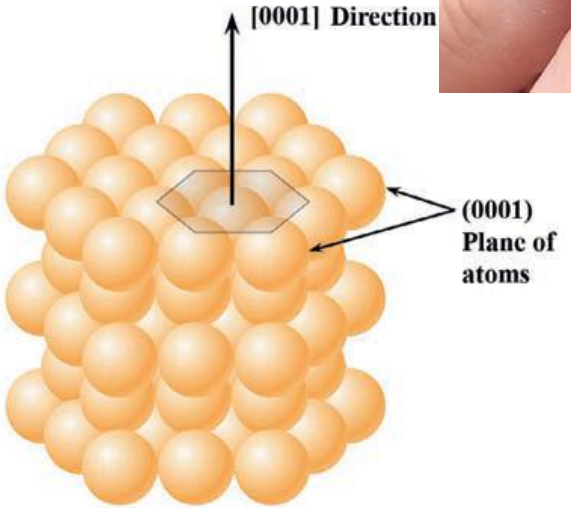
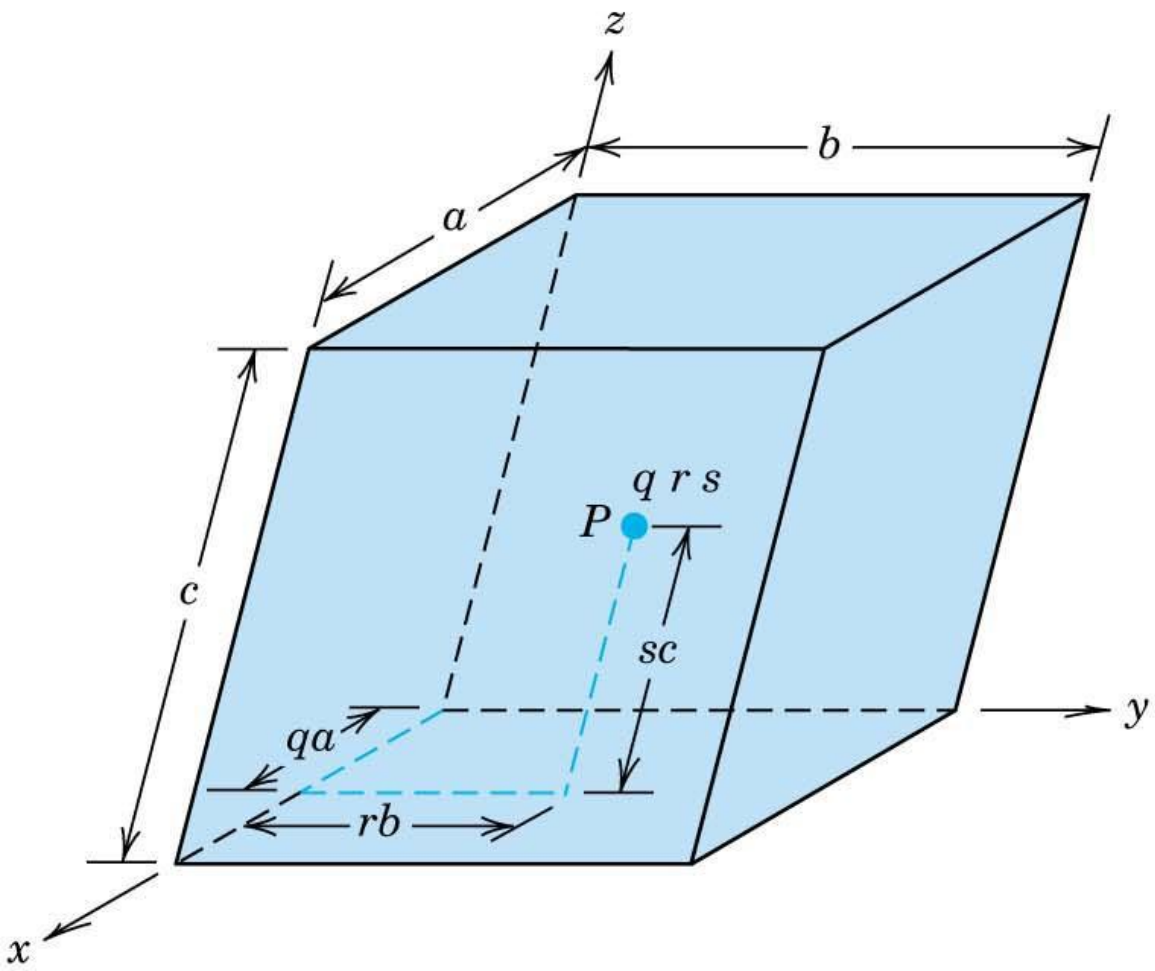
فصل سوم: آرایش اتمی در جامدات

- آنچه در این فصل می آموزیم:
- بلور چیست؟
- چگونه اتم های در یک ساختار جامد آرایش دارند؟
- چگونه خواص مواد با توجه به ساختار کریستالی تغییر می کند؟

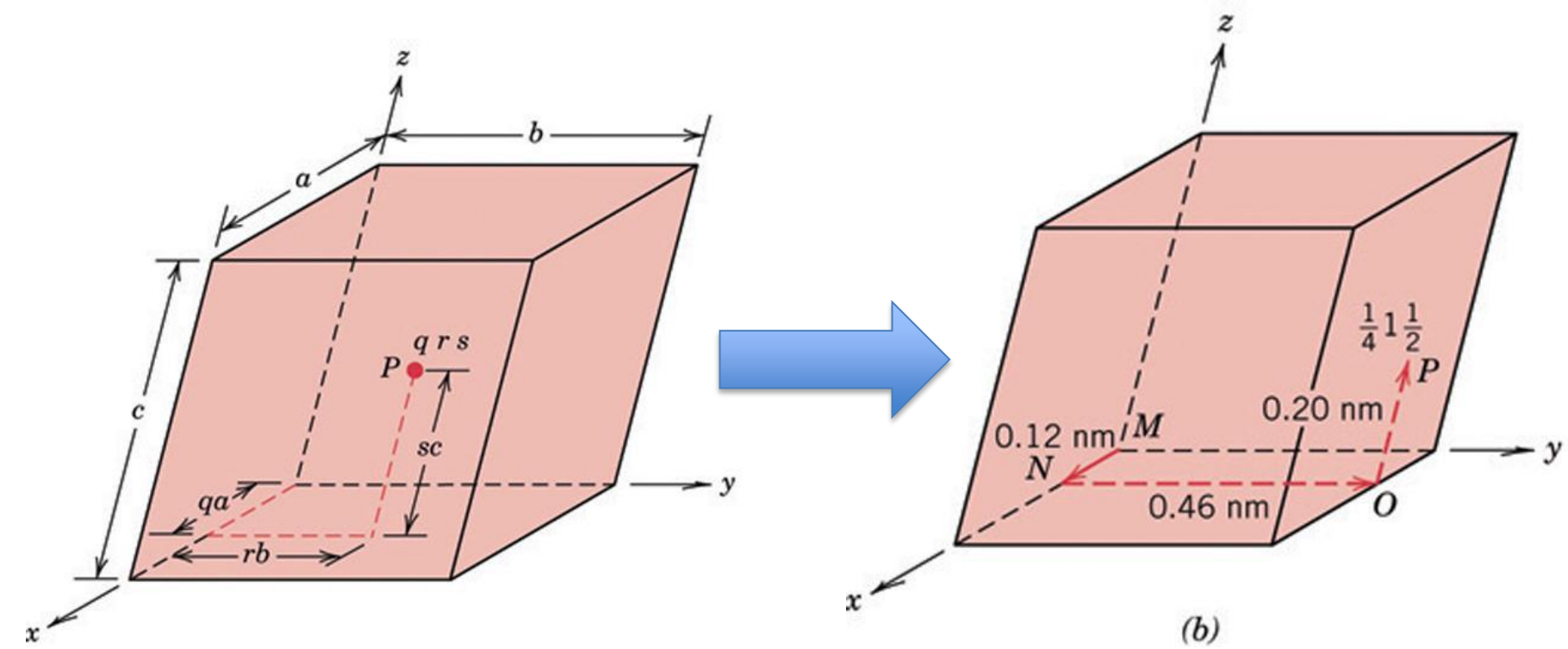


نقاط کریستالوگرافی

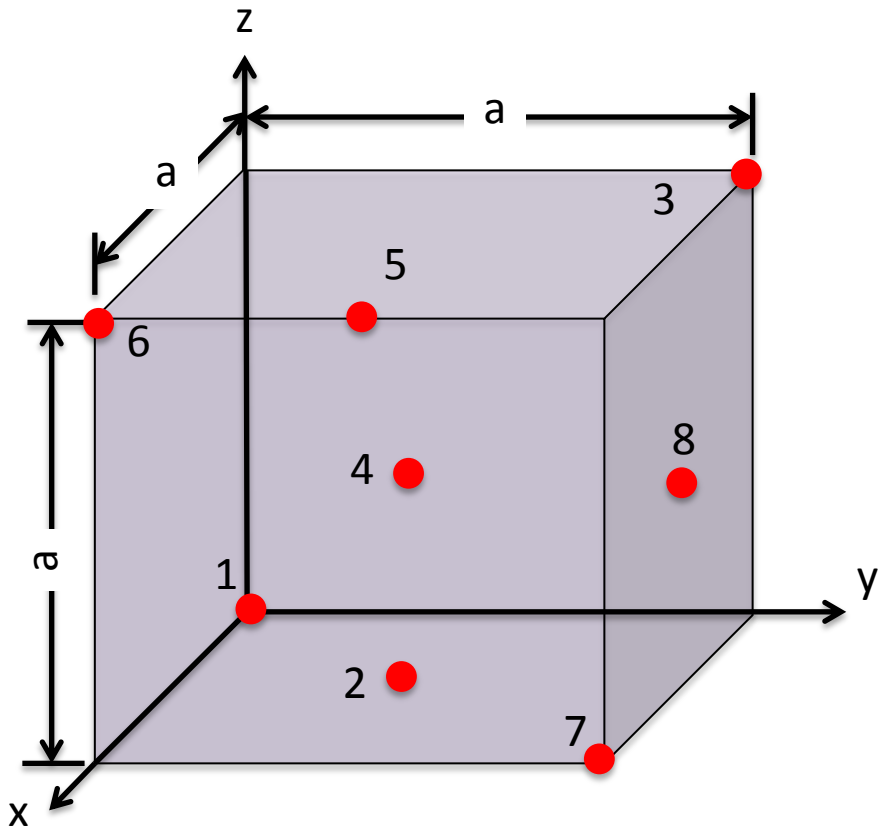


مقال تعیین نقاط در ساختارهای بلوری

- مطلوب است محاسبه مکان نقطه ای با مختصات 1/4 1 2/1با
  فرض a=0.48 nm ,b=0.46 nm c= 0. 4nm

