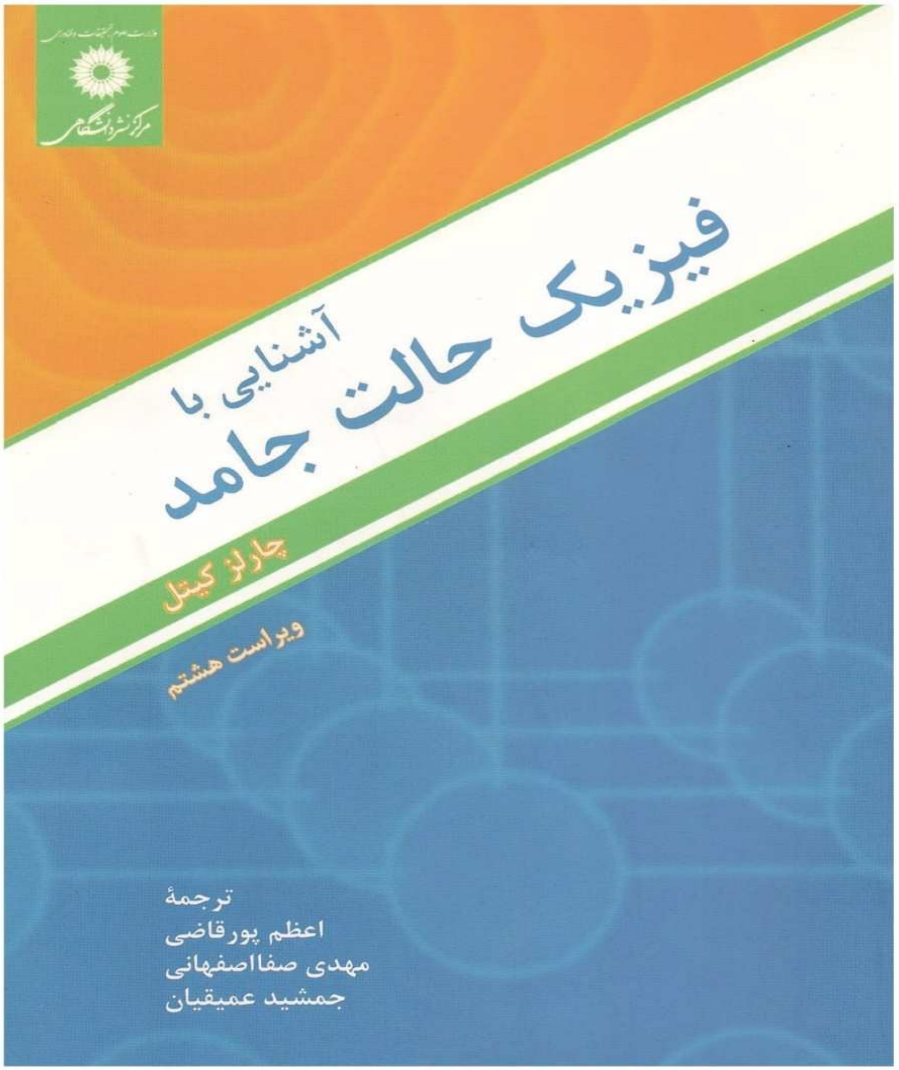
به نام خدا

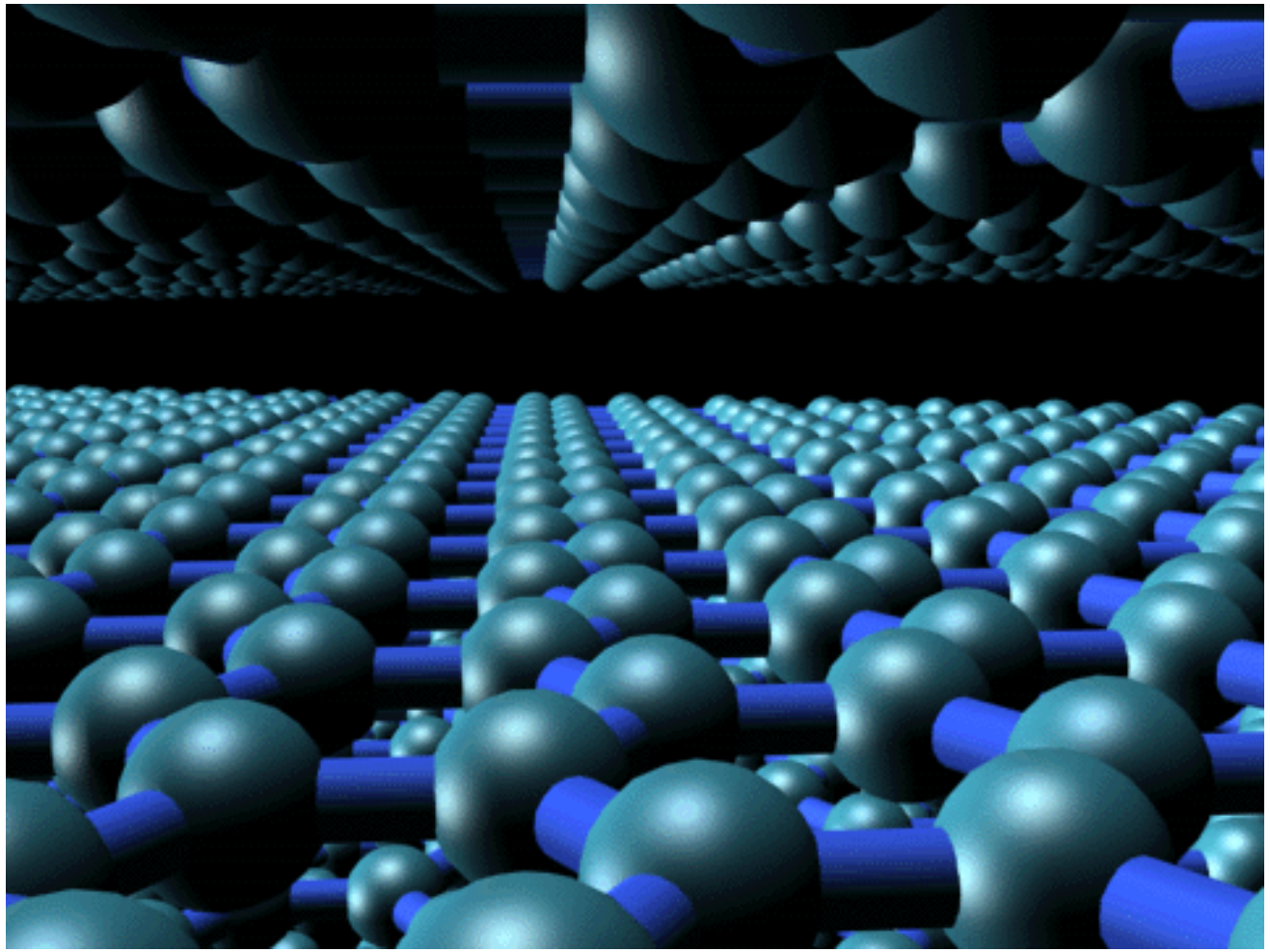

مرکز نشر دانشگاهی
آشنایی با
فیزیک حالت جامد
چارلز کیتل
ویراست هشتم
ترجمهٔ
اعظم پورقاضی
مهدی صفااصفهانی
جمشید عمیقیان

مقدمه

فیزیـک مـاده چگـال (CONDENSE MATTER PHYSICS) مـواد در فازهای جامد (Solid) و مایع (Liquid) را مورد مطالعه قرار می دهد.

فیزیک حالت جامد مطالعه جامدات در فازهای کریستالی منظم و همچنین فازهای نامنظم مانند فازهـای جامـدات شیشـه گونـه (Glassy) و آمـورف (بـی شـکل) (Amorphous) را در بر می گیرد .

Chapter 1
Crystal Lattice



فصل اول

ساختار بلوری

آرایه‌های دوره‌ای اتمها

انواع اصلی شبکه‌ها

دستگاه شاخص‌گذاری صفحات بلوری

ساختارهای بلوری ساده

تصویربرداری مستقیم از ساختار اتمی

وقوع ساختارهای بلوری غیرایده‌آل

داده‌های مربوط به ساختار بلوری

- کریستال‌ها جامد هستند – اما جامدات الزاماً کریستالی یا بلورین نیستند
- کریستال‌ها دارای تقارن و نظم دور بُرد می‌باشند

symmetry (Kepler) and *long range order*

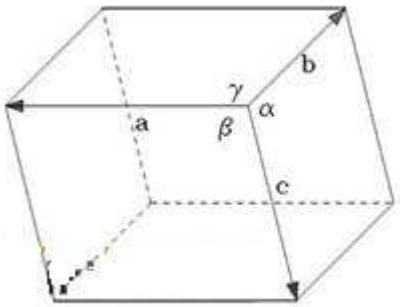
- جامدات کریستالی (crystalline solids)
- جامدات بی شکل یا آمورف (amorphous solids)

بلورشناسی

- زیر مجموعه ای از علم کانی شناسی است.
- علم آرایش اتم ها در جامدات است.
- هدف اصلی بلورشناسی بررسی خود بلور است.
- بلورها لزوماً در همه جهات رفتار مشابهی از خود نشان نمی دهند و علت این تفاوت، به نحوه قرار گیری اتم ها، صفحات تشکیل دهنده بلورها، میزان تراکم اتمی و پیوندهای اتمی و یونی وابسته است.
- فاصله اتم ها در ساختار به نیروهای بین اتمی، دما، فشار و نیروهای مکانیکی وابسته است.

ساختار بلورها

- بلور مجموعه ای از اتم ها است که نظم تکرار شونده ای در سه بعد دارند.
- اتم ها تمایل دارند در موقعیت پایدار قرار بگیرند.
- کوچک ترین واحدی که متقارن بوده و بیانگر خصوصیات بلوری باشد، سلول واحد نامیده می شود.
- خصوصیات سلول واحد توسط پارامترهای شبکه تعیین می شود.
- پارامترهای شبکه شامل طول اضلاع سلول واحد یعنی a، b و c و زوایای بین اضلاع در سلول واحد، یعنی α، β و γ می شوند.



تقارن در بلور

- اتم ها در بلور به صورت متقارن در یک شبکه سه بعدی که شبکه اتمی نام دارد، آرایش می یابند.
- وجوه هر بلور نیز دارای آرایش منظمی از اتم ها می باشد و بنابراین تقارن شبکه بلورین را نمایش می دهد.
- بلورها شامل قسمت های گوناگونی مانند؛ گوشه ها، اضلاع و صفحات متعدد فراوانی هستند و اجزای سازنده آن ها عموما به صورتی در کنار هم قرار می گیرند که مشابه اند و با یکدیگر تقارن به وجود می آورند.

- انواع تقارن در بلور عبارتند از :

۱- تقارن سطحی و سطوح تقارن

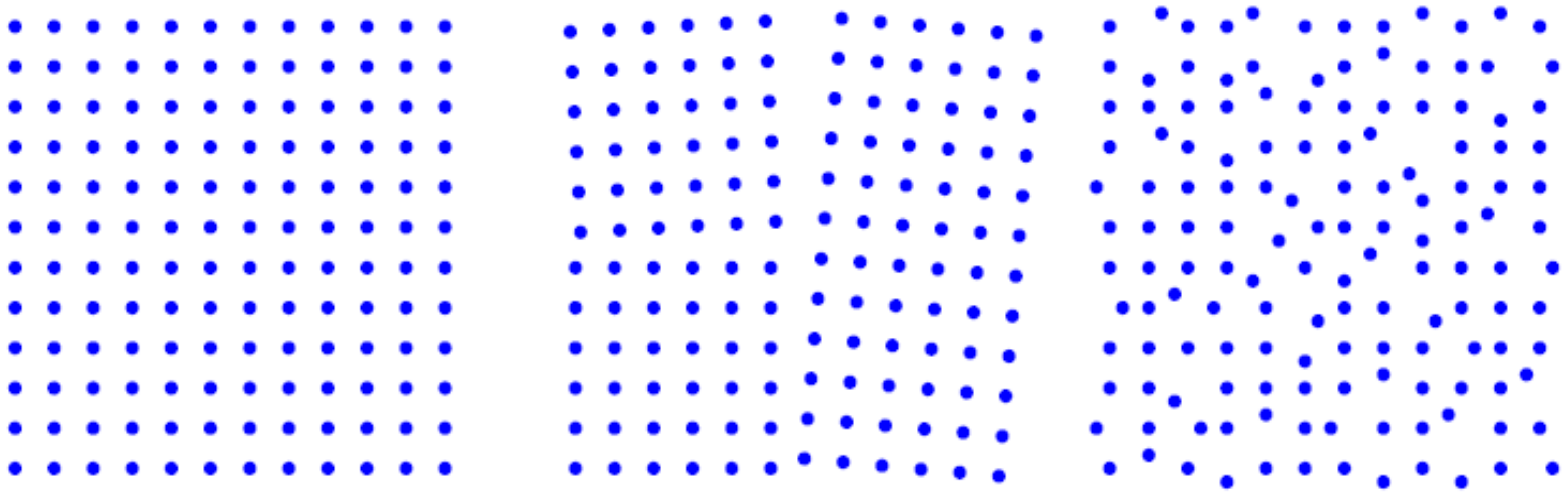
۲- تقارن دورانی یا محوری و محور تقارن

۳- تقارن مرکزی و مرکز تقارن

Space Lattice شبکه فضایی

تقارن انتقالی وجود دارد

Translational symmetry exists.



Crystalline

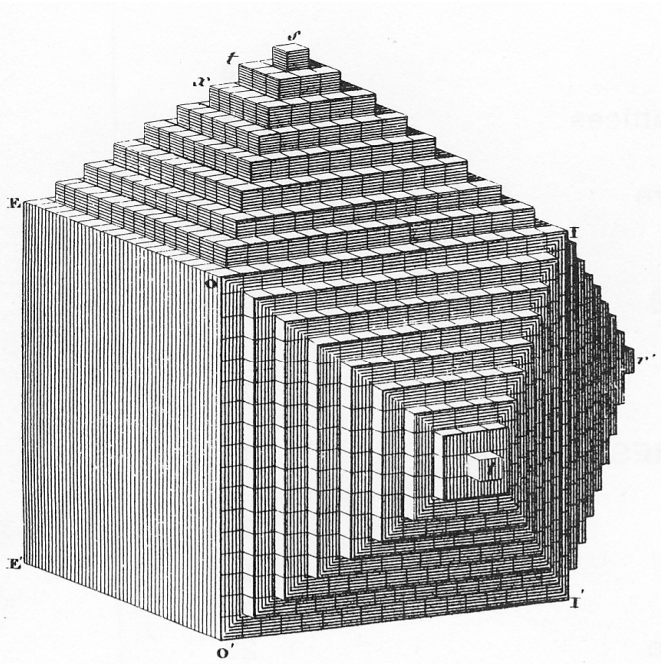
کریستالی

Polycrystalline

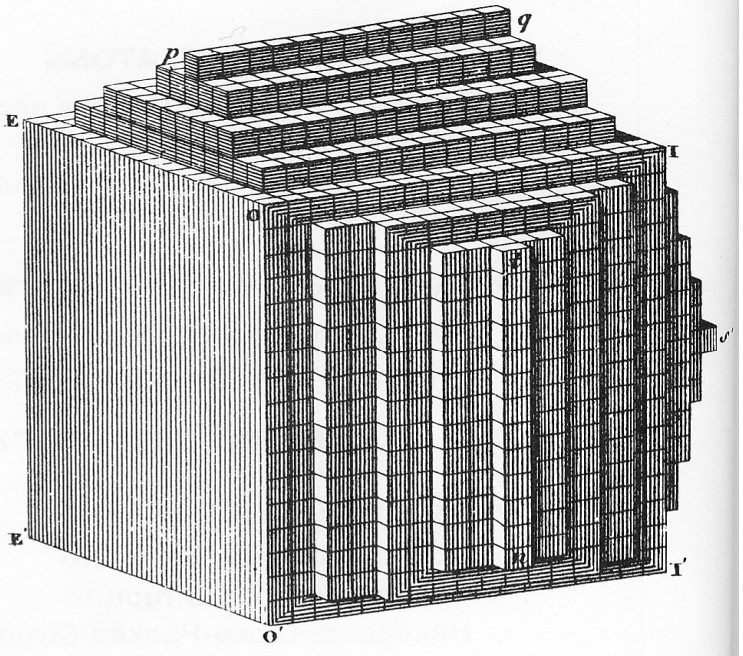
پلی کریستالی

Amorphous

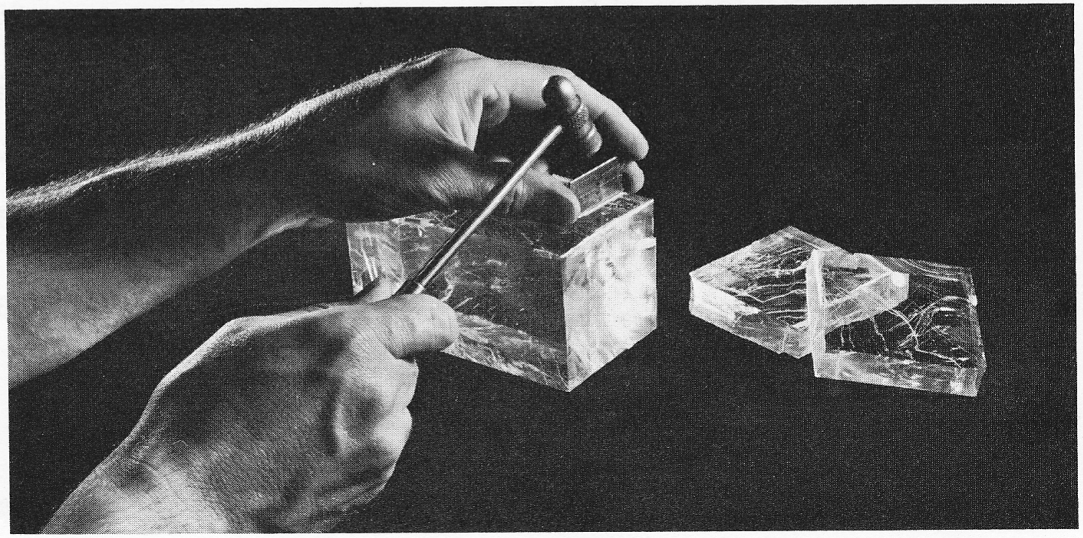
آمورف (بی شکل)



(a)

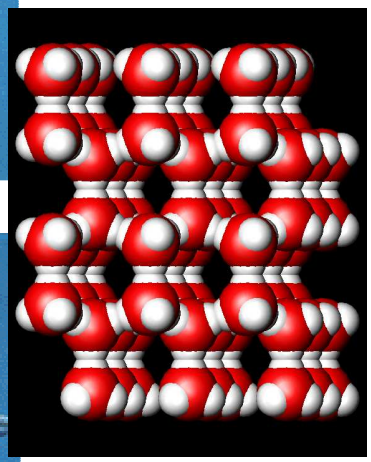


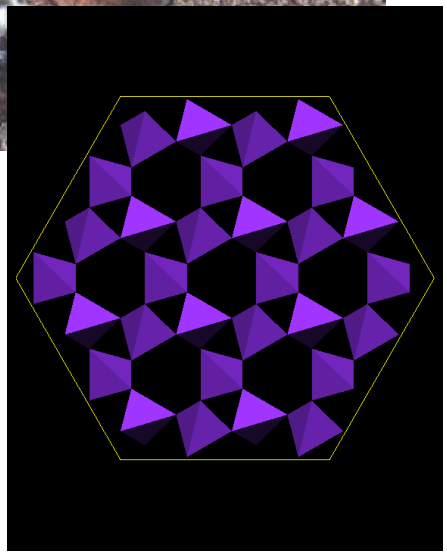
(b)



(c)

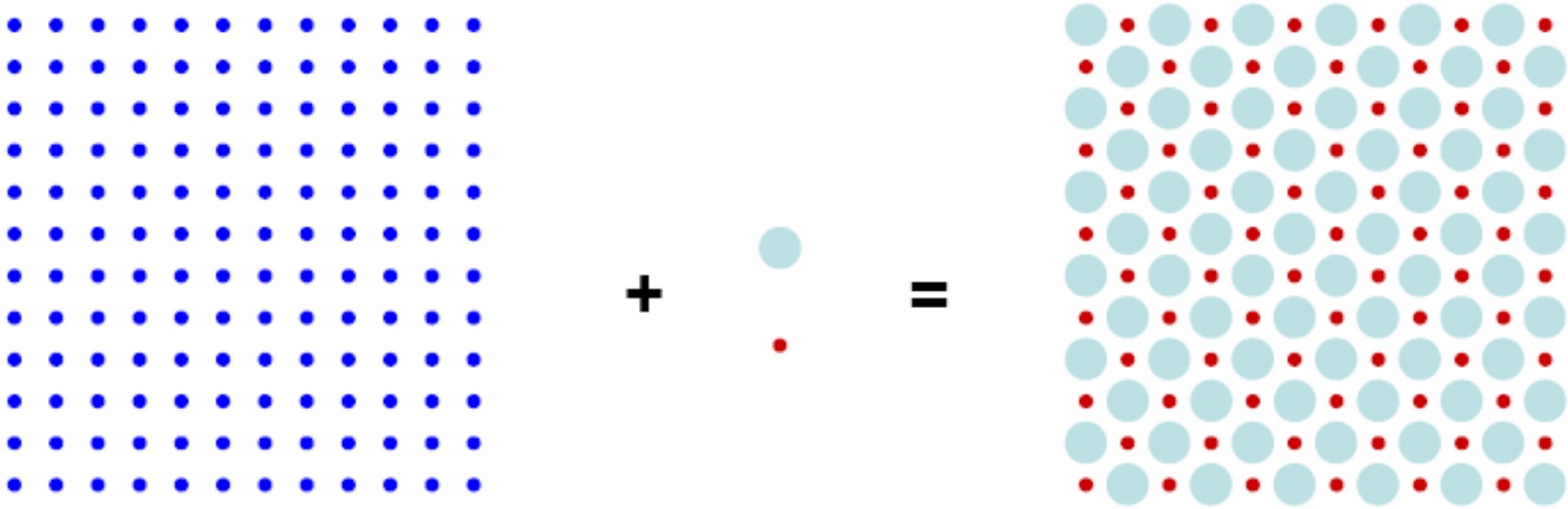
بلورها در همه جا وجود دارند !





