه سلول واحد متعلق به هشت سلول می‌باشد. بنابراین تنها $\frac{1}{8}$ اتم به سلول متعلق است. در حالتی که اتم روی یال مکعب قرار می‌گیرد، این اتم به چهار سلول تعلق دارد. بنابراین تنها $\frac{1}{4}$ از این اتم در آن سلول واحد قرار دارد. در حالتی که اتم در روی سطح یک سلول قرار دارد، این اتم به دو سلول متعلق است. بنابراین برای هر سلول $\frac{1}{2}$ اتم وجود دارد. اتمهایی نیز که در وسط سلول قرار دارند، فقط به آن سلول تعلق دارند.

بنابراین برای هر سلول واحد از نوع P، یک اتم، برای هر سلول واحد از نوع I، دو اتم، برای سلول از نوع F چهار اتم و برای سلول از نوع C دو اتم وجود دارد.

سلول واحد ساده	سلول واحد مرکزدار	سلول واحد با وجوه مرکزدار
$8 \times \frac{1}{8} = 1$	$(8 \times \frac{1}{8}) + 1 = 2$	$(8 \times \frac{1}{8}) + (6 \times \frac{1}{2}) = 4$
		



2(1). Cube and octahedron with some of their symmetry elements.

اندیس گذاری نقاط، جهات و صفحات

در بحث های خواص فیزیکی و مکانیکی مواد مهمترین مورد، شناخت صفحات مختلف در سلول واحد است. برای شروع، ابتدا از شبکه های دو بعدی شروع می کنیم.

برای اندیس گذاری صفحات، جهات و یا نقاط مهمترین نکته انتخاب محورهای مختصات است. در ابتدا باید مرکز مختصات و جهات را تعیین کنیم. برای سلول واحد مربعی روبرو و برای صفحات نشان داده شده که عمود بر صفحه هستند. ابتدا مبداء را مشخص می کنیم. دو بردار را سپس مشخص و نام گذاری می کنیم. در شکل روبرو آنها را a, b نام گذاری کرده ایم. برای هر جهت ابتدا تعداد فاصله هایی را که توسط صفحات قطع شده اند، در نظر می گیریم. در شکل بالا صفحات بردار a را به دو قسمت a, b تقسیم نکرده اند. همچنین چون عمود بر صفحه در نظر گرفته شده اند c را اصلاً قطع نکرده اند.

بنابراین اندیس $a, 2$ ، اندیس $b, 1$ و اندیس c صفر است. سپس اندیس صفحه 210 است.

صفحات را همیشه درون پرانز قرار می دهند. (210) . سپس باید مشخص شود که این اعداد مثبت هستند و یا منفی. اگر به شکل روبرو توجه شود. اگر از بالای صفحه به پایین آن حرکت کنیم مثبت و اگر از پایین به بالا حرکت کنیم، منفی است.

برای شبکه روبرو با مشخص کردن محور مختصات و بردارها شروع کنیم. با فرض عمود بودن صفحات به صفحه کاغذ برای محور که عمود بر کاغذ است هیچ تقاطعی وجود ندارد. برای محور a ، دو قسمت و برای محور b ، چهار قسمت وجود دارد. پس صفحه 240 است.

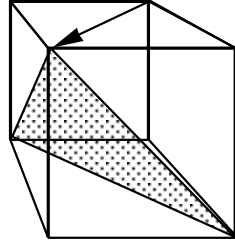
اما علامت برای a منفی و برای b مثبت است. پس صفحه را به صورت $(2\bar{4}0)$ می نویسیم. توجه داشته باشید که در صورت عوض کردن مبداء و محورهای مختصات علامت این اعداد تغییر می کند.

از مصالح گفته شده در این قسمت مشخص است که برای هر صفحه علاوه بر نام، فواصل مشخص وجود دارد.

اما وقتی به حال سه بعدی رویم تعیین اندیس صفحه به این روش میزان ساده نیست. همچنین رسم این صفحات به آسانی صورت نمی‌گیرد. در این حالت فرض کنید سه برادر را در مقادیر (شکل روبرو) قطع کرده است. طبق شکل در این حالت مقادیر بدست آمده را معکوس کرده و مقادیر معکوس را به عنوان اندیس صفحه مشخص می‌کنیم. مثالی دیگر در شکل زیر رسم شده است.

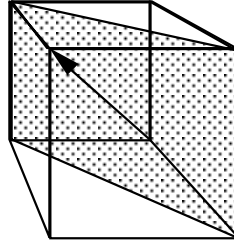
Miller Indices Worksheet.

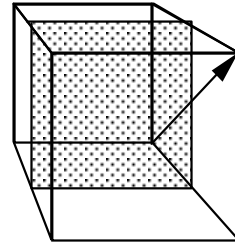
Fill in the blanks with the correct form of the Miller indices for the planes shown. Accurately draw the corresponding plane normal on the sketch, indicating coordinates of the point where the ray exits the unit cell.

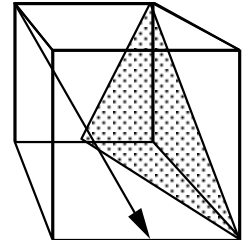


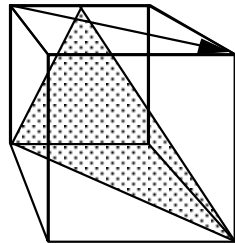
Plane: _____

Direction: _____



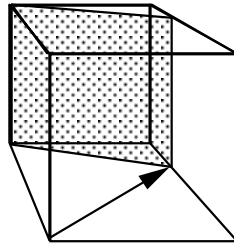


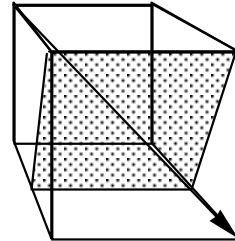


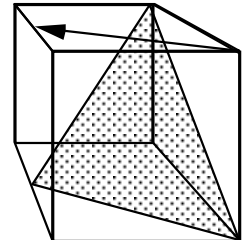


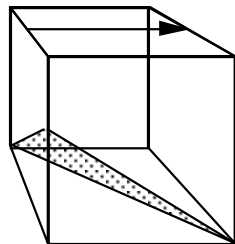
Plane: _____

Direction: _____



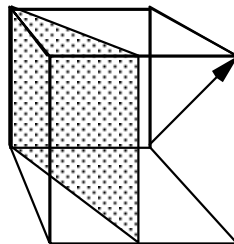


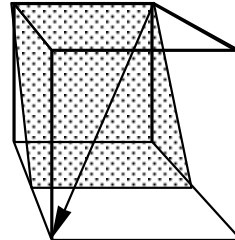


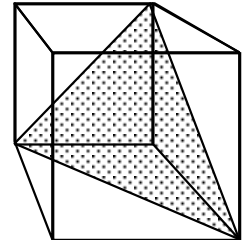


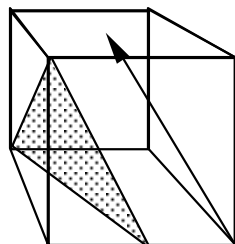
Plane: _____

Direction: _____



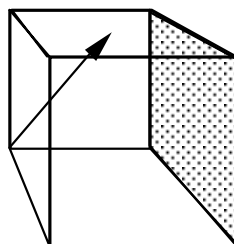


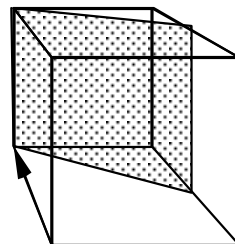


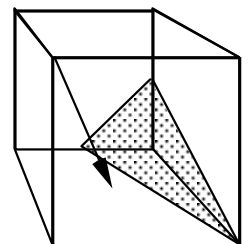


Plane: _____

Direction: _____

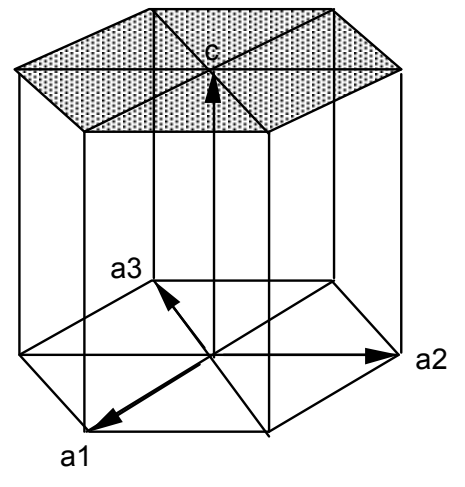
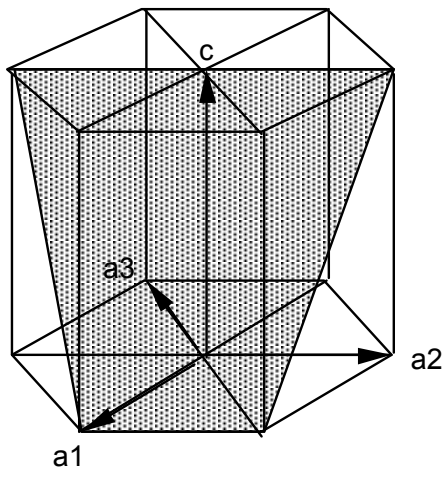
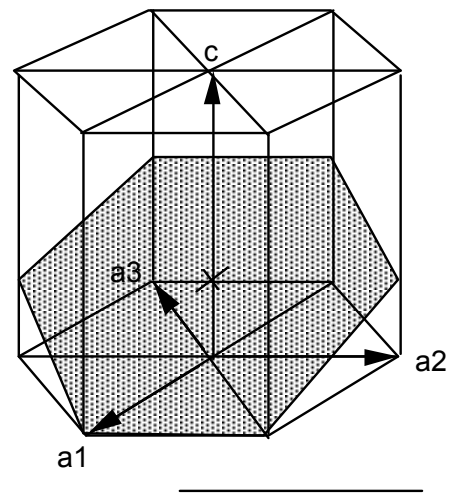
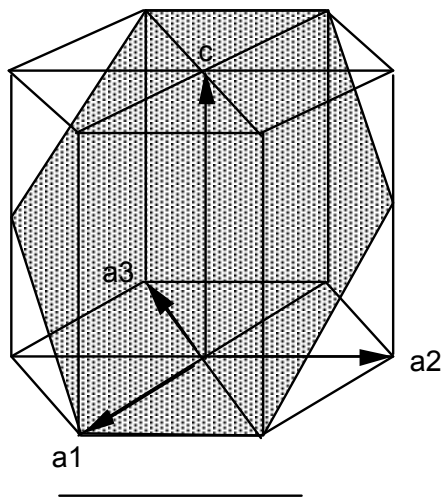
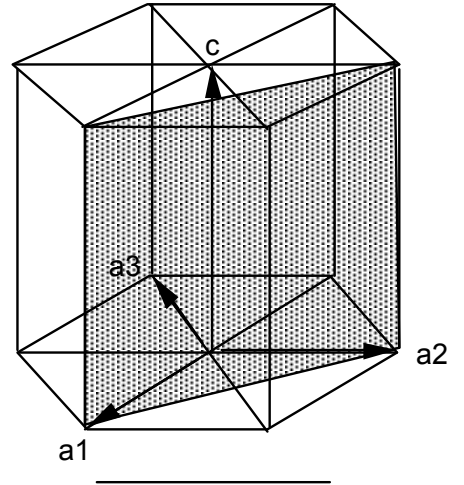
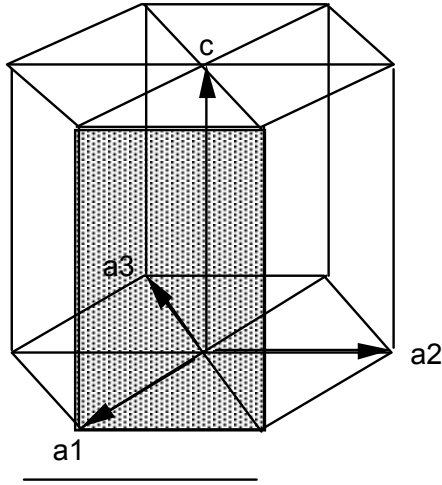






Miller Bravais Indexing Exercises

Write the proper form of the Miller-Bravais indices in the blanks, for the planes shown.

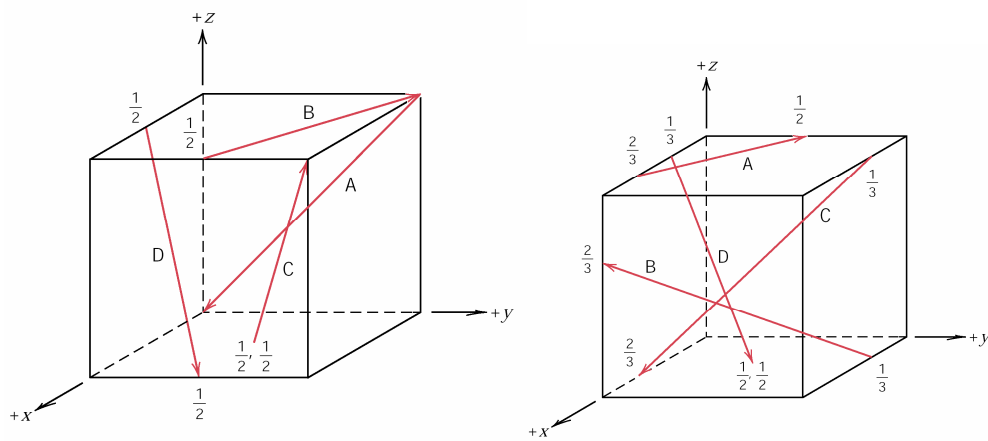
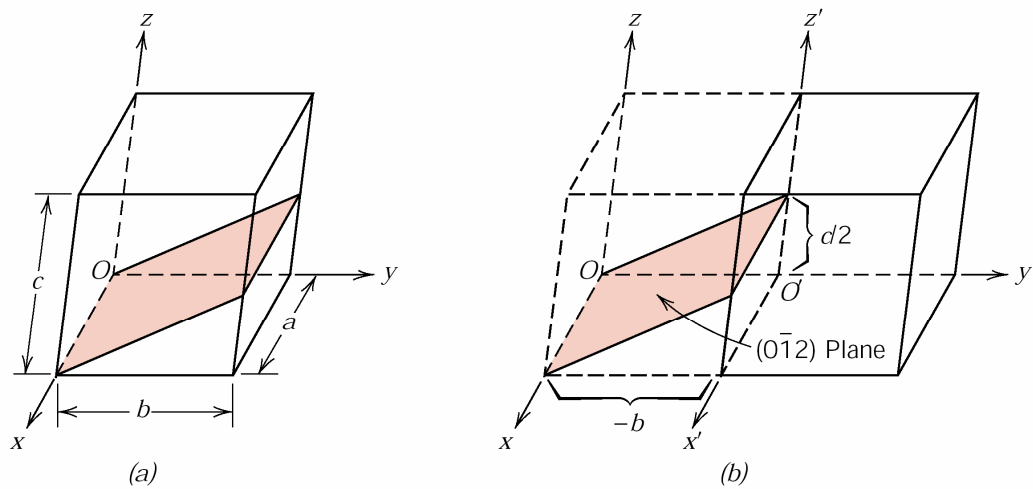