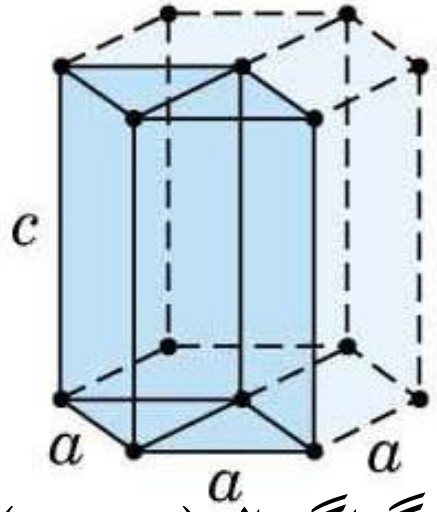


نقاط در سیستم های بلوری



شماره نقطه	محور x	محور y	محور z	مختصات نقطه
۱	0	0	0	000
۲	1/2	0	1/2	½ ½ ½
۳	0	1	1	011
۴	1/2	1/2	1/2	½ ½ ½
۵	1	1/2	1	1 ½ 1
۶	1	0	1	101
۷	1	1	0	110
۸	1/2	1	1/2	½ 1 ½

سیستم های بلوری در فلزات

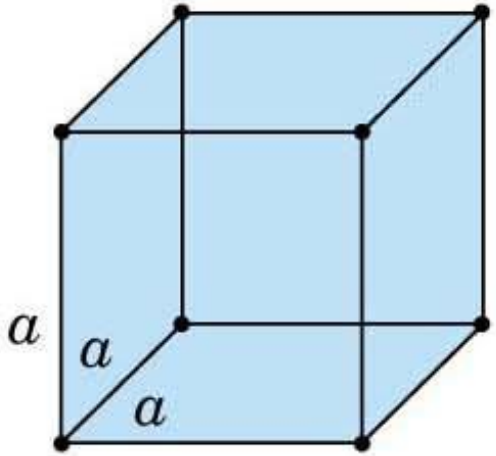


هگزاگونال (شش پر)

a=b≠c

α=β=90°

γ=120°



مکعبی

a=b=c

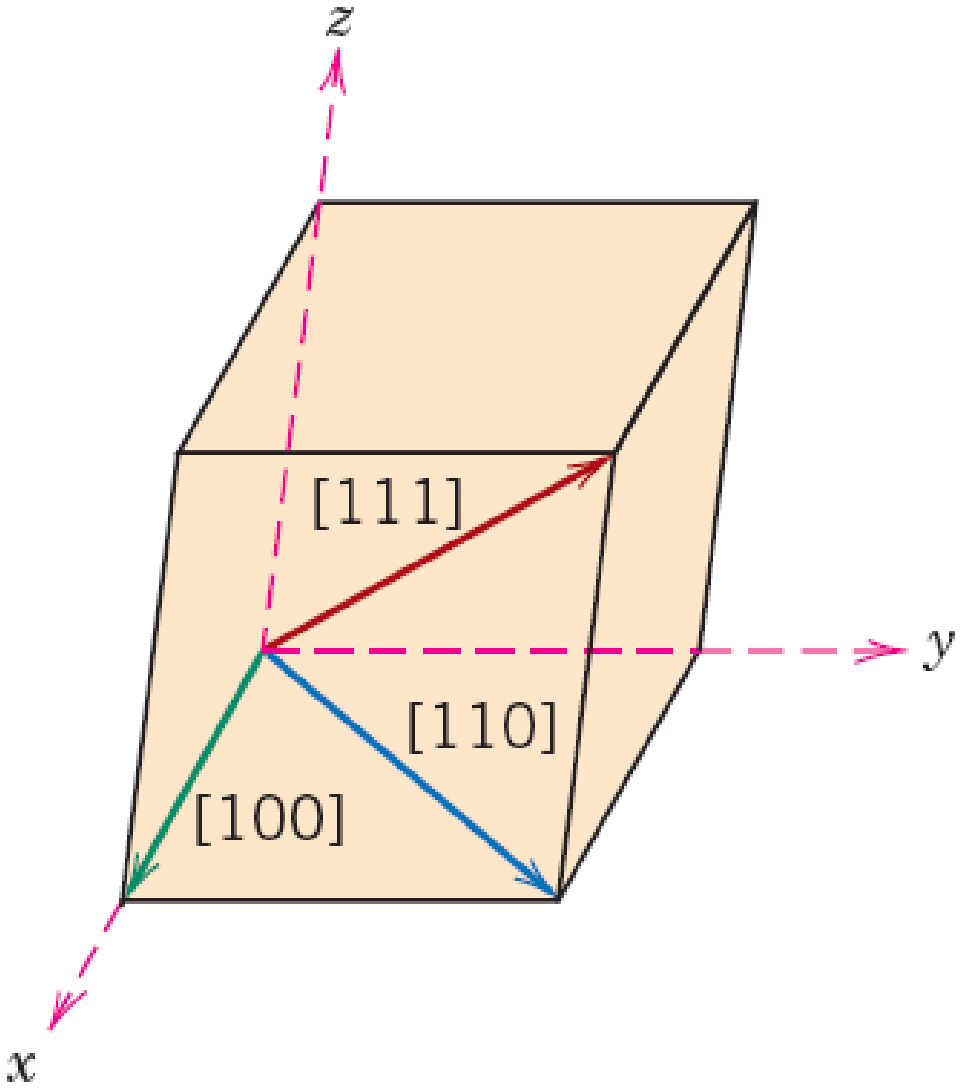
α=β=γ=90°

SC(مکعبی ساده)

BCC(مکعبی مرکزدار)

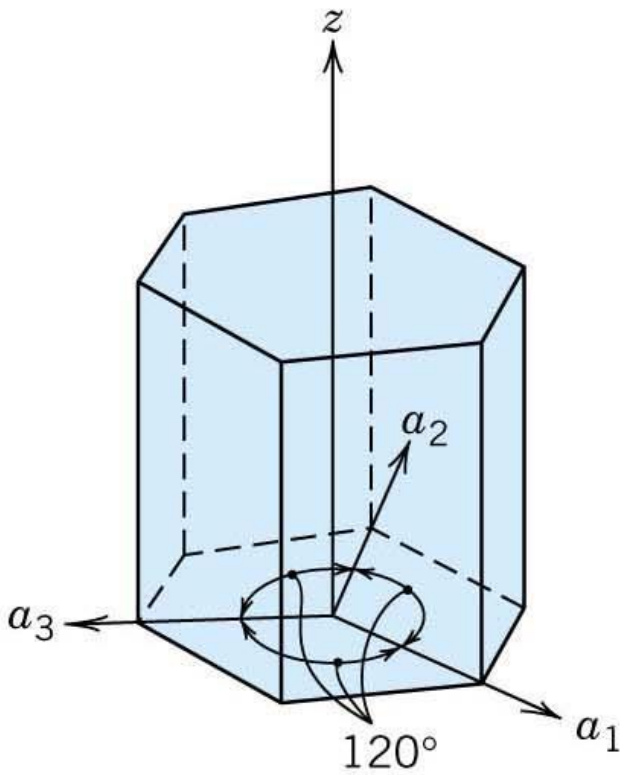
FCC(مکعبی با وجوه مرکزدار)

جهات در شبکه های بلوری



جهات در شبکه های بلوری

- اندیس میلر–براوه در سیستم های هگزاگونال
- از سیستم چهارتایی استفاده می شود که ارتباط آن ها به صورت زیر است:



$$[u'v'w'] \rightarrow [uvtw]$$

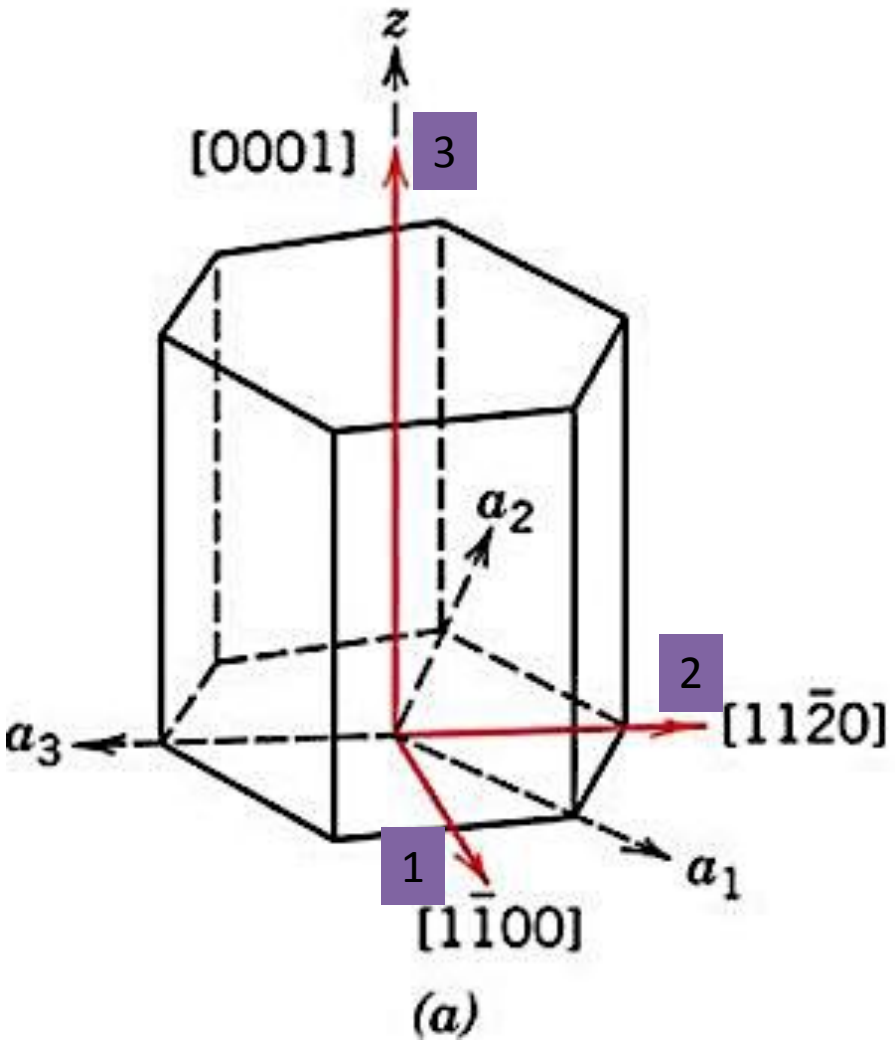
$$u = \frac{1}{3}(2u' - v')$$

$$v = \frac{1}{3}(2v' - u')$$

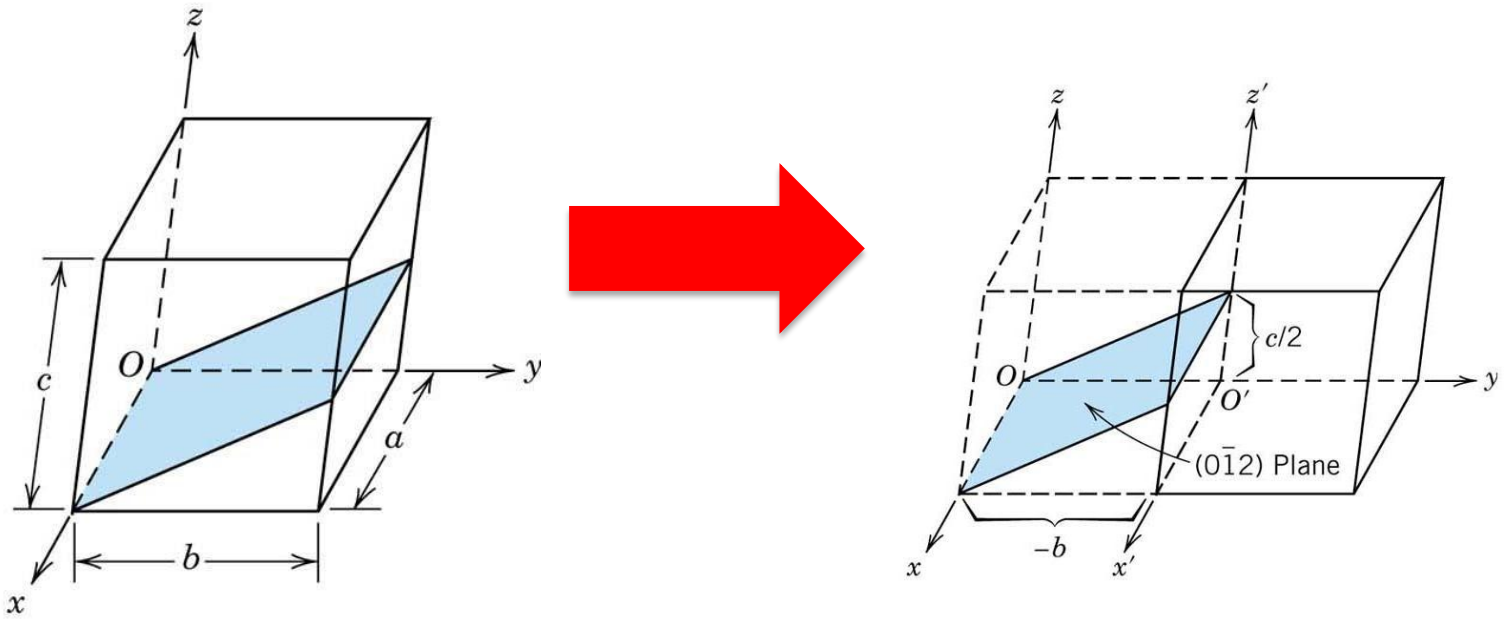
$$t = -(u + v)$$

$$w = w'$$

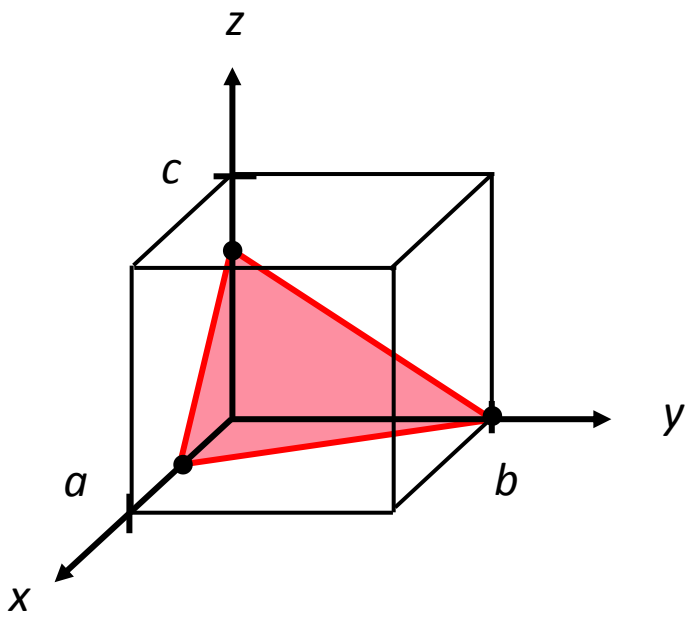
مثال: جهات در سیستم های هگزاگونال

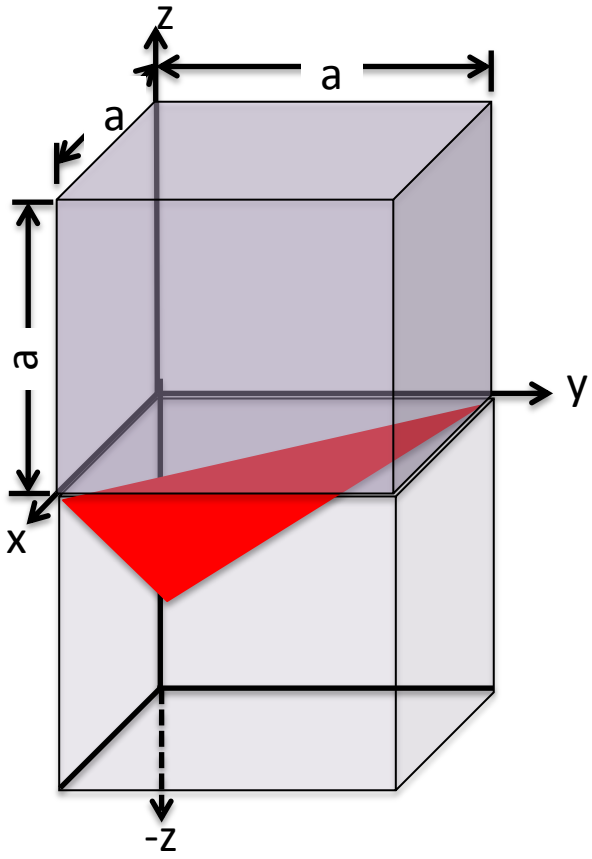


صفحات در شبکه های کریستالی مکعبی

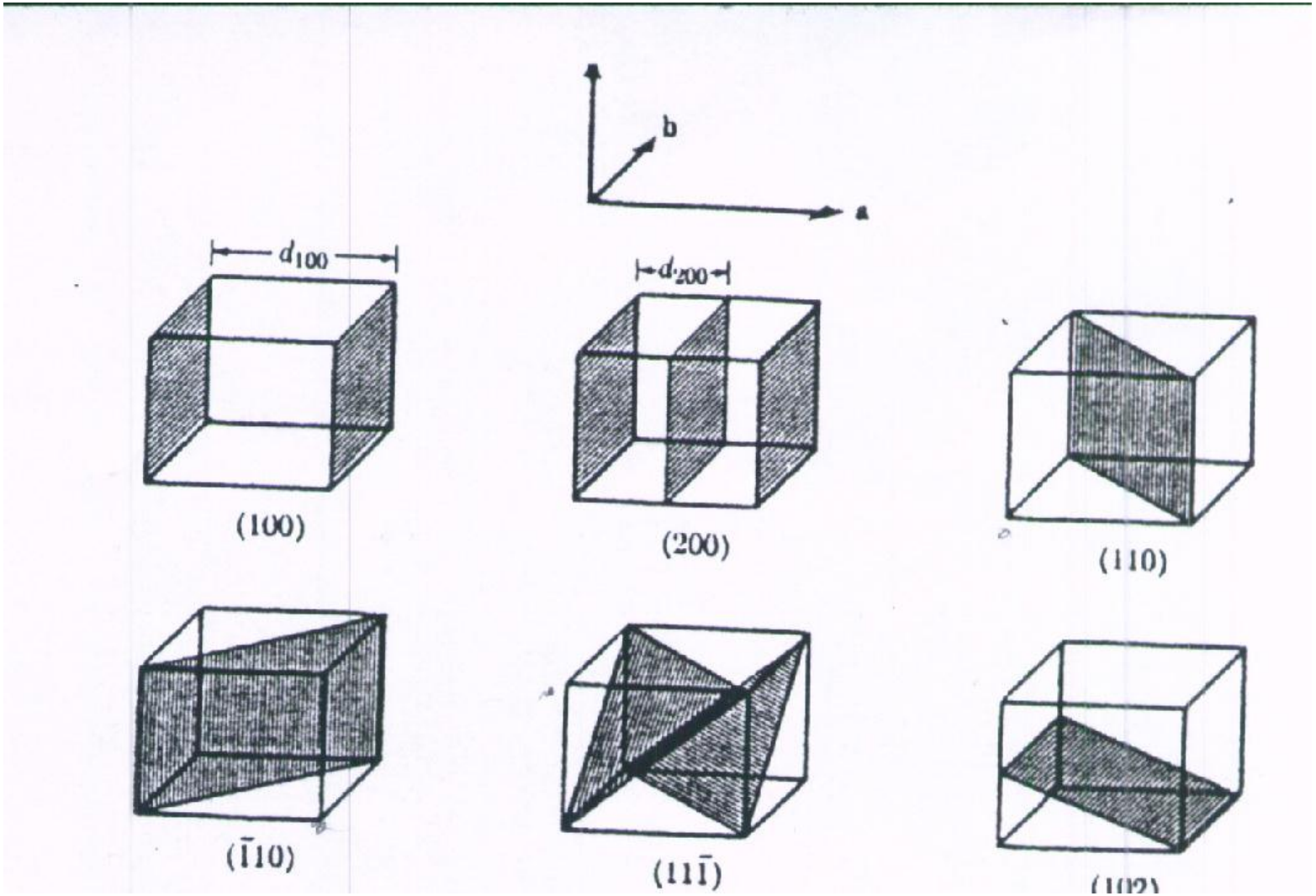


مثال: صفحات در سیستم های مکعبی

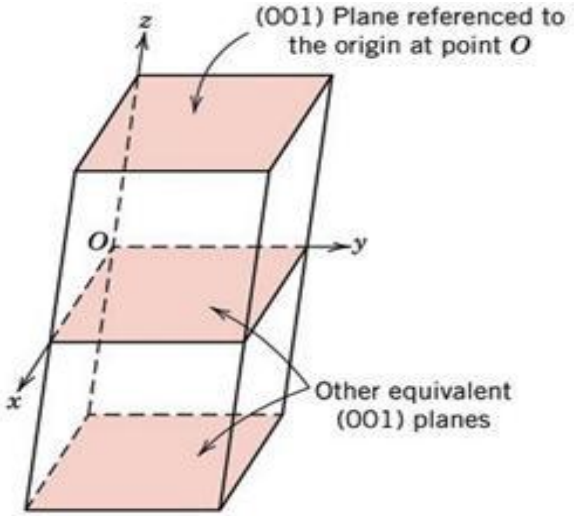




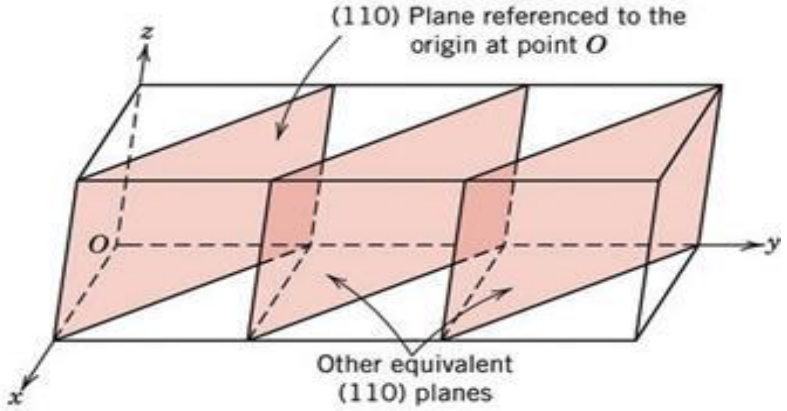
اندیس چند صفحه بلوری بر مبنای اندیس گذاری میلر.