کریستال = اتم ها + شبکه

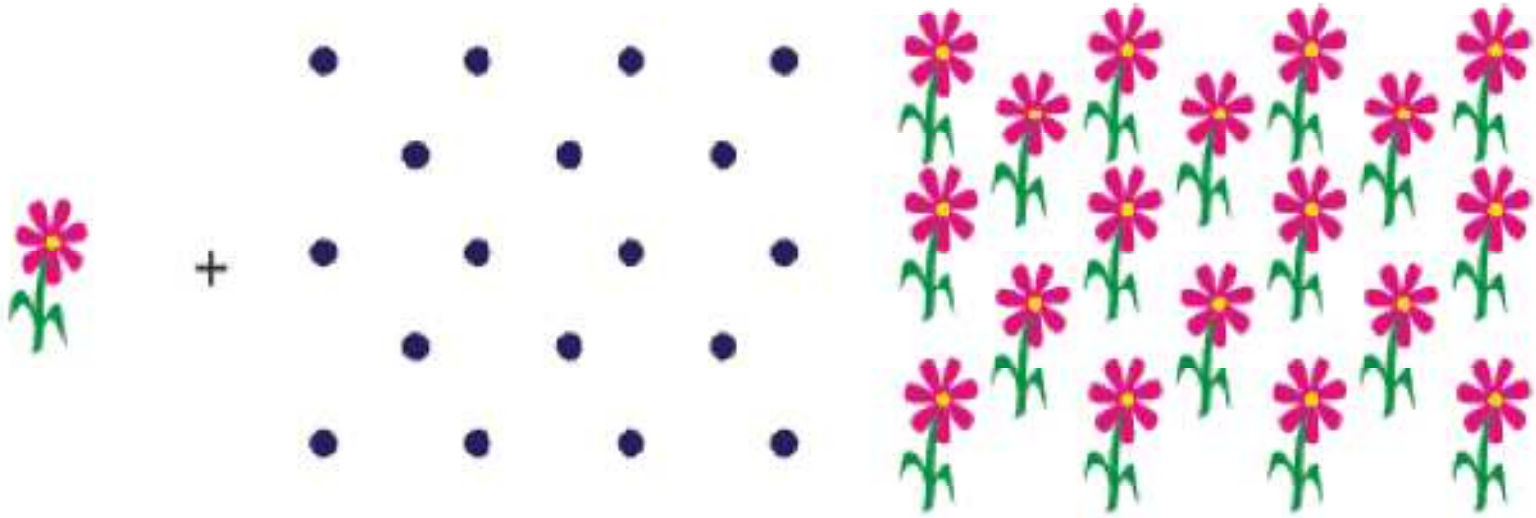
Lattice+ Atoms=Crystal



Crystal Structure

Crystal structures can be obtained by attaching atoms, groups of atoms or molecules which are called basis (motif) to the lattice sides of the lattice point.

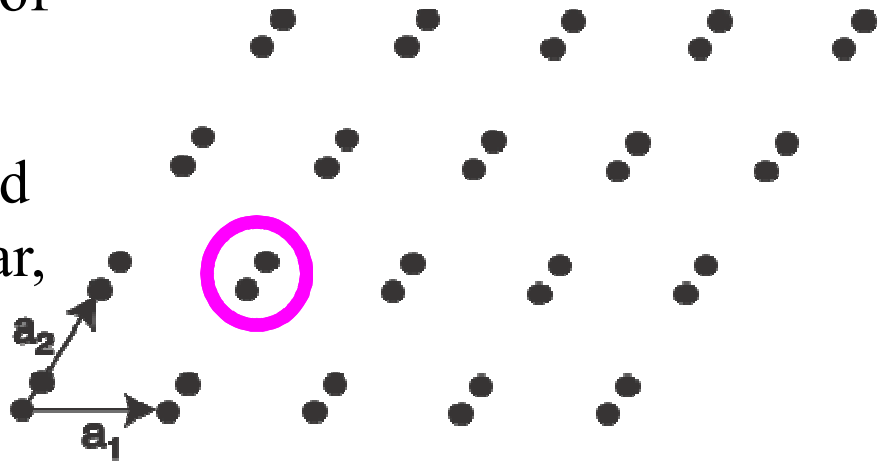
Basis + Crystal Lattice = Crystal Structure



Basis Lattice = Crystal

The crystal lattice: basis

- We could think: all that remains to do is to put atoms on the lattice points of the Bravais lattice.
- But: not all crystals can be described by a Bravais lattice (ionic, molecular, not even some crystals containing only one species of atoms.)
- BUT: all crystals can be described by the combination of a Bravais lattice and a basis. This basis is what one "puts on the lattice points"



شبکه براوه : یک آرایش **منظم** و **دوره ای** از نقاط در فضا است. محیط احاطه شده برای هر نقطه شبکه **یکسان** است

پایه : یک اتم یا گروهی از اتم‌های " متصل " به هر نقطه شبکه برای اینکه ساختار کریستال را ایجاد کنند.

تقارن انتقالی یک شبکه توسط بردارهای پایه یا بردارهای شبکه . معمولا این بردارها طوری انتخاب می‌شوند که :

1 – کوتاه‌ترین بردارهای ممکن باشند یا
2 – منطبق بر سلول واحد با تقارن بالا باشد

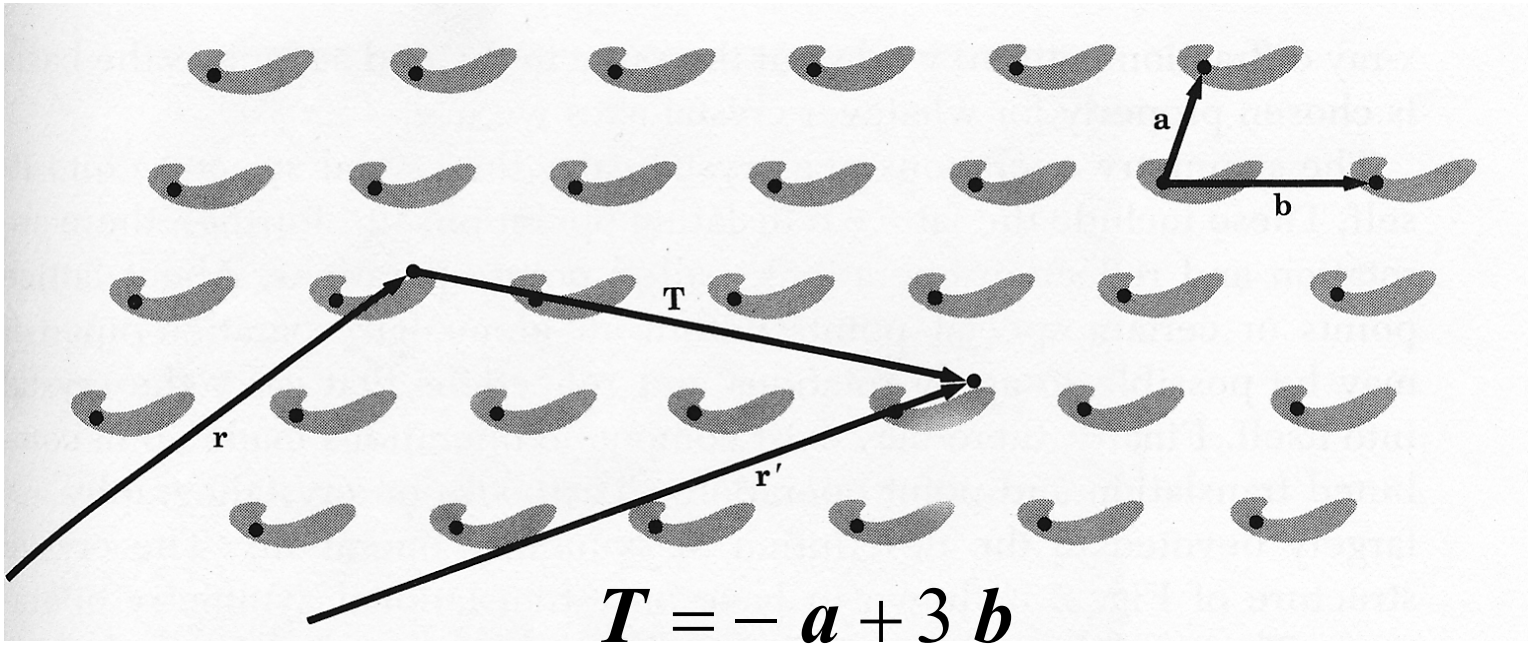
بلور ایده آل از آرایش اتمها بر روی یک شبکه تشکیل می شود .

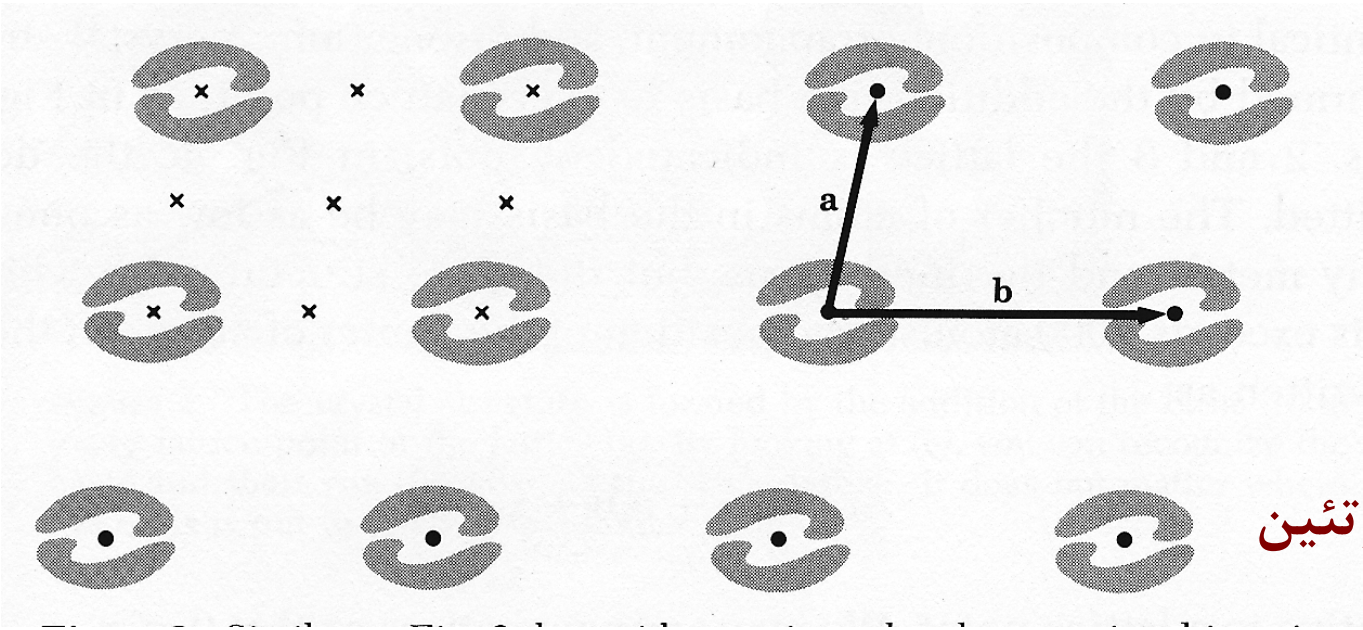
شبکه براوه به وسیله سه بردار اساسی به گونه ای تعریف می شود که آرایش اتمها از دید هر نقطه از هر حیث یکسان به نظر آید

مجموعه نقاط $\mathbb{R}$ که به ازای تمام مقادیر درست n به دست می آینـــد ، **شبکه** را تعریف می کنند.

بردار انتقال

$$\mathrm{R} = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$$



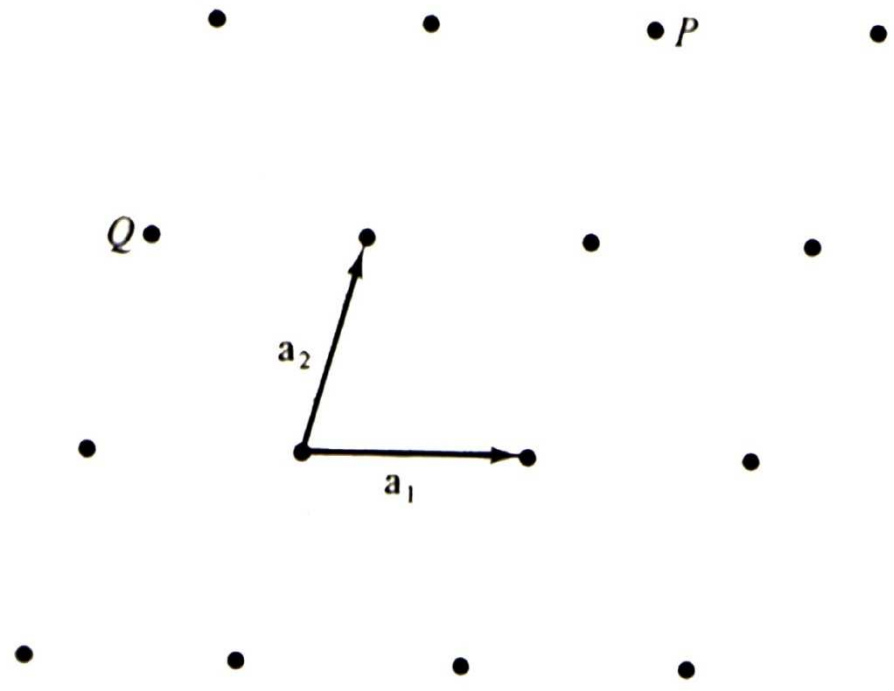


مولکول های پروتئین

Bravais Lattice (2D)

A Bravias lattice is a lattice of points, defined by

$$\mathrm{R} = n_1 a_1 + n_2 a_2$$



The lattice looks exactly the same from every point

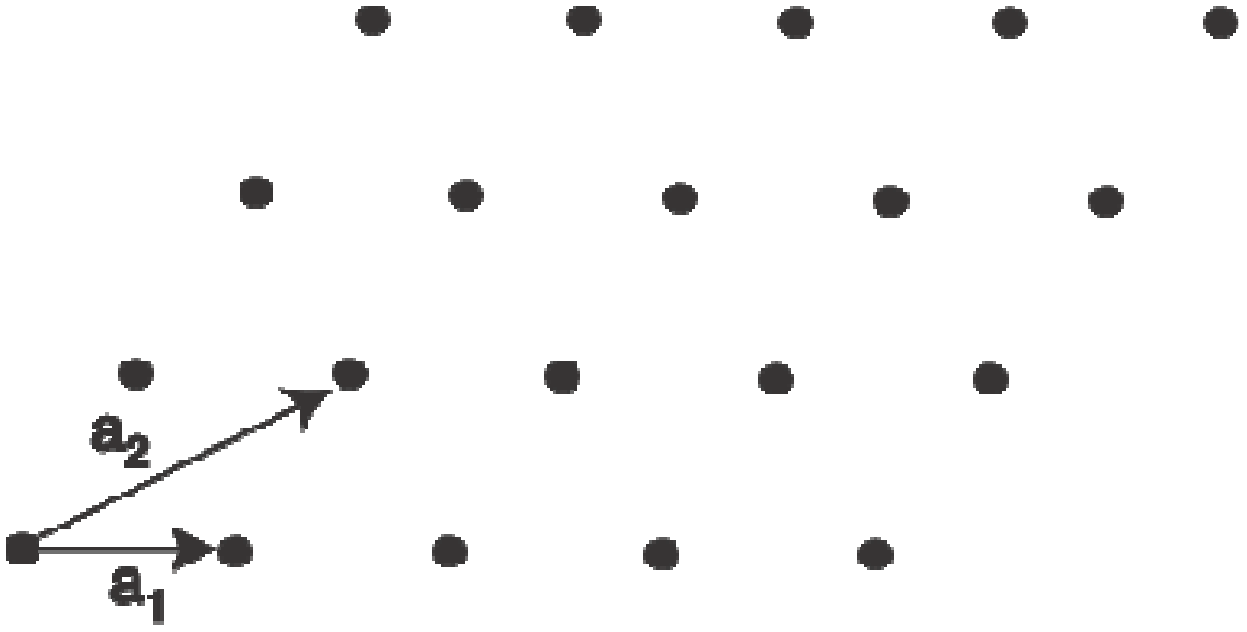
Primitive vectors $\mathbf{a_1}$ and $\mathbf{a_2}$

$\mathrm{P} = \mathbf{a_1} + 2\mathbf{a_2}$,

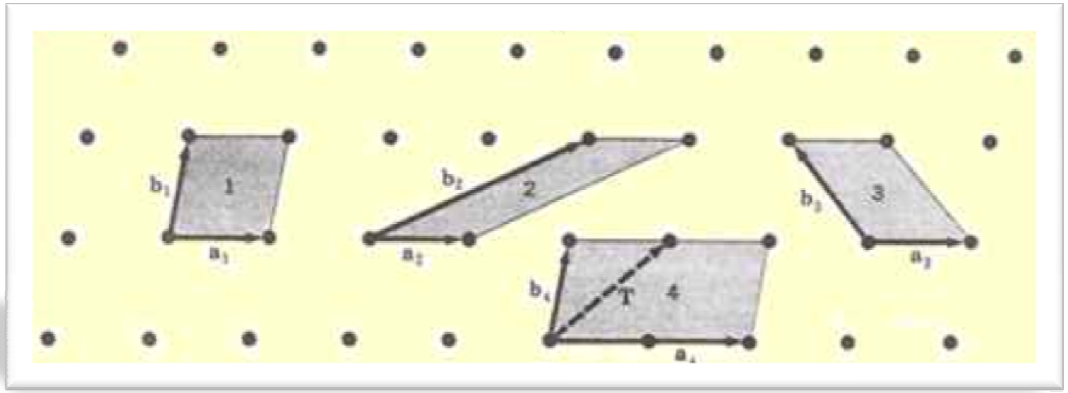
$\mathrm{Q} = -\mathbf{a_1} + \mathbf{a_2}$.

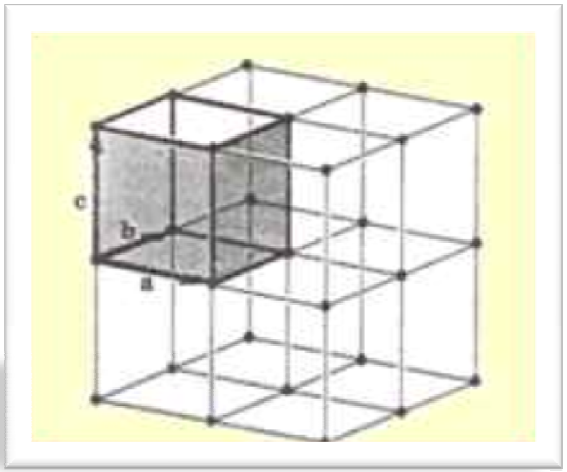
Bravais Lattice (2D)

$$\mathrm{R} = n_1 a_1 + n_2 a_2$$



نقاط شبکه فضایی در دو بعد . تمام زوج بردارهای a،b بردارهای انتقال شبکه اند . ولی a_4b_4،بردارهای انتقال بسیط نیستند ، زیرا نمی توانیم به کمک ترکیبات درست a_4b_4، انتقال شبکه Tرا تشکیل دهیم





یاخته بسیط شبکه فضایی در سه بعد

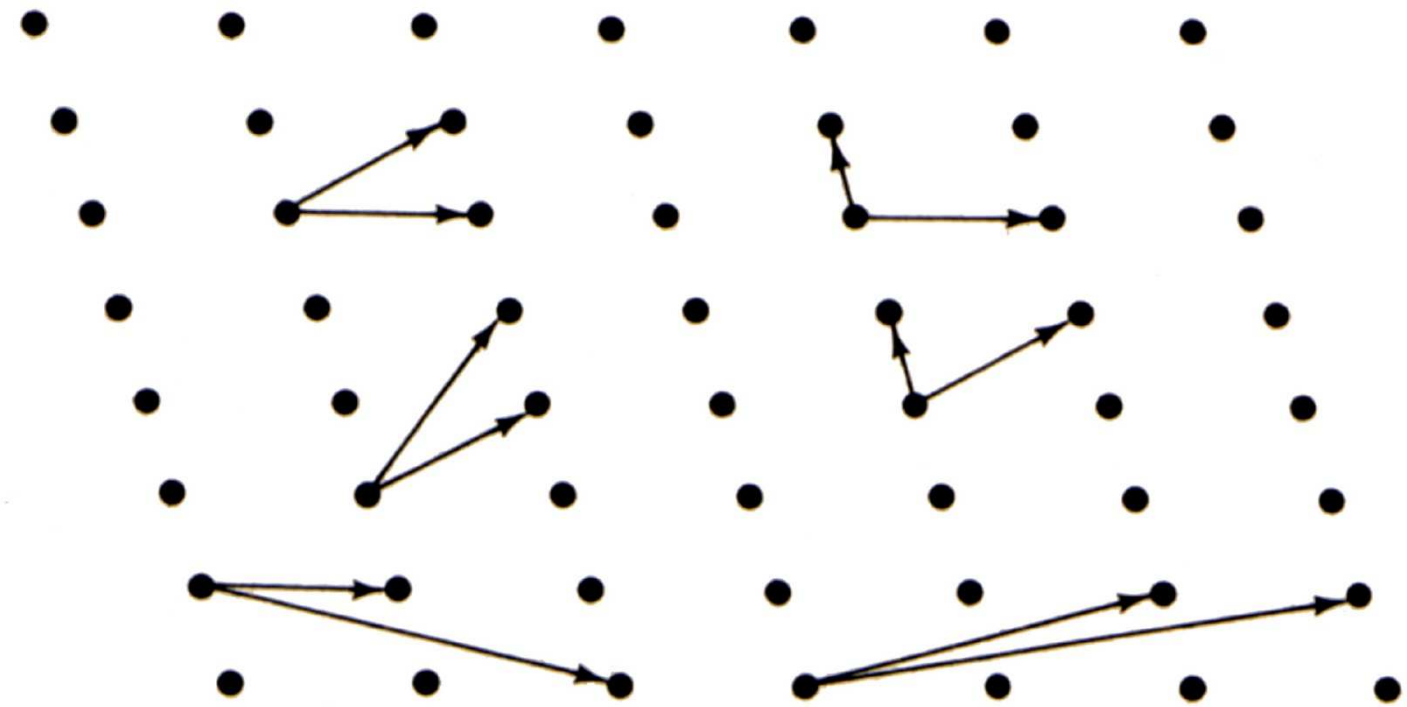


FIGURE Several possible choices of pairs of primitive vectors for a two-dimensional Bravais lattice. They are drawn, for clarity, from different origins. (Ashcroft, Neil W. *Solid state physics*.)