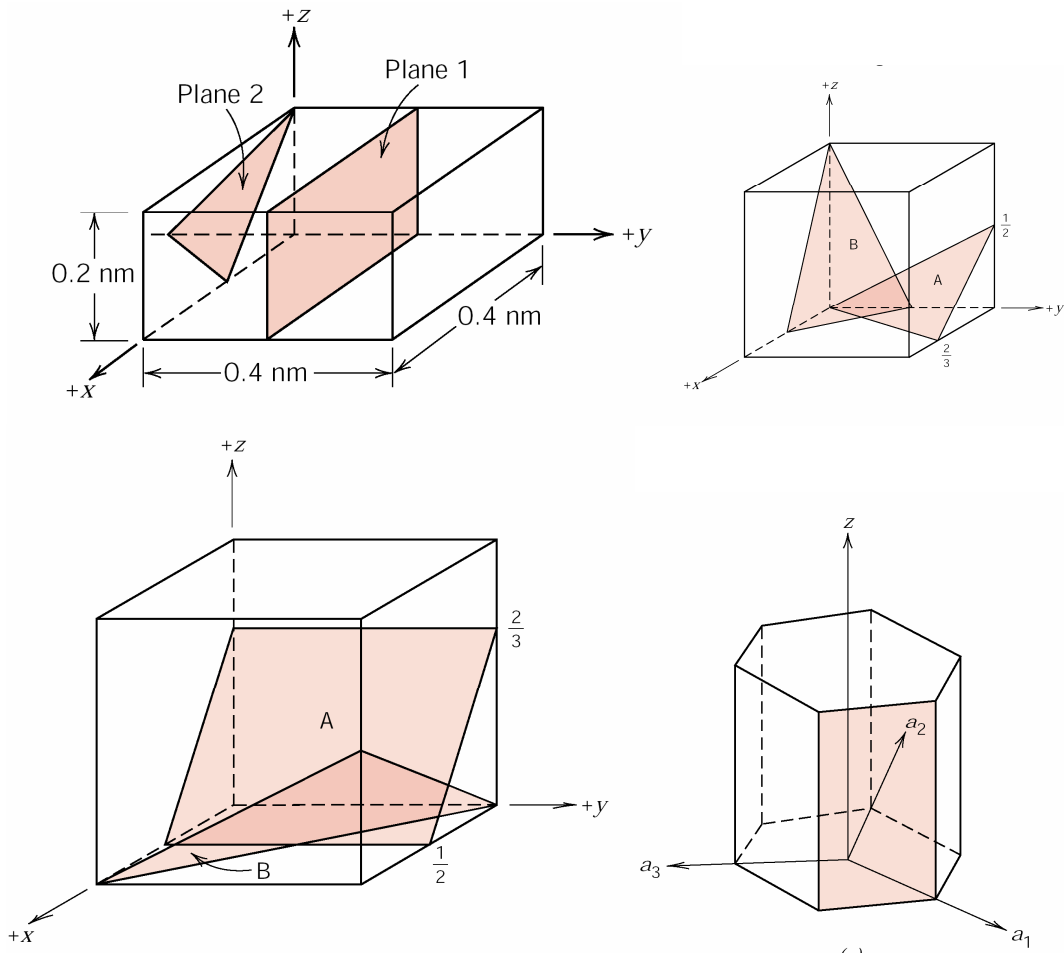
- اندیس جهات و نقاط

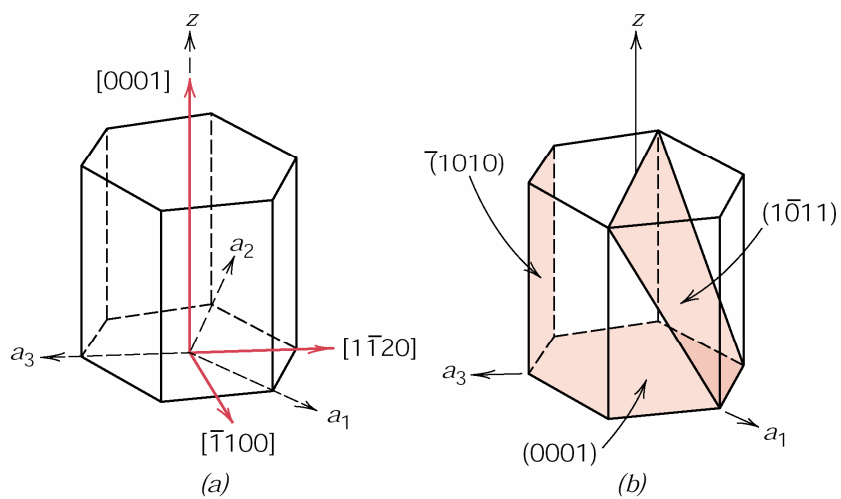
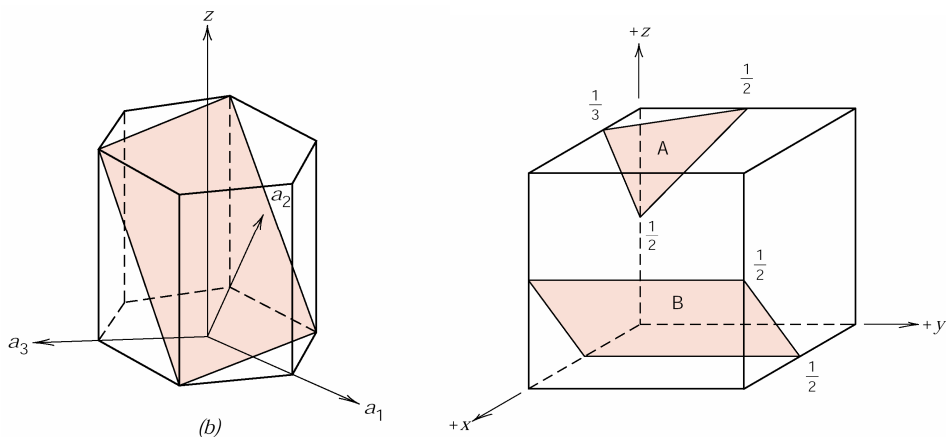
هر نقطه را در فضای سه بعدی می‌توان نسبت به برادارها تعیین کرد. مانند مثالهای زیر
اما اگر بخواهیم از یک نقطه به نقطه دیگری برسیم نیاز به یک جهت داریم که نشان دهنده مسیر و جهت حرکت است. برای
بدست آوردن جهت می‌توان نقطه را از
برای مثال بردار AB در شکل بالا این طور بدست می‌آید.

چند نکته در مورد اندیس صفحات، جهات و نقاط :

-۱







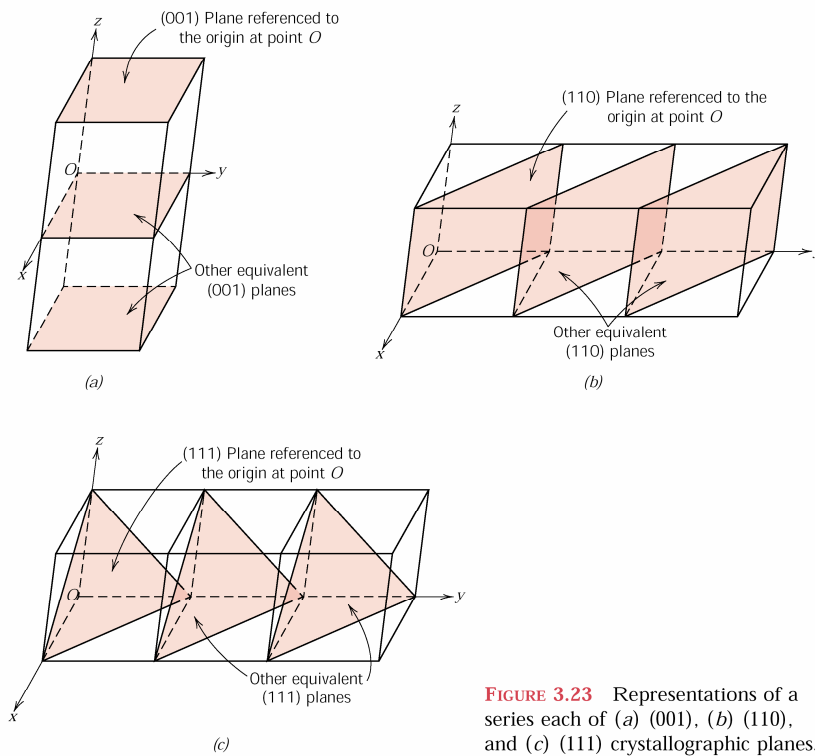
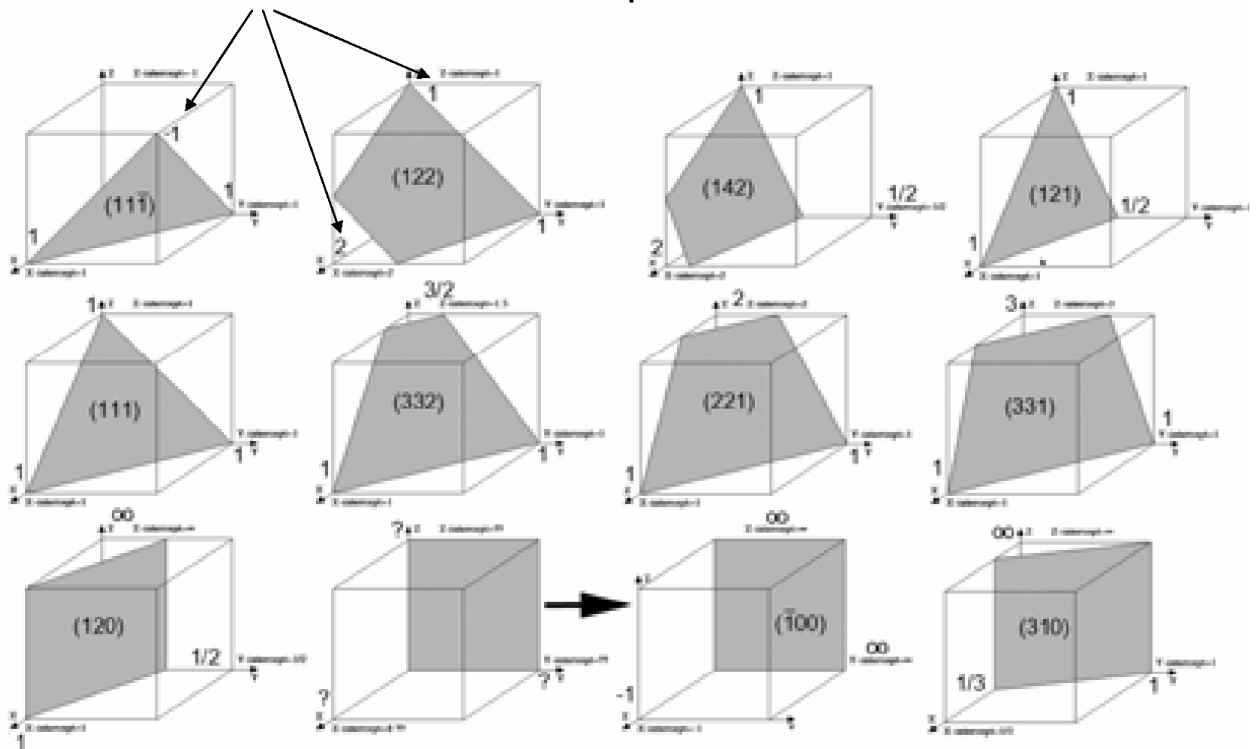
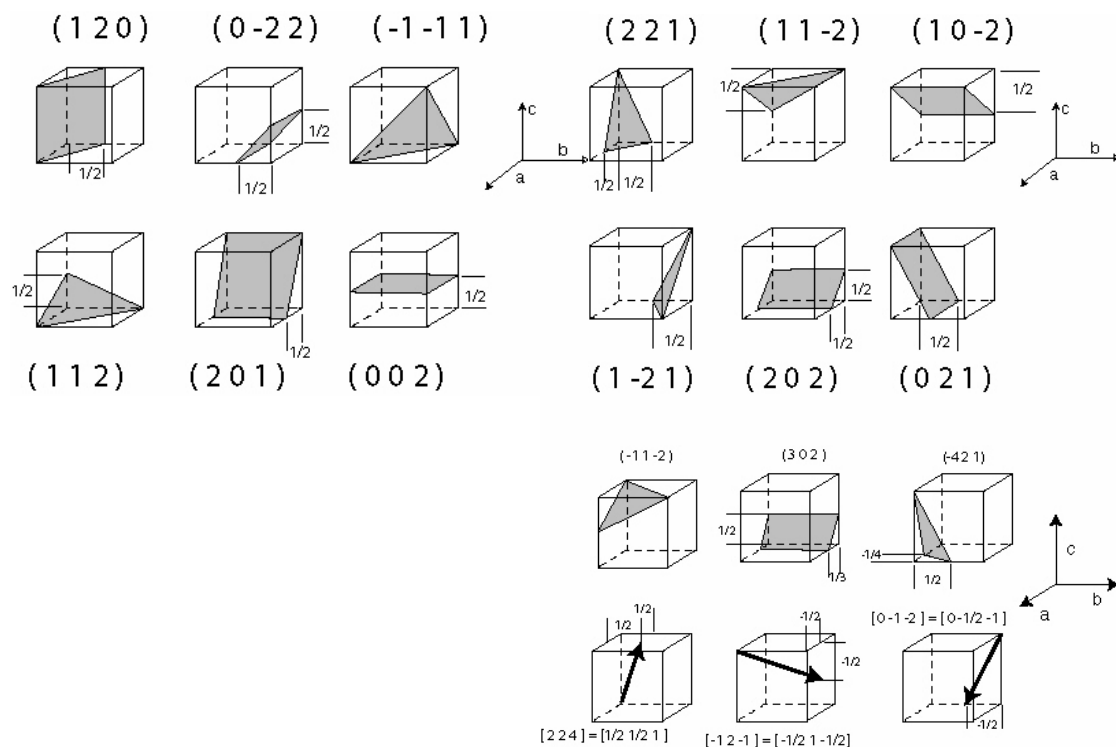
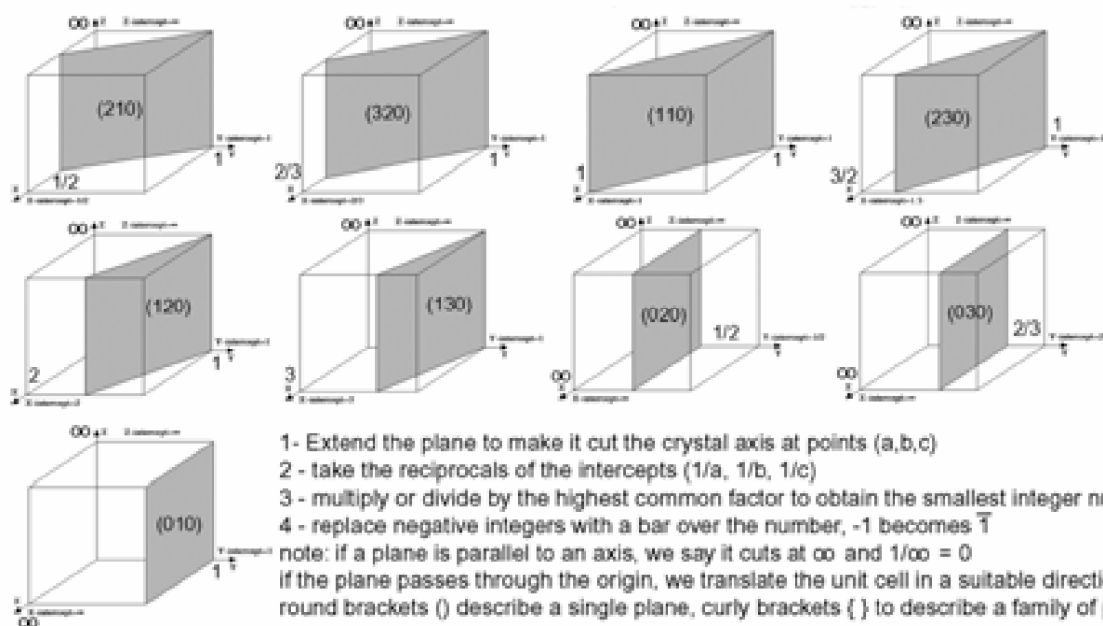


FIGURE 3.23 Representations of a series each of (a) (001), (b) (110), and (c) (111) crystallographic planes.

Numbers indicate axis intercepts





ضرب داخلی و خارجی

برای بردارها دو حالت ضرب داخلی و خارجی وجود دارد. که اولی به عدد می‌انجامد و دومی به یک بردار عمود بر دو بردار اولیه

ضرب داخلی (یا عددی)

اگر بخواهیم دو بردار $[u_1v_1w_1]$ و $[u_2v_2w_2]$ را در هم ضرب کنیم

$$\underline{[U_1V_1W_1][U_2V_2W_2]} = (U_1U_2 + V_1V_2 + W_1W_2)$$

که این جواب یک عدد است. قبلاً دیده بودیم که این مقدار با ضرب اندازه بردارها در کسینوس زاویه بین آنها برابر است. یعنی:

$$[U_1V_1W_1][U_2V_2W_2] = |U_1V_1W| \times |U_2V_2W| \cos \varphi$$

که قبلاً داشتیم که

$$|U_1V_1W| = \sqrt{U_1^2 + V_1^2 + W_1^2}$$

و

$$|U_2V_2W_2| = \sqrt{U_2^2 + V_2^2 + W_2^2}$$

$$2 \text{ و } 1 \Rightarrow \cos \varphi = \frac{U_1U_2 + V_1V_2 + W_1W_2}{\sqrt{U_1^2 + V_1^2 + W_1^2} \sqrt{U_2^2 + V_2^2 + W_2^2}}$$

پس زاویه بین دو بردار به راحتی با این عمل ضرب داخلی بدست آمد.

برای مثال زاویه بین دو بردار $[111]$ و $[110]$ به این صورت است.

$$\cos \varphi = \frac{2}{\sqrt{2}\sqrt{3}} = \frac{2}{\sqrt{6}}$$

و یا زاویه بین دو بردار $[112]$ و $[110]$

$$\cos \varphi = \frac{0}{\sqrt{2}\sqrt{6}} = 0 \Rightarrow P = 90^\circ$$

پس هرگاه ضرب داخلی دو بردار صفر شود دو بردار بر هم عمودند.