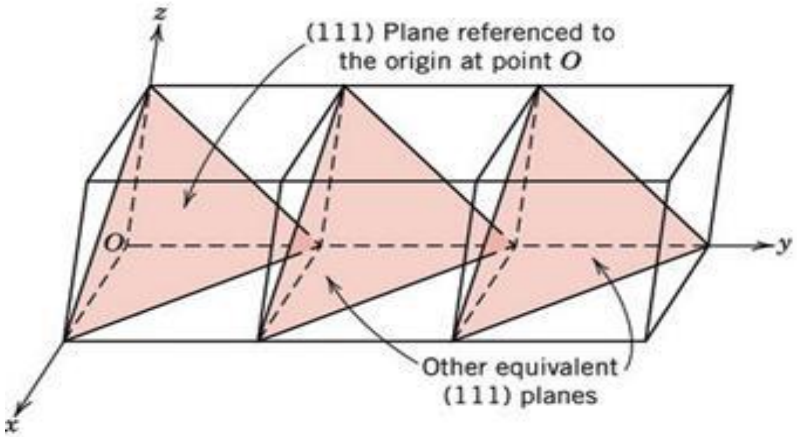
صفحات هم خانواده



(a)

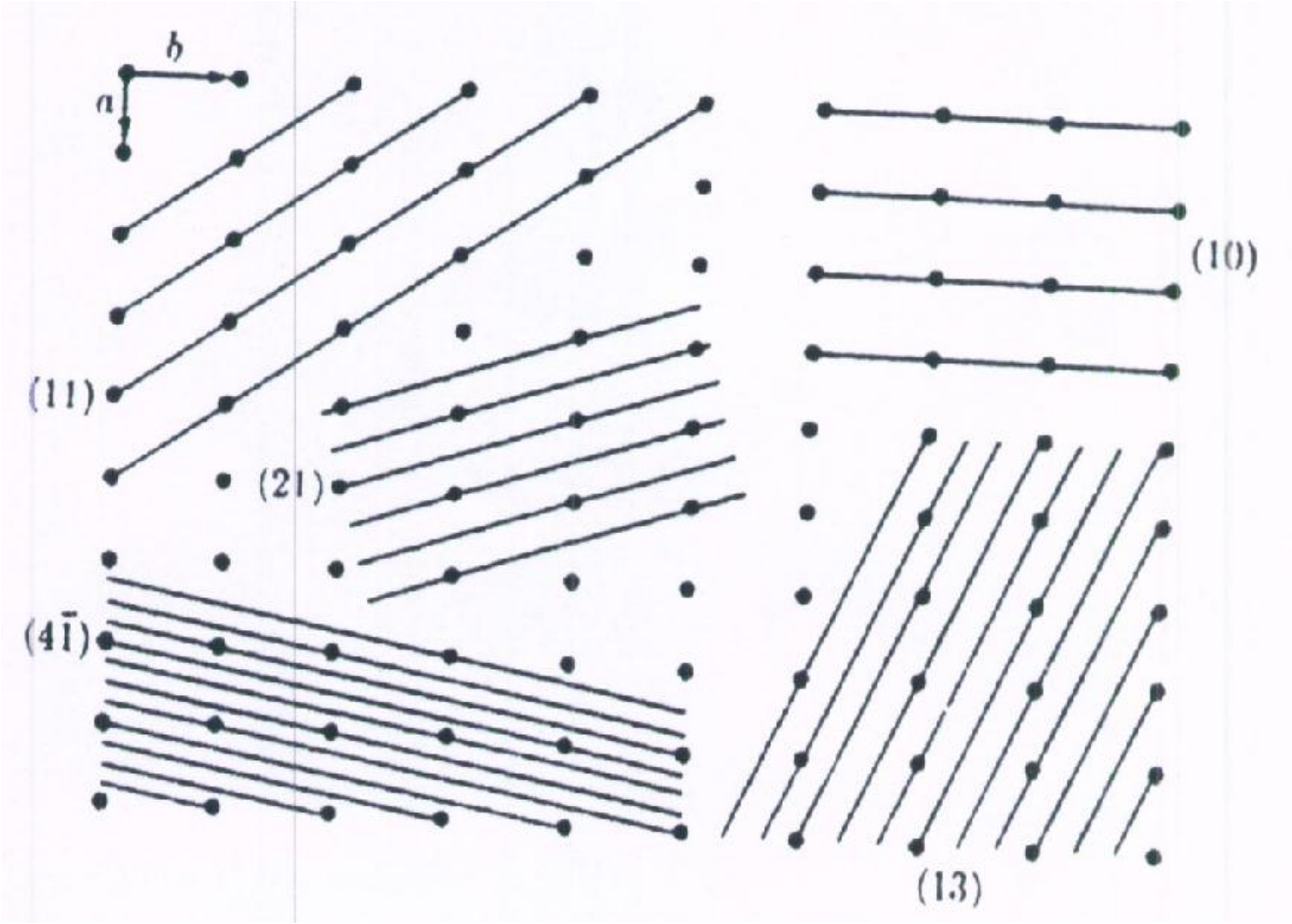


(b)

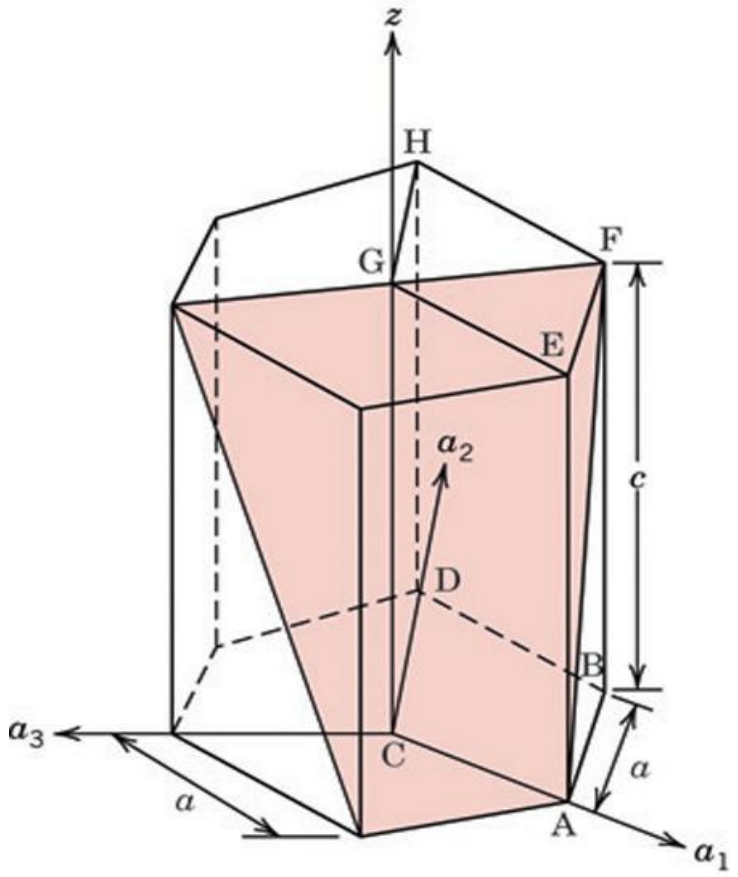


(c)

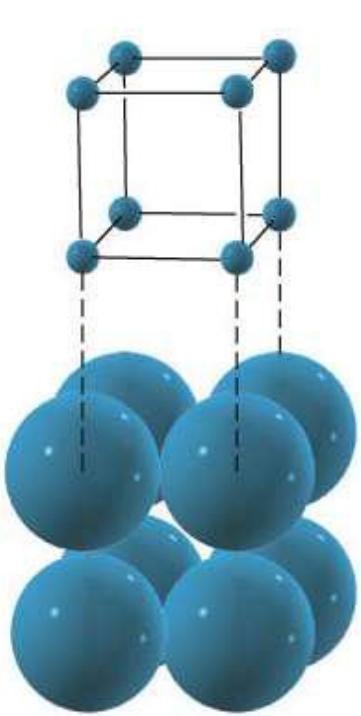
مقایسه فاصله بین صفحات بلوری در سیستم های با اندیس متفاوت. با افزایش اندیس صفحه، فاصله بین صفحات کمتر می شود.