Honeycomb

لانه زنبوری، شش گوشی

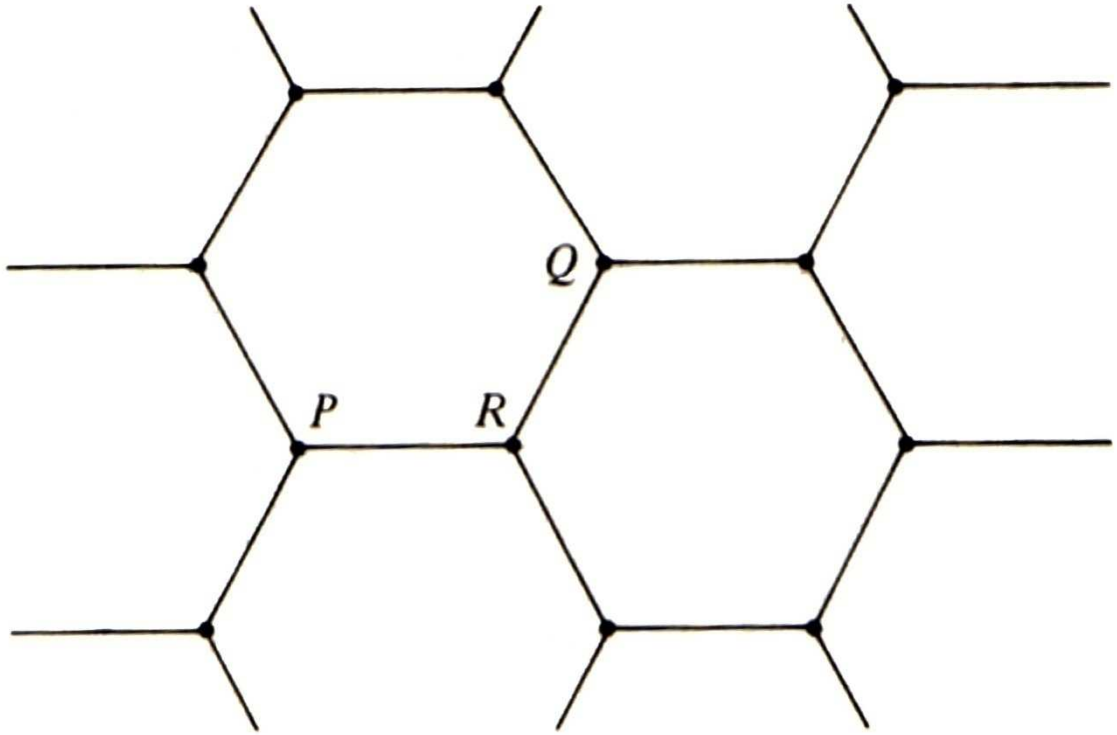
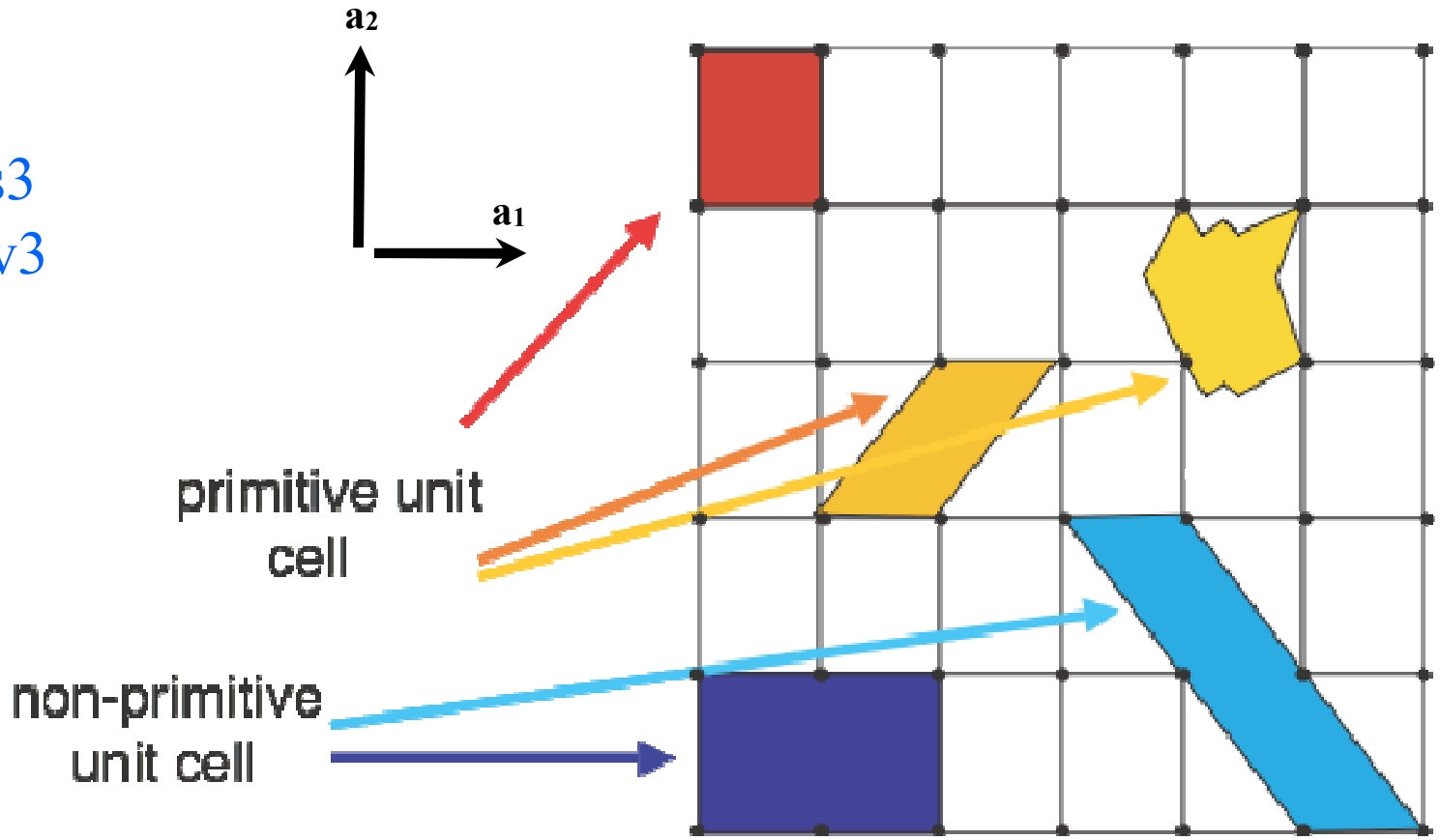


FIGURE The vertices of a two-dimensional honeycomb do not form a Bravais lattice. The array of points has the same appearance whether viewed from point P or point Q. However, the view from point R is rotated through 180^0. (Ashcroft, Neil W. *Solid state physics*.)

primitive unit cell

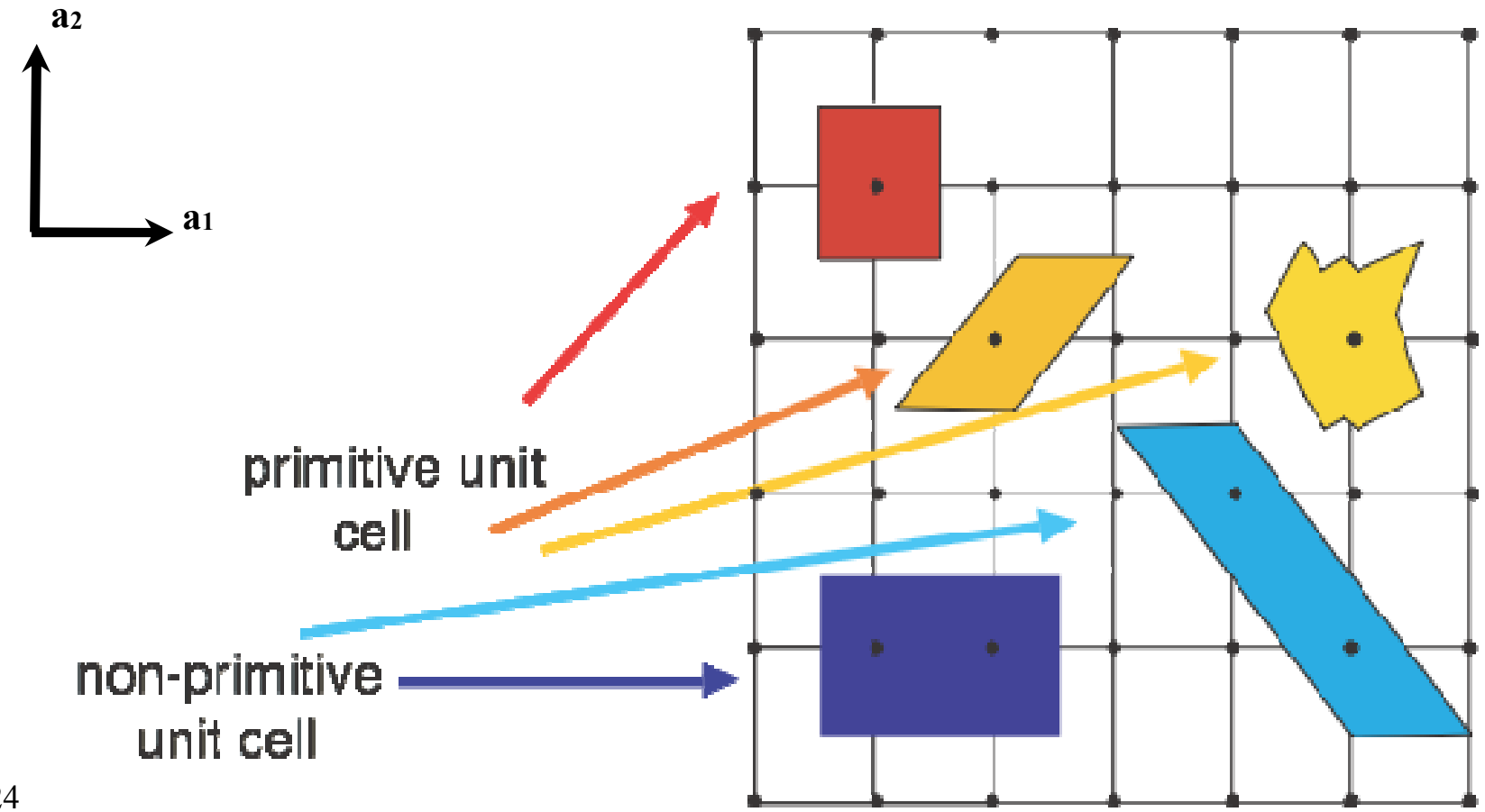
Primitive unit cell: any volume of space which, when translated through all the vectors of the Bravais lattice, fills space without overlap and without leaving voids

S1=s2=s3
V1=v2=v3



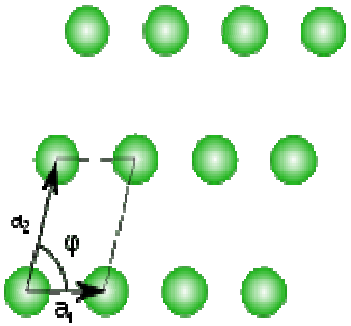
primitive unit cell

Primitive unit cell: any volume of space which, when translated through all the vectors of the Bravais lattice, fills space without overlap and without leaving voids



شبکه های ممکن دو بعدی

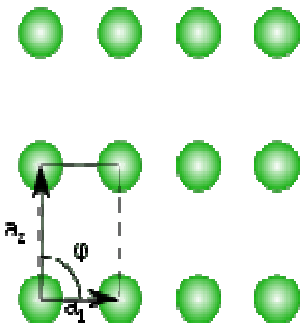
تقارن :
– ۲تایه دورانی
– بازتابی



$|a_1| \neq |a_2|, \varphi \neq 90°$

مورب

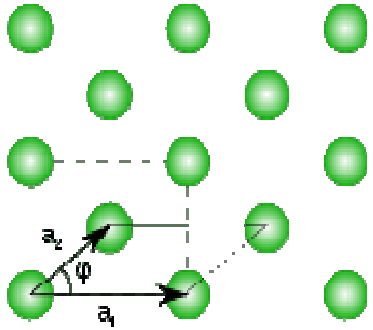
1



$|a_1| \neq |a_2|, \varphi = 90°$

مستطیلی

2

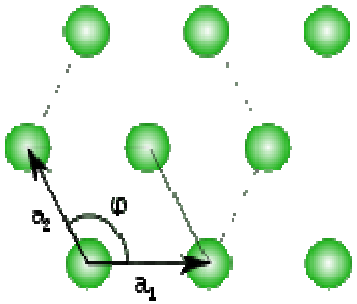


$|a_1| \neq |a_2|, \varphi \neq 90°$

مستطیلی مرکزدار

3

تقارن :
– ۶تایه دورانی
– بازتابی

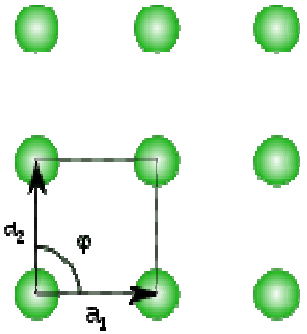


$|a_1| = |a_2|, \varphi = 120°$

ششگوشی

4

تقارن :
– ۴تایه دورانی
– بازتابی

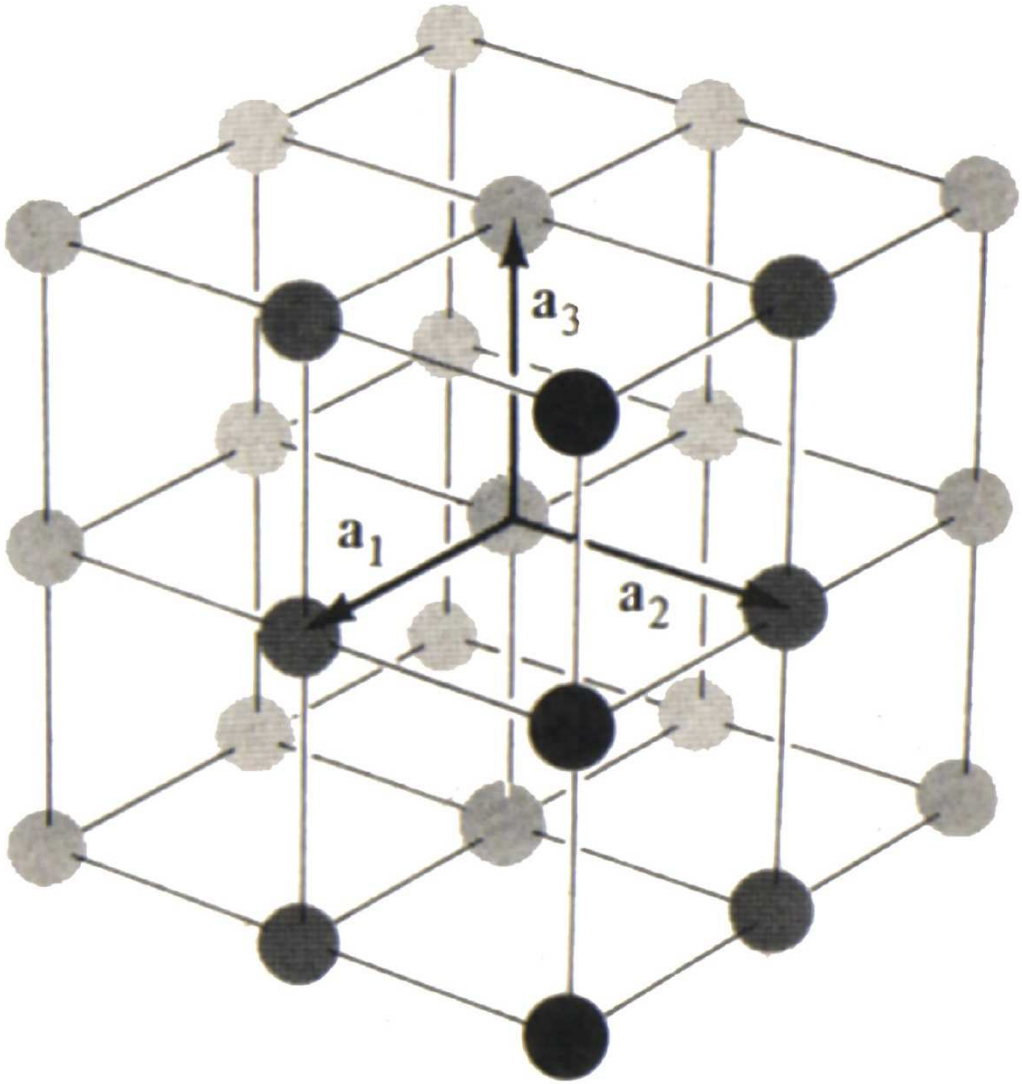


$|a_1| = |a_2|, \varphi = 90°$

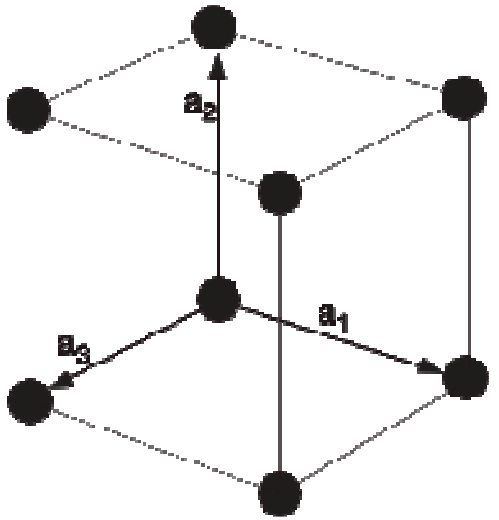
مربعی

5

Bravais lattice (3D)

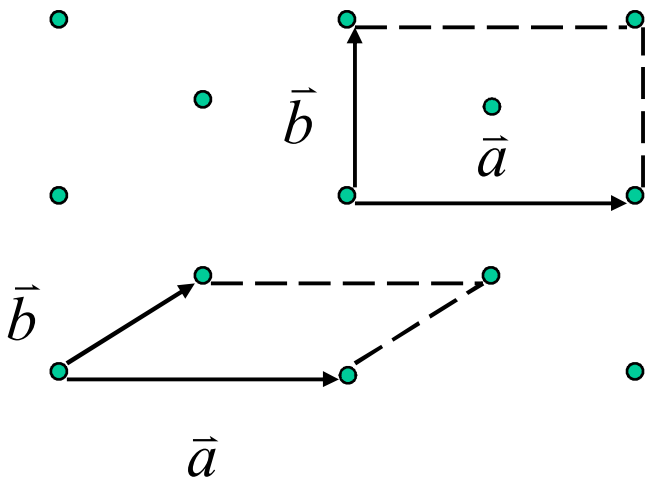


$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$



سلول واحد

انتخاب بردارهای شبکه در شکل زیر دو نوع سلول واحد را نشان می دهد



سلول واحد قراردادی (بلورشناسی) :

Conventional (crystallographic) unit cell

بزرگتر از سلول بسیِط (primitive cell)

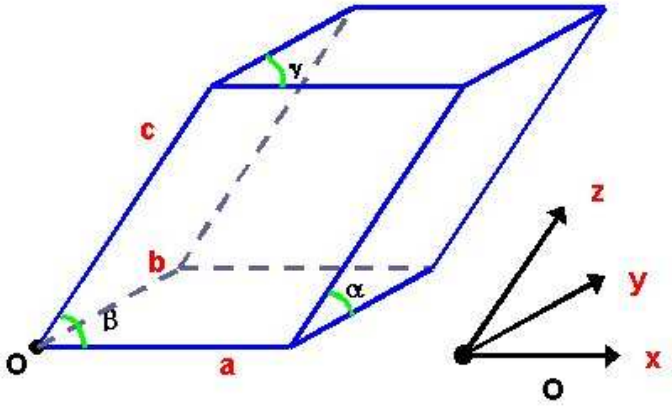
انتخاب به علت نشان دادن بالاترین درجه تقارن

سلول واحد بسیط (primitive unit cell)

دارای حجم مینیمم و فقط دارای یک نقطهٔ شبکه می باشد

یاخته بسیط شبکه

- حجم و سطحی که توسط بردارهای انتقال بسیط در سه یا دو بعد ایجاد میشود یاخته بسیط می نامند.
- هر یاخته بسیط شامل یک اتم است .
- یاخته بسیط دارای شکل اختیاری اما سطح و حجم ثابتی دارد.
- حجم یاخته بسیط برابر است با:
- نقاط شبکه در گوشه های یاخته بسیط قرار می گیرند .