ضرب خارجی (یا برداری)

ضرب خارجی دو بردار، برداری عمود بر آن دو بردار به ما می‌دهد. البته در این حالت ترتیب نوشتن بردارها (اول و یا دوم نوشتن یک بردار) با توجه به قانون دست راست جهت بردار بدست آمده از ضرب برداری را مشخص می‌کند. با تغییر در نوشتن بردارها جهت بردار بدست آمده از ضرب برداری معکوس می‌شود. برای دو بردار $[u_1v_1w_1]$ و $[u_2v_2w_2]$ ، بردار ضرب خارجی با ضرب اندازه این بردارها در سینوس زاویه بین آنها بدست می‌آید. یعنی

$$[U_1V_1W_1] \wedge [U_2V_2W_2] = |U_1V_2W_1| \times |U_2V_2W_2| \times \sin \phi$$

اما به صورت ساده تر این بردار از حل ماتریس دو بردار بدست می‌آید.

$$\begin{bmatrix} U & V & W \\ U_1 & V_1 & W_1 \\ U_2 & V_2 & W_2 \end{bmatrix} = [(12-12), -(U_1W_2 - W_1U_2), (U_1V_2 - V_1U_2)]$$

برای مثال برای ضرب خارجی دو بردار $[111]$ و $[011]$ داریم:

$$\begin{bmatrix} U & & W \\ \bar{1} & 1 & 1 \\ 0 & 1 & \bar{1} \end{bmatrix} = [(-1-1), (-1), (-1)] = [\bar{2}11]$$

مشخص است که اگر ابتدا $[011]$ را می‌نوشتیم جواب معکوس و به صورت $[111]$ در می‌آمد.

اندیس صفحه و بردار نرمال

هر صفحه‌ای با اندیس (hkl) یک جهت (hkl) وجود دارد که همنام و عمود بر صفحه است. البته این حالت فقط برای سلول مکعبی صدق می‌کند. اما از این بردار نرمال چه استفاده‌ای می‌توان کرد؟
مهمترین استفاده این بردار بدست آوردن جهاتی است که در صفحه قرار دارد. فرض کنید جهت (hkl) در صفحه مثلاً $[111]$ قرار داشته باشد. اگر این جهت در آن صفحه باشد، بنابراین بر بردار نرمال صفحه عمود است. پس ضرب داخلی این بردار در بردار $[111]$ باید صفر باشد. یعنی

$$[111] \cdot [] = h \times 1 + L \times 1 + k \times 1$$

اگر حاصل این ضرب داخلی صفر باشد، جهت (hkl) در صفحه $[111]$ قرار دارد. پس باید داشته باشیم

$$h + k = -L \quad \text{یا} \quad h + k + L = 0$$

هر جهتی که این خاصیت را داشته باشد در صفحه $[111]$ قرار دارد. مانند

$$\left[\bar{1}10 \right], \left[12\bar{3} \right], \left[22\bar{4} \right], \left[\bar{2}11 \right], \dots$$

کاربرد دوم این بردار نرمال، اندازه گیری زاویه بین دو صفحه است. چون دو بردار نرمال بر دو صفحه مربوط به خود عمودند، پس زاویه بین دو صفحه برابر زاویه بین دو بردار نرمال می شود. و از طریق ضرب داخلی می توان این زاویه را حساب کرد. یعنی

$$\cos \theta = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + L_1 L_2}{|h_1 k_1 L_1| \times |h_2 k_2 L_2|}$$

کاربرد دیگر بردار نرمال پیدا کردن جهتی است که در هر دو صفحه وجود دارد. توجه دارید که هر دو صفحه غیر همنام با هم محل تلاقی دارند. این محل تلاقی همان برداری است که در هر دو صفحه وجود دارد. بر هر دو بردار نرمال صفحات عمود است.

فرض کنید برای دو صفحه $[111]$ و $[1\bar{1}1]$ که بردار نرمال $[111]$ و $[1\bar{1}1]$ دارند، در محل تقاطعشان یک خط یا بردار (hkl) قرار گرفته باشد. پس این (hkl) بر هر دو بردار نرمال عمود است.

برای پیدا کردن (hkl) می توان دو بردار نرمال را در هم ضرب خارجی کرد.

$$\begin{bmatrix} U & V & W \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & \bar{1} & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 20\bar{2} \end{bmatrix}$$

همانطور که می دانیم چون $[20\bar{2}]$ بردار است، پس معادل $[10\bar{1}]$ است. پس جواب ما بردار $[10\bar{1}]$ است که در هر دو صفحه قرار دارد.

کاربرد دیگر بردار نرمال این است که اگر دو بردار داشته باشیم و صفحه ای را که از این بردار می گذرد را بخواهیم بدست آوریم کافی است دو بردار را در هم ضرب خارجی کنیم، تا برداری را کهبه این دو جهت که درون صفحه هستند، عمود است را بدست آوریم. برای مثال فرض کنید برای دو بردار $[111]$ و $[21\bar{2}]$ صفحه گذاراز این دو بردار را بخواهیم بدست آوریم. کافی است دو بردار را در هم ضرب خارجی کنیم تا بردار نرمال صفحه که همنام با همان صفحه است را بدست آوریم.

یعنی

$$\begin{bmatrix} U & V & W \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & \bar{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10\bar{1} \end{bmatrix}$$

که برار نرمال صفحه $[10\bar{1}]$ است. پس دو بردار ذکر شده در صفحه $[10\bar{1}]$ قرار دارند.

کاربرد دیگر بردار نرمال یافتن این مسئله است که آیا سه بردار داده شده در یک صفحه هستند یا نه؟

اگر سه بردار در یک صفحه باشند، باید اگر دو بردار را در هم ضرب خارجی کنیم و حاصل را در بردار سوم ضرب داخلی کنیم جواب صفر شود. یعنی بردار نرمال بدست آمده از ضرب خارجی دو بردار اول، بر بردار سوم هم عمود باشد تا این بردار هم در آن صفحه باشد.

سؤال آیا سه بردار $[101]$ ، $[112]$ و $[312]$ در یک صفحه قرار دارند؟

بردار نرمال دو بردار اول

$$\begin{bmatrix} U & V & W \\ 1 & 0 & \bar{1} \\ 1 & 1 & \bar{2} \end{bmatrix} = [111]$$

برای وجود داشتن جهت سوم در صفحه بدست آمده باید ضرب داخلی آن در بردار نرمال آن صفحه صفر می‌شود که می‌شود یعنی

$$[\bar{3}12] \cdot [111] = 0$$

کاربرد دیگر بردار نرمال یافتن صفحات هم قطب است (یا صفحات هم محور). این صفحات به گونه‌ای کنار هم قرار می‌گیرند که محل تقاطع مشترک دارند. برای مثال یک کتاب باز را در نظر بگیرید، همه صفحات این کتاب هم محورند و محور مشترک، محوری در پشت جلد کتاب است. برای پیدا کردن این که آیا سه صفحه مورد نظر هم محورند یا نه کافی است، محور مشترک دو صفحه اول را بدست آورده و در بردار نرمال محور سوم ضرب خارجی کنیم.

برای مثال آیا سه $[211]$ و $[233]$ و $[111]$ با هم هم محورند؟ اول محور مشترک دو محور اول را بدست می‌آوریم یعنی

$$\begin{bmatrix} U & V & W \\ 2 & \bar{1} & \bar{1} \\ 2 & 3 & 3 \end{bmatrix} = [0\bar{8}8]$$

اگر ضرب داخلی این بردار در بردار سوم صفر شود یعنی در صفحه سوم نیز قرار دارد، یعنی محور منطقه این سه صفحه است.

$$[0\bar{8}8] \cdot [111] = 0(0 + (-8) + 8) = 0$$

چند مثال از صفحه

برای بردار مختصات داده شده، صفحات را نامگذاری کنید.

چهار نوع صفحه (111) داریم که در شکل دوتای آنها دیده نمی‌شوند.

فاصله صفحات هم ارز

همانطور که دیده شد صفحات هم ارز دارای جهات و فواصل یکسانند. فواصل صفحات را در سلول مکعبی برای صفحه (hkl) از فرمول زیر بدست می‌آوریم.

$$d_{(hkl)} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + L^2}}$$

که a ثابت شبکه (طول هر یال مکعب) است.

مثال

$$d_{(112)} = \frac{a}{\sqrt{6}} \quad \text{و} \quad d_{(111)} = \frac{a}{\sqrt{3}}$$

$$d_{(122)} = \frac{a}{\sqrt{9}}$$

عدد فشردگی:

حجم اتمهای موجود در یک سلول واحد به حجم کل سلول واحد را عدد فشردگی یا packing factor گویند. یعنی

$$\text{عدد فشردگی} = \frac{\text{حجم اتم} * \text{تعداد اتم}}{\text{حجم سلول واحد}}$$

$$\text{for s.c} \rightarrow pF = \frac{1 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3}$$

$$a = 27 \rightarrow a^3 = 8r^3$$

$$pF = \frac{4/3\pi r^3}{8r^3} = \frac{p}{6}$$

$$pF_{bcc} = \frac{2 \times 4/3\pi r^3}{a^3}, \text{ for } bcc \quad \sqrt{3}a = 4r$$

$$a^3 = \frac{64}{3\sqrt{3}} r^3 \quad a = \frac{4}{\sqrt{3}} r$$

$$p.f = \frac{2 \times 4/3\pi r^3}{\frac{64}{3\sqrt{3}} r^3} = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} = 0.68$$

$$\text{for } fcc \quad p.f_{fcc} = \frac{4 \times 4/3\pi r^3}{a^3}$$

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

$$a^3 = \frac{64}{2\sqrt{2}} r^3$$

$$pf_{fcc} = \frac{4 \times 4/3\pi r^3}{\frac{64}{2\sqrt{2}} r^3} = \frac{4 \times 4 \times 2\sqrt{2}\pi r^3}{3 \times 64 r^3} = \frac{2\sqrt{2}\pi}{3 \times 4} = 0.74$$

همانطور که دیده می شود فضاهای پر در سلول fcc خیلی بیشتر از سلول واحد bcc و فضاهای پر در سلول bcc خیلی بالاتر از سلول s.c است. بنابراین چگالی کلی شبکه fcc خیلی بالاتر از سلولهای bcc و s.c است.

$$\text{for bcc: } \sqrt{3}a = 4r \rightarrow a = \frac{4r}{\sqrt{3}} \rightarrow a^3 = \frac{8r^3}{3\sqrt{3}}$$

$$\text{P.F.} = \frac{2 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{\frac{8\pi r^3}{3\sqrt{3}}} = \frac{3\sqrt{3}\pi}{3} = \pi$$

$$\text{for Fcc} = \text{PF} = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3}$$

$$\sqrt{2}a = 4r \rightarrow a = r \rightarrow a^3 = 2\sqrt{2}r^3$$

$$\rightarrow \text{PF} = \frac{\frac{16}{3} \pi r^3}{2\sqrt{2}r^3} = \frac{16\pi}{6\sqrt{2}}$$

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

$$= \sqrt{a^2 + a^2} = \sqrt{2}.a \quad \text{قطر مربع}$$

$$= \sqrt{(\sqrt{2}a)^2 + a^2} = \sqrt{3}.a \quad \text{قطر مکعب}$$

عدد همسایگی

تعداد اتمهایی را که با یک اتم مشخص در تماسند عدد همسایگی می نامند. برای مثال در شبکه دو بعدی مربعی عدد همسایگی چقدر است؟ با رسم این شبکه عدد همسایگی را مشخص می کنیم. دیده میشود که برای اتم هاشور خورده عدد همسایگی چهار است. در سلول مکعبی چون یک ردیف سلول مربعی روی سلول قبلی قرار میگیرد، عدد همسایگی اتم هاشور خورده ۶ می

شود. یعنی در شش جهت اتمهای همسایه با اتم وسط تماس دارند. بالا، پایین، راست، چپ، زیر و رو. برای سلول واحد bcc تجسم این عدد خیلی راحت تر است. اگر اتم وسط bcc را در نظر بگیرید این اتم با هشت اتم اطراف در تماس است. پس عدد همسایگی آن هشت است. در سلول fcc اگر اتم پایین قرار گرفته و وسط صفحه ۰۰۱ را در نظر بگیریم در آن صفحه اتم با چهار اتم در تماس است. همچنین ۴ اتم بالا در صفحه ۰۰۲ نیز با اتم در نظر گرفته تماس دارند. ۴ اتم صفحه ۰۰۲ هم با این اتم تماس دارند پس هر اتم fcc با ۱۲ اتم تماس دارد و عدد همسایگی آن ۱۲ است.

اما مفهوم عدد همسایگی چه اهمیتی دارد. در پیوند بین اتمها داشتیم که وقتی دو اتم در فاصله ۷۰ قرار بگیرند انرژی را به میزان E_0 کاهش میدهند. حال اگر یک اتم با دو اتم دیگر با فاصله ۷۰ تماس پیدا کنند، انرژی شبکه به اندازه $2E_0$ کاهش می‌یابد. بنابراین برای هر اتم برای شبکه SC انرژی شبکه به اندازه $6E_0$ کاهش می‌یابد. کاهش انرژی شبکه برای حالات bcc و fcc، $8E_0$ و $12E_0$ است. بنابراین برای وضعیت یکسان حالت fcc کاهش انرژی شبکه را به ما میدهد و پایدارترین حالت است. پس اگر یک سری اتم را که در حالت SC قرار دارند را به حال خود رها کنیم تمایل دارند که به سمت حالت fcc بروند. همانطور که دیدید هرچه فاکتور فشردگی بالاتر رفت، عدد همسایگی هم افزایش پیدا کرد.

عدد همسایگی در صفحه

برای پیدا کردن عدد همسایگی در صفحه باید تعداد اتم در تماس با هرکدام از اتمها را حساب کنیم. برای این کار ابتدا باید صفحه اتم مورد نظر را تجسم کنید.

مثال: عدد همسایگی صفحه ۱۰۰ در شبکه SC: همانطور که دیده میشود این عدد چهار است.

مثال: عدد همسایگی صفحه ۱۱۰ در bcc: همانطور که دیده میشود این عدد ۴ است.

عدد همسایگی صفحه ۱۱۱ در شبکه fcc:

این عدد همسایگی ۶ اتم چرا؟

عدد همسایگی صفحه ۱۰۰ در شبکه fcc

این عدد ۴ است.

عدد همسایگی صفحه ۱۱۰ شبکه fcc:

عدد همسایگی ۲ است.

از عدد همسایگی صفحه چه چیزی می‌فهمیم؟ فرض کنید که یک کریستال بزرگ یا شبکه fcc را در صفحه ۱۱۱ قطع کرده‌ایم. انرژی فصل مشترک این صفحه چقدر است؟ چون عدد همسایگی صفحه ۱۱۱ شبکه fcc، ۶ است و عدد همسایگی حجمی آن ۱۲ است، پس در کل ۶ پیوند حذف شده است. اما ۳ تا از این پیوندها درون ماده است که قطع نشده اند و فقط ۳ پیوند دیگر قطع شده اند. پس انرژی فصل مشترک fcc با هوا، به میزان $3E_0$ برای هر اتم می‌باشد.

انرژی صفحات کریستالی

همانطور که گفته شد، با توجه به تعداد اتمهای قطع شده، انرژی سیستم برای یک صفحه کریستالی بالا می‌رود. مثلاً فرض کنید یک کریستال را که bcc در صفحه (۱۰۰) مقطع زده‌ایم. به علت اینکه عدد همسایگی در صفحه برای سلول bcc در صفحه (۱۰۰) صفر است، تعداد اتمهای قطع شده برای هر اتم ۴ است. (چون در bcc عدد همسایگی حجمی ۸ است و چهار اتم هم به صورت قطع نشده در زیر صفحه (۱۰۰) مورد نظر قرار دارند). در زیر عدد همسایگی صفحه‌ای و انرژی نیز صفحه را می‌بینید. بدیهی است که انرژی همه صفحات را نسبت به انرژی کریستال بالاتر و مقدار آن مثبت است.

استحاله و تغییرات حجم ناشی از آن:

تغییر حالت یک ماده را از یک نوع سلول واحد به نوع دیگر استحاله گویند. با توجه به عدد همسایگی و عدد فشردگی هر استحاله‌ای موجب تغییر در حجم مواد می‌گردد.

فرض کنید طی یک استحاله اگر ماده‌ای از حالت fcc به حالت bcc تبدیل شود، میزان تغییر حجم چه اندازه است؟

$$fcc \rightarrow bcc$$

فرض کنید ماده در حالت اول N اتم داشته باشد، مسلماً در حالت دوم هم N اتم دارد. برای حالت اول fcc، هر سلول واحد در برگیرنده ۴ اتم است، بنابراین $\frac{N}{4}$ سلول واحد در حالت اول و $\frac{N}{2}$ سلول واحد در حالت دوم (bcc) داریم. حجم شبکه fcc و bcc بر حسب اندازه شعاع اتم به صورت زیر است:

$$V_{fcc} = a^3 = \left(\frac{4}{\sqrt{2}}r\right)^3 = 16\sqrt{2}r^3$$

$$V_{bcc} = a^3 = \left(\frac{4}{\sqrt{3}}r\right)^3 = \frac{64}{3\sqrt{3}}r^3$$

حجم کل ماده برابر است با: حجم هر سلول واحد ضربدر تعداد سلولهای واحد

$$V_{fcc} = \frac{N}{4} \times 16\sqrt{2}r^3, V_{bcc} = \frac{N}{2} \times \frac{64}{3\sqrt{3}}r^3$$

$$\frac{V_{bcc}}{V_{fcc}} = \frac{\frac{N}{4} \times 16\sqrt{2}r^3}{\frac{N}{2} \times \frac{64}{3\sqrt{3}}r^3} = \frac{4 \times 64}{6 \times 16\sqrt{6}} = 1.088$$

بنابراین تبدیل از حالت fcc به bcc به اندازه ۱/۰۸۸ افزایش حجم ایجاد کرده است.