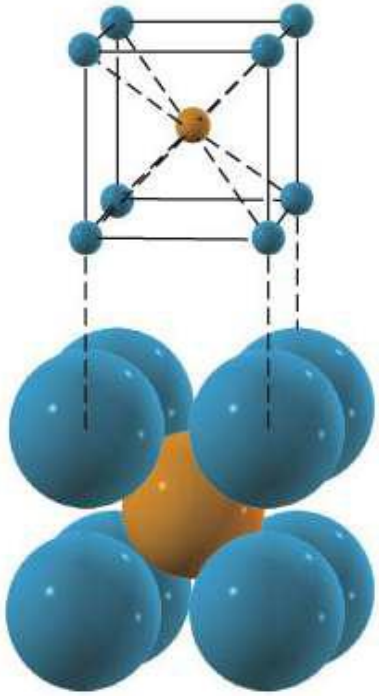
اندیسه صفحات در شبکه های هگزاگونال



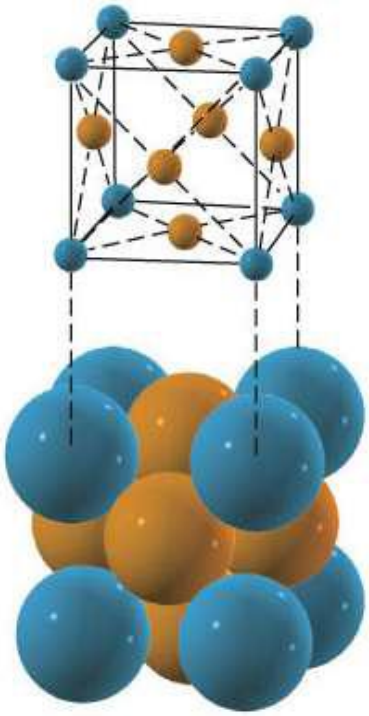
سیستم های بلوری مکعبی



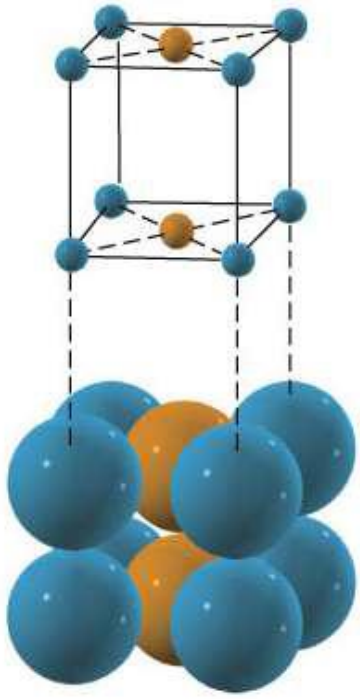
Primitive



Body-centered



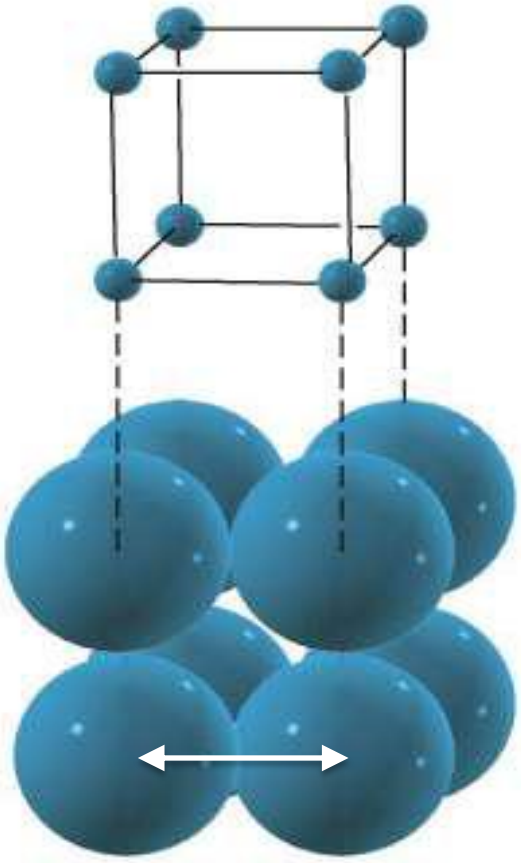
Face-centered



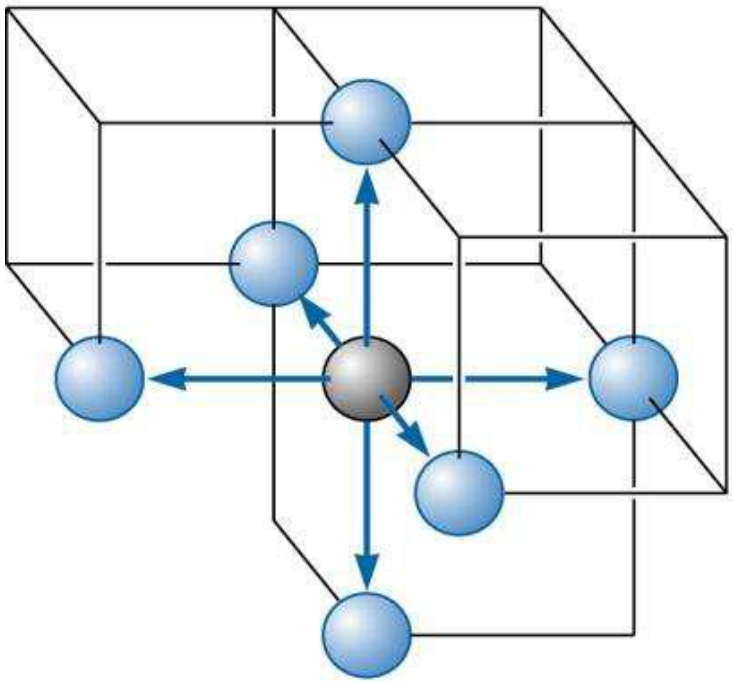
Side-centered

© 2007 Thomson Higher Education

سیستم مکعبی ساده (SC).



a= 2r



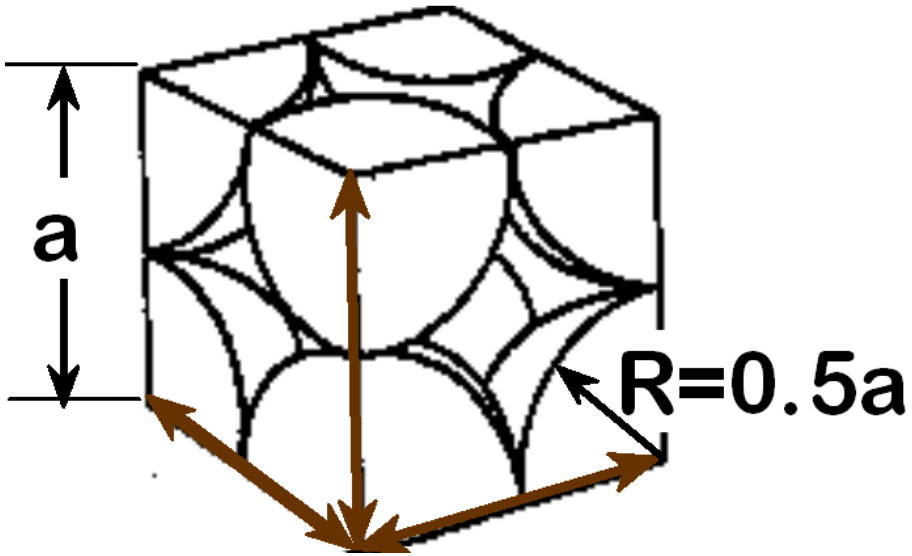
عدد هماهنگی:۶

تعداد اتم: ۱

فاکتور فشردگی اتمی (Atomic Packing Factor):

$$APF = \frac{\text{حجم اتم ها در واحد شبکه}}{\text{حجم کل واحد شبکه}}$$

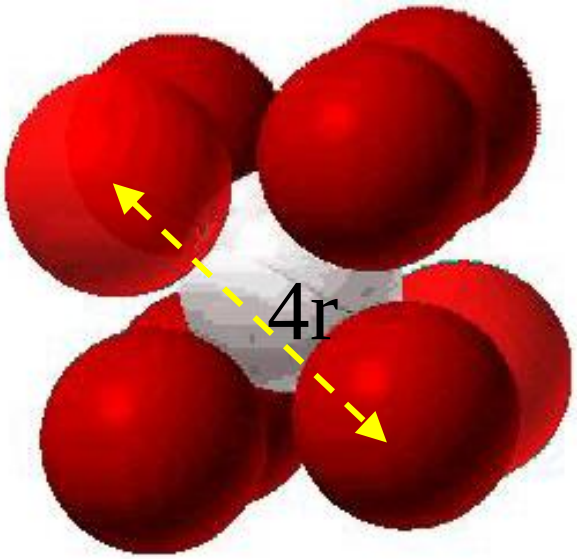
شبکه مکعبی ساده



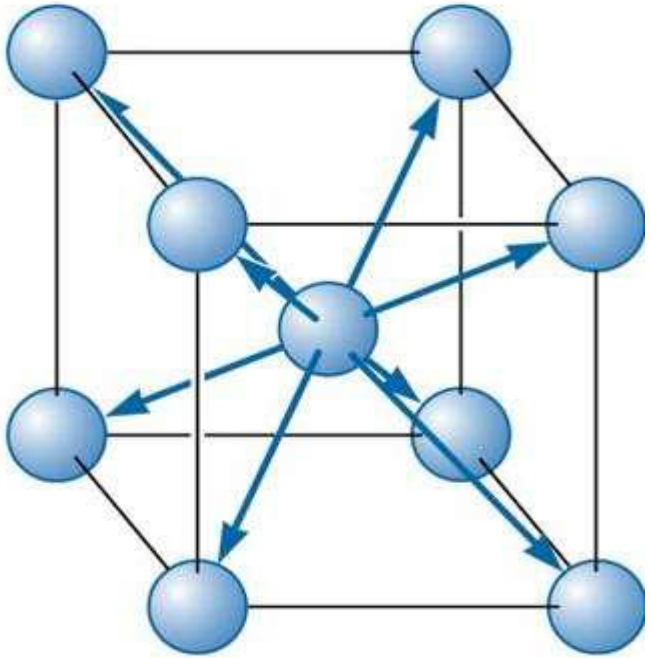
جهت فشرده اتمی طول= $a = 2R$

سیستم مکعبی مرکزدار (BCC)

- مثال:سزیم، اهن، پتاسیم، لیتیم، مولیبدن، تنگستن، کروم
- جهت با بیشترین فشردگی: قطر مکعب (۱۱۱)



$$a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$$

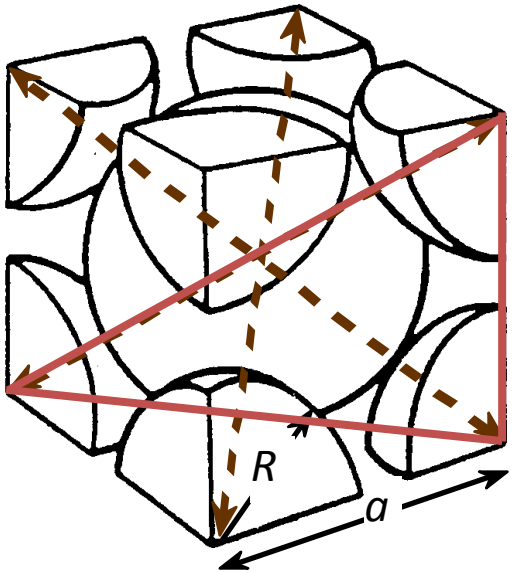


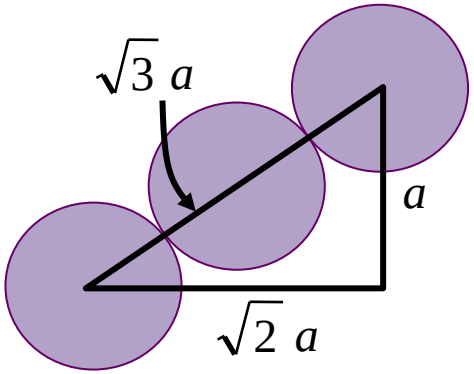
- عدد هماهنگی: ۸
- تعداد اتم: ۲

ویژگی های شبکه مکعبی مرکزدار

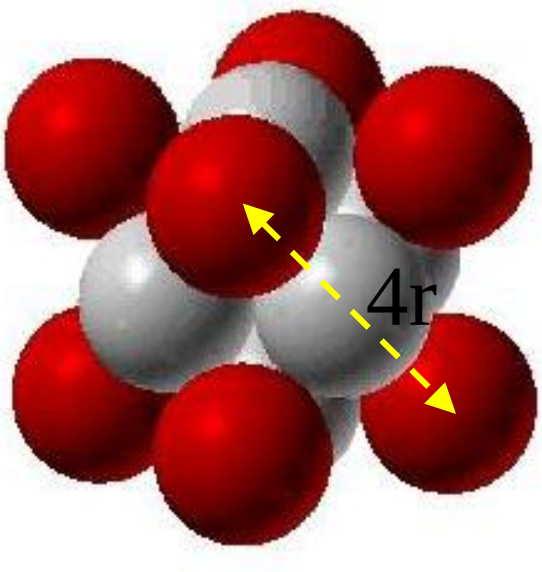
فاکتور فشردگی اتمی (Atomic Packing Factor):