کوچکترین واحد تکراری متعلق به یک ساختار کریستالی در سه بُعد ، که تقارن کامل ساختار را نشان می‌دهد

$$V = \left|\vec{a}.(\vec{b}\times\vec{c})\right|$$

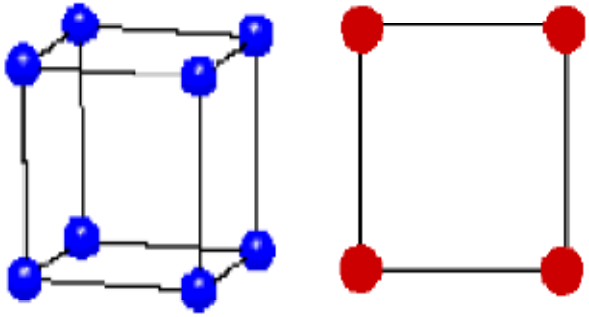
UNIT CELL

Primitive

- Single lattice point per cell
- Smallest area in 2D, or
- Smallest volume in 3D

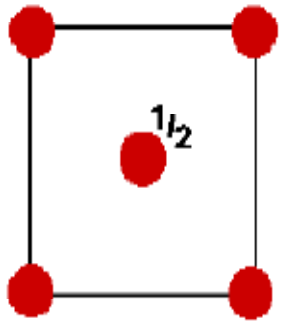
Conventional & Non-primitive

- More than one lattice point per cell
- Integral multibles of the area of primitive cell



Simple cubic(sc)

Conventional = Primitive cell



Body centered cubic(bcc)

Conventional ≠ Primitive cell

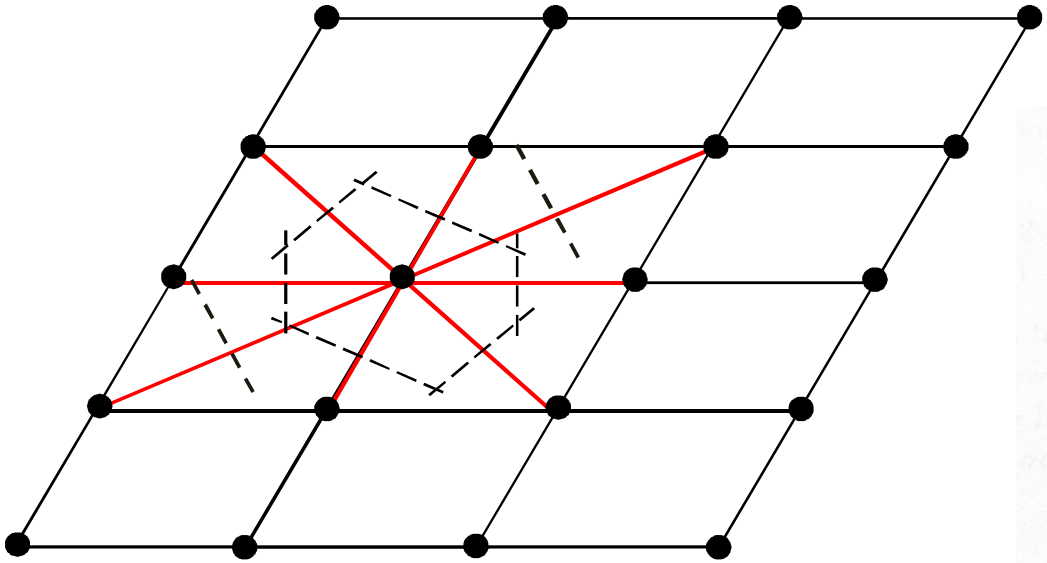
یاخته بسیط ویگنر- سایتز

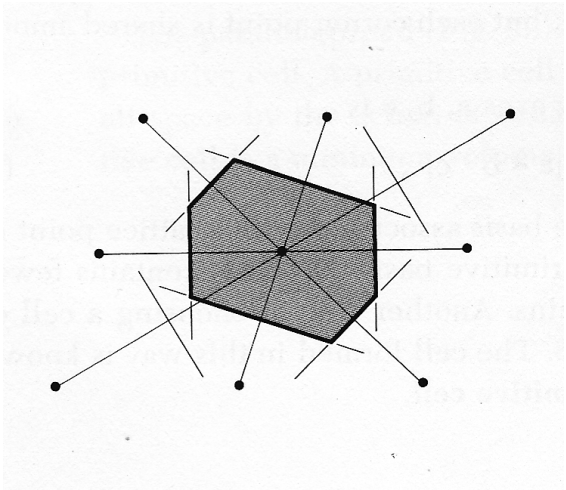
سلول واحد بسیِط را همچنین میتوان به شکل ارائه شده توسط ویگنر – سایتز Wigner – Seitz به دست آورد

خطوطی رسم کنید که یک نقطه مفروض شبکه را به تمام نقاط شبکه نزدیک به آن متصل سازد

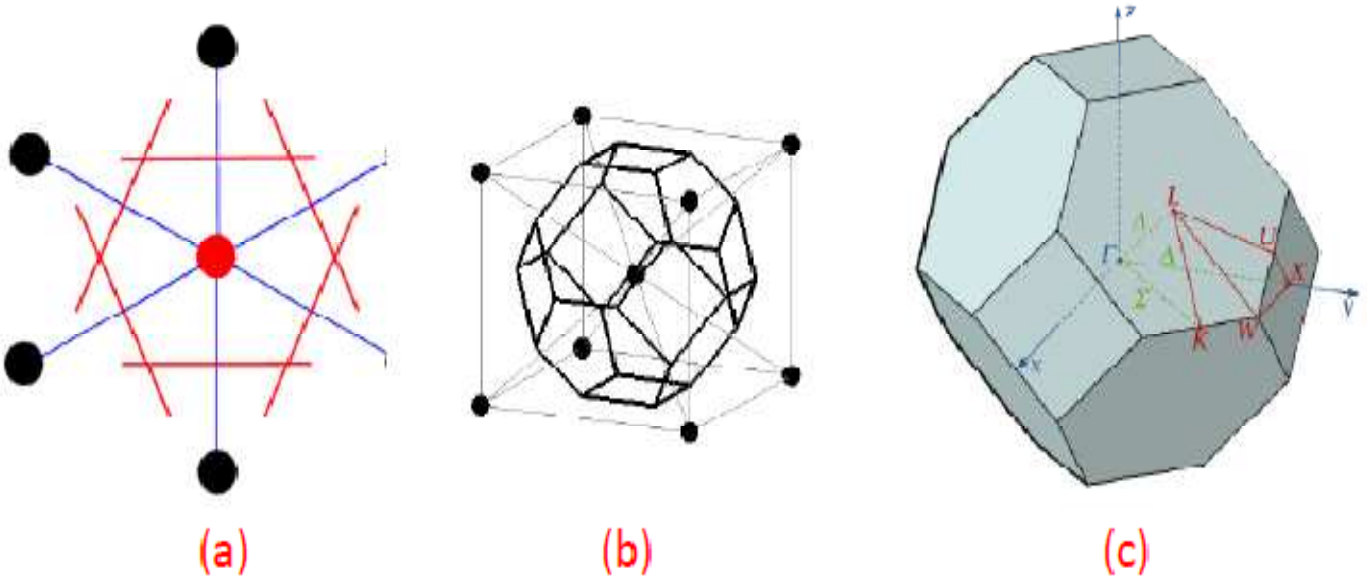
در وسط این خطوط ، و عمود بر آنها ، خطوط یا صفحات جدیدی رسم کنید.

کوچکترین حجمی که بدین ترتیب محاط می شود یاخته بسیط ویگنر- سایتز





WIGNER-SEITZ CELL (PRIMITIVE CELL)



(a) (b) (c)

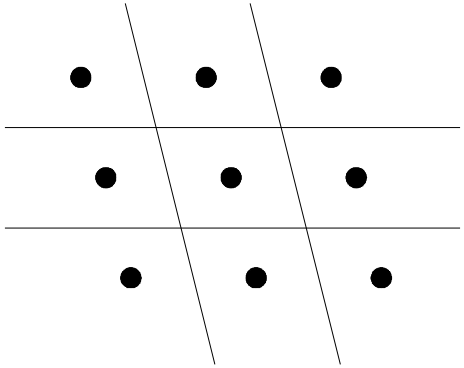
The construction of Wigner-Seitz cell for

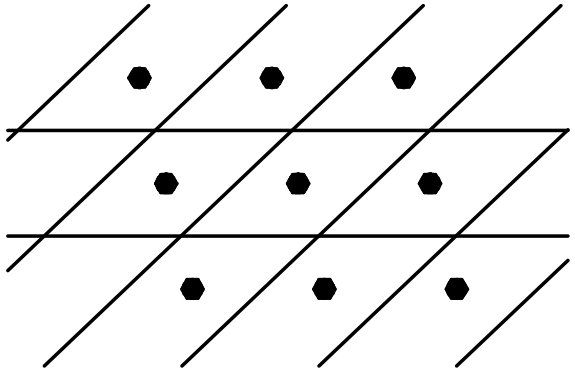
(a) two dimensional space lattice

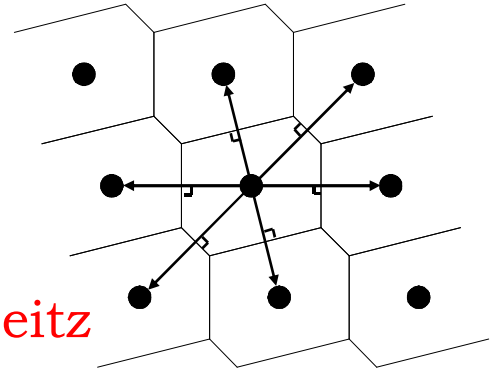
(b) bcc space lattice and

(c) fcc space lattice.

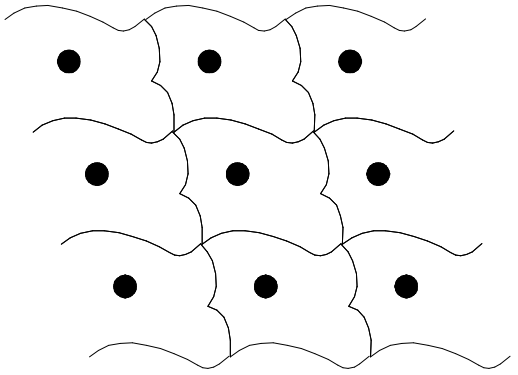
Two Dimensional Lattice







Wigner-Seitz



Possible choices of primitive cell for a single 2D Bravais lattice.

شبکه های براوه Bravais Lattices

- تعداد نامحدودی از شبکه های ممکن را می توان داشت زیرا هیچگونه محدودیتی در انتخاب بردارهای شبکه بسیط وجود ندارد.
- معذالک تعداد خاصی از شبکه ها تحت عملیات گروه نقطه‌ای شبکه (Point Group Operations) ناوردا می باشند.
- این شبکه های خاص شبکه براوه نامیده می شوند
- شبکه های براوه بر اساس تقارنشان دسته بندی می شوند

طبقه بندی شبکه های براوه

گروه های تقارنی یا فضایی شبکه براوه:

مجموعه عمل های صلبی که شبکه براوه را بر روی خودش تصویر میکند.

عمل های صلب (فاصله بین همه نقاط شبکه را حفظ می کند.)

این عملها شامل :انتقال از طریق بردارهای شبکه ، دوران ها ، بازتاب ها و وارونی ها است.

هفت سیستم بلوری

گروه نقطه ای شبکه براوه: وقتی تقارنهای غیر انتقالی را بررسی میکنیمءاغلب کل گروه فضایی یک شبکه براوه را در نظر نمی گیریم بلکه فقط آنهایی را در نظر میگیریم که نقطه خاصی از شبکه را ثابت نگه دارد . این زیر مجموعه از گروه تقارنی شبکه براوه ، گروه نقطه ای شبکه براوه نام دارد

تنها هفت گروه نقطه ای متمایز وجود دارد که یک شبکه براوه میتواند داشته باشد.وهر ساختار بلوری متعلق به یکی از هفت سیستم بلوری است.

چهارده شبکه براوه

اگر محدودیت های عمل های تقارنی را رها کرده و گروه تقارنی کامل شبکه براوه را درنظر بگیریم معلوم می شود که یک شبکه براوه
می تواند چهارده گروه فضایی متمایز داشته باشد.

شکل‌های هفت سلول واحد

• Cubic	P,I,F	a=b=c	$\alpha=\beta=\gamma=90°$	مکعبی
• Tetragonal	P,I	a=b≠c	$\alpha=\beta=\gamma=90°$	مربعی
• Orthorhombic	P,C,I,F	a≠b≠c	$\alpha=\beta=\gamma=90°$	راستگوشه
• Monoclinic	P,C	a≠b≠c	$\alpha=\gamma=90°, \beta \neq 90°$	تک مِیلی
• Triclinic	P	a≠b≠c	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$	سه میلی
• Hexagonal	P	a=b≠c	$\alpha=\beta=90°, \gamma=120°$	ششگوشی
• Rhombohedral (Trigonal)	R	a=b=c	$\alpha=\beta=\gamma\neq90°$	لوزی رخ

The 7 lattice systems	The 14 Bravais lattices			
Triclinic	P			
	$\alpha, \beta, \gamma \neq 90°$			
Monoclinic	P	C		
	$\beta \neq 90°$ $\alpha, \gamma = 90°$	$\beta \neq 90°$ $\alpha, \gamma = 90°$		
Orthorhombic	P	C	I	F
	$a \neq b \neq c$	$a \neq b \neq c$	$a \neq b \neq c$	$a \neq b \neq c$
Tetragonal	P	I		
	$a \neq c$	$a \neq c$		
Rhombohedral	P			
	$\alpha=\beta=\gamma \neq 90°$			
Hexagonal	P			
Cubic	P (pcc)	I (bcc)	F (fcc)	

P بسیط

F کلیه وجوه دارای یک نقطه شبکه در مرکز

I نقطه شبکه در مرکز سلول

C نقطه شبکه در مرکز وجه پایه

درون هر سیستم کریستالی یک تعداد سلول غیر بسیط می تواند وجود داشته باشد :

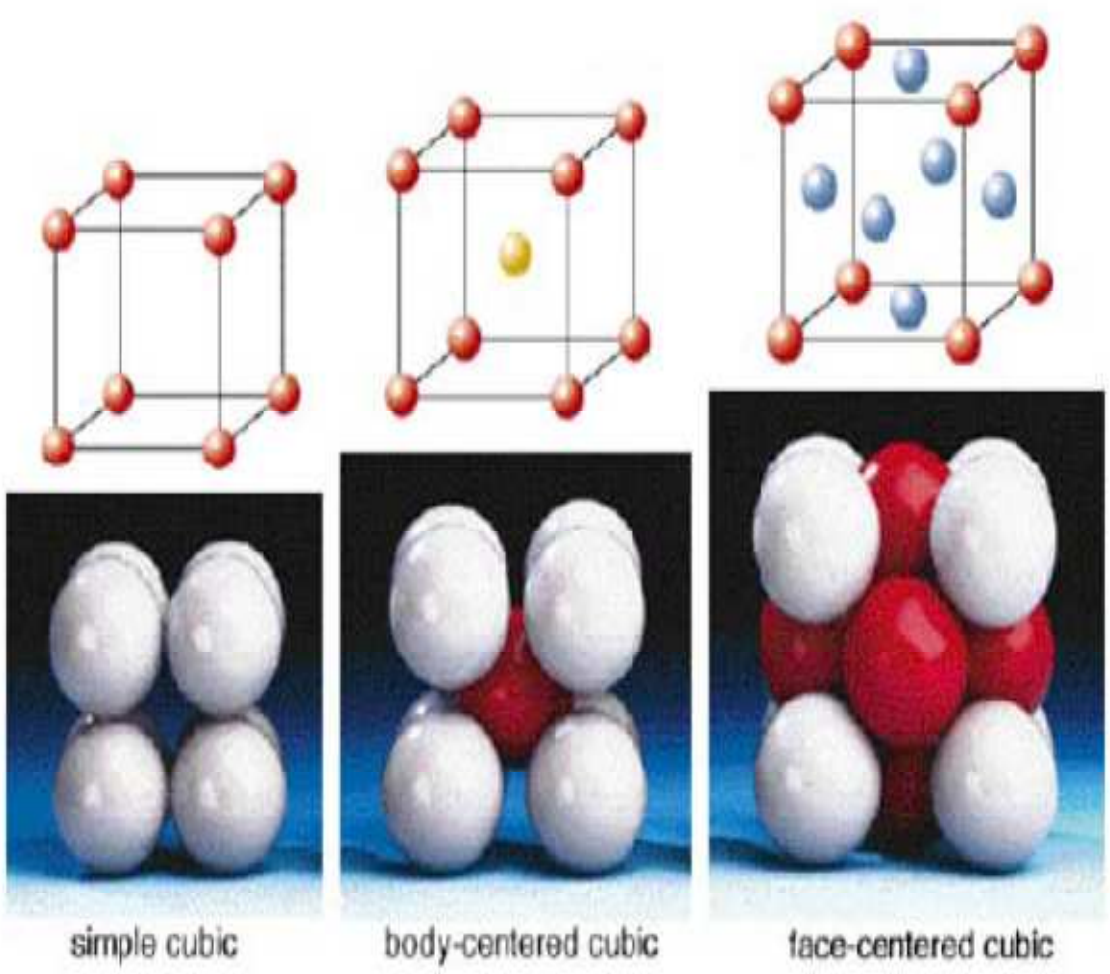
P بسیط
F کلیه وجوه دارای یک نقطه شبکه در مرکز می باشد
I نقطه شبکه در مرکز سلول
C نقطه شبکه در مرکز وجه پایه

Within each crystal system there can be a number of nonprimitive

cells:

P Primitive
F All faces have a lattice point at the centre
I Lattice point in cell centre
C Lattice point in centre of base face

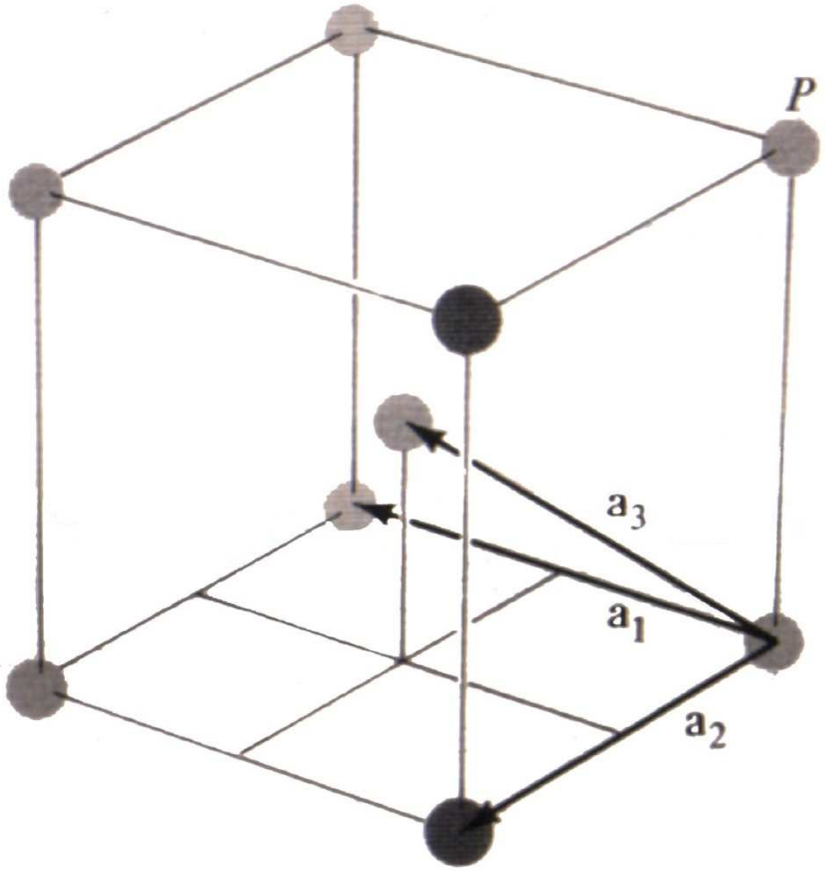
Three Common Unit Cells in 3D

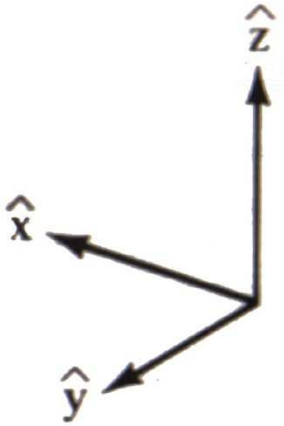


Body-centered cubic Bravais lattice

Primitive vectors

$$\mathbf{a}_1 = a\hat{\mathbf{x}},\quad \mathbf{a}_2 = a\hat{\mathbf{y}},\quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}\left(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}}\right) \qquad (4.3)$$