اندازه گیری جرم اتمی (جرم هر اتم)

فرض کنید برای آهن خالص با چگالی 7.87 g/cm^3 و ثابت شبکه 2.8567 \AA وزن هر اتم را محاسبه کنیم. آهن شبکه bcc دارد.

$$V_{bcc} = a^3 = (2.8567 \times 10^{-8} \text{ cm})^3 = 23.149 \times 10^{-24} \text{ cm}^3$$

$$\times V_{bcc} = 7.87 \times 23.149 \times 10^{-24} \text{ جرم هر اتم}$$

ضرب عدد ۲ به این دلیل است که در هر سلول دو اتم وجود دارد.

$$= \text{جرم هر اتم} \times 9.169 \times 10^{-23} \text{ g}$$

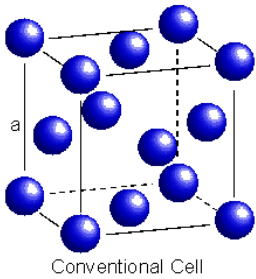
اما برای یافتن واحد وزن هر ذره ای جرم 6.02×10^{23} از آن ذره را در نظر می گیرند (عدد آو گادرو)

$$55.2 \text{ g} = 6.02 \times 10^{23} \times \text{جرم هر اتم}$$

$$\text{جرم هر اتم} \times 6.02 = 55.2 \text{ g}$$

پس جرم اتمی آهن ۵۵/۲ است که هالته با تقریب خوبی با جدول مندلیف مطابقت دارد.

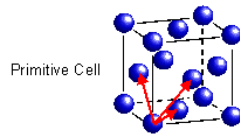
Face Centered Cubic Lattice



Atoms per conventional cell: 4

First neighbors: 12
First neighbor distance: $\frac{\sqrt{2}}{2} a$

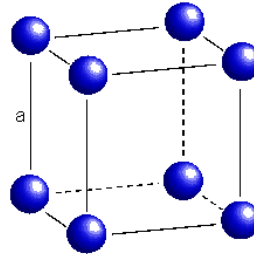
Second neighbors: 6
Second neighbor distance: a



Elements with FCC lattices include Al, Ag, Ca, Cu, Ni, Pb, and Pt.

D. Richards 9/99

Simple Cubic Lattice



Atoms per cell: 1

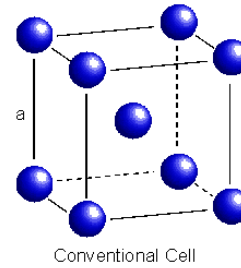
First neighbors: 6
First neighbor distance: a

Second neighbors: 12
Second neighbor distance: $\sqrt{2} a$

The only element known to form a simple cubic lattice is polonium.

D. Richards 9/99

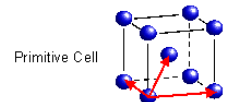
Body Centered Cubic Lattice



Atoms per conventional cell: 2

First neighbors: 8
First neighbor distance: $\frac{\sqrt{3}}{2} a$

Second neighbors: 6
Second neighbor distance: a



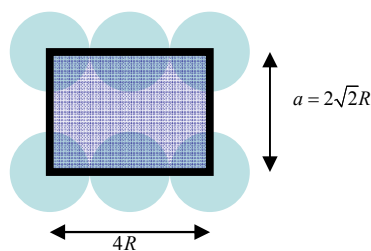
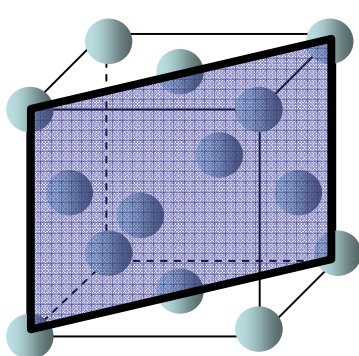
Elements with BCC lattices include Cr, Fe, K, Li, Mo, Na, Ta, and W

D. Richards 9/99

Planar Density (PD)

$$PD = \frac{\text{Number of atoms centered on a given plane}}{\text{Area of the plane}}$$

Example: calculate the planar density on (1 1 0) plane of an FCC crystal.



Count only the parts of the atoms within the plane:
2 atoms

$$area = 2\sqrt{2}R \times 4R$$

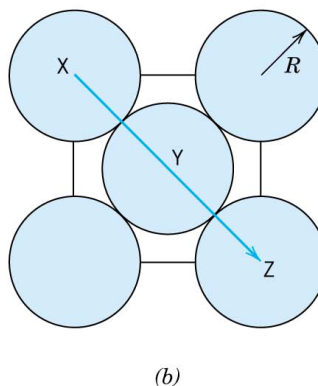
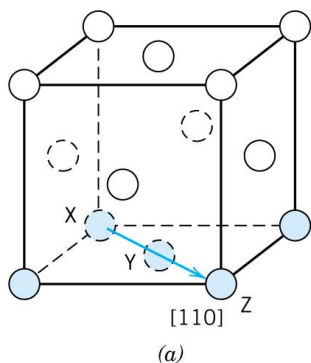
$$PD = \frac{2}{(4R)(2\sqrt{2}R)} = \frac{1}{4\sqrt{2}R^2}$$



Linear Density (LD)

$$LD = \frac{\text{Number of atoms centered on a direction vector}}{\text{Length of the direction vector}}$$

Example: calculate the linear density of an FCC crystal along [1 1 0].



Length = 4R

Effectively 2 atoms along the [1 1 0] vector.

$$LD = 2/4R = 1/2R$$

Density example

Calculate density of copper given: $R = 0.128 \text{ nm}$
 $A = 63.5 \text{ g/mol}$
 FCC structure

Recall for FCC, there are 4 atoms per unit cell.

Express unit cell volume in terms of atomic radius R .

$$V = a^3 = (2\sqrt{2}R)^3 = 16\sqrt{2}R^3$$

Then we have:

$$\rho = \frac{M}{V} = \frac{nA}{N_A 16\sqrt{2}R^3}$$

$$= \frac{4(63.5 \text{ g/mol})}{(6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1})(16\sqrt{2})(1.28 \times 10^{-8} \text{ cm})^3}$$

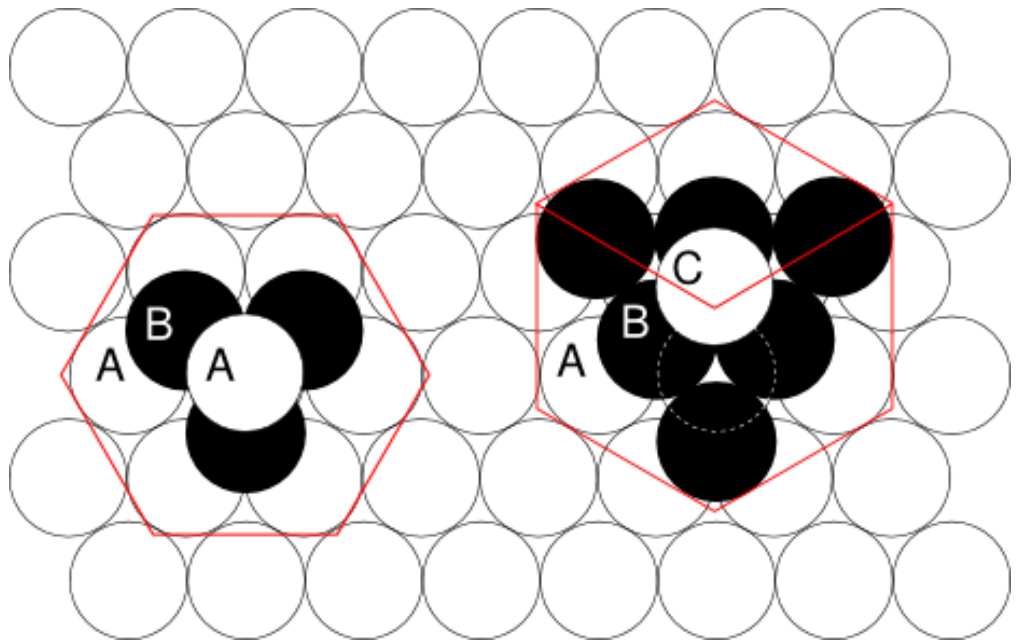
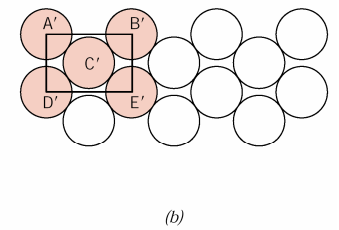
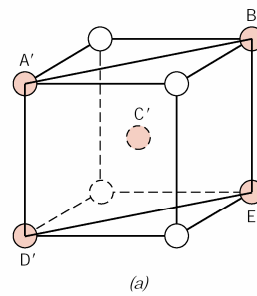
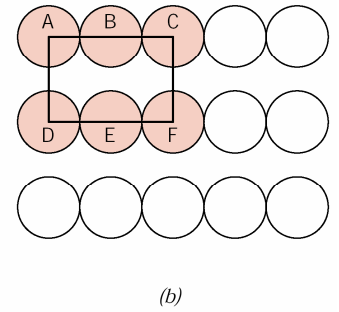
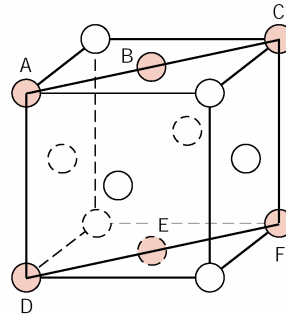
$= 8.89 \text{ g/cm}^3$

Compare to actual value of **8.94 g/cm³**!

Atomic packing factor (APF) for FCC

$V_{atoms} = 4 \left(\frac{4}{3} \pi R^3 \right)$
 $V_{unit_cell} = a^3 = (2\sqrt{2}R)^3 = 16\sqrt{2}R^3$

Independent of R and $a!$

$$APF = \frac{V_{atoms}}{V_{unit_cell}} = \frac{\left(\frac{16}{3} \pi R^3 \right)}{16\sqrt{2}R^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0.74$$


$$APF = \frac{\text{Volume of Atoms}}{\text{Volume of Whole Crystal}}$$

مکانهای بین نشین

در صورتی که اتم دیگری بخواهد در میان اتمهای یک شبکه بنشیند، به این اتم بین نشین و به مکان قرار گیری اتم مکان بین نشین می گویند.

Lattice و Mottif در شبکه های اتمی

گفته شد که قرارگیری منظم اتمها (Mottif) در مکانهای اتمی (Lattice) شبکه اتمی را می سازد. حال چند شبکه را برای مثال در نظر گرفته و نوع Mottif و Lattice را مشخص می کنیم.

مثال CsCl

یعنی اگر شبکه Sc را با موتیفهای دو اتمی پر کنیم، بکه بالا بدست می آید.

مثال شبکه Hcp

موتیف دو اتمی

شبکه هگزاگونال است.

(عدد ۰ و $\frac{1}{2}$ به معنای ارتفاع اتم است، یعنی اتم ۰ در قاعده پایینی قرار گرفته و اتم $\frac{1}{2}$ در وسط قرار دارد)

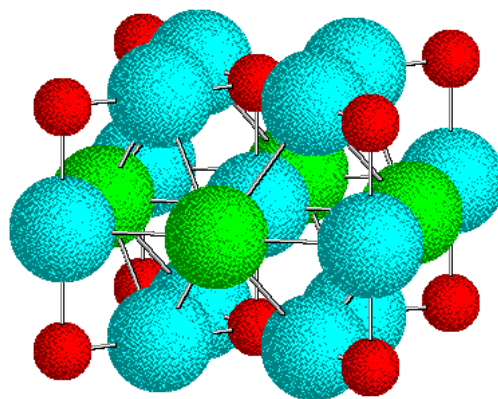
$$\text{Cl تعداد اتم} = \left(8 \times \frac{1}{8}\right) + \left(3 \times \frac{1}{2}\right) = 4$$

$$\text{Na تعداد اتم} = \left(12 \times \frac{1}{4}\right) + 1 = 4$$

شبکه الماسی

نوع موتیف دو اتمی

نوع شبکه fcc است.



اندیس گذاری شبکه هگزاگونال

در شبکه هگزاگونال به جای در نظر گرفتن سه بردار، چهار بردار را برای اندیس گذاری در نظر می گیریم. اگر صفحه روبرو را در نظر بگیریم که عمود بر ... است.

$$\begin{array}{cccc} a & b & i & c \\ 1 & 1 & -\frac{1}{2} & \infty \\ 1 & 1 & \frac{1}{2} & 0 \\ (11\bar{2}0) \end{array}$$

در شبکه هگزاگونال همیشه صفحات به صورت چهار رقمی اند. $(hkjl)$ و همیشه رابطه $k+k+l=0$ برقرار است. یعنی با به دست آوردن دو مؤلفه، مؤلفه سوم به دست می آید. به این ترتیب صفحات به صورت hkl به دست می آیند.

چیدمان اتمی:

هر شبکه ای را، به صورت چیدمانی از صفحه های اتمی مشابه میتوان در نظر گرفت. این صفحات را با توجه به موقعیت منحصر به فردشان با حروف A, B, C و ... نامگذاری میکنند. صفحه A صفحه ای است که اتمهای آن همه در مکانهای نوع A قرار گرفته اند و به همین ترتیب.

چیدمان اتمی SC:

همانطور که دیده میشود صفحات SC به صورت مشابه روی هم قرار می گیرند و شبکه SC را می سازند. به صورت ... AAA ...

چیدمان bcc

چیدمان اتمی bcc، از صفحات اتمی مشابه به صورت ... ABAB ...

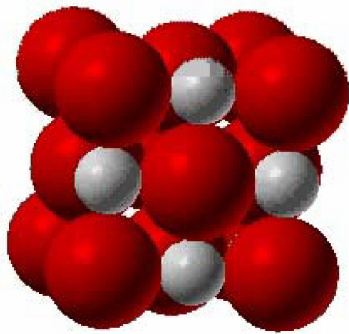
چیدمان fcc

آیا صفحات روبرو از نظر شکل مشابه‌اند؟

خیر. پس باید به دنبال صفحات مشابه برویم. در fcc دسته صفحه‌های (۱۱۱) مشابه‌اند. همانطور که دیده می‌شود مرکزگیری صفحات اتمی مشابه به صورت ... ABCABC ... می‌باشد.

چیدمان HCP

در مورد چیدمان شبکه هگزاگونال فشرده در قسمت موتیف مقداری صحبت شد. اگر به شکل روبه‌رو دقت شود اگر اتمهایی را که با ارتفاع $\frac{1}{2}$ هستند به هم وصل کنیم چیدمان دقیقاً مانند صفحه ۰ است. تنها تفاوت در قرار نگرفتن این اتمها در مکانهای زیرین است. اتمهای ارتفاع ۱ هم دقیقاً روی اتمهای ارتفاع ۰ قرار می‌گیرند. اگر قرارگیری اتمهای صفر را A و اتمهای ۱ را B در نظر بگیریم، چیدمان اتمهای HCP به صورت ABAB است. اگر دقت شود صفحات (۰۰۰۱) رسم شده برای HCP دقیقاً با شکل صفحات (۱۱۱) fcc مشابه است. تنها تفاوت قرارگیری صفحات (۱۱۱) به صورت ABCABC است. میزان عدد همسایگی HCP هم مانند fcc، ۱۲ است. اگر اتم قرار گرفته در مرکز ارتفاع صفر (یعنی صفحه (۰۰۰۱)) را در نظر بگیرید. این اتم در این صفحه با شش اتم در تماس است. همچنین ۳ اتم در ارتفاع $\frac{1}{2}$ و سه اتم در ارتفاع $-\frac{1}{2}$ با این اتم تماس دارند. پس عدد همسایگی اتمها در HCP، ۱۲ است.