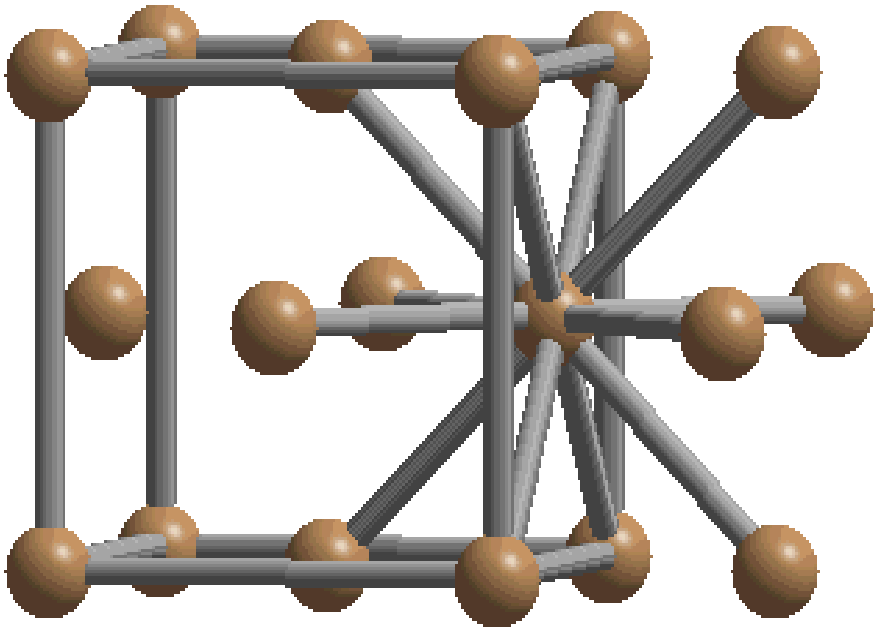
جهت فشرده اتمی= $\sqrt{3}\,a = 4R$





نحوه آرایش اتم ها و عدد همسایگی در سیستم مکعبی با وجوه مرکزدار(FCC)

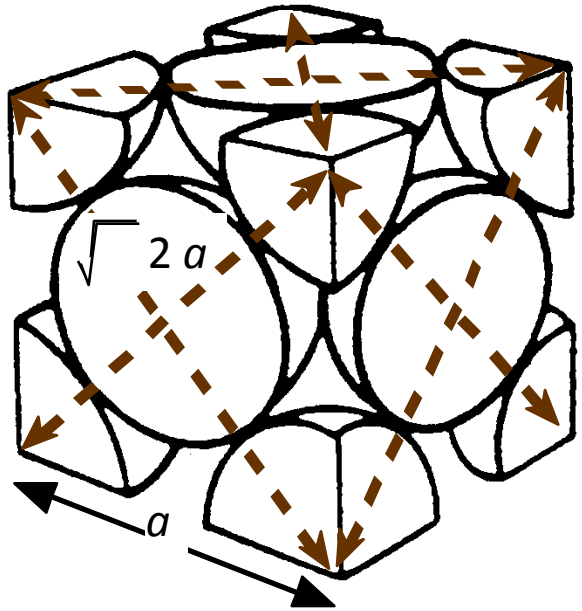




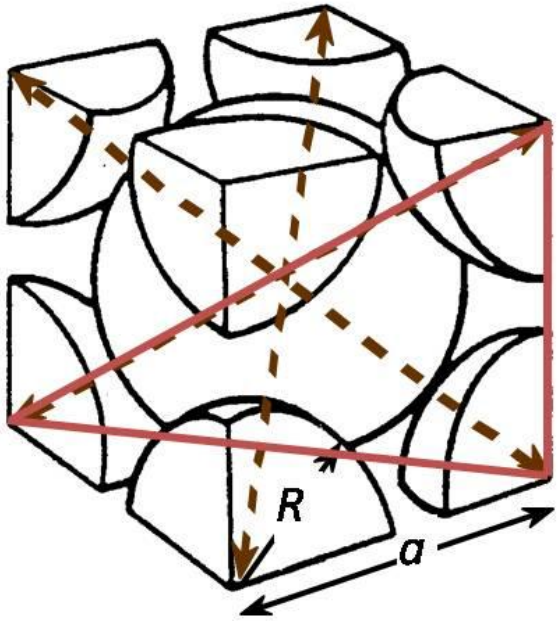
$$a = 2R\sqrt{2}$$

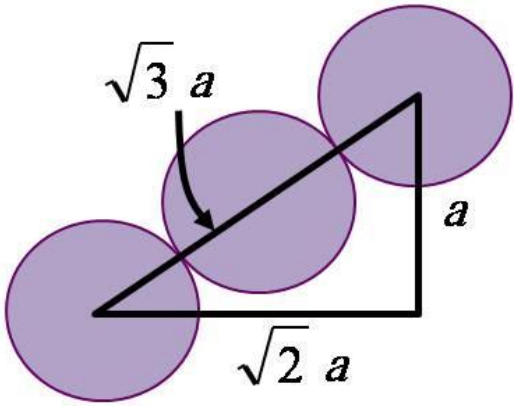
ویژگی های شبکه مکعبی با وجوه مرکزدار

جهت فشرده اتمی= $\sqrt{2}\,a = 4R$

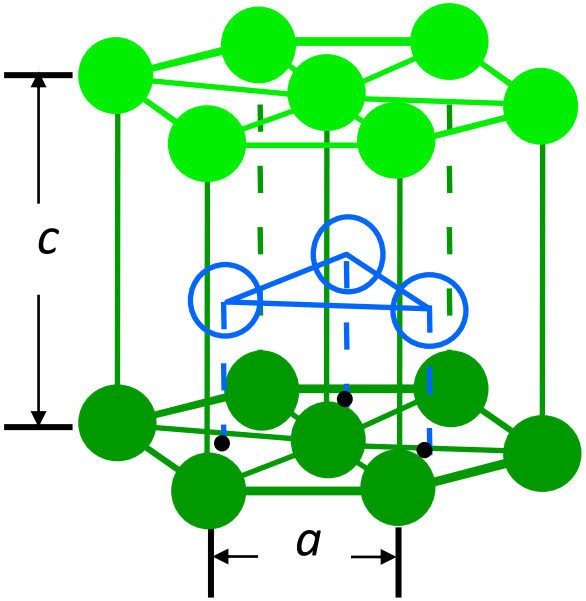


تعداد اتم در قطر مکعب در ساختار بلوری مکعب مرکزدار.





ساختار بلور هگزاگونال فشرده (HCP)



- مثال: منیزیم و روی...
- تعداد اتم: ۶
- موقعیت های اتم:
- عدد هماهنگی: ۱۲

c/a: 1.63

- فاکتور فشردگی اتمی : ۰/۷۴

ویژگی های ساختارهای بلوری

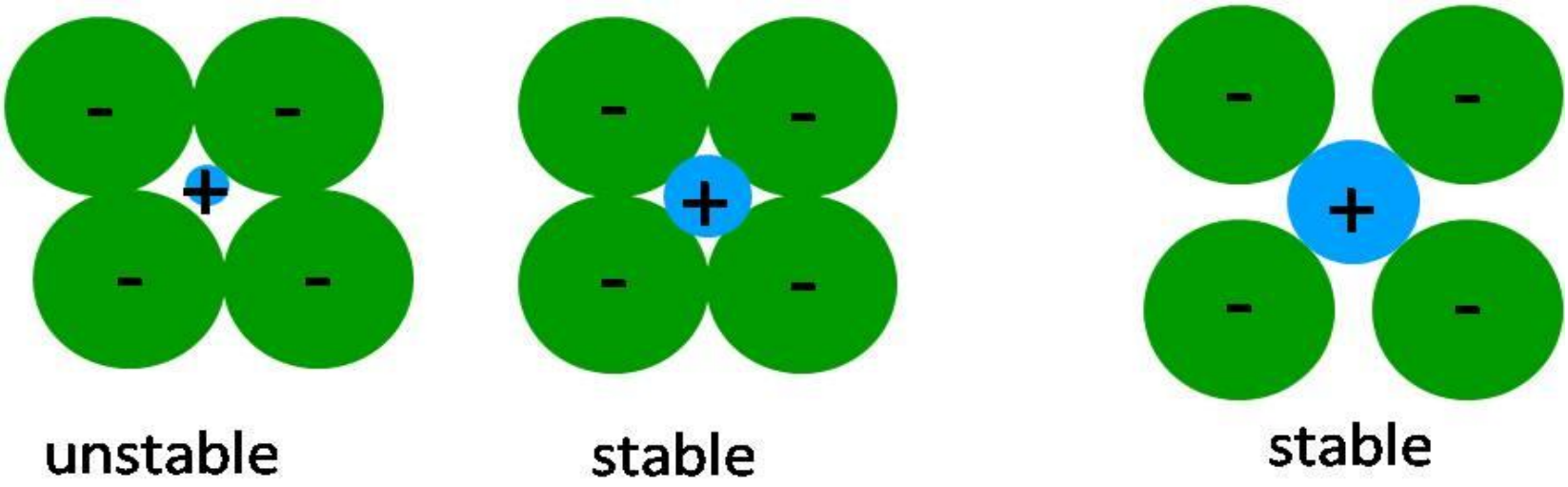
دانسیته تئوری:

$$\text{دانسیته} = \rho = \frac{\text{جرم اتم ها در واحد شبکه}}{\text{حجم کل واحد شبکه}}$$

$$\rho = \frac{n\,A}{V_c\,N_A}$$

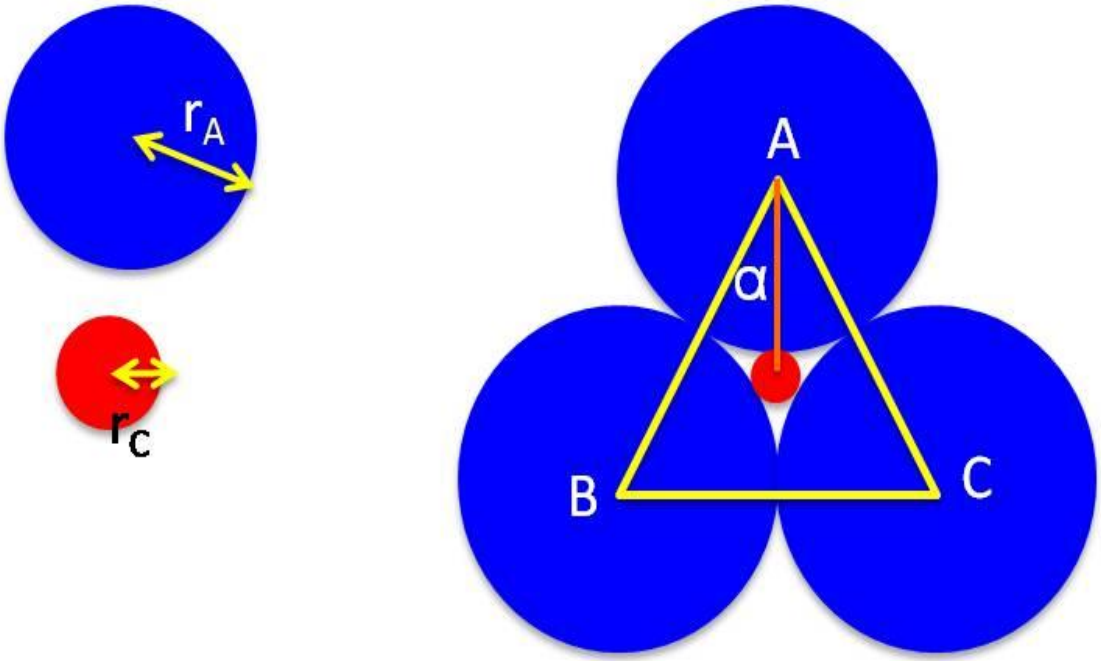
- n: # atoms/unit cell
- A: Atomic weight (g/mol)
- V_c: Volume/unit cell (cm^3/unit cell)
- N_A: Avogadro's number (6.023×10^{23} atoms/mol)