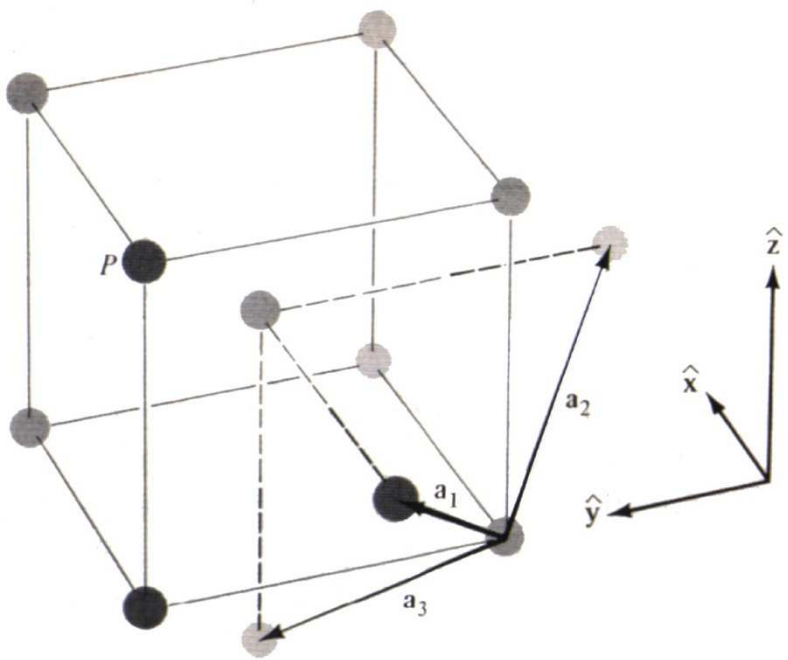
$\mathbf{P} = -\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2 + 2\mathbf{a}_3$

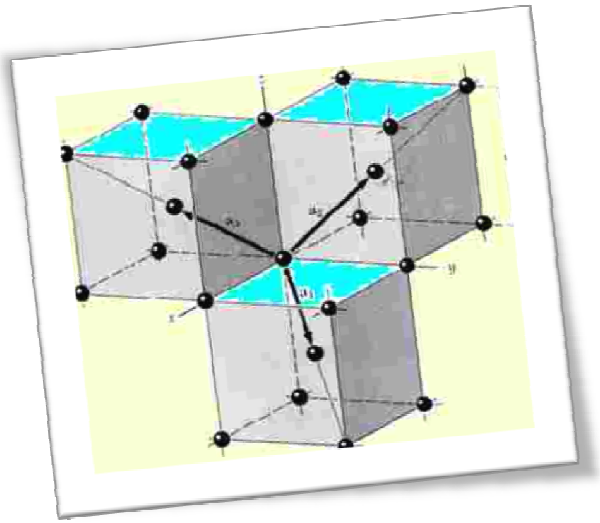
Body-centered cubic Bravais lattice

Primitive vectors

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}\left(-\hat{x}+\hat{y}+\hat{z}\right),\quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}\left(\hat{x}-\hat{y}+\hat{z}\right),\quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}\left(\hat{x}+\hat{y}-\hat{z}\right) \qquad (4.4)$$

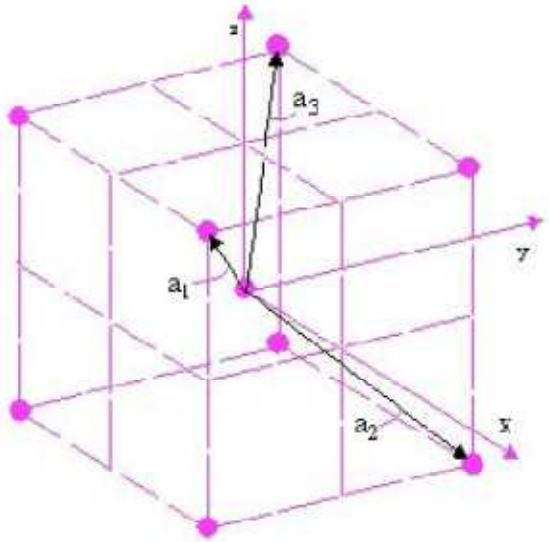
$$\mathrm{P} = 2\,\mathbf{a_1} + \mathbf{a_2} + \mathbf{a_3}$$

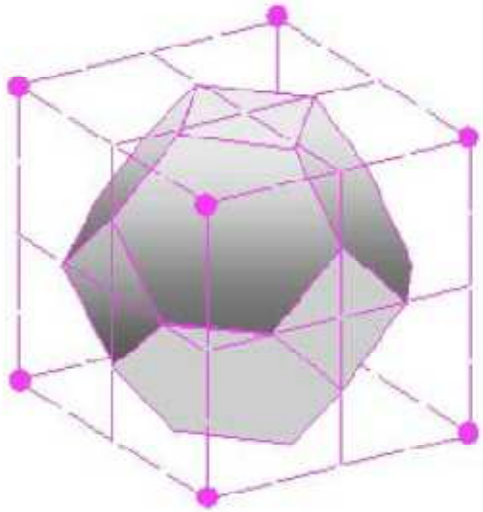




bcc

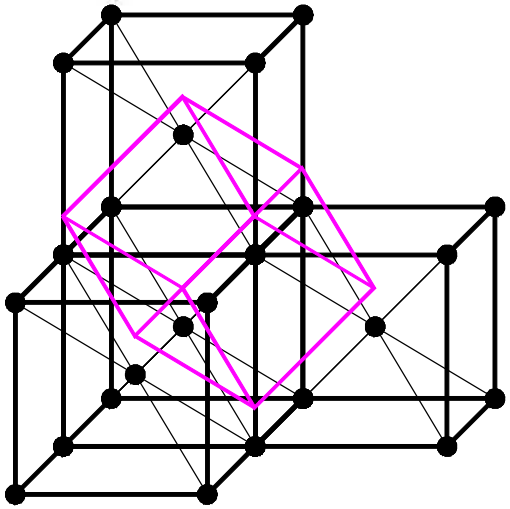
Primitive bcc cell

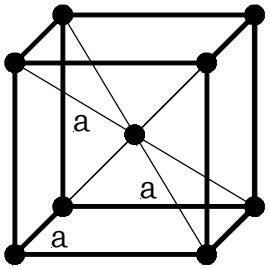




Wigner-Seitz Cell for
Body Centered Cubic Lattice

Body Centered Cubic Lattice



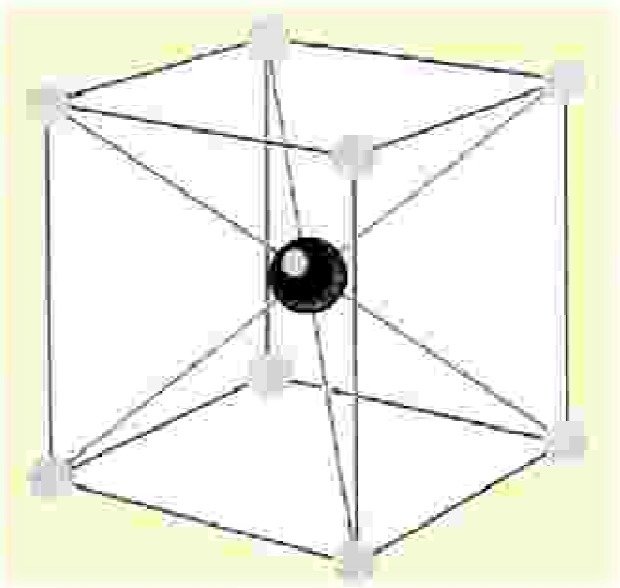


Body-Centered
Cubic (I)

Unit Cell

Primitive Cell

ساختار سزیم کلرید CsCl



★ ساختار بلور سزیم کلرید. شبکه فضایی مکعبی ساده وپایه دارای یک یون Cs^+ در 000 و یک یون Cl^- در 2/1 2/1 2/1 است.

★ تعداد همسایه های اول آن برابر 8 است.

bcc

Face-centered cubic Bravais lattice

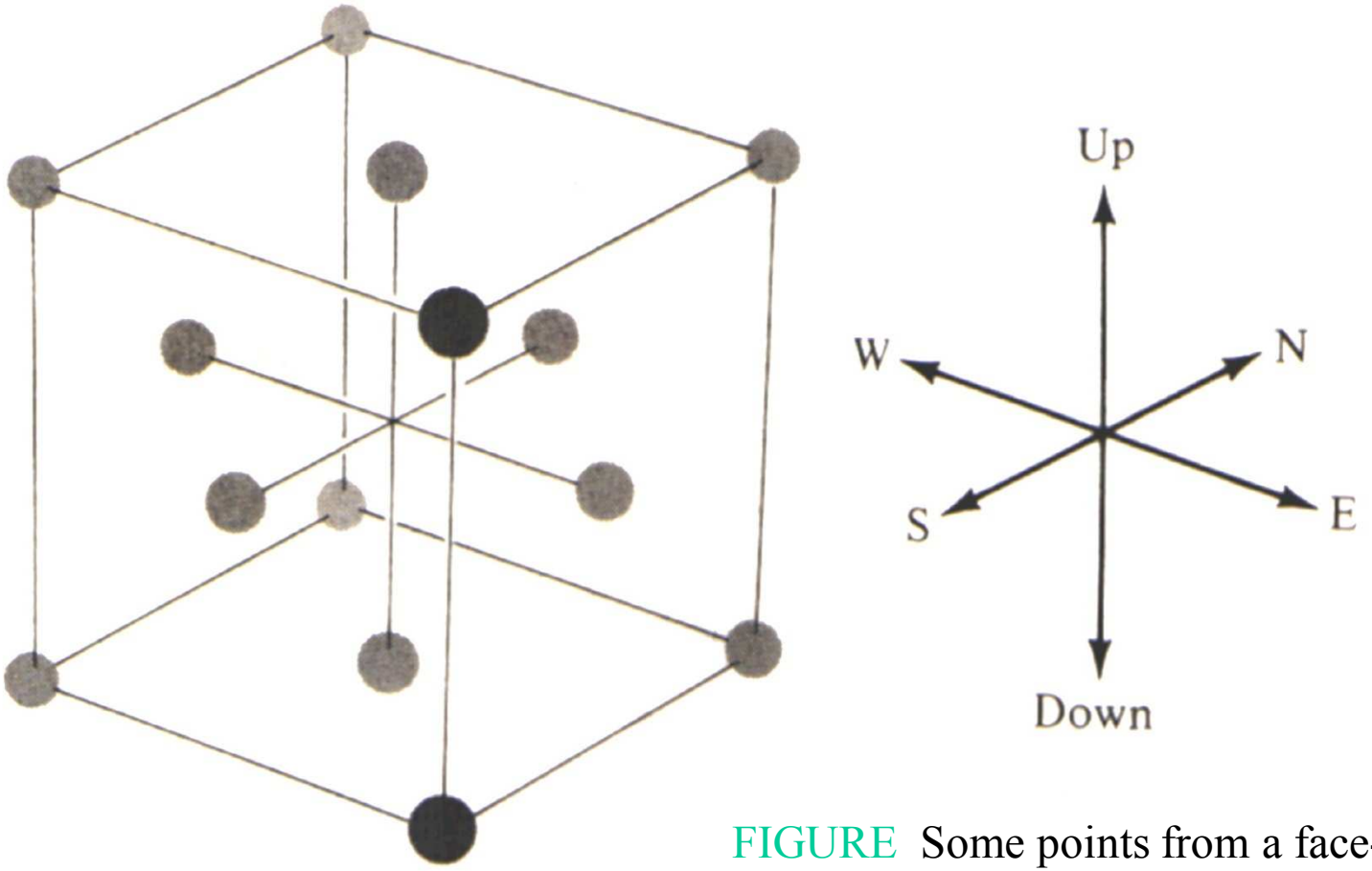
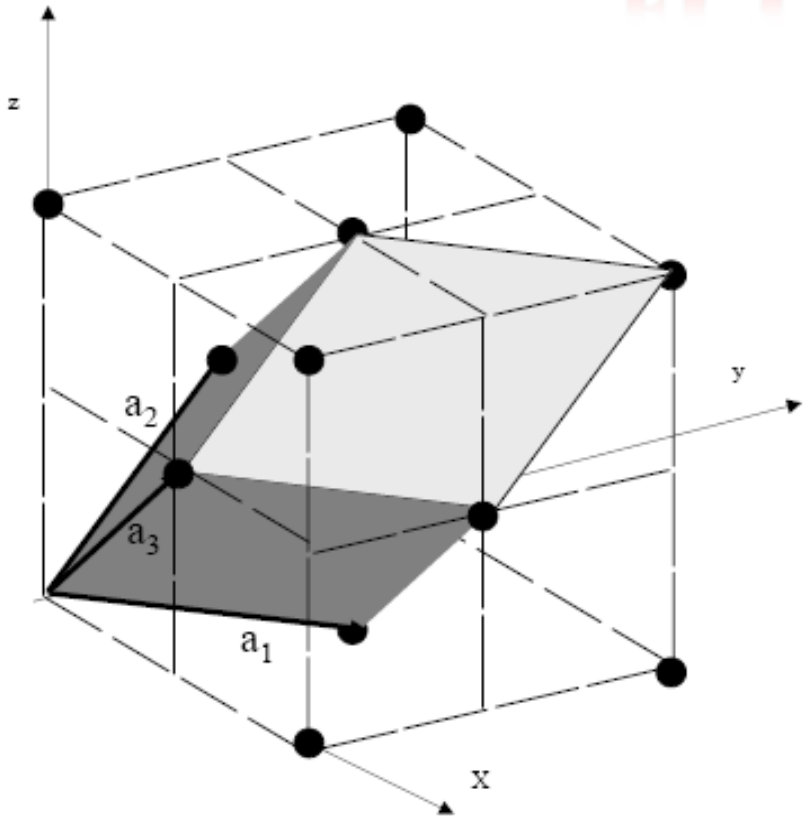
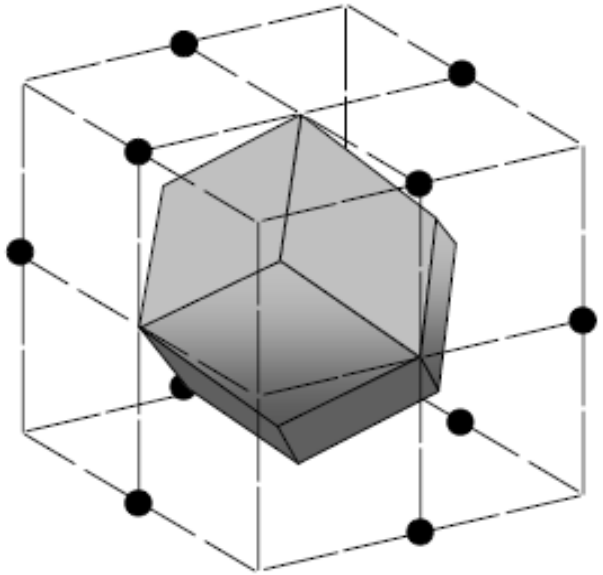


FIGURE Some points from a face-centered cubic Bravais lattice. (Ashcroft, Neil W. *Solid state physics*.)

FCC



One Primitive Cell



Wigner-Seitz Cell

Face Centered Cubic Lattice

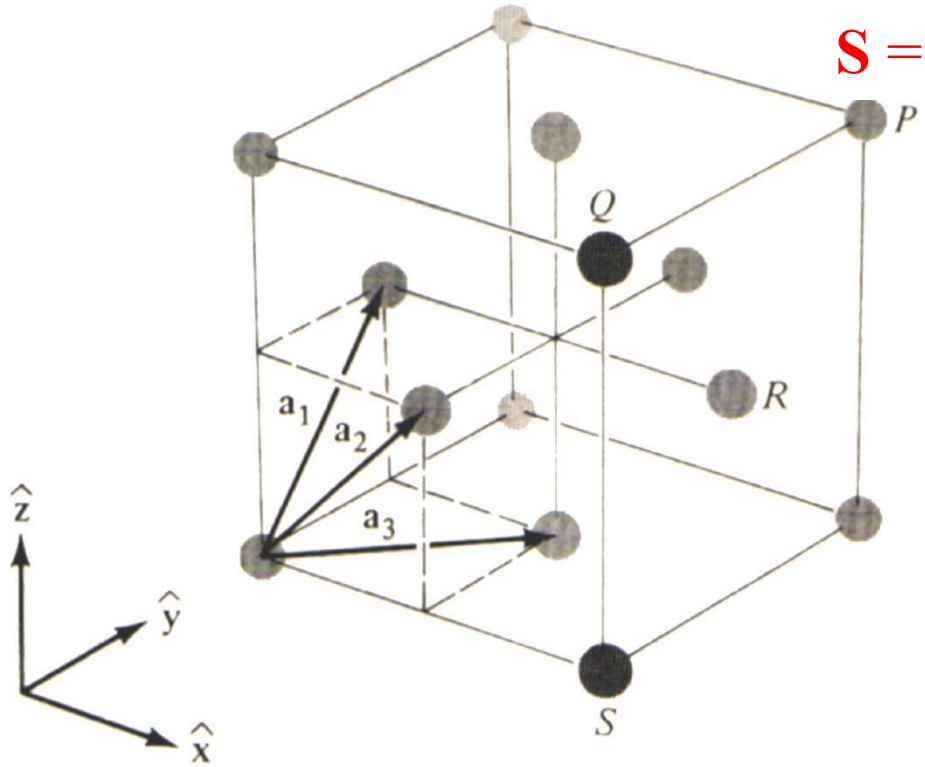
Face-centered cubic Bravais lattice

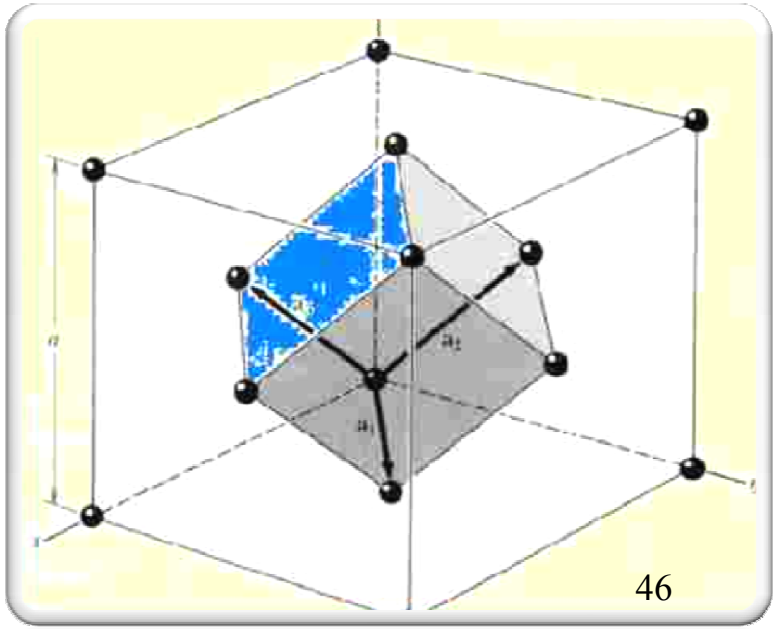
Primitive vectors

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{y}+\hat{z}),\quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{z}),\quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}) \qquad (4.5)$$

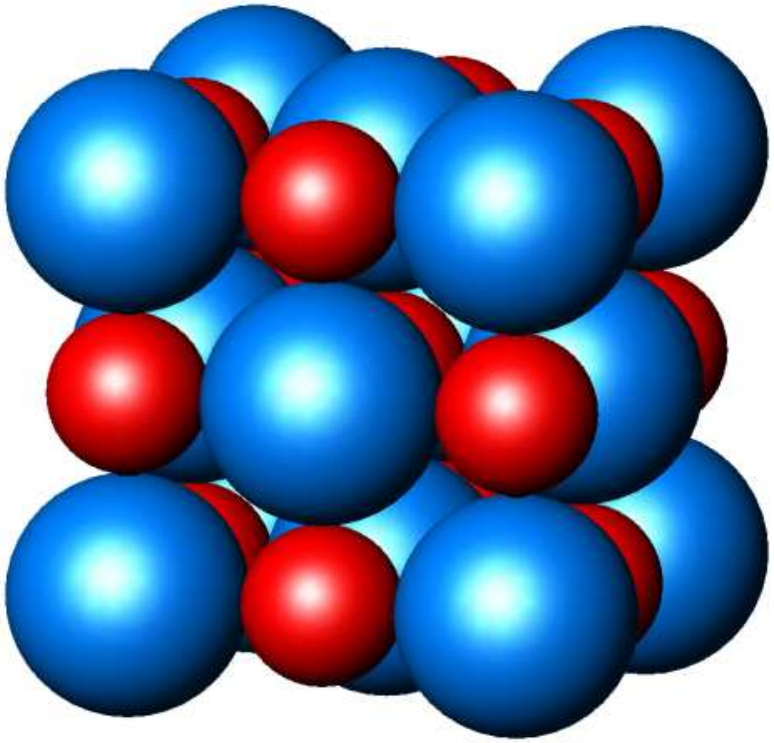
P = a_1 + a_2 + a_3, Q = 2a_2, R = a_2 + a_3,

S = -a_1 + a_2 + a_3.





NaCl کلرید سدیم ، سنگ نمک



- کلرور سدیم

Sodium Chloride (NaCl)

- ساختار کریستالی مکعب مرکز سطحی

Face Centered Cubic

- همچنین

NaF, KBr, MgO, …..