Structure of NaCl

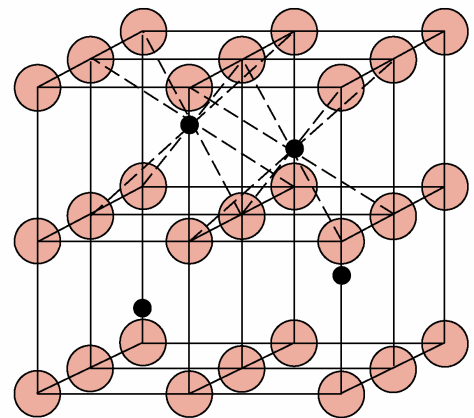
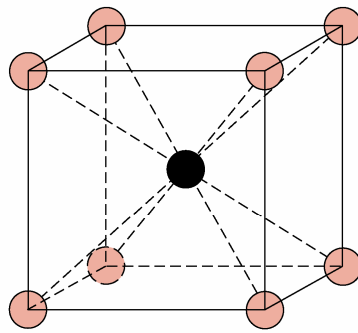
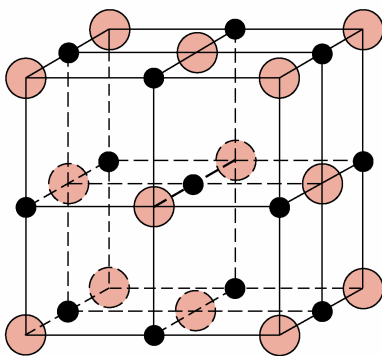
Cl⁻ anions are red

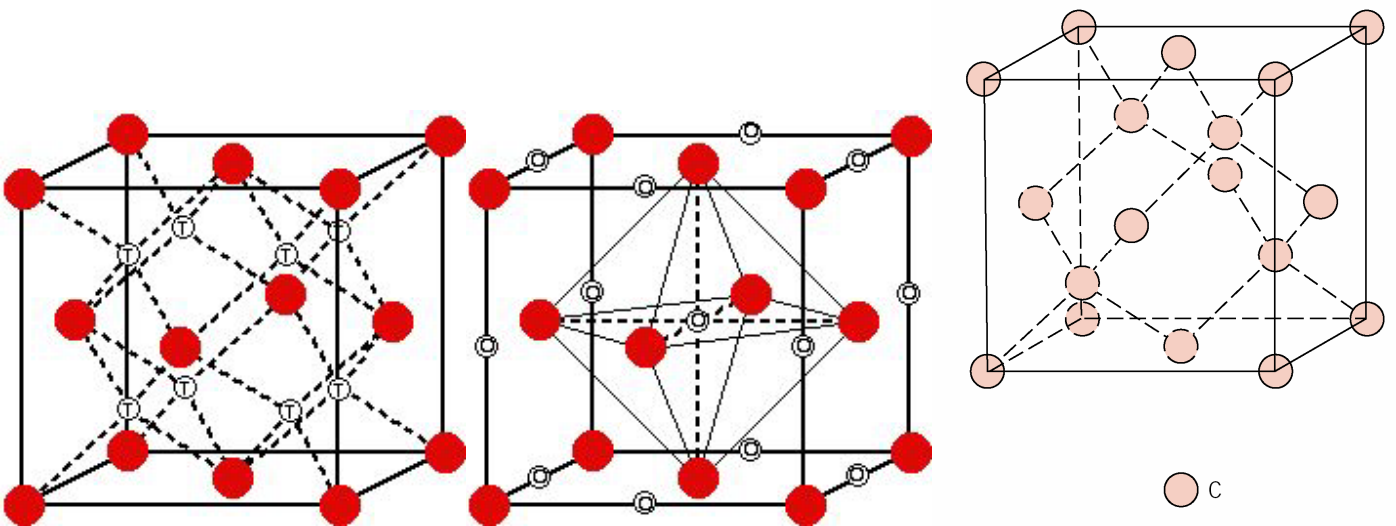
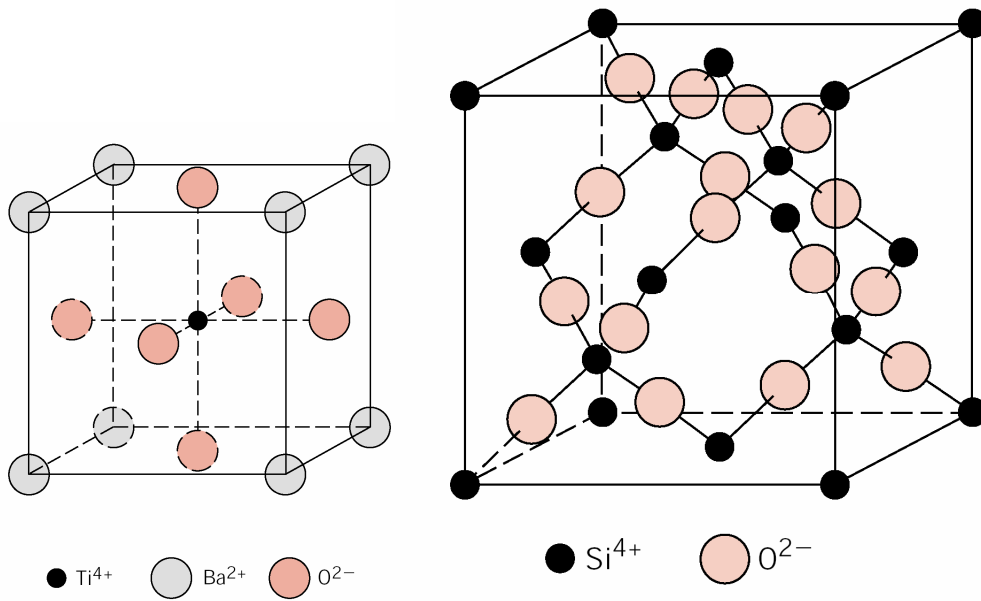
Na⁺ cations are grey

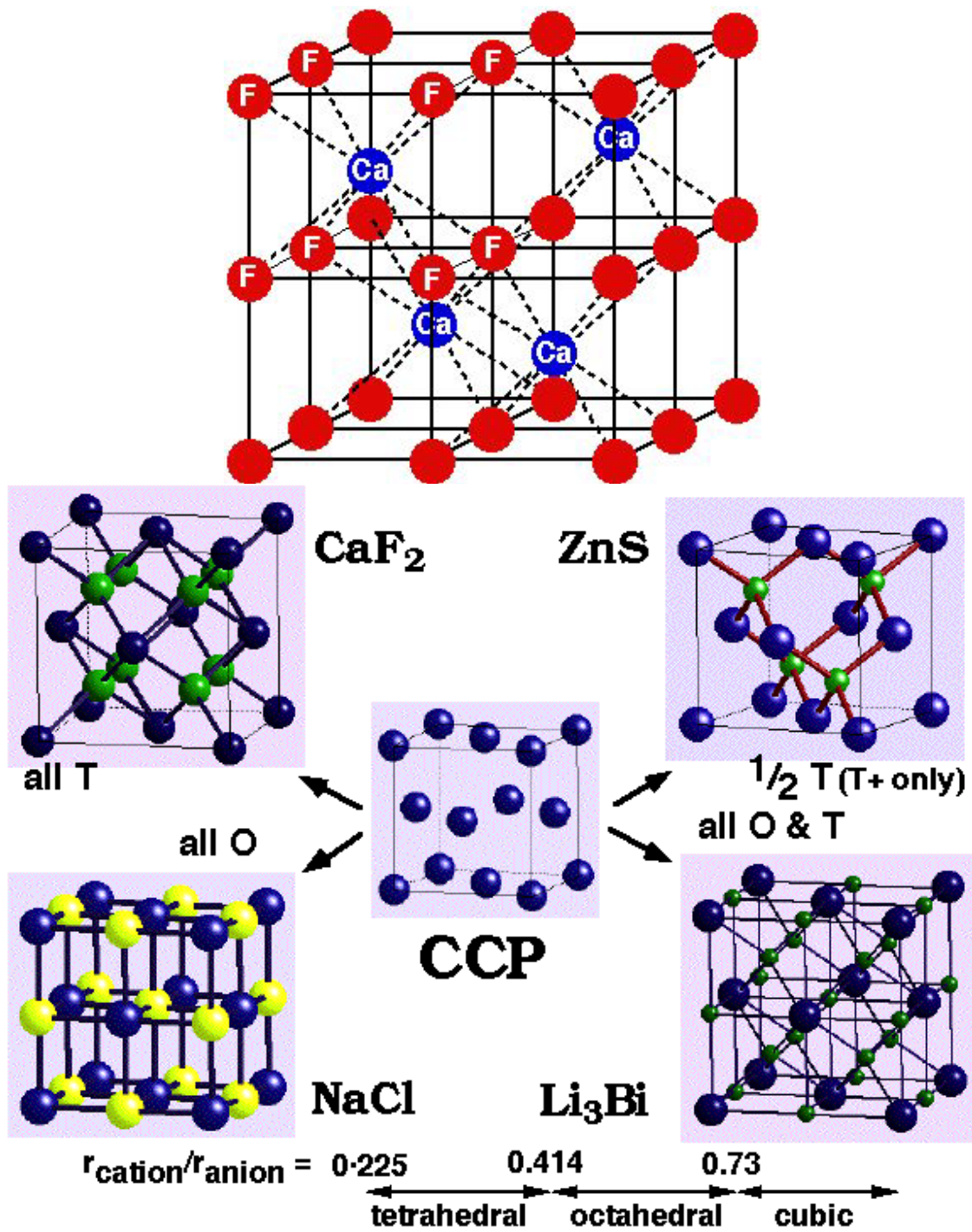
Cl⁻ and Na⁺ ions sit on *interpenetrating* FCC lattices.

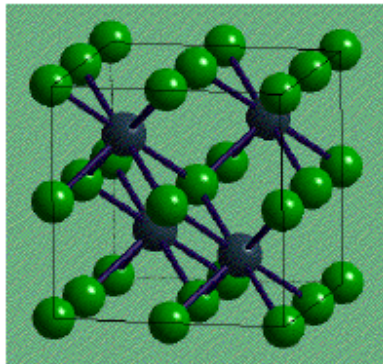
Close-packed directions

--along cube edges.

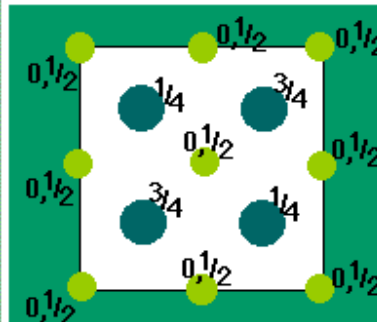




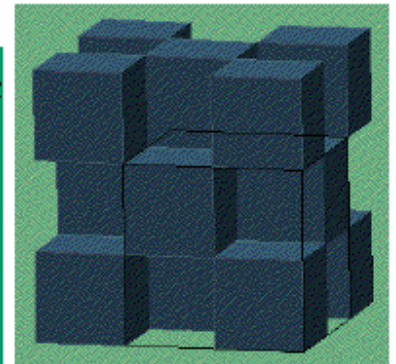




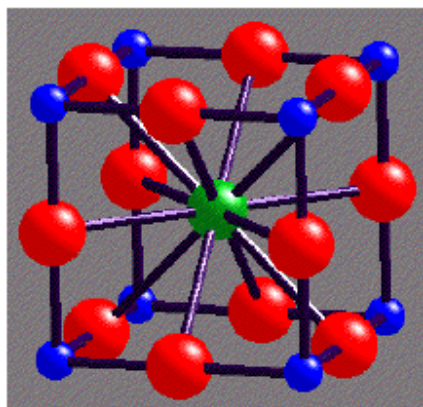
Fluorite B-cell



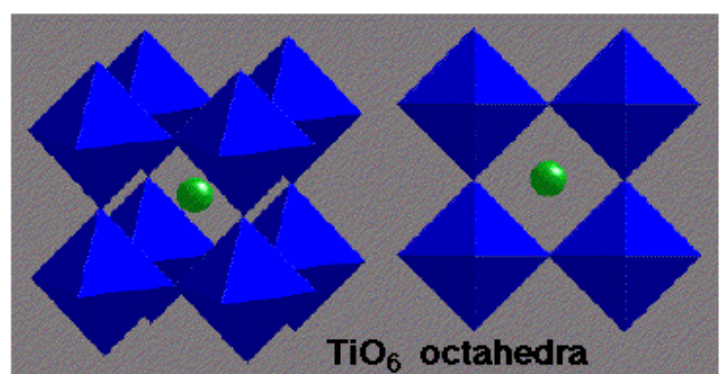
Plan view



CaF₂ Cubes



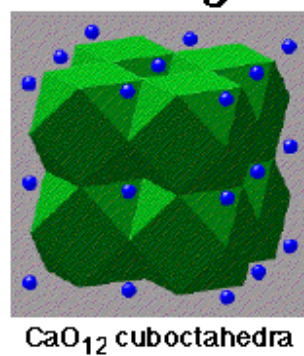
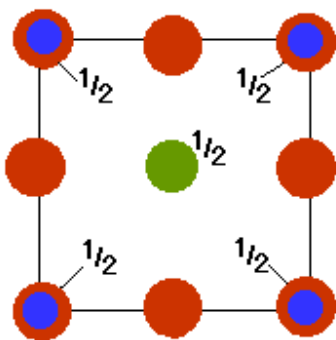
A-Cell