ساختارهای بلوری در سرامیک ها



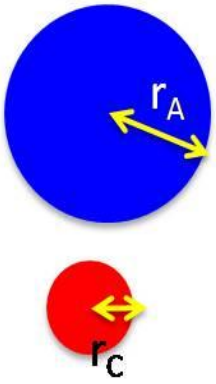
عدد همسایگی در سرامیک ها

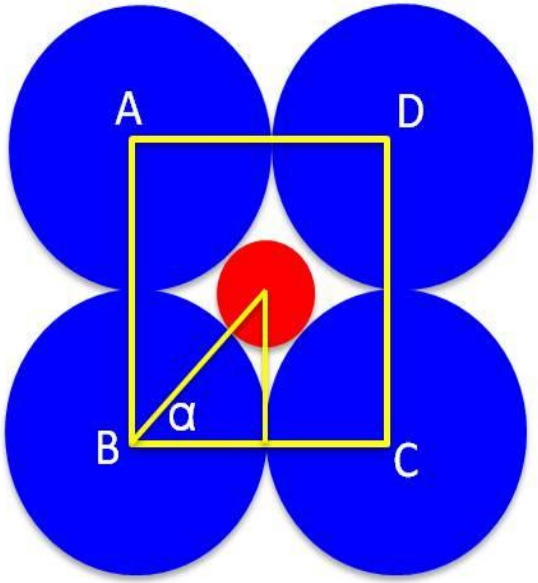
عدد همسایگی ۳

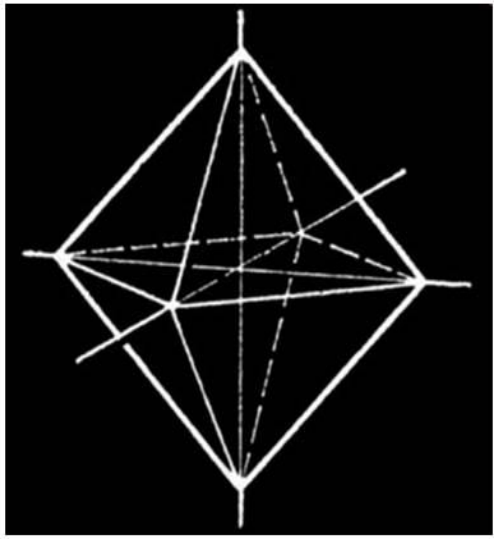


عدد همسایگی در سرامیک ها

عدد همسایگی 6

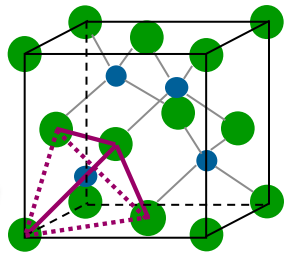




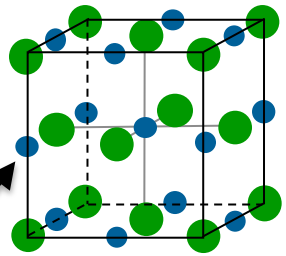


عدد همسایگی در ترکیبات سرامیکی

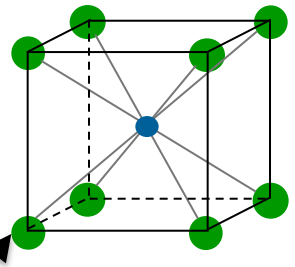
Coordination Number	Cation–Anion Radius Ratio	Coordination Geometry
2	<0.155	
3	0.155–0.225	
4	0.225–0.414	
6	0.414–0.732	
8	0.732–1.0	



ZnS
(zinc blende)

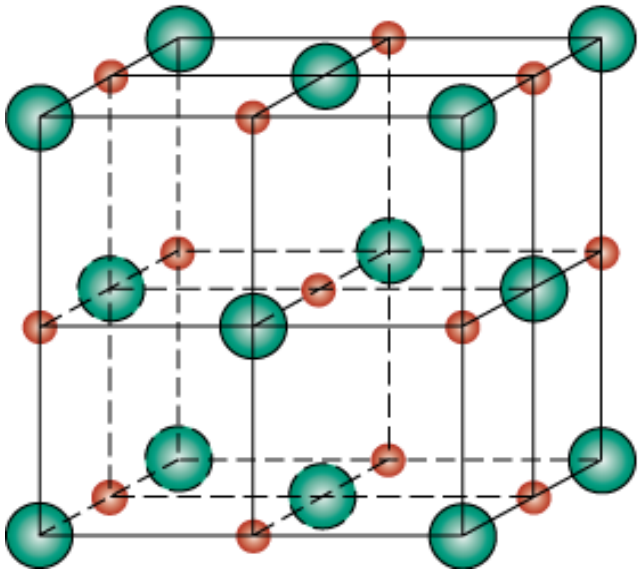


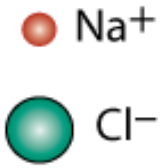
NaCl
(sodium
chloride)



CsCl
(cesium
chloride)

AXاول ساختار سرامیکی نوع





ساختار مشهور: نمک طعام

MgO, MnS, FeOترکیبات با ساختار مشابه:

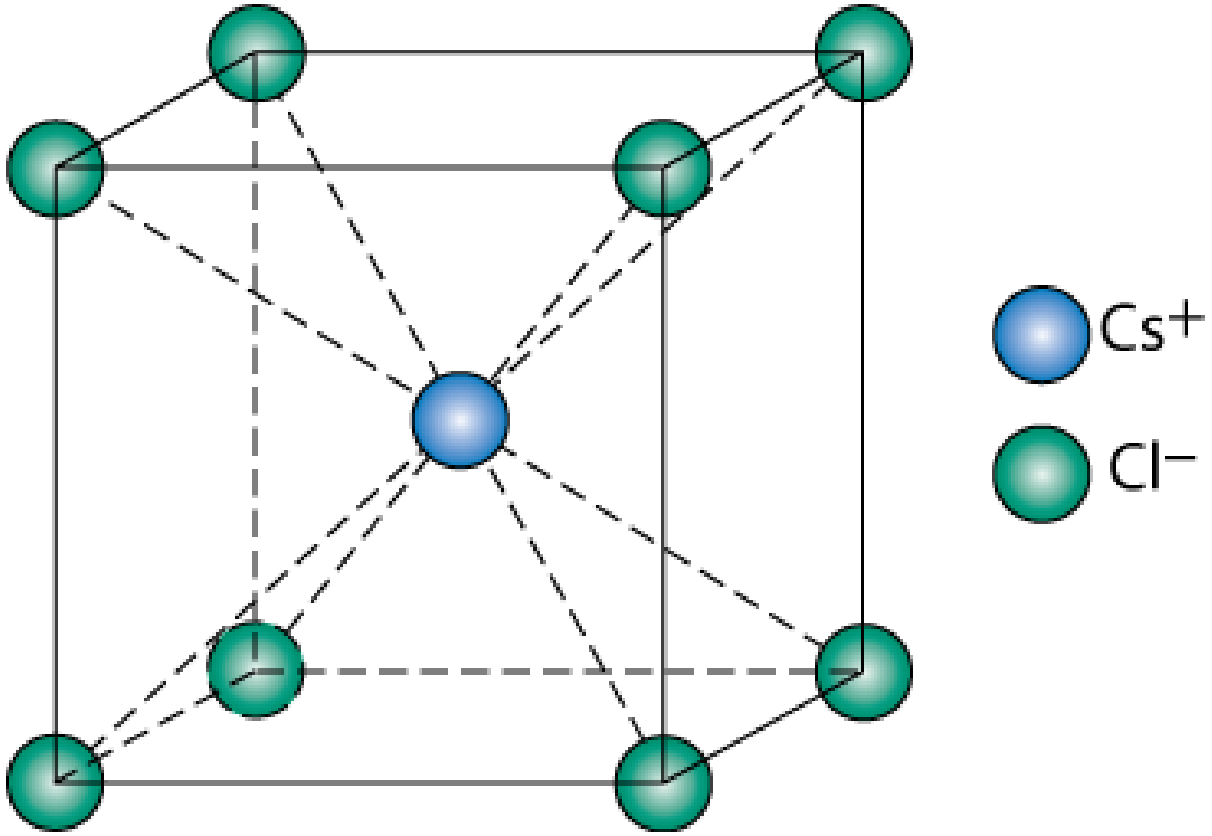
a=2RNa+2RCl

r_{Na} = 0.102 nm

r_{Cl} = 0.181 nm

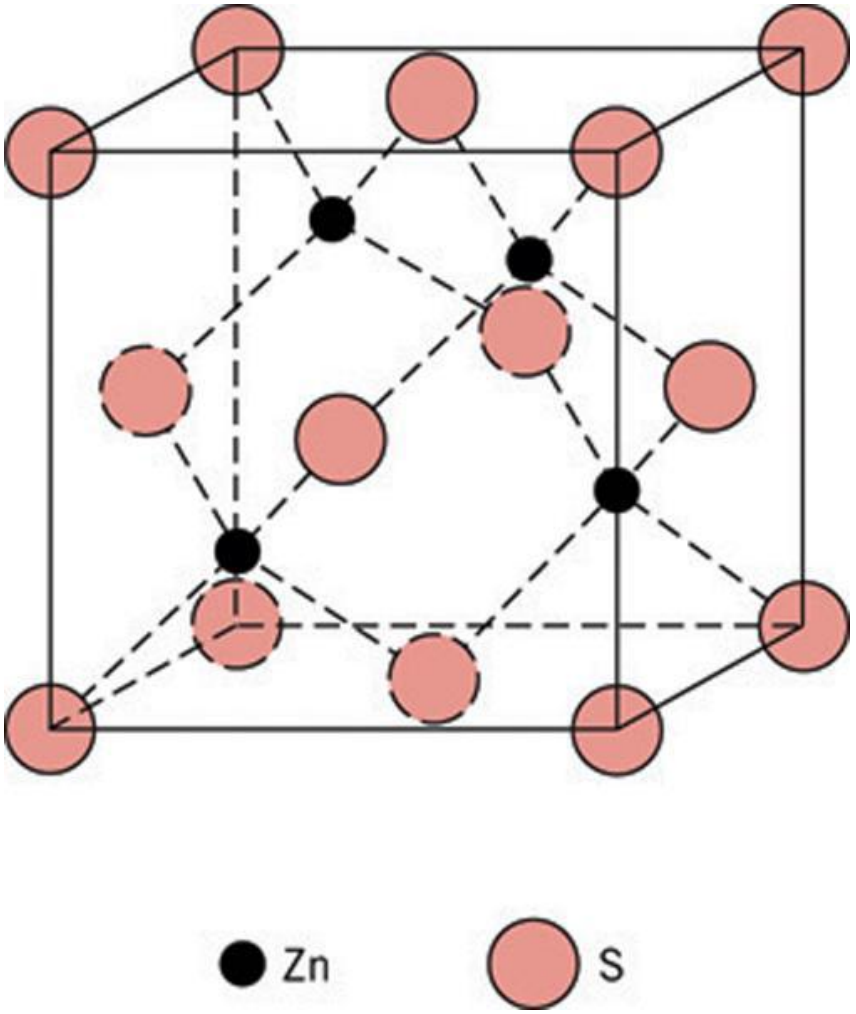
ساختارهای سرامیکی: AX نوع دوم

- ساختار مشهور: سزیم کلراید (CsCl)