ELEMENTS WITH THE MONATOMIC FACE-CENTERED CUBIC CRYSTAL STRUCTURE

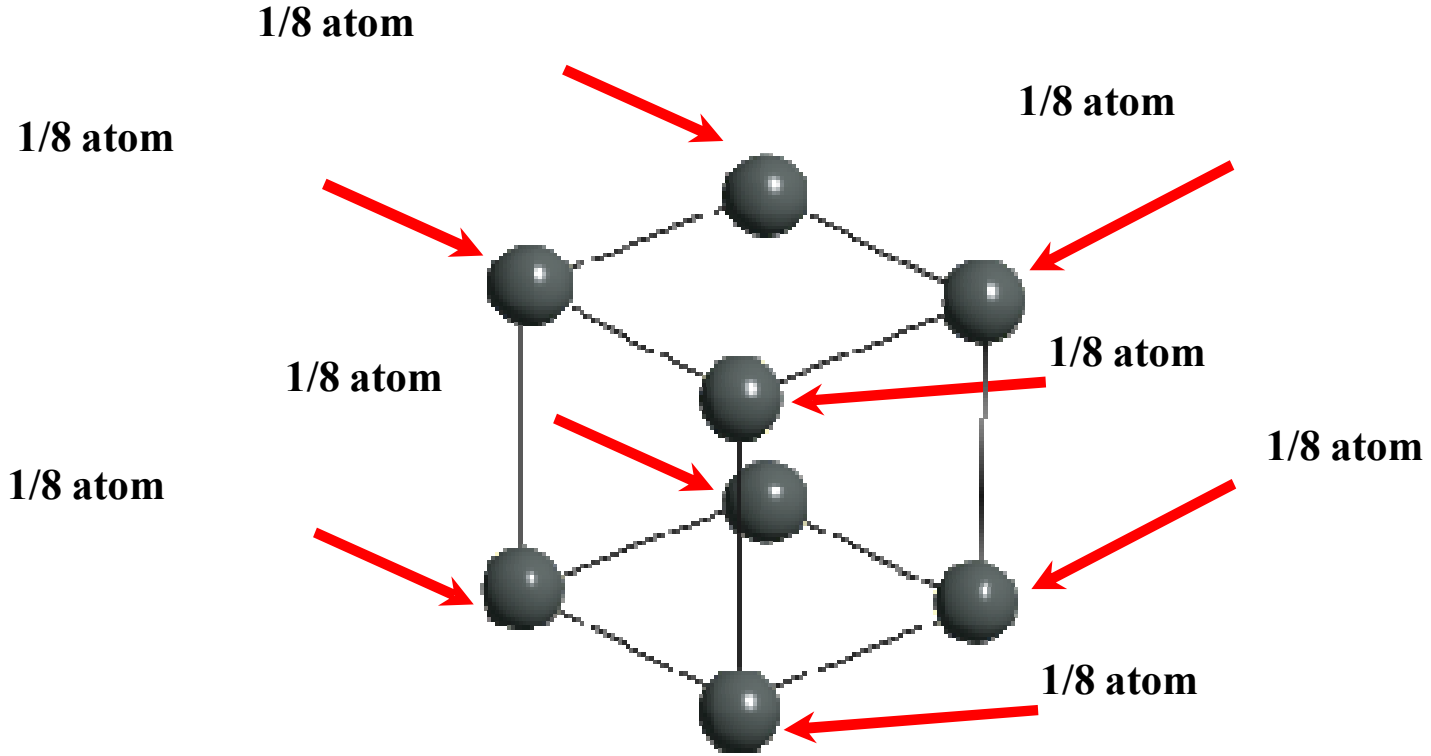
ELEMENT	a (Å)	ELEMENT	a (Å)	ELEMENT	a (Å)
Ar	5.26 (4.2 K)	Ir	3.84	Pt	3.92
Ag	4.09	Kr	5.72 (58 K)	δ-Pu	4.64
Al	4.05	La	5.30	Rh	3.80
Au	4.08	Ne	4.43 (4.2 K)	Sc	4.54
Ca	5.58	Ni	3.52	Sr	6.08
Ce	5.16	Pb	4.95	Th	5.08
β-Co	3.55	Pd	3.89	Xe (58 K)	6.20
Cu	3.61	Pr	5.16	Yb	5.49

ELEMENTS WITH THE MONATOMIC BODY-CENTERED CUBIC CRYSTAL STRUCTURE

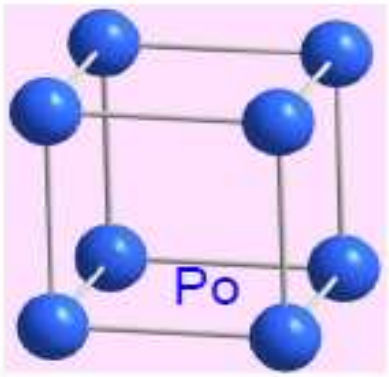
ELEMENT	a (Å)	ELEMENT	a (Å)	ELEMENT	a (Å)
Ba	5.02	Li	3.49 (78 K)	Ta	3.31
Cr	2.88	Mo	3.15	Tl	3.88
Cs	6.05 (78 K)	Na	4.23 (5 K)	V	3.02
Fe	2.87	Nb	3.30	W	3.16
K	5.23 (5 K)	Rb	5.59 (5 K)		

Simple cubic

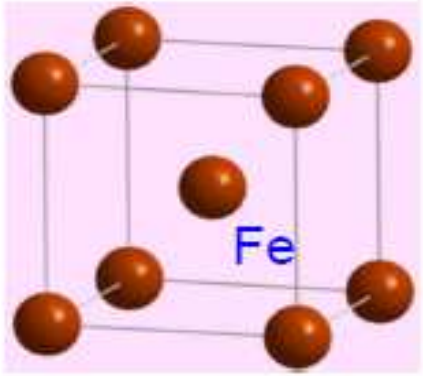
- We can also simply count the atoms we see in one unit cell.
- But we have to keep track of how many unit cells share these atoms.



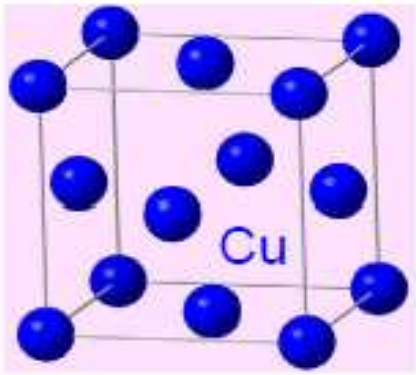
Examples of simple cubic crystal structures with different number of basis



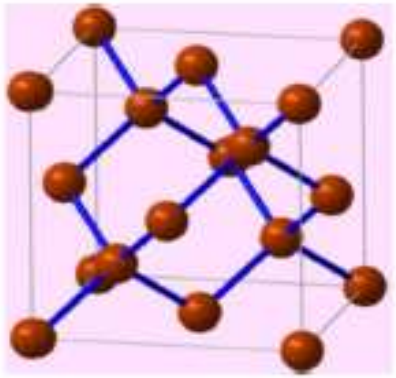
n = 1 SC



n = 2 BCC



n = 4 FCC/CCP



n = 8 DC

C (diamond)

Unit cell contents

Atoms	Shared Between:	Each atom counts:
corner	8 cells	1/8
face centre	2 cells	1/2
body centre	1 cell	1
edge centre	4 cells	1/4

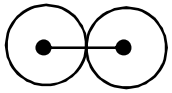
- Number of atoms per unit cell
  - scc: 1 atom
  - bcc: 2 atoms
  - fcc: 4 atoms

یک بلور فلزی را می‌توان به صورت ساختار حاصل از چیدن کره‌هایی سخت در کنار هم در نظر گرفت که آن را **مدل کرات سخت (Hard-Ball Model)** می‌نامند. شعاع کره‌ها در این مدل نصف فاصله مراکز دو اتم به هم چسبیده است.

با توجه به مدل کرات سخت، شعاع اتمی (کره‌ها) با توجه به اندازه یال مکعب که **پارامتر شبکه (Lattice Parameter)** نامیده می شود قابل محاسبه است.

در ساختار مکعبی ساده اگر اندازه یال شبکه **a** باشد در این صورت رابطه آن با شعاع اتمی به صورت زیر است:

$$a = 2R$$

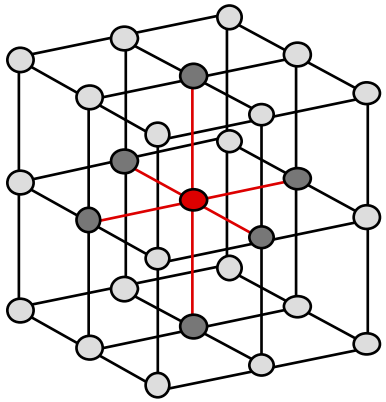


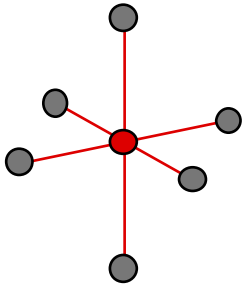
بدیهی است حجم شبکه a^3 و $\frac{4}{3}\pi R^3$ حجم یک اتم خواهد بود.

عدد همسایگی (Coordintion Number)

عدد هم آرایی یک شبکه بلوری برابر با تعداد نزدیک‌ترین اتم‌های همسایگی یک اتم در شبکه است.

در شبکه مکعبی ساده هر اتم، شش اتم را در همسایگی چسبیده به خود دارد و لذا عدد همسایگی این شبکه بلوری برابر ۶ است.





CN (Coordination No) = 6

Metallic Crystal Structures

Some important crystal structure terms are defined below

- **Atomic packing factor:** The fraction of the space occupied by atoms in a unit cell is known as **atomic packing factor (APF)**; or simply packing factor; i.e., it is the ratio of the volume of the atoms occupying the unit cell to the volume of the unit cell relating to that structure.

$$APF = PF = \frac{v}{V} = \frac{Volume\ of\ atoms\ in\ a\ unit\ cell}{Volume\ of\ primitive\ cell}$$

Packing fraction

Packing fraction:

We try to pack N spheres (hard, cannot deform).

The total volume of the spheres is $N4\,\pi\frac{R^3}{3}$

The volume these spheres occupy $V > N4\,\pi\frac{R^3}{3}$ (there are spacing)

Packing fraction=total volume of the spheres/total volume these spheres occupy

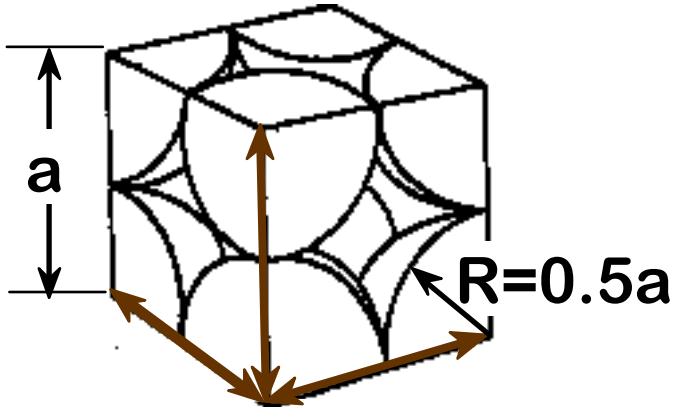
$$Packing\ fraction = \frac{N4\,\pi\frac{R^3}{3}}{V} = \frac{4\,\pi\frac{R^3}{3}}{V/N} = \frac{4\,\pi\frac{R^3}{3}}{Volume\ per\ site}$$

$$= \frac{4\,\pi\frac{R^3}{3}}{Volume\ of\ a\ primitive\ cell}$$

High packing fraction means the space is used more efficiently

ضریب تراکم اتمی (Atomic Packing Factor)

نسبت حجم اتم ها در یک سلول واحد به حجم سلول واحد ضریب تراکم اتمی APF نامیده می شود.



close-packed directions

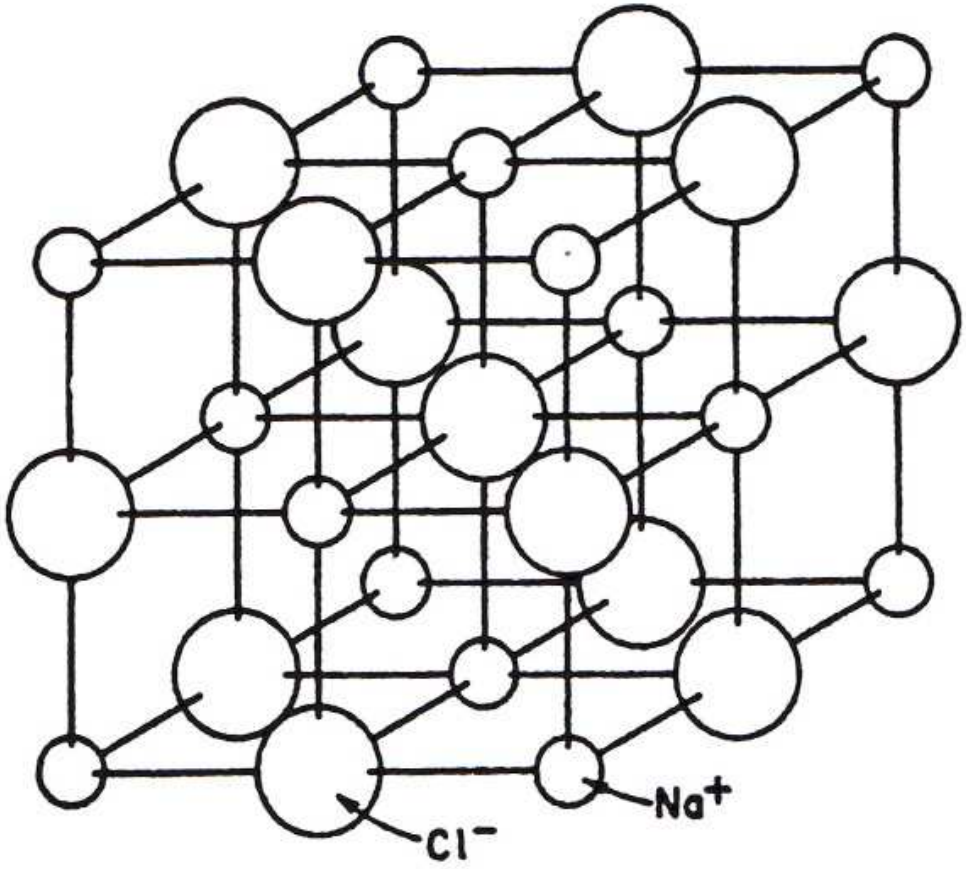
contains 8 x 1/8 =

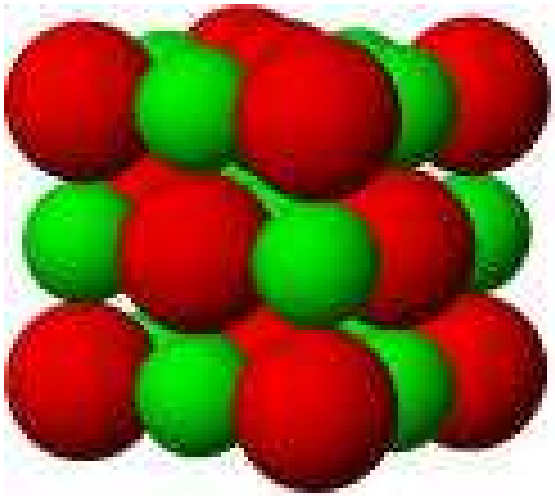
1 atom/unit cell

$$APF = \frac{\text{atoms}}{\text{unit cell}} \cdot \frac{\text{volume}}{\text{atom}} \Big/ \frac{\text{volume}}{\text{unit cell}}$$

$$APF = \frac{1 \cdot \frac{4}{3}\pi (0.5a)^3}{a^3}$$

$$APF = 0.524$$

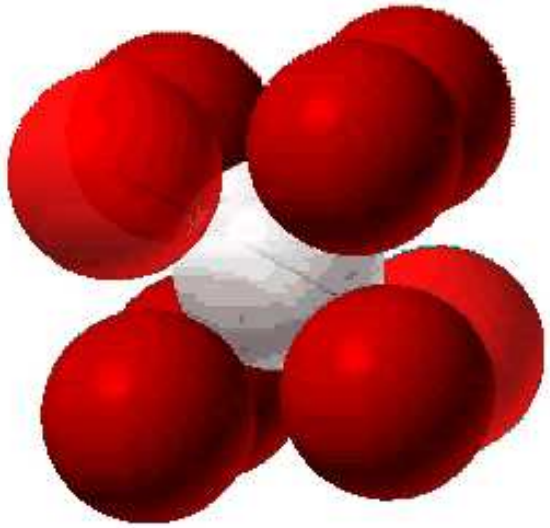


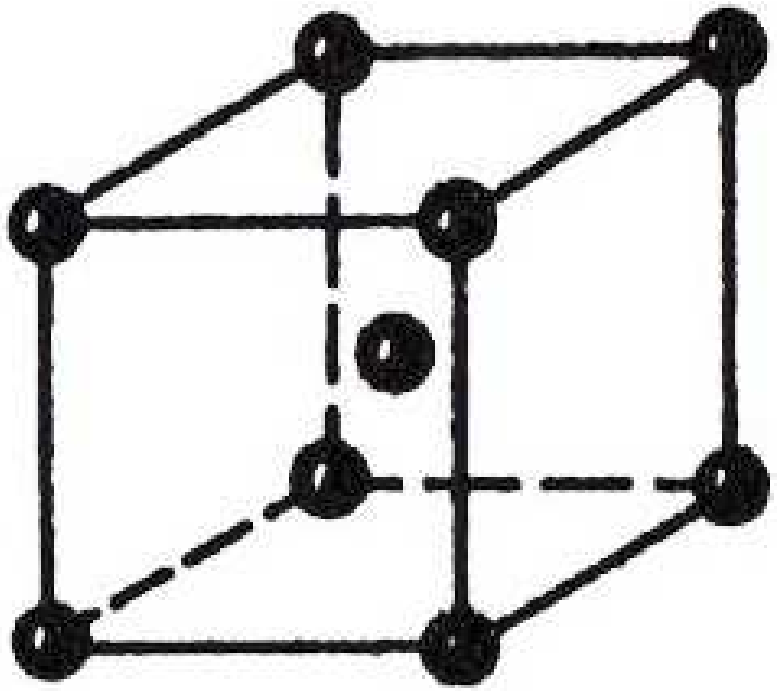


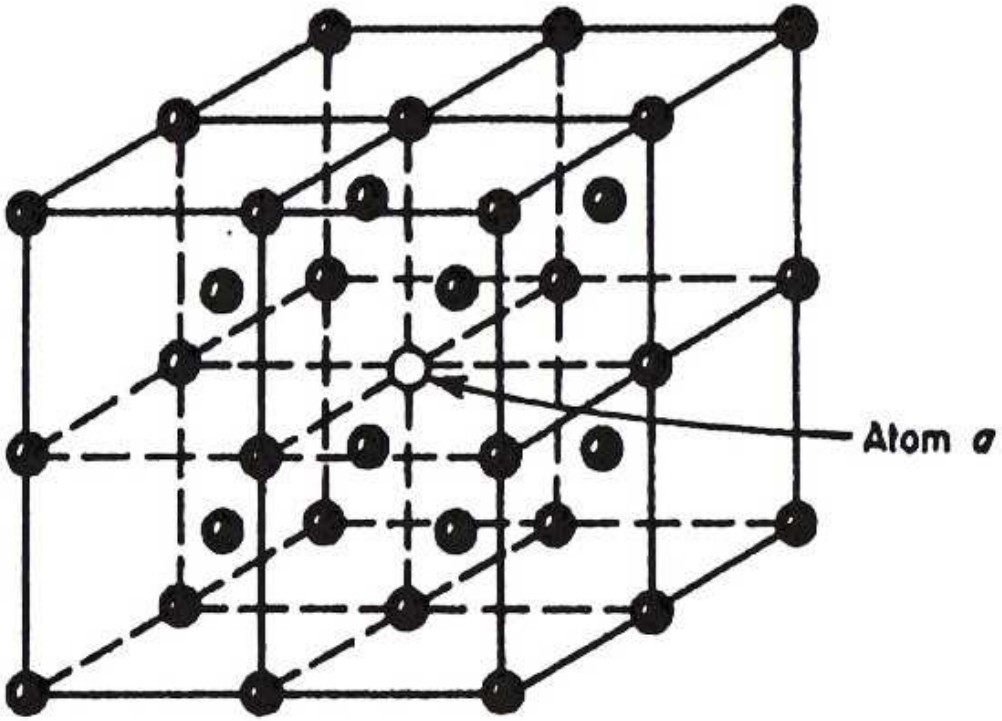
شبکه بلوری سدیم کلرید

شبکه بلوری سدیم کلرید یک جامد یونی است که آن مکعبی ساده است. هر یون توسط ۶ یون غیرهم‌نام احاطه شده است.

ساختار مکعبی مرکز دار
Body Centered Cubic (BCC)





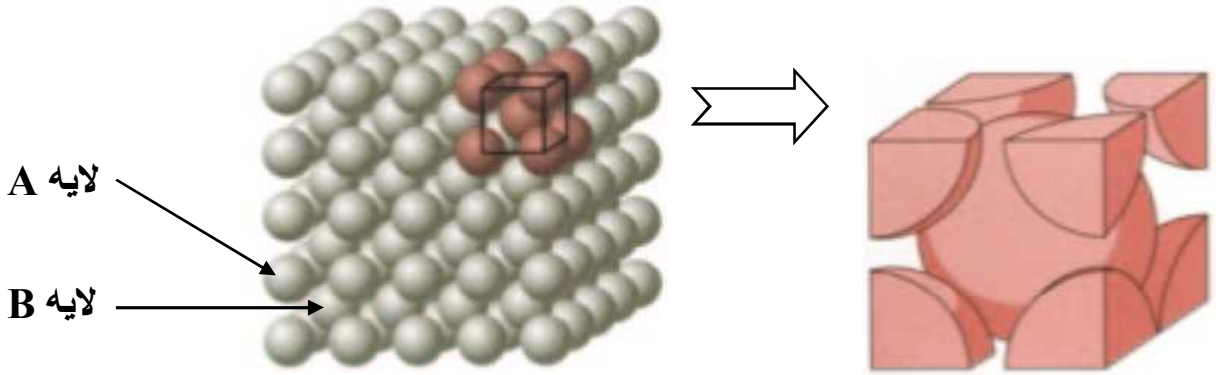


در ساختار مکعبی مرکزدار، هر اتم واقع در گوشه مکعب به ۸ سلول تعلق دارد و سهم هر سلول از اتم‌های واقع در رئوس، یک هشتم است. ولی اتم مرکزی هر سلول فقط به همان سلول متعلق است.