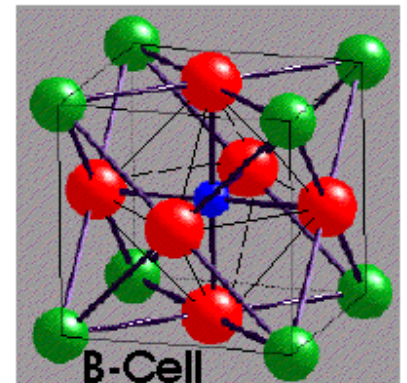
TiO₆ octahedra

Perovskite
CaTiO₃

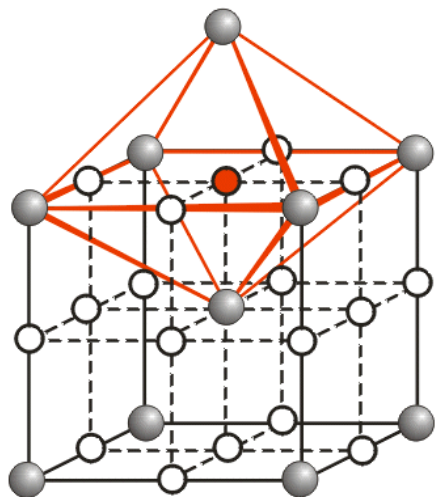
● Ca ● Ti ● O



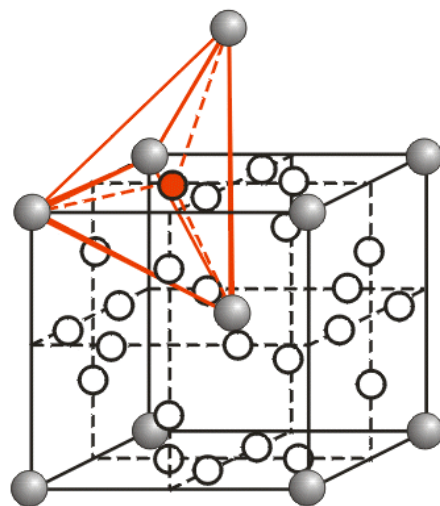
CaO₁₂ cuboctahedra



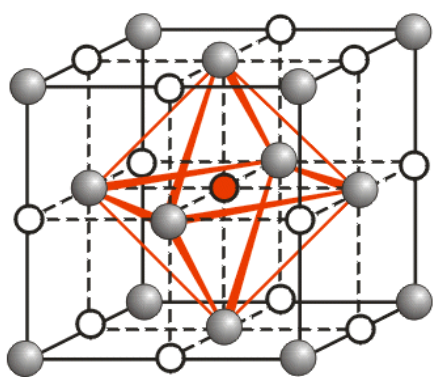
B-Cell



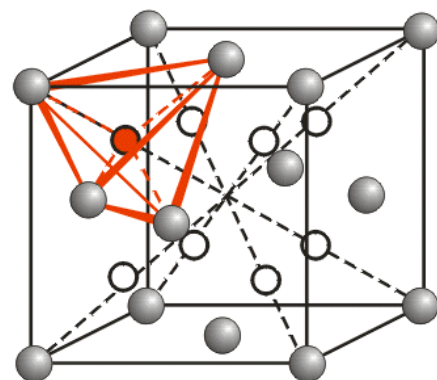
● Metal atoms
○ Octahedral interstices



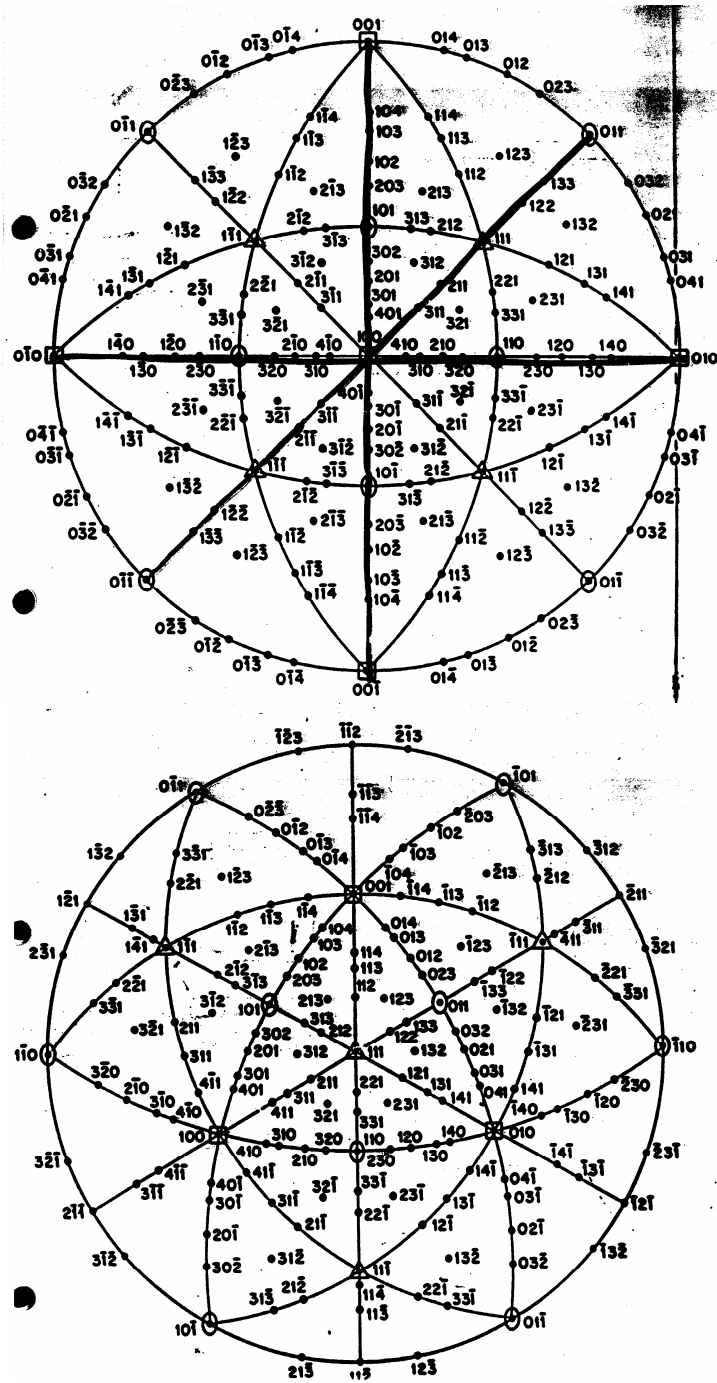
● Metal atoms
○ Octahedral interstices



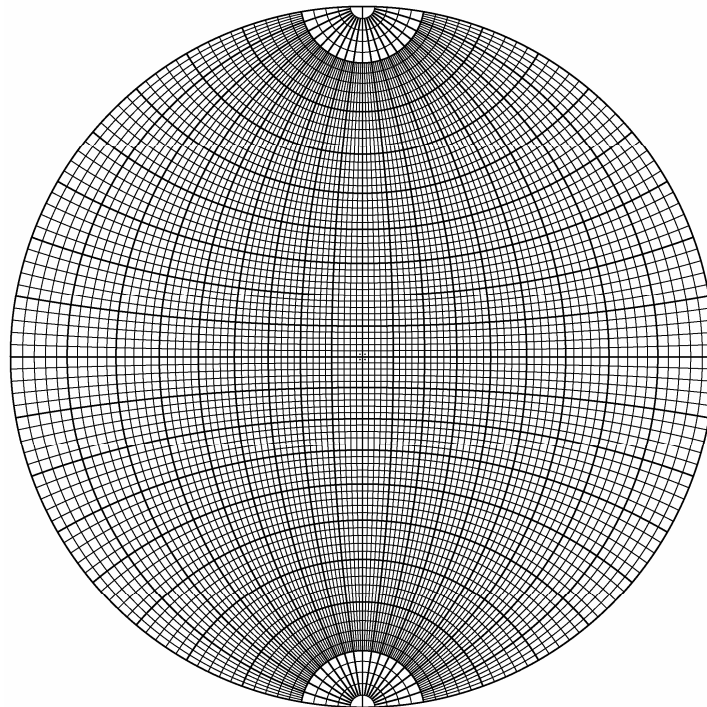
● Metal atoms
○ Octahedral interstices



● Metal atoms
○ Tetrahedral interstices



با چرخیدن ۴۵ درجه شکل صفحه قبل به سمت چپ تصویر استریوگراف با قطب ۰۱۱ داریم.



پراش پرتو ایکس

در مورد پراش در دبیرستان مطالبی گفته شده است. در آنجا از پراش نور مرئی صحبت شده است. در پدیده پراش پرتو نور با برخورد با سطحی در جهات گوناگون تغییر مسیر می‌دهد. این پدیده برای نور مرئی در مورد عبور نور از روزنه باریکی که تولید یک سری دایره متحدالمرکز میشد دیده شده است. اما برای مطالعه پلورها که شامل هسته‌هایی کوچک و با فاصله کوچک یک تا دو آنگسترون هستند نور مرئی کاربرد ندارد و باید از اشعه‌ای با طول موج کوچکتر استفاده کرد. در این حالت از اشعه X که طول موجی برابر یک تا دو آنگستروم دارد استفاده می‌شود.

تداخل همفاز و غیر همفاز

در صورتی که دو موج که کنار هم حرکت می‌کنند با هم به بالا و پایین حرکت کنند در صورت برخورد به یک سطح اثری برابر با دوبرابر اثر هرکدام از آنها به سطح وارد میشود. آمادگر ماکزیمم و مینیمم آنها عکس هم می‌باشند، در نقطه برخورد همدیگر را خشی میکند و به سطح مورد نظر نمی‌رسد. برای مثال اگر دو طناب را به دو میله ببندید به طوری که طنابها به صورت موازی قرار گیرند در صورتی که موج هم شکل و در یک زمان ایجاد کنید میله‌ای که موج به آن برخورد میکند مقداری تکان می‌خورد اما اگر موج‌ها هم شکل ولی با اختلاف زمان باشند انرژی کمی به میله می‌رسد.

فاصله دو قله موج تا هم برابر طول موج می‌گردد (۸).

اما آیا ممکن است موجی را از مبدأ با یک شرایط ایجاد کنید.

و در مقصد همفاز نباشند. همانطور که در شکل‌های بالا می‌بینید به دلیل طی کردن طول برابر موج‌ها در مبدأ و مقصد شرایط یکسان دارند. اما اگر یک موج طول بیشتری را طی کند. برای مثال اگر یکی از آنها به صورت منحنی حرکت کند. دو موج فاصله‌های برابر طی نکرده و در صورت همفاز بودن در مبدأ تنها در شرایطی در مقصد همفازند که طول طی شده اضافی توسط موج دوم ضربی از طول موج باشد.

if → اختلاف مسیر طی شده $n\lambda =$

$n=0,1,2,\dots$

پراش نور

در دبیرستان داشتیم که اگر پرتوی نوری از یک روزنه خیلی باریک عبور کند، خطوطی به شکل دایره روی صفحه ظاهر میشوند. این خطوط نقاطی هستند که امواج نور پراشیده شده با هم همفازند یعنی اختلاف طی شده به صورت ضربی از طول موج است.

تک کریستال و پلی کریستال

اگر مذاب یک فلز را در نظر بگیرید، در مذاب اتمها به صورت کاملاً نامنظم کنار هم جمع میشوند. در صورتی که دمای مذاب را کاهش دهید و به دمای انجماد برسید، انجماد با کنار هم قرار گرفتن اتمها به صورت منظم انجام میشود. در این حالت اگر کنار هم قرار گرفتن اتمها از یک نقطه شروع شود و اتمهای مذاب به این مکان بپیوندند، در آخر یک جامد تک کریستال داریم. اما اگر انجماد از زیر نقطه مذاب شروع شود ب دلیل هر استانیودن اتمهای کنار هم قرار گرفته دار انتها چند تکه کریستال در ماده جامد داریم که در جهت‌های مختلفی هستند به این ماده پلی کریستال گویند.

پراش پرتو X

اگر پرتوهای X به صورت همفاز از مبدأ به سطح کریستال برخورد کنند، با برخورد به صفحه‌های اتمی مختلف داخل تک کریستال، مانند یک آینه که نور را برمی‌گرداند، منعکس میشوند. به طوریکه اگر با زاویه θ نسبت به صفحه hkl برخورد کرده باشند با همان زاویه بر می‌گردند.

اگر پرتو ۱ و ۲ را در نظر بگیرید که به صورت همفاز از مبدأ تولید اشعه حرکت کرده‌اند تا در صورتی این دو موج در مقصد همفازند که طول اضافی طی شده توسط ۲ نسبت به ۱ ضریبی از λ باشد، یعنی:

$$MP + PN = N\lambda$$

$$MP = PN = d \sin \theta$$

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

در این حالت فرمول به شکل زیر در می‌آید:

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + L^2}} \rightarrow n\lambda = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + L^2}} \sin \theta$$

در دستگاه اشعه X نور دهنده و نور گیرنده به صورت θ نسبت به صفحه مبدأ قرار می‌گیرند. و به صورت همزمان با زاویه θ حرکت میکنند. در صورتی که صفحه مبدأ مربوط به یک تک کریستال باشد فقط یک نور در زاویه θ_1 بخصوص توسط نور گیرنده گرفته میشود که:

$$\sin \theta_1 = \frac{n\lambda}{2a} \sqrt{h^2 + k^2 + L^2}$$

که این θ_1 با توجه به فاصله صفحات ثابت شبکه α و طول موج λ بدست می‌آید. در حالت تک کریستال فقط در یک θ جواب می‌دهد.

اما اگر یک پلی کریستال را به صورت آینه‌ای مقطع بزنیم، مانند این است که میز تک کریستال را به صورت بسیار نزدیک و در جهت‌های مختلف کنار هم چسبانده‌ایم. در این حالت هر کدام از کریستال‌ها با توجه به d صفحات قرار گرفته در سطح آینه‌ای پراش می‌دهند.

شناسایی مواد از نظر نوع ساختار شبکه براوه

برای شناسایی نوع شبکه ماده مورد آزمایش از اشعه X استفاده میشود.

در صورتی که یک پلی کریستال از نوع شبکه مکعبی ساده باشد، همه صفحات آن پراش می‌دهند.

اما در مورد bcc به دلیل قرار گرفتن یک صفحه بین صفحات مکعبی ساده، صفحه ۱۰۰ در تصویر نمی‌آید.

فقط hkl هایی دیده میشوند که $h + K + L = 2n$ باشد.

در مورد شبکه fcc به دلیل وارد شدن یک صفحه و عوض شدن قاعده مکعبی ساده به صورت زیر است

نحوه شناسایی یک ماده:

فرض کنید یک سری پیک در زوایای زیر و با طول موج اشعه ایکس داده شده وجود دارد. نوع ماده را مشخص.

$$\lambda = 1.542 \text{ \AA}$$

$$\theta_1 = 21.7 \quad , \theta_2 = 25.35 \quad , \theta_3 = 37.00$$

از فرمول برگ d_1 ، d_2 و d_3 را بدست می آوریم:

$$\lambda = 2d \sin \theta \rightarrow d = \frac{\lambda}{2 \sin \theta}$$

$$\rightarrow d_1 = 2.086 \text{ \AA} \quad , d_2 = 1.801 \text{ \AA} \quad , d_3 = 1.281 \text{ \AA}$$

ابتدا فرض می کنیم که شبکه SC است و امتحان می کنیم

در نتیجه صفحات d_1 ، d_2 و d_3 مربوط به صفحات 100 ، 110 و 111 به ترتیب هستند:

$$d_1 \rightarrow 100 \quad d_1 = \frac{a}{\sqrt{1}} = 2.086 \text{ \AA} \rightarrow a = 2.088 \text{ \AA}$$

$$d_2 \rightarrow 110 \quad d_{110} = \frac{a}{\sqrt{2}} = 1.801 \text{ \AA} \rightarrow a = 2.5469 \text{ \AA}$$

$$d_3 \rightarrow 111 \quad d_{111} = \frac{a}{\sqrt{3}} = 1.281 \text{ \AA} \rightarrow a = 2.218 \text{ \AA}$$

که از سه صفحه سه مقدار مختلف بدست آمد که درست نیست

حال فرض می کنیم شبکه bcc بوده است. پس d_1 ، d_2 و d_3 مربوط به سه صفحه 110 ، 200 و 211 باشد.

$$d_1 \rightarrow 110 \quad d_1 = \frac{a}{\sqrt{2}} = 2.086 \text{ \AA} \rightarrow a = 2.95 \text{ \AA}$$

$$d_2 \rightarrow 200 \quad d_{110} = \frac{a}{\sqrt{4}} = 1.801 \text{ \AA} \rightarrow a = 3.602 \text{ \AA}$$

$$d_3 \rightarrow 211 \quad d_{111} = \frac{a}{\sqrt{6}} = 1.281 \text{ \AA} \rightarrow a = 3.137 \text{ \AA}$$

که سه ثابت به دست آمده برابر نیستند، پس bcc هم نیست. حال فرض میکنیم fcc است. پس سه صفحه اول ۱۱۱، ۲۰۰ و ۲۲۰ است.

$$d_1 \rightarrow 111 \quad d_1 = \frac{a}{\sqrt{3}} = 2.086A^\circ \rightarrow a = 3.6130$$

$$d_2 \rightarrow 200 \quad d_2 = \frac{a}{\sqrt{4}} = 1.801A^\circ \rightarrow a = 3.62$$

$$d_3 \rightarrow 220 \quad d_3 = \frac{a}{\sqrt{8}} = 1.281A^\circ \rightarrow a = 3.6232$$

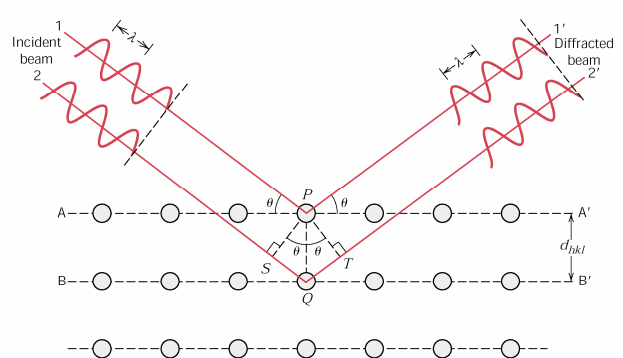
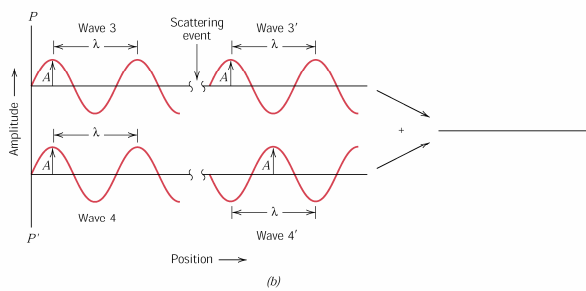
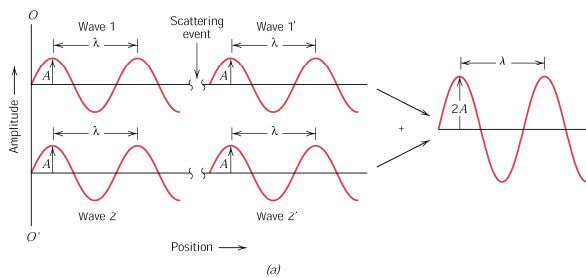
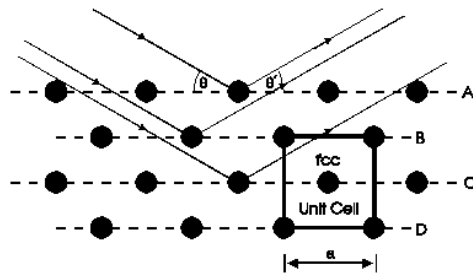
که سه مقدار تقریباً با هم برابرند. اختلاف جزئی بین اعداد از اشکال در دستگاه و اشتباه در خواندن θ از روی نمودار ایجاد می شود.

Table 2-4 Systematic Absences of Diffracted Beams for Cubic Crystals.

Bravais Lattice	Diffracted Beam Absent	Diffracted Beam Present
Simple cubic	None	All
Body-centered cubic	$(h + k + l)$ odd	$(h + k + l)$ even
Face-centered cubic	hkl mixed odd & even	hkl all odd or all even
Diamond cubic	hkl mixed odd & even, or hkl all even and not divisible by 4	hkl all odd, or hkl all even and divisible by 4

Table 2-5 Diffraction Conditions for Cubic Crystals.

Plane (hkl)	Simple cubic	fcc	bcc	diamond cubic
(100)	Present			
(110)	Present		Present	
(111)	Present	Present		Present
(200)	Present	Present	Present	
(210)	Present			
(211)	Present		Present	
(220)	Present	Present	Present	Present
(300)	Present			
(221)	Present			
(310)	Present		Present	
(311)	Present	Present		Present
(222)	Present	Present	Present	



$$n\lambda = \overline{SQ} + \overline{QT}$$

$$n\lambda = d_{hkl} \sin \theta + d_{hkl} \sin \theta = 2 d_{hkl} \sin \theta$$

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

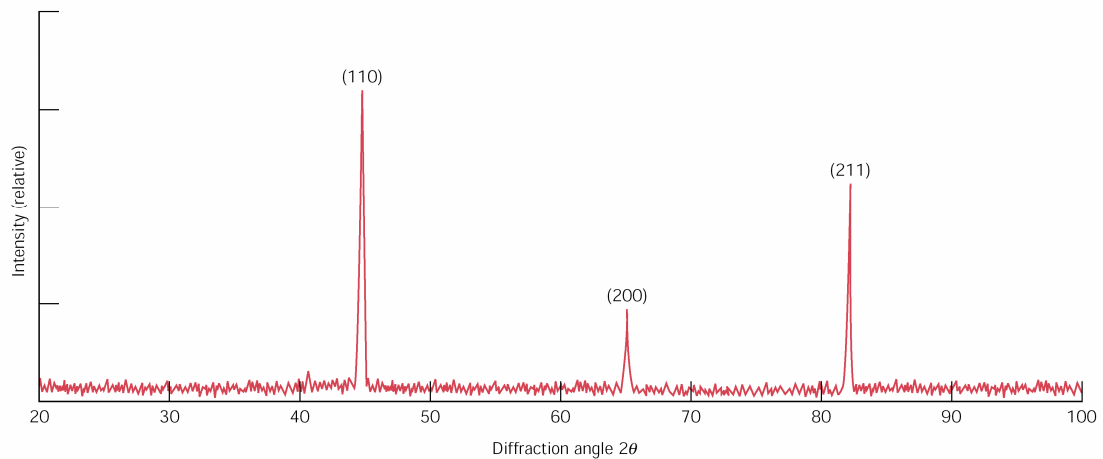
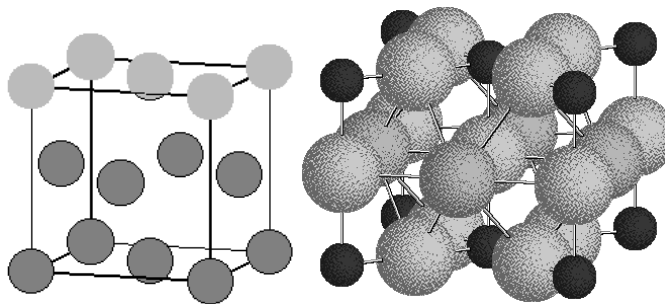


FIGURE 3.37 Diffraction pattern for polycrystalline α -iron.