ساختارهای سرامیکی:AX نوع سوم

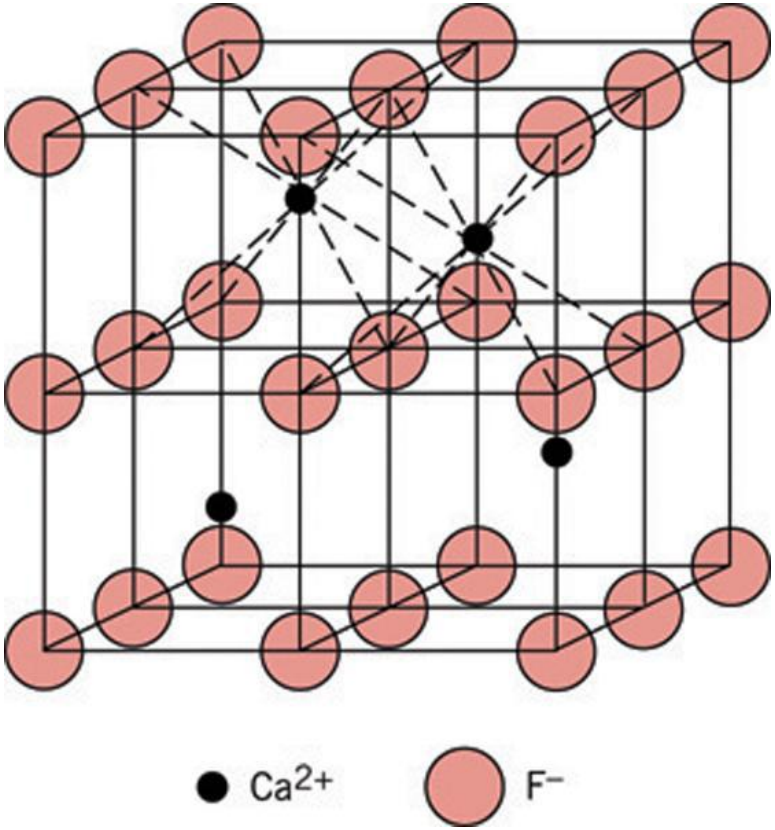
- ساختار مشهور: سولفید روی (ZnS) و الماس



ساختارهای سرامیکی: نوع AmXp

فرض $m \neq p \neq 1$

- ساختار مشهور: سولفید روی (CaF_2)

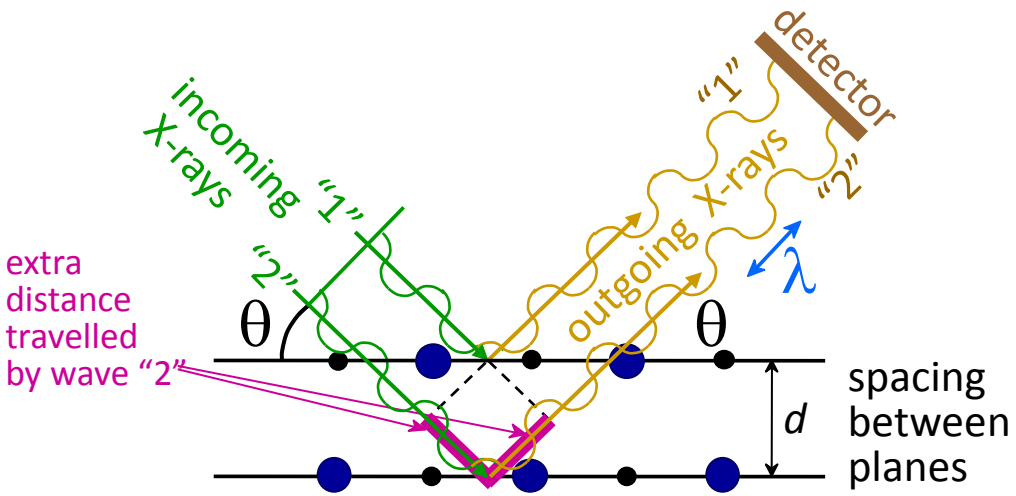


r_{Ca} = 0.112 nm

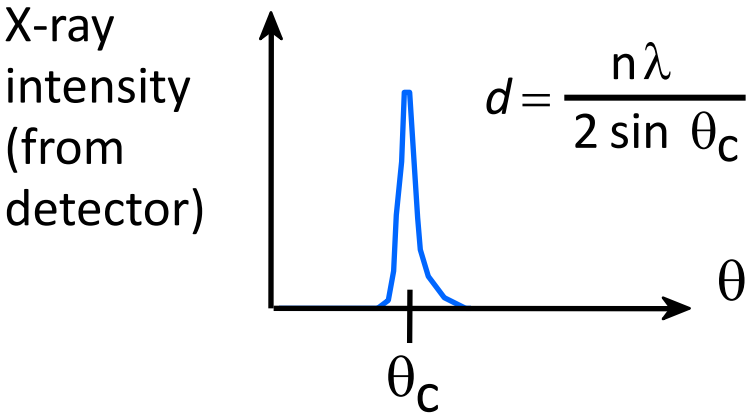
r_F = 0.131 nm

چگونه یک بلور شناسایی می شود؟

استفاده از پراش پرتو ایکس به منظور تعیین ساختار بلوری مواد



Adapted from Fig. 3.37, *Callister & Rethwisch 3e*.

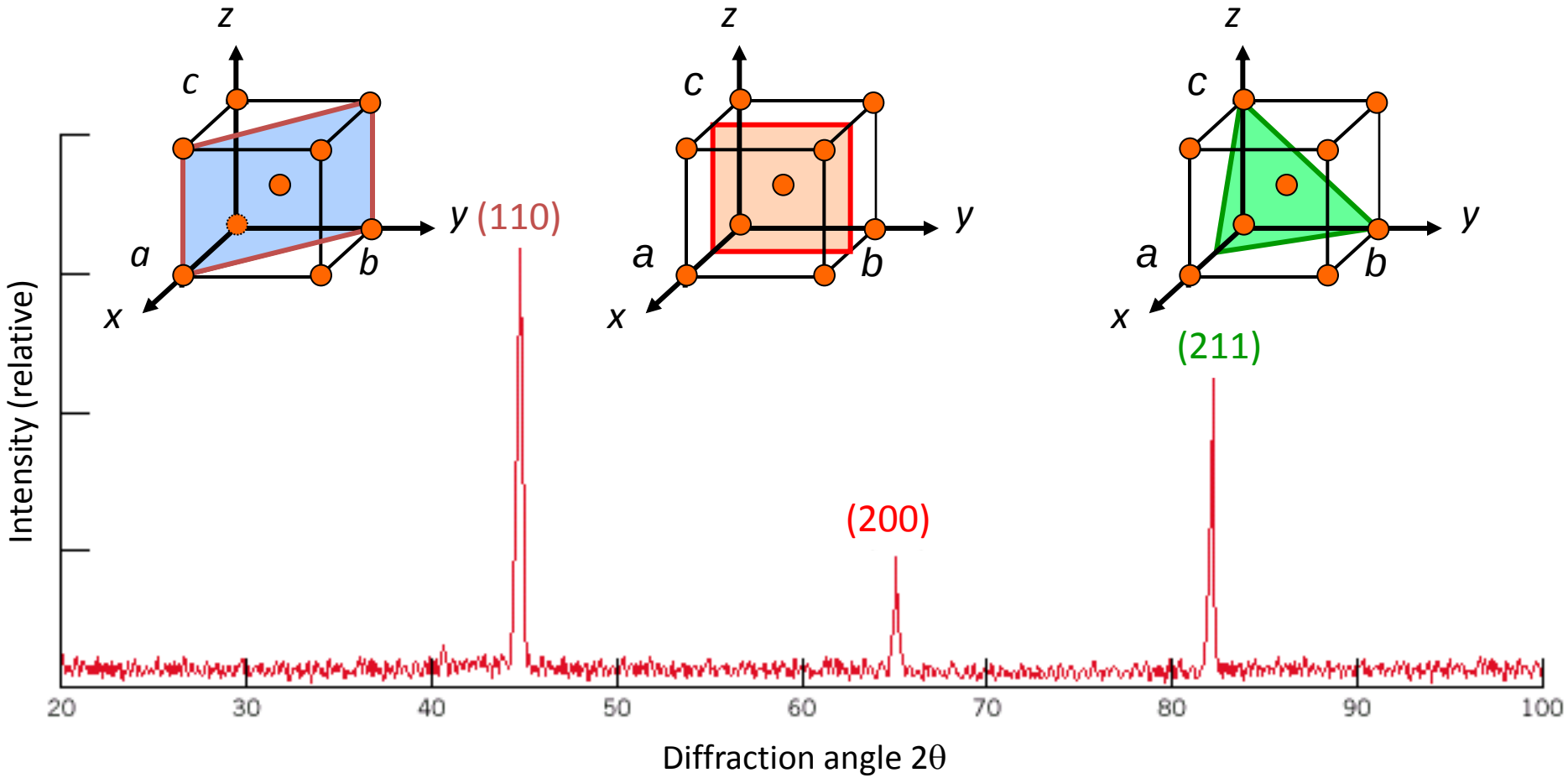


$$d = \frac{n\lambda}{2 \sin \theta_c}$$

اندازه گیری فاصله بین صفحه ای با استفاده از رابطه براگ

تعیین نوع بلور

الگوی پراش پرتوایکس



Diffraction pattern for polycrystalline α-iron (BCC)

Adapted from Fig. 3.20, *Callister 5e.*