پس به هر سلول واحد در شبکه (BCC) دو اتم تعلق می‌گیرد.

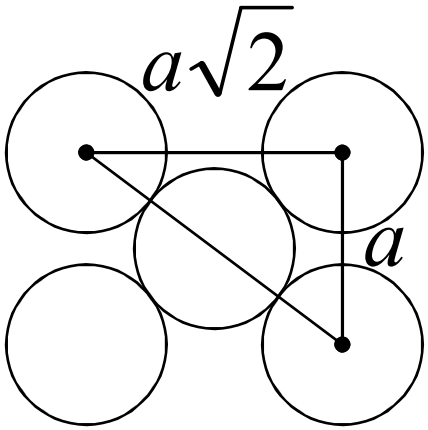
در ساختار مکعبی مرکزدار (BCC)، اتم مرکزی با اتم‌های واقع در گوشه در یک راستا هستند.

در ساختار (BCC)، اتم مرکزی با اتم‌های گوشه فرقی با هم ندارند.



چیدمان صفحات اتمی در این ساختار به صورت ...ABABAB است.

در ساختار مکعبی مرکزدار اگر اندازه یال شبکه a باشد در این صورت رابطه آن با شعاع اتمی به صورت زیر است:



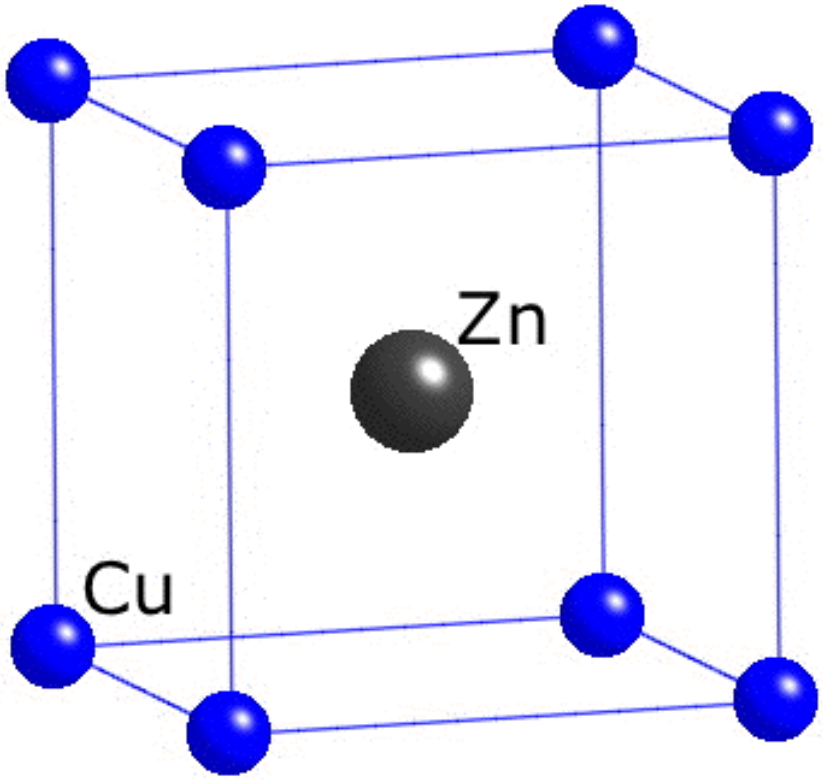
تصویر مقطع بلور BCC در صفحه (110).

$$(4R)^2 = a^2 + \left(a\sqrt{2}\right)^2 \Rightarrow a = \frac{4}{\sqrt{3}} R$$

در شبکه مکعب مرکز دار هر اتم، هشت اتم را در همسایگی چسبیده به خود دارد و لذا عدد همسایگی این شبکه بلوری برابر ۸ است.

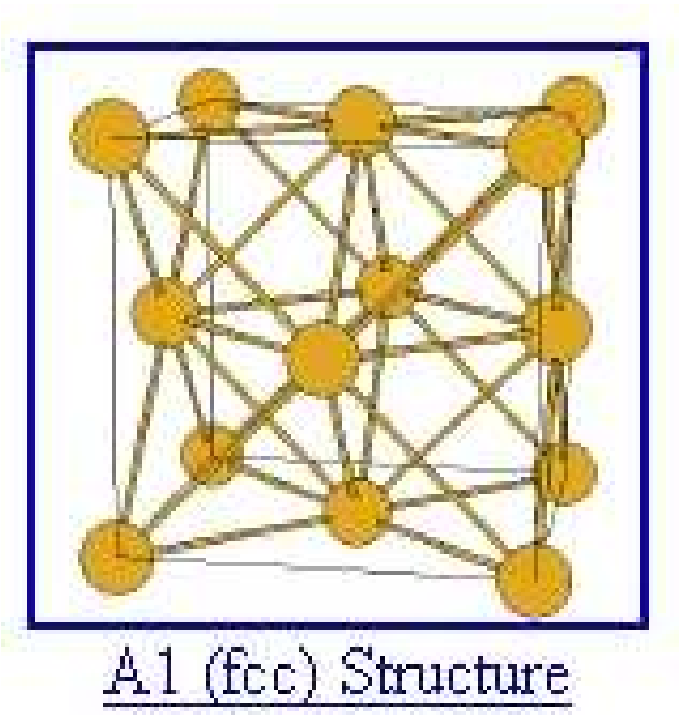
ضریب تراکم اتمی در شبکه **BCC** برابر است با:

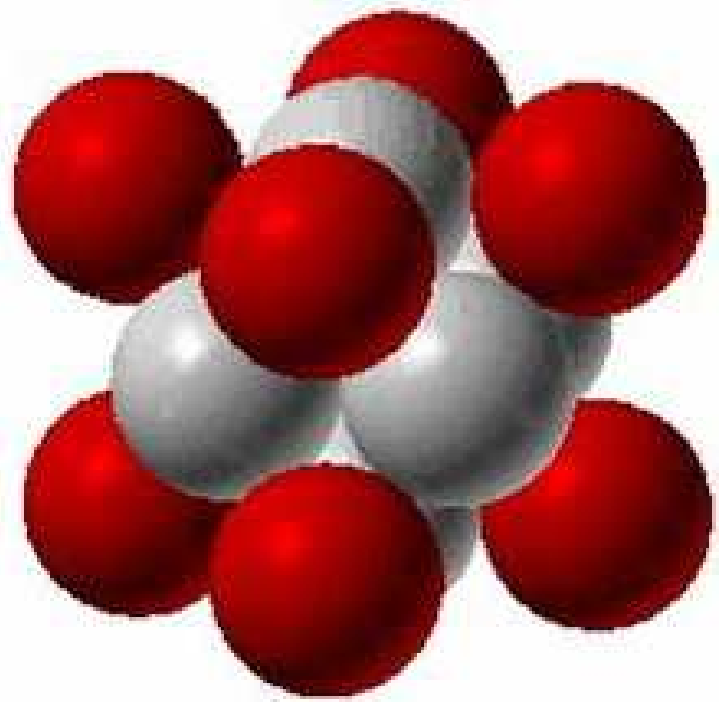
$$APF = \frac{2 \times \frac{4}{3}\pi R^3}{\left(\frac{4}{\sqrt{3}}R\right)^3} = 0.68$$

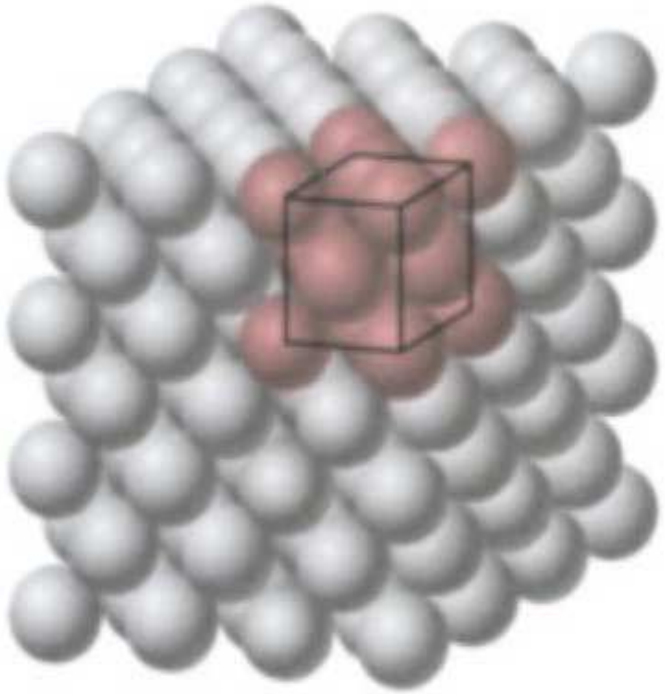


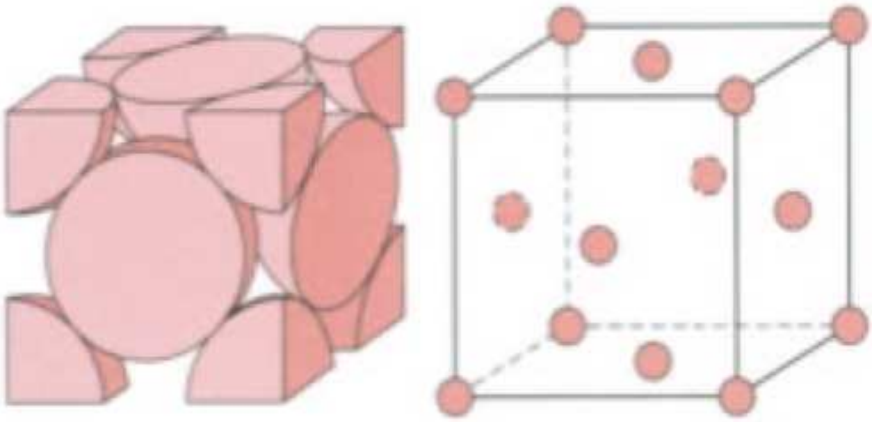
Brass, Cubic lattice, with a motif of Cu (0,0,0) and Zn (1/2,1/2,1/2)

ساختار مکعبی با وجوه مرکزدار
Face Centered Cubic (FCC)









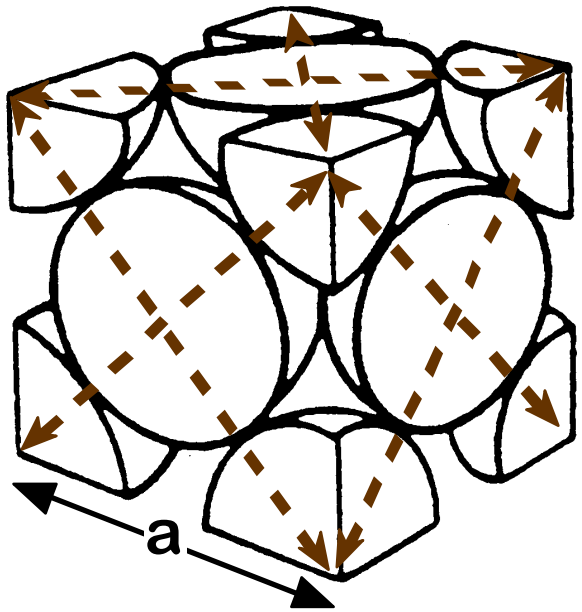
در ساختار مکعبی با وجوه مرکزدار، اتم‌ها (یا کره‌ها در مدل کرات سخت) تا حد امکان به هم فشرده هستند.

فلزات با این شبکه بلوری خواص فیزیکی ویژه‌ای نسبت به سایر فلزات دارند. مثلا قابلیت تغییر شکل در این فلزات بسیار زیاد است.

در ساختار مکعبی مرکزدار (FCC)، هر اتم واقع در گوشه مکعب به ۸ سلول تعلق دارد و هر اتم واقع در مرکز هر وجه به دو سلول مجاور هم متعلق است. پس به هر سلول واحد در شبکه (FCC) ۴ اتم تعلق می‌گیرد.

$$8\times\frac{1}{8}=1$$
$$\Rightarrow 1+3=4$$
$$6\times\frac{1}{2}=3$$

APF : FCC



Close-packed directions:

length = 4R

$= \sqrt{2}\, a$

$$APF = \frac{\text{atoms}}{\text{unit cell}} \cdot \frac{\text{volume}}{\text{atom}} \Big/ \frac{\text{volume}}{\text{unit cell}}$$

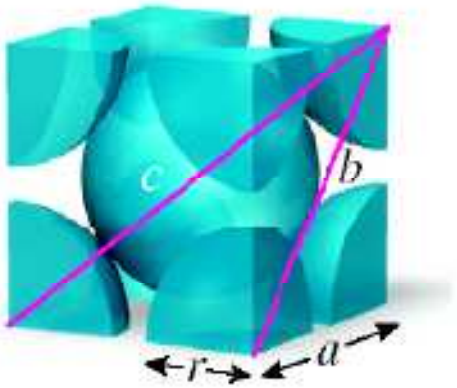
$$APF = \frac{4 \cdot \frac{4}{3}\pi (\sqrt{2}a/4)^3}{a^3}$$

APF = 0.74

GEOMETRIC RELATIONSHIPS

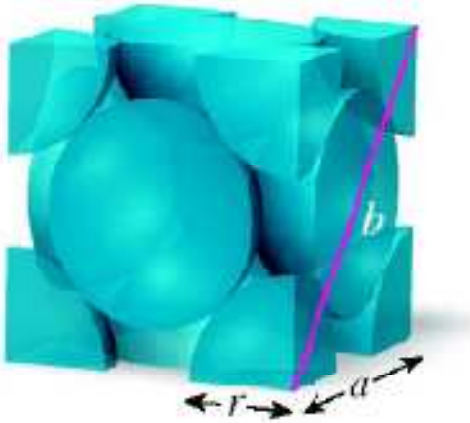
scc

$$a = 2r$$



bcc

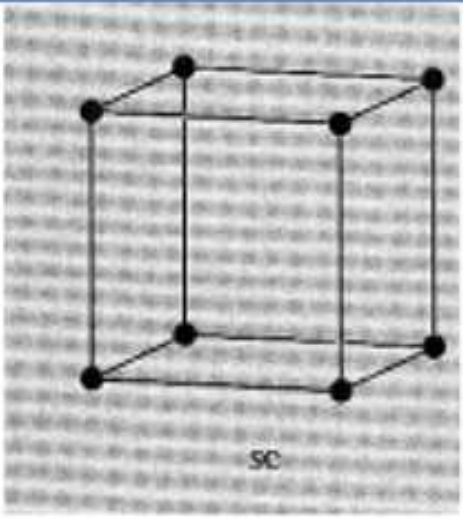
$$b^2 = a^2 + a^2$$
$$c^2 = a^2 + b^2$$
$$= 3a^2$$
$$c = \sqrt{3}a = 4r$$
$$a = \frac{4r}{\sqrt{3}}$$



fcc

$$b = 4r$$
$$b^2 = a^2 - a^2$$
$$16r^2 = 2a^2$$
$$a = \sqrt{8}r$$

Simple cubic



Lattice sites: $a(l\,\hat{x} + m\,\hat{y} + \mathrm{n}\,\hat{z})$

Lattice point per conventional cell: $1 = 8\times\frac{1}{8}$

Volume (conventional cell): a^3

Volume (primitive cell) : a^3

Number of nearest neighbors: 6

Nearest neighbor distance: a

Number of second neighbors: 12

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

Packing fraction: $\frac{\pi}{6} \approx 0.524$

$$Packing\ fraction = \frac{4\,\pi\frac{R^3}{3}}{Volume\ of\ a\ primitive\ cell}$$

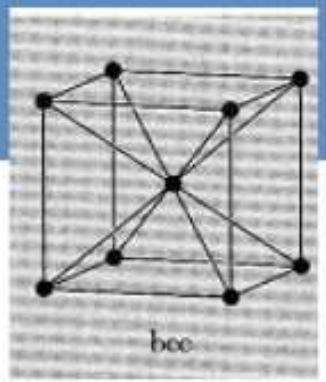
$$= \frac{4\,\pi\frac{R^3}{3}}{a^3} = \frac{4\,\pi}{3}\left(\frac{R}{a}\right)^3 = \frac{4\,\pi}{3}\left(\frac{a/2}{a}\right)^3 = \frac{\pi}{6} \approx 0.524$$

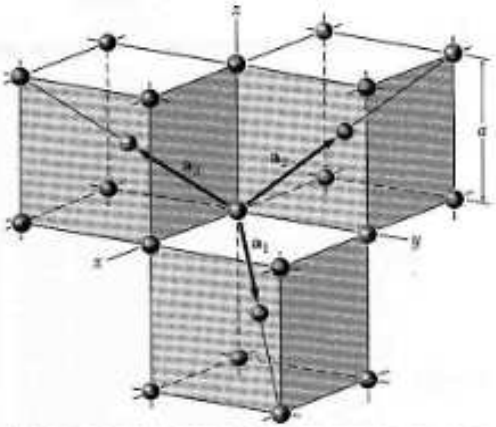
Nearest distance= 2 R

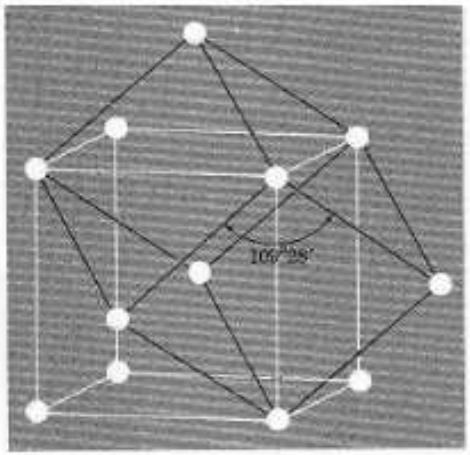
R= Nearest distance/2=$a/2$

- About half (0.524=52.4%) of the space is really used by the sphere.
- The other half (0.476=47.6%) is empty.

bcc







Lattice sites

$a(l\,\hat{x} + m\,\hat{y} + \mathrm{n}\,\hat{z})$ and $a[\left(l+\frac{1}{2}\right)\hat{x} + \left(m+\frac{1}{2}\right)\hat{y} + \left(n+\frac{1}{2}\right)\hat{z}]$

Lattice point per conventional cell: $2 = 8\times\frac{1}{8} + 1$

Volume (conventional cell): a^3

Volume (primitive cell) : $a^3/2$

Number of nearest neighbors: 8

Nearest neighbor distance: $\sqrt{(\frac{a}{2})^2+(\frac{a}{2})^2+(\frac{a}{2})^2} = \frac{\sqrt{3}}{2}a \approx 0.866a$

Number of second neighbors: 6

Second neighbor distance: a

Packing fraction: $\frac{\sqrt{3}}{8}\pi \approx 0.680$

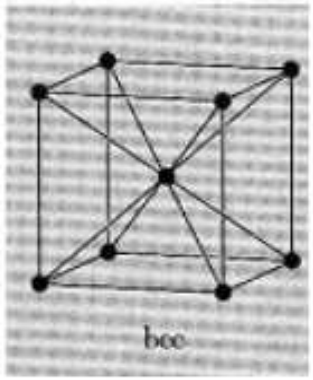
Coordinates of the sites: (l, n, m)

For the site $(0,0,0)$,

8 nearest neighbors: $\left(\pm\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\right)$

6 nest nearest neighbors: $(\pm1,0,0)$, $(0,\pm1,0)$ and $(0,0,\pm1)$

bcc packing fraction



Volume (primitive cell) : $a^3/2$

Nearest neighbor distance: $\sqrt{(\frac{a}{2})^2+(\frac{a}{2})^2+(\frac{a}{2})^2}=\frac{\sqrt{3}}{2}a \approx 0.866a$

Packing fraction: $\frac{\sqrt{3}}{8}\pi \approx 0.680$

$$Packing\ fraction = \frac{4\,\pi\frac{R^3}{3}}{Volume\ of\ a\ primitive\ cell}$$

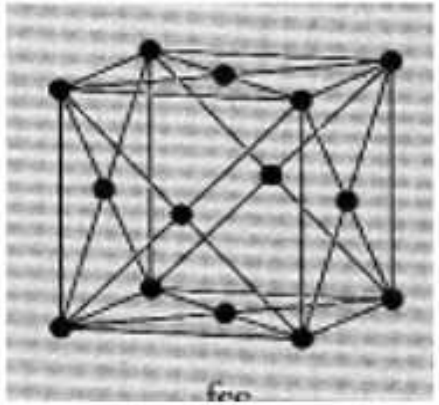
$$= \frac{4\,\pi\frac{R^3}{3}}{a^3/2} = \frac{8\pi}{3}(\frac{R}{a})^3 = \frac{8\pi}{3}(\frac{\frac{\sqrt{3}}{4}a}{a})^3 = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} \approx 0.680$$

Nearest distance= 2 R

R= Nearest distance/2=$\frac{\sqrt{3}}{4}a$

- About 68.0% of the space is really used by the sphere.
- About 32.0% of the space is empty.

fcc



Lattice sites

$a(l\,\hat{x} + m\,\hat{y} + n\,\hat{z})$ $\quad a[\left(l+\frac{1}{2}\right)\hat{x} + \left(m+\frac{1}{2}\right)\hat{y} + n\,\hat{z}]$

$a[\left(l+\frac{1}{2}\right)\hat{x} + m\,\hat{y} + \left(n+\frac{1}{2}\right)\hat{z}]$