- ۱- دسته صفحات $\{111\}$ و دسته جهات $\langle 111 \rangle$ را در شکلهایی جداگانه رسم کنید.
- ۲- در صفحه (۱۱۱) چه تعداد از انواع جهات $[110]$ وجود دارد. نام ببرید.
- ۳- آیا سه جهت $[111]$ و $[11\bar{3}]$ و $[110]$ در یک صفحه قرار دارند. در صورت مثبت بودن جواب سه جهت دیگر در این صفحه را نام ببرید.
- ۴- چرا تتراگونال FCC و C وجود ندارد. با ترسیم شکل توضیح دهید.
- ۵- الف- صفحات (۱۱۱) و (۲۰۰) و (۲۲۰) را برای شبکه FCC رسم کرده و انرژی سطحی هر کدام از این صفحات را مشخص کنید. ب- آیا انرژی سطحی صفحه (۲۰۰) با صفحه (۱۰۰) مساوی است. چرا؟
- ۶- ارتفاع شبکه HCP را بر حسب شعاع اتم های قرار گرفته در این شبکه حساب کنید. ب- در صورتی که نسبت ارتفاع به ثابت شبکه ۱٫۶۳ باشد، عدد فشردگی HCP را بدست آورید.
- ۷- عدد فشردگی سطحی صفحه (۱۱۱) شبکه BCC را محاسبه کنید. (راهنمایی: از فاصله صفحات ۱۱۱ برای فهمیدن سطحی از اتم مرکزی که روی صفحه ۱۱۱ می افتد استفاده کنید).
- ۸- نوع و تعداد محورهای تقارن را در شبکه های مکعبی، تتراگونال و هگزاگونال مشخص نمایید.
- ۹- شعاع بزرگترین کره ای که می تواند بدون برهم زدن نظم شبکه مکعبی ساده در میان آن قرار گیرد را بدست آورید. (راهنمایی: این حالت مانند شبکه BCC ای است که اتم مرکزی به اندازه ای کوچک است که اتمهای دیگر با هم تماس پیدا می کنند).
- ۱۰- نوع lattice و Motif شبکه های زیر را مشخص کنید. (طول، عرض و ارتفاع شبکه های زیر مساوی است).



- ۱۱- هر کدام از صفحات و جهات زیر را در یک مختصات مکعبی مشخص کنید.
 $(103) (1\bar{1}0) (422) (\bar{2}\bar{1}0) (002) // [\bar{1}\bar{1}1] [123] [00\bar{1}] [11\bar{2}] [110]$
- ۱۲- برای شبکه های مکعبی، تتراگونال و هگزاگونال، نوع و تعداد و جهت محورهای تقارن را مشخص کنید.
- ۱۳- در صورتی که طول موج اشعه X مورد استفاده جهت پراش ۱٫۵۴۲ آنگستروم باشد. با توجه به زوایای داده شده، نوع شبکه بلوری، ثابت شبکه و شعاع اتمی ماده آزمایش شده را حساب کنید.

$$\theta_1=22.210703^0, \theta_2=32.3162^0, \theta_3=40.899862^0, \theta_4=49.115229^0$$

۱۴- فاکتور فشردگی کره های به شعاع R را که به صورت BCC چیده شده اند را محاسبه کنید. آیا این فاکتور برای کره های به شعاع 2R که به صورت BCC چیده شده اند، بزرگتر است؟ چرا؟ چگالی دو حالت ذکر شده را با هم مقایسه کنید و مشخص کنید که کدام حالت دارای چگالی بالاتری است.

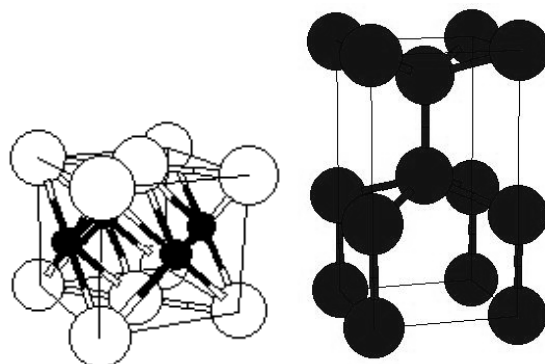
۱۵- چرا تتراگونال قاعده مرکزدار وجود ندارد؟ از درون شبکه FCC یک شبکه BCT در آورید؟

۱۶- صفحات $(2\bar{1}\bar{1})$ ، (233) و (111) به کدام محور منطقه متعلق هستند؟ دو صفحه دیگر متعلق به این محور منطقه را نام ببرید.

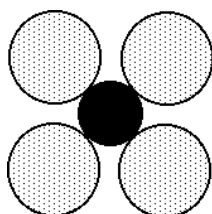
۱۷- در صورتی که چگالی آهن در حالت BCC، 7.87 گرم بر سانتی متر مکعب باشد، چگالی آن را در حالت FCC حساب کنید.

۱۸- نوع Lattice و Motif و جهت گیری Motif را در شبکه الماس مشخص کنید. شبکه الماس را به صورت دوبعدی و با ذکر ارتفاع هر اتم رسم کنید. آیا انرژی داخلی شبکه الماس با حالت FCC برابر است؟ توضیح دهید.

۱۹- نوع Lattice و Motif و جهت گیری Motif را در شبکه های زیر مشخص کنید.



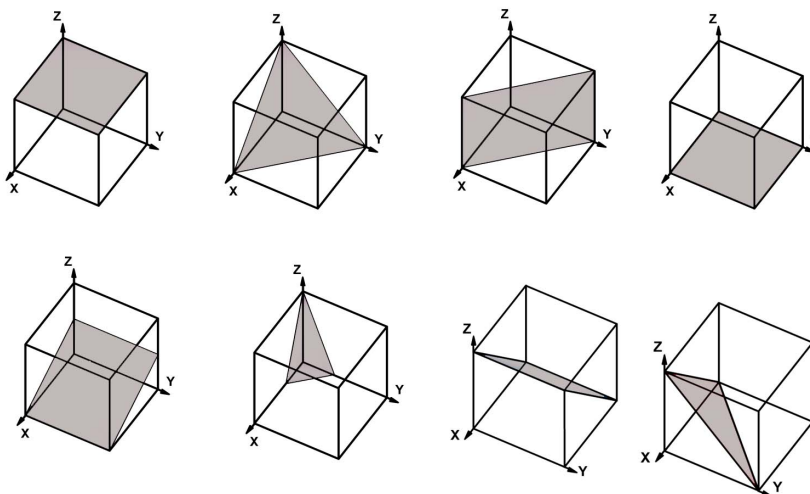
۲۰- در صورتی که آهن ساختار مکعبی مرکز دار داشته و دارای شعاع اتمی 1.2427 آنگسترم باشد، شعاع کوچکترین اتم خارجی که بدون به هم زدن مکان اتمهای اصلی بتواند مانند شکل روبرو میان چهار اتم صفحه 001 قرار گیرد، چقدر است؟



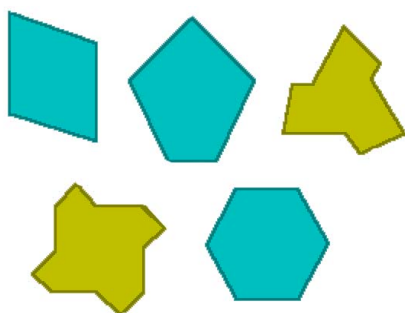
۲۱- برای هر کدام از شبکه های FCC و BCC سه عنصر مثال بنویسید.

۲۱- در صورتی که بتوان فاصله صفحات 001 شبکه HCP را برابر صفحات 111 FCC در نظر گرفت، نسبت ارتفاع شبکه HCP به ثابت قاعده آن را محاسبه کنید (یعنی نسبت c/a).

۲۲- در اشکال زیر اندیس جهات و صفحات را مشخص کنید. (۳نمره)



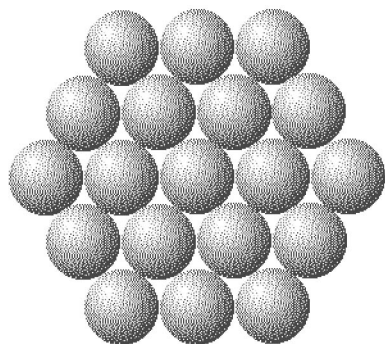
۲۳- آیا اشکال زیر متقارن هستند؟ نوع محور تقارن هر کدام را مشخص کنید.. (۱نمره)



۲۴- نوع شبکه را برای تصاویر دوبعدی زیر مشخص کنید. (۱نمره)



۲۵- ترتیب قرار گرفتن صفحات را در شبکه های FCC و HCP با توجه به شکل توضیح دهید. (۱نمره)



- ۲۶- برای شبکه های مکعبی، تتراگونال و هگزاگونال، نوع و تعداد و جهت محورهای تقارن را مشخص کنید. (انمره)
- ۲۷- روی تور ولف صفحه بعد، تصویر استوریوگراف را با مبدا ۱۰۱۱ رسم کنید. محورهای درجه دو، سه و چهار را مشخص نمایید. نصف النهاری را که محور منطقه آن ۰۱۱ است مشخص کنید. نقطه ۲۱۲ را روی تصویر استوریوگراف نشان دهید. (۳ انمره)
- ۲۸- در صورتی که طول موج اشعه X مورد استفاده جهت پراش ۱,۵۴۲ آنگستروم باشد. با توجه به زوایای داده شده، نوع شبکه بلوری، ثابت شبکه و شعاع اتمی ماده آزمایش شده را حساب کرده و از جدول صفحه بعد نوع عنصر مورد آزمایش را مشخص نمایید (۳ انمره)

$$\theta_1=22.210703^0, \theta_2=32.3162^0, \theta_3=40.899862^0, \theta_4=49.115229^0$$

۲۹- فاکتور فشردگی را در شبکه FCC حساب کنید. (انمره)

۳۰- صفحات (۲۱۱)، (۲۳۳) و (۱۱۱) به کدام محور منطقه متعلق هستند؟ دو صفحه دیگر متعلق به این محور منطقه را نام ببرید. (انمره)

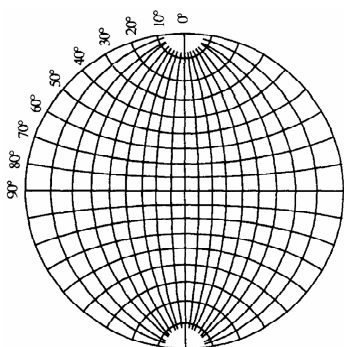
۳۱- چرا تتراگونال قاعده مرکزدار وجود ندارد؟ آیامی توان شبکه FCC را به صورت شبکه BCT در نظر گرفت؟ با کشیدن شکل توضیح دهید؟ (انمره)

۳۲- در صورتی که طول موج اشعه X مورد استفاده ۱/۷۹۰ آنگستروم و ثابت شبکه ماده ۲/۸۶۶ آنگستروم و نوع شبکه BCC باشد، زاویه ده پراش اول را حساب کنید.

۳۳- نوع Motif و Lattice و جهتگیری موتیف را در شبکه الماس مشخص کنید. صفحه (۱۱۰) الماس را در دو بعد رسم کرده و عدد فشردگی این صفحه را حساب کنید. (در الماس $\sqrt{3}a = 8r$ است).

۳۴- در صورتی که چگالی ماده ای در حالت BCC ۷/۸۷ گرم بر سانتیمتر مکعب باشد، چگالی آنرا در حالت HCP حساب کنید.

۳۵- روی تور ولف شکل پایین تصویر استوریوگراف را با مبدا ۰۱۰ رسم کنید. همچنین نقاط ۲۲۵ و ۰۱۳ را مشخص نمایید.



۳۶- نسبت شعاع اتم بین نشین به اتم اصلی را برای تتراهدرال بدست آورید.

۳۷- صفحات (۱۱۲)، (۲۲۰)، (۲۰۰) و (۱۱۰) را برای شبکه های FCC و BCC در دو بعد رسم کنید.

۳۸- عدد فشردگی صفحه (۱۰۰) و (۲۰۰) FCC را محاسبه کنید.

۳۹- ثابت شبکه نیکل و کروم را با توجه به چگالی، وزن اتمی و نوع سلول واحد تعیین کنید.

۴۰- شعاع اتم مولیبدن را با توجه به چگالی، وزن اتمی و نوع سلول واحد تعیین کنید.

۴۱- وزن اتمی فلزی با ثابت شبکه ۳/۳۱ آنگستروم و چگالی ۱۶/۶ گرم بر سانتیمتر مکعب را تعیین کنید در صورتی که ساختار آن مکعبی مرکز دار باشد.

۴۲- در دمای ۱۰۰ درجه سانتیگراد ثابت شبکه مس ۳/۶۵۵ آنگستروم است. چگالی مس را در این دما محاسبه کنید.

۴۳- عدد فشردگی خطی ماکزیمم را برای وانادیوم حساب کنید. (یعنی کدام جهت در این سلول واحد دارای بیشترین فشردگی است).

۴۴- عدد فشردگی سلول واحد مکعبی مرکز دار که دارای پارامتر شبکه ۳/۰۳۹ آنگستروم و چگالی ۵/۸۱ گرم بر سانتیمتر مکعب است را محاسبه کنید.

۴۵- شعاع اتمی نقره را با توجه به چگالی و نوع سلول واحد حساب کنید.

۴۶- درصد تغییر حجم ناشی از تبدیل BCC به FCC را محاسبه کنید.

۴۷- جهات گفته شده را در یک مختصات مکعبی رسم کنید. (علامت بار به صورت منفی آمده است). [012], [11-2], [10-1], [-100], [02]

۴۸- الف- با توجه به اینکه چگالی آهن در حالت BCC ۷/۸۷۴ گرم بر سانتیمتر مکعب است، شعاع اتم آهن و چگالی آنرا در حالت FCC را محاسبه کنید.

ب- اندازه بزرگترین اتمی که می تواند در فضای اکتاهدرال و تتراهدرال آهن در دو حالت BCC و FCC را محاسبه کنید.

ج- تعداد مکانهای تتراهدرال و اکتاهدرال را در شبکه های BCC و FCC بیان کنید.

د- در هر میلیمتر مربع از صفحه ۱۰۰ آهن چند اتم وجود دارد.

۴۹- چند جهت $\langle 110 \rangle$ در صفحه (۱۱۱) وجود دارد.

۵۰- فلزی BCC دارای چگالی $7/21$ گرم بر سانتیمتر مکعب بوده و صفحات 110 آن دارای فواصل $m \cdot 10^{-10} \cdot 2.4$ می باشد. جرم اتمی این فلز را محاسبه کنید.

۵۱- صفحات $(11-1)$ ، $(01-2)$ ، $(00-2)$ و (-13) را رسم کنید. (علامت بار به صورت منفی آمده است).

۵۲- چگونه است که خواص مواد مختلف در اکثر حالت به صورت ایزوتروپ است در حالی که سلول واحدی که این مواد را می سازد دارای خواص آنیزوتروپ می باشد.

۵۳- عدد فشردگی الماس را حساب کنید. (در الماس $\sqrt{3}a = 8r$ است)

۵۴- کدام صفحه فلز نیکل است که فاصله صفحات آن $1/246$ آنگستروم می باشد. (ثابت شبکه $3/524$ آنگستروم)

۵۵- سه تک کریستال FCC را در سه صفحه 111 ، 110 و 100 مقطع زده و وارد اسید می کنیم. خوردگی کدام تک کریستال بیشتر است.

۵۶- اندیس های خانواده 110 و 113 و 124 را مشخص کنید.

۵۷- چرا مواد تمایل دارند به صورت منظم و با ساختار کریستالوگرافی معین جامد شوند.

۵۸- ساختمان کریستالی آهن خالص در اثر افزایش دما در 1183 درجه کلوین از مکعبی مرکزدار (BCC) به مکعبی با وجوه مرکزدار (FCC) تبدیل می شود. در صورت ثابت ماندن طول پیوند Fe-Fe در این تحول، نسبت چگالی آهن BCC به آهن FCC را محاسبه کنید.