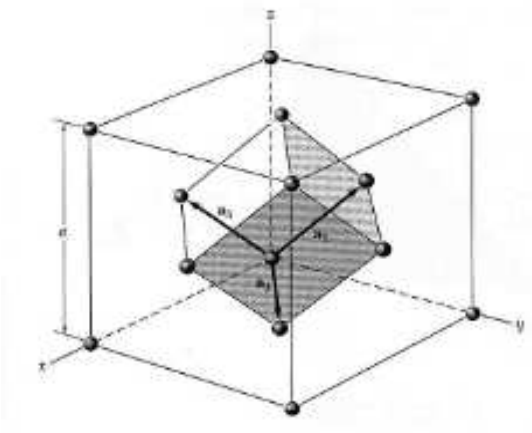
$a[l\hat{x} + \left(m+\frac{1}{2}\right)\hat{y} + \left(n+\frac{1}{2}\right)\hat{z}]$

Lattice point per conventional cell: $4 = 8\times\frac{1}{8} + 6\times\frac{1}{2} = 1 + 3$

Volume (conventional cell): a^3

Volume (primitive cell) : $a^3/4$

Number of nearest neighbors: 12



Nearest neighbor distance: $\sqrt{(\frac{a}{2})^2+(\frac{a}{2})^2+(0)^2} = \frac{\sqrt{2}}{2}a \approx 0.707a$

Number of second neighbors: 6

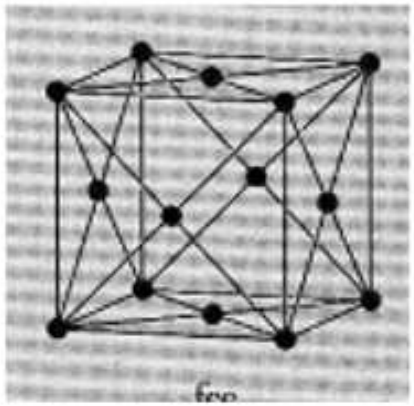
Second neighbor distance: a

For the site $(0,0,0)$,

12 nearest neighbors: $\left(\pm\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2},0\right)$, $\left(\pm\frac{1}{2},0,\pm\frac{1}{2}\right)$ and $\left(0,\pm\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}\right)$

6 nest nearest neighbors: $(\pm1,0,0)$, $(0,\pm1,0)$ and $(0,0,\pm1)$

fcc packing fraction



Volume (primitive cell) : $a^3/4$

Nearest neighbor distance: $\sqrt{(\frac{a}{2})^2+(\frac{a}{2})^2+(0)^2}=\frac{\sqrt{2}}{2}a \approx 0.707a$

Nearest distance= 2 R

R= Nearest distance/2=$\frac{\sqrt{2}}{4}a$

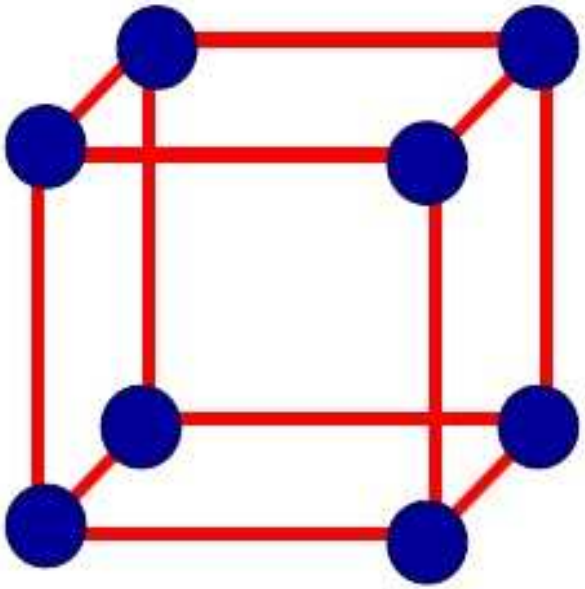
$$Packing\ fraction = \frac{4\,\pi\frac{R^3}{3}}{Volume\ of\ a\ primitive\ cell}$$

$$= \frac{4\,\pi\frac{R^3}{3}}{a^3/4} = \frac{16\pi}{3}(\frac{R}{a})^3 = \frac{16\pi}{3}(\frac{\frac{\sqrt{2}}{4}a}{a})^3 = \frac{\sqrt{2}\pi}{6} \approx 0.740$$

- About 74.0% of the space is really used by the sphere.
- About 26.0% of the space is empty.

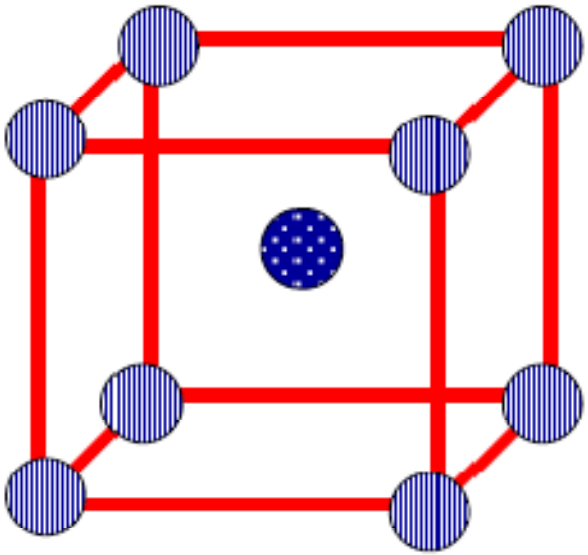
0.740 is the highest packing fraction one can ever reach.
This structure is called "close packing"
There are other close packing structures (same packing fraction)

Simple Cubic



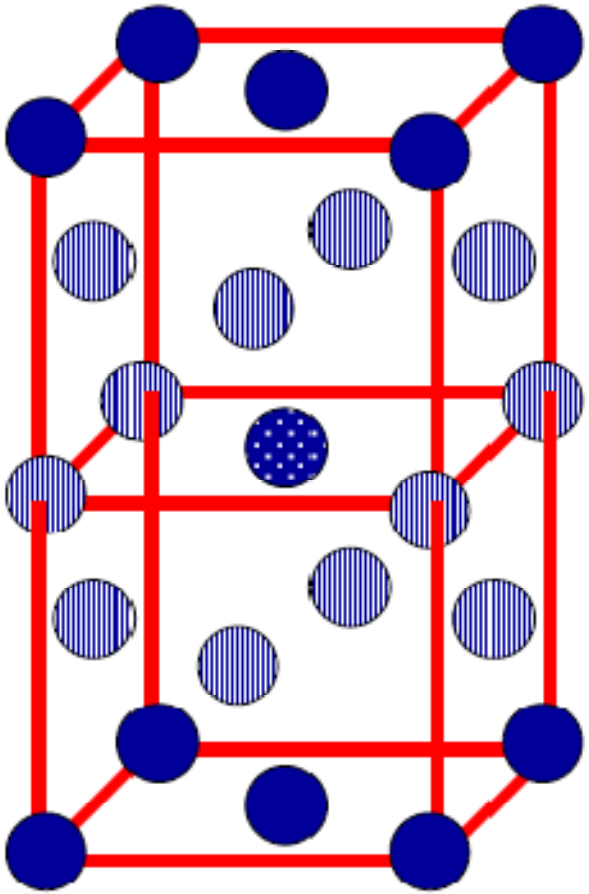
Number of atoms per unit cell	1/8 X 8 = 1
Coordination number	6
Atomic packing factor	0.52

BODY CENTERED CUBIC



Number of atoms per unit cell	1/8 X 8 + 1 = 2
Coordination number	8
Atomic packing factor	0.68

FACE CENTERED CUBIC



Number of atoms per unit cell	1/8 X 8 + 1/2 X 6 = 4
Coordination number	12
Atomic packing factor	0.74

Comparison of cell properties of some crystal structure

Sr. No.	Crystal Specifications	sc	bcc	fcc	hcp
1	Coordination Number	6	8	12	12
2	Nearest Neighbour distance	$2r = a$	$2r = \frac{a\sqrt{3}}{2}$	$2r = \frac{a\sqrt{2}}{2}$	$2r = a$
3	Lattice Constant	$a = 2r$	$a = \frac{4r}{\sqrt{3}}$	$a = \frac{4r}{\sqrt{2}}$	$a = 2r$
4	Number of atoms per unit cell	$n = \frac{1}{8} \times 8 = 1$	$n = \frac{1}{8} \times 8 + 1 = 2$	$n = \frac{1}{8} \times 8 + 3 = 4$	$n = \left(\frac{3}{2} + \frac{3}{2} + 3\right) = 6$
5	Number of lattice points	1	2	4	6
6	Volume of all the atoms in a unit cell	$v = 1 \times \frac{4}{3}\pi r^3$	$v = 2 \times \frac{4}{3}\pi r^3$	$v = 4 \times \frac{4}{3}\pi r^3$	$v = 6 \times \frac{4}{3}\pi r^3$
7	Volume of unit cell	$V = a^3 = (2r)^3$	$V = a^3 = \left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^3$	$V = a^3 = \left(\frac{4r}{\sqrt{2}}\right)^3$	$V = a^3 = (2r)^3$

اندیس های بلوری

- جهات و صفحات بلوری در فضا توسط علائمی به نام اندیس های بلوری تعریف می گردند.

- عموما از سیستم میلر برای اندیس گذاری صفحات و جهات بلوری استفاده می شود.

روش تعیین اندیس های صفحات در شبکه مکعبی

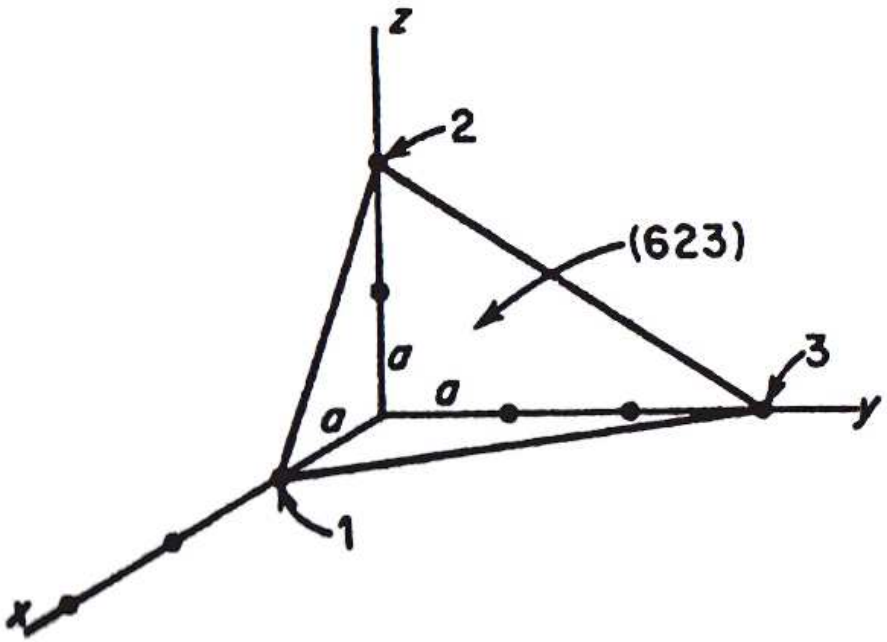
- نقاط تقاطع صفحه مورد نظر با محورهای مختصات تعیین و مختصات آن ها تعیین می شود.

- اندیس میلر صفحه متناسب با معکوس مختصات نقاط تقاطع با محورهاست که باید به کوچکترین اعداد صحیح تبدیل شوند.

Miller indices of lattice plane

- The indices of a crystal plane (h,k,l) are defined to be a set of **integers** with no common factors, inversely proportional to the intercepts of the crystal plane along the crystal axes:

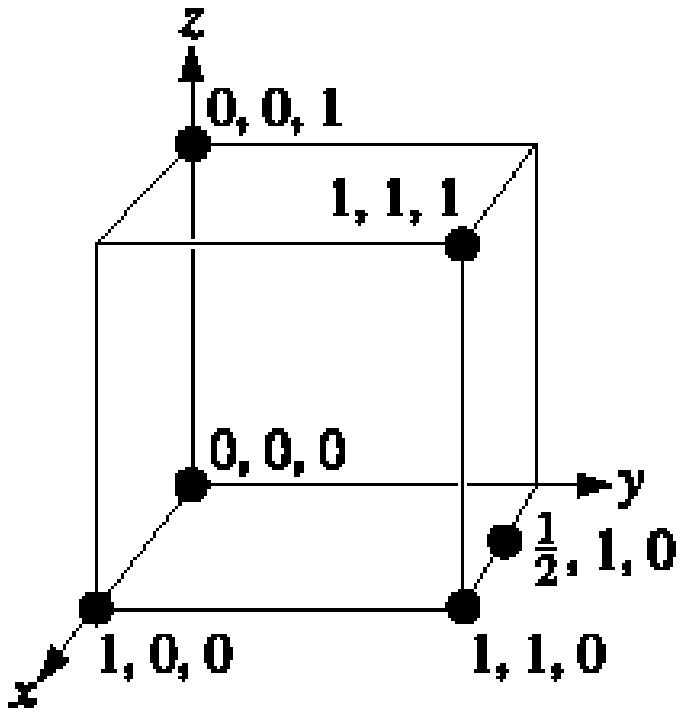
$$h:k:l = \frac{1}{x_1}:\frac{1}{x_2}:\frac{1}{x_3}$$



$$\left(\frac{1}{1},\frac{1}{3},\frac{1}{2}\right)$$

$$(623)$$

Fig. 1.15 The intercepts of the (623) plane with the coordinate axes.


z
0, 0, 1
1, 1, 1
0, 0, 0
y
1/2, 1, 0
1, 0, 0
1, 1, 0
x

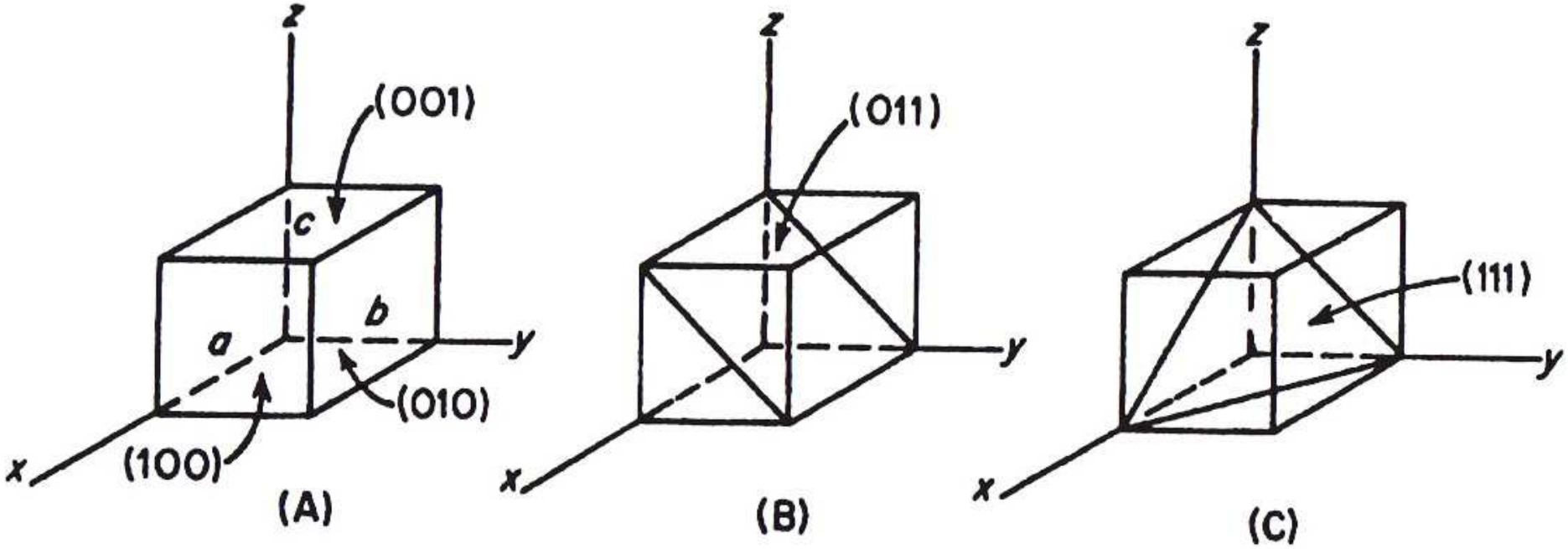
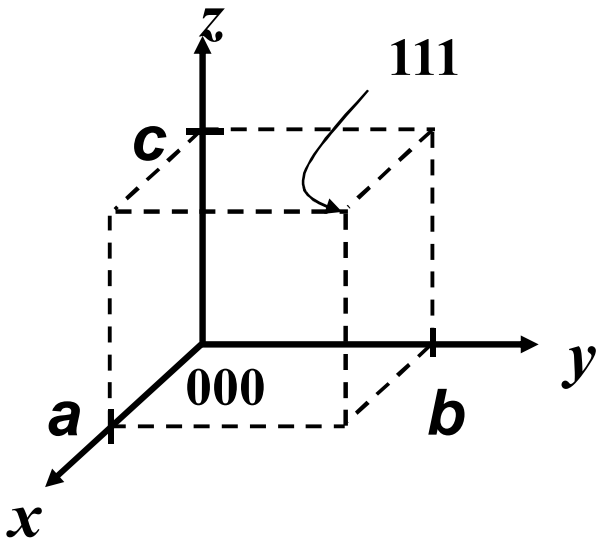


Fig. 1.16 (A) Cube planes of a cubic crystal: *a* (100); *b* (010); *c* (001). (B) The (011) plane. (C) The (111) plane.

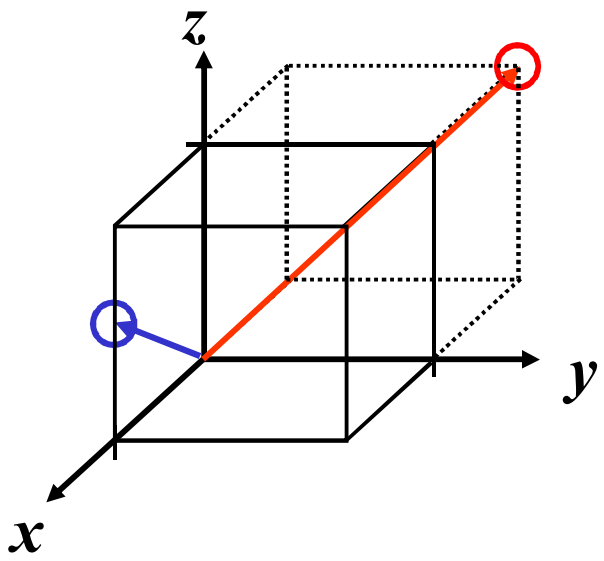


♋ اندیسهای میلر مرکز یک یونیت سل

$a/2, b/2, c/2$ ½ ½ ½

♋ اندیسهای میلر انتهای یکی یونیت سل

1 1 1



ex: 1, 0, ½ => 2, 0, 1 => [201]

-1, 1, 1 => $[\bar{1}11]$ برای عددهای منفی یک خط بر روی اندیس میلر آن می گذاریم

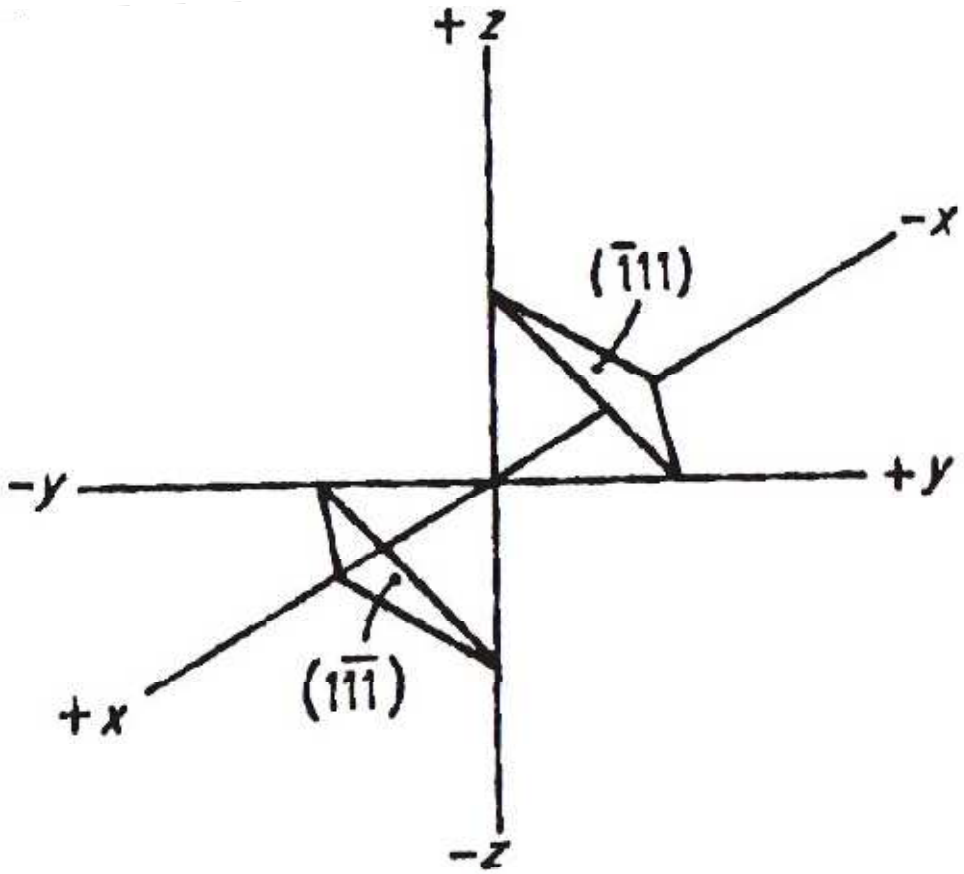


Fig. 1.17 The $(\bar{1}11)$ and $(1\bar{1}\bar{1})$ planes are paraliel to each other and therefore represent the same crystallographic plane.

Indices of Planes: Cubic Crystal