۵۹- ساختمان کریستالی آهن خالص در دمای محیط (298 درجه کلوین) مکعبی مرکزدار (BCC) است. اگر جرم اتمی آهن $55/85 \text{ g/mole}$ و چگالی تئوریک آهن خالص $7/8 \text{ g/cm}^3$ باشد، طول پیوند Fe-Fe را بدست آورید.

۶۰- چگالی تئوریک مس خالص $8/92 \text{ g/cm}^3$ است. مطالعات اشعه ایکس نشان می دهد که ساختار مس مکعبی با وجوه مرکزدار و طول پیوند Cu-Cu برابر $0/2556 \text{ nm}$ است. جرم اتمی مس را تخمین بزنید.

۶۱- ساختار کریستالی منیزیم HCP و چگالی آن $1/738 \text{ g/cm}^3$ است. طول پیوند Mg-Mg را به دست آورید.

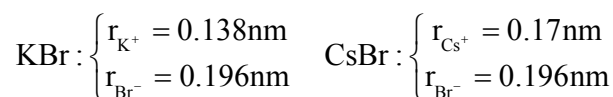
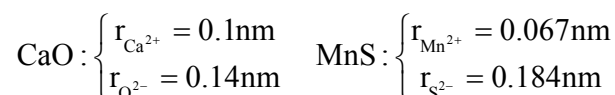
۶۲- ساختار کریستالی نوعی برنج (آلیاژ مس و روی) FCC با طول ضلع مکعب (سلول واحد) $0/3696 \text{ nm}$ است. اگر چگالی این آلیاژ $8/44 \text{ g/cm}^3$ باشد، درصد روی و مس موجود در ترکیب را محاسبه نمایید. (جرم اتمی روی $65/37 \text{ g/mole}$ و جرم اتمی مس $63/55 \text{ g/mole}$ می باشد)

۶۳- قانون اول پاولینگ را برای تمام حالات اثبات کنید

$R_C/R_A = r$	تعداد آنیون در اطراف کاتیون (CN_C)
---------------	---

$0 < r < 0.155$	2
$0.155 < r < 0.255$	3
$0.255 < r < 0.414$	4
$0.414 < r < 0.732$	6
$0.732 < r < 1$	8
$r = 1$	12

۶۴- بر اساس شعاع آنیونی و کاتیونی ساختار کریستالی مواد زیر را تعیین کنید



۶۵- مطلوب است Packing Factor در ساختارهای NaCl و CsCl

$$r_{\text{Na}^+} = 0.102\text{nm}, r_{\text{Cl}^-} = 0.181\text{nm}, r_{\text{Cs}^+} = 0.170\text{nm}$$

۶۶- مطلوب است محاسبه دانسیته تئوریک الماس، بلند روی و کلرید سزیم (با توجه به اطلاعات زیر)

$$d_{\text{C-C}} = 0.154\text{nm}, r_{\text{Cs}^+} = 0.170\text{nm}, r_{\text{Cl}^-} = 0.181\text{nm}, d_{\text{Zn-S}} = 0.234\text{nm}$$

$$M_{\text{S}} = 32\text{gr/mole}, M_{\text{Zn}} = 60\text{gr/mole}, M_{\text{C}} = 12\text{gr/mole},$$

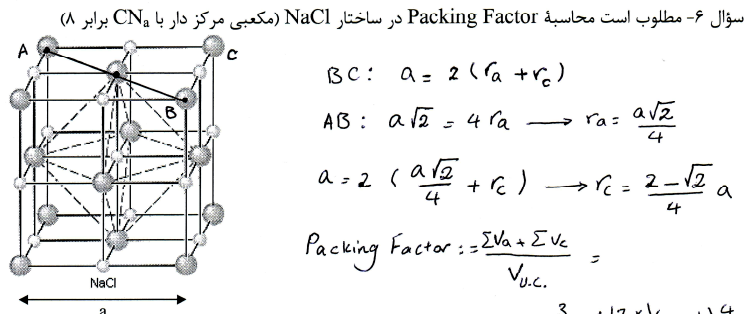
$$M_{\text{Cs}} = 133\text{gr/mole}, M_{\text{Cl}} = 35.45\text{gr/mole}$$

۶۷- نوعی SiO_2 دارای شبکه مکعبی با پارامتر شبکه 0.7nm است. اگر دانسیته آن 2.32gr/Cm^3 باشد، سلول واحد این سیلیکا دارای چند SiO_2 است؟

۶۸- در یک سرامیک اکسیدی با فرمول M_2O شعاع آنیون و کاتیون به ترتیب 128 pm و 48 pm است. آرایش آنیونها دارای تقارن مکعبی است.

- الف) با انجام محاسبات لازم نحوه انباشتگی کاتیونها و آنیونها را مشخص کنید و شکل سلول واحد را رسم کنید.
- ب) تعداد اتمها در یک سلول واحد را تعیین کنید و مختصات این اتمها در سلول واحد را بنویسید.
- ج) اگر جرم اتمی اکسیژن و M به ترتیب 16 و 7 گرم بر مول باشد، جرم حجمی تئوریک M_2O را محاسبه کنید.

۶۹- دانشجویی مسئله زیر را اینگونه حل کرده است؛ به نظر شما راه حل وی چه ایرادی دارد؟



$$BC: a = 2(r_a + r_c)$$

$$AB: a\sqrt{2} = 4r_a \rightarrow r_a = \frac{a\sqrt{2}}{4}$$

$$a = 2\left(\frac{a\sqrt{2}}{4} + r_c\right) \rightarrow r_c = \frac{2-\sqrt{2}}{4}a$$

$$Packing Factor = \frac{\sum V_a + \sum V_c}{V_{u.c.}}$$

$$\frac{(8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2}) \frac{4}{3}\pi r_a^3 + (12 \times \frac{1}{4} + 1) \frac{4}{3}\pi r_c^3}{a^3}$$

$$\therefore Packing Factor = \frac{4 \times \frac{4}{3}\pi \left(\frac{a\sqrt{2}}{4}\right)^3 + (2 - \sqrt{2}) \frac{4}{3}\pi a^3}{a^3} = \frac{\pi}{3} \left(\frac{2\sqrt{2}}{4} + \frac{2-\sqrt{2}}{4}\right)^3$$

$$\rightarrow \boxed{Packing Factor = 0.79 = 79\%}$$

۷۰- آیا می‌توان با داشتن نسبت شعاعها عدد همسایگی آنیون (یون بزرگتر) را نیز مثل عدد همسایگی کاتیون (یون کوچکتر) بدست آورد؟

۷۱- جهات $\{111\}$ ، $\{110\}$ و $\{100\}$ را روی دایره‌ی استریوگرافیک نمایش دهید.

۷۲- مکان هندسی جهاتی که با راستای $[111]$ کریستال مکعبی زاویه‌ی ۲۰ درجه می‌سازند را روی دایره‌ی استریوگرافیک نمایش دهید.

۷۳- مکان هندسی جهاتی که با راستای $[110]$ کریستال مکعبی زاویه‌ی ۲۰ درجه می‌سازند را روی دایره‌ی استریوگرافیک نمایش دهید.

۷۴- مکان هندسی جهاتی که با محورهای $\{100\}$ کریستال مکعبی زاویه‌ی ۲۰ درجه می‌سازند را روی دایره‌ی استریوگرافیک نمایش دهید.

۷۵- مکان هندسی جهاتی که با راستای $[111]$ کریستال مکعبی زاویه‌ی ۹۰ درجه می‌سازند را روی دایره‌ی استریوگرافیک نمایش دهید.

۷۶- جهات $[123]$ ، $[412]$ و $[211]$ را روی دایره‌ی استریوگرافیک نمایش دهید.

- ۷۷- مکان هندسی قطب صفحات منطقه‌ی جهات مسئله‌ی قبل را روی دایره‌ی استریوگرافیک نمایش دهید.
- ۷۸- صفحه‌ی مشترک دو منطقه‌ی [123] و [211] را روی دایره‌ی استریوگرافیک نمایش دهید.
- ۷۹- محور منطقه‌ای را که شامل دو صفحه‌ی (421) و (123) است را روی دایره‌ی استریوگرافیک نمایش دهید.
- ۸۰- صفحه‌ای را رسم کنید که حاوی دو جهت [211] و [123] باشد.
- ۸۱- قطب‌های مسئله‌ی قبل را حول محور [111] به اندازه‌ی ۱۲۰ درجه دوران دهید.

- ۱- نقره فلزی FCC است. جرم اتمی آن ۱۰۷/۸۷ گرم بر مول است. اگر شعاع اتمی نقره ۰/۱۴۴۴ نانومتر باشد، ثابت شبکه، چگالی و غلظت اتمی آنرا بیابید. همچنین APF آنرا حساب کنید.
- جواب: با توجه به FCC بودن نقره داریم:

$$a^2 + a^2 = (4R)^2$$

$$a = \frac{4}{\sqrt{2}} R = 2\sqrt{2}R$$

$$a = (2\sqrt{2})(0.1444 \text{ nm}) = 0.4084 \text{ nm}$$

برای بدست آوردن جرم هر اتم کافی جرم اتمی ماده را (یعنی جرم یک مول) به عدد آووگادرو تقسیم کنیم. در هر سلول واحد FCC چهار اتم وجود دارد، بنابراین برای بدست آوردن چگالی باید جرم چهار اتم را بر حجم سلول واحد تقسیم کنیم:

$$\rho = \frac{\text{Mass of atoms in unit cell}}{\text{Volume of unit cell}} = \frac{(\text{Number of atoms in unit cell}) \times (\text{Mass of one atom})}{\text{Volume of unit cell}}$$

$$\rho = \frac{4 \left(\frac{M_{at}}{N_A} \right)}{a^3} = \frac{4 \left[\frac{107.87 \times 10^{-3} \text{ kg mol}^{-1}}{6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}} \right]}{(0.4084 \times 10^{-9} \text{ m})^3}$$

$$\rho = 1.05 \times 10^4 \text{ kg m}^{-3} \text{ or } 10.5 \text{ g cm}^{-3}$$

غلظت اتمی یعنی تعداد اتم در یک حجم مشخص. برای بدست آوردن غلظت اتمی کافی است تعداد اتمهای یک سلول واحد را بر حجم آن تقسیم کنیم:

$$n_{at} = \frac{4}{a^3} = \frac{4}{(0.4084 \times 10^{-9} \text{ m})^3} = 5.87 \times 10^{28} \text{ m}^{-3} \text{ or } 5.87 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$$

همچنین عدد فشردگی FCC به صورت زیر بدست می آید.

$$APF = \frac{(\text{Number of atoms in unit cell}) \times (\text{Volume of one atom})}{\text{Volume of unit cell}}$$

$$APF = \frac{4\left(\frac{4}{3}\pi R^3\right)}{a^3} = \frac{4\left(\frac{4}{3}\pi R^3\right)}{(2\sqrt{2}R)^3} = \frac{4\left(\frac{4}{3}\pi\right)}{(2\sqrt{2})^3} = 0.74 \text{ or } 74\%$$

اگر مسئله چگالی نقره در حالت BCC را خواسته بود، به راحتی می توان از روی نسبت عدد فشردگی BCC به FCC چگالی در حالت BCC را حساب نمود. چون عدد فشردگی BCC ۰/۶۸ است، یعنی چگالی BCC هم به این نسبت از FCC کمتر است. بنابراین با داشتن چگالی در حالت FCC یعنی ۱۰/۵ گرم بر سانتیمتر مکعب، چگالی در حالت BCC ۹/۶۴ گرم بر سانتیمتر مکعب است.

۲- ساختار کریستالی Si و GaAs با توجه به شکل زیر از نوع الماسی است. ثابت شبکه این دو ماده به ترتیب ۰/۵۴۳ و ۰/۵۶۵ نانومتر است. با داشتن جرم اتمی این دو ماده (از جدول مندلیف) چگالی آنها را محاسبه کنید.

جواب: برای Si داریم:

$$\rho = \left(\frac{8}{a^3}\right) \left[\frac{(10^{-3})M_{Si}}{N_A}\right]$$

$$\rho = \left[\frac{8}{(0.543 \times 10^{-9} \text{ m})^3}\right] \left[\frac{(10^{-3} \text{ kg/g})(28.09 \text{ g mol}^{-1})}{6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}}\right]$$

$$\rho = 2.33 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3} \text{ or } 2.33 \text{ g cm}^{-3}.$$

همچنین برای GaAs چگالی بدین صورت بدست می آید:

$$\rho = \left[\frac{4}{(0.565 \times 10^{-9})^3}\right] \left[\frac{(10^{-3})(69.72 + 74.92)}{6.022 \times 10^{23}}\right]$$

$$\rho = 5.33 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3} \text{ or } 5.33 \text{ g cm}^{-3}.$$

۳- در شبکه NaCl اگر شعاع اتمی Na⁺ و Cl⁻ به ترتیب ۰/۰۹۷ و ۰/۱۸۱ باشد، عدد فشردگی این شبکه را محاسبه کنید.

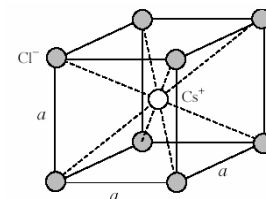
با توجه به وجود چهار اتم کلر و چهار اتم سدیم در شبکه FCC نمک طعام داریم:

$$APF = \frac{4\left(\frac{4}{3}\pi R_+^3\right) + 4\left(\frac{4}{3}\pi R_-^3\right)}{(2R_+ + 2R_-)^3} = \frac{4\left(\frac{4}{3}\pi 0.097^3\right) + 4\left(\frac{4}{3}\pi 0.181^3\right)}{(2 \times 0.097 + 2 \times 0.181)^3} = 0.667$$

۴- در شبکه CsCl اگر شعاع Cs⁺ و Cl⁻ به ترتیب ۰/۱۷۰ و ۰/۱۸۱ نانومتر باشد، نوع شبکه و عدد فشردگی آنرا بدست آورد.

جواب: با توجه به اینکه نسبت شعاع Cs⁺ به Cl⁻ ۰/۹۳۲ است که بین ۰/۷۳۲ و ۱ است. با توجه به قانون پاولی نوع شبکه بین

نشین مکعبی است. با توجه به این مطلب ثابت شبکه به صورت زیر بدست می آید:



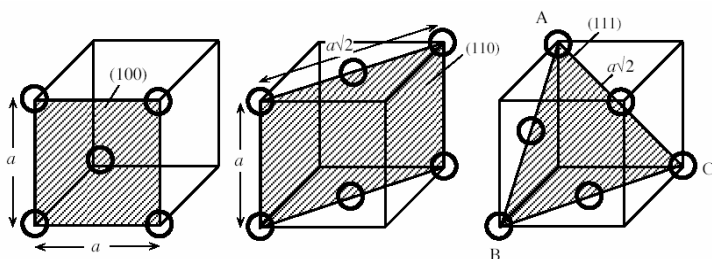
$$a = \frac{2}{\sqrt{3}}(R_+ + R_-) = \frac{2}{\sqrt{3}}(0.167 + 0.181) = 0.402$$

همچنین چون در سلول واحد یک Cs و Cl وجود دارد، عدد فشردگی به صورت زیر بدست می آید.

$$APF = \frac{1\left(\frac{4}{3}\pi R_+^3\right) + 1\left(\frac{4}{3}\pi R_-^3\right)}{a^3} = \frac{1\left(\frac{4}{3}\pi 0.167^3\right) + 1\left(\frac{4}{3}\pi 0.181^3\right)}{0.402^3} = 0.68$$

که مساوی عدد فشردگی BCC است اما شبکه از نوع SC می باشد.

۵- چگالی صفحه ای (عدد فشردگی سطحی) FCC را برای صفحات [100], [110], [111] نقره با ثابت شبکه ۰/۴۰۸۴ بدست آورید.



$$n_{(100)} = \frac{4\left(\frac{1}{4}\right) + 1}{a^2} = \frac{2}{a^2} = \frac{2}{(0.4084 \times 10^{-9} \text{ m})^2}$$

$$n_{(100)} = 12 \times 10^{18} \text{ atoms m}^{-2} \text{ or } 12 \text{ atoms nm}^{-2}$$

$$n_{(110)} = \frac{4\left(\frac{1}{4}\right) + 2\left(\frac{1}{2}\right)}{(a)(a\sqrt{2})} = \frac{2}{a^2\sqrt{2}} = \frac{2}{(0.4084 \times 10^{-9} \text{ m})^2\sqrt{2}}$$

$$n_{(110)} = 8.5 \times 10^{18} \text{ atoms m}^{-2} \text{ or } 8.5 \text{ atoms nm}^{-2}$$

$$n_{(111)} = \frac{3\left(\frac{60}{360}\right) + 3\left(\frac{1}{2}\right)}{\frac{1}{2}a\sqrt{2}\left(\frac{a\sqrt{3}}{\sqrt{2}}\right)} = \frac{2}{a^2\frac{\sqrt{3}}{2}} = \frac{2}{(0.4084 \text{ nm})^2\frac{\sqrt{3}}{2}}$$

$$n_{(111)} = 13.8 \text{ atoms nm}^{-2}$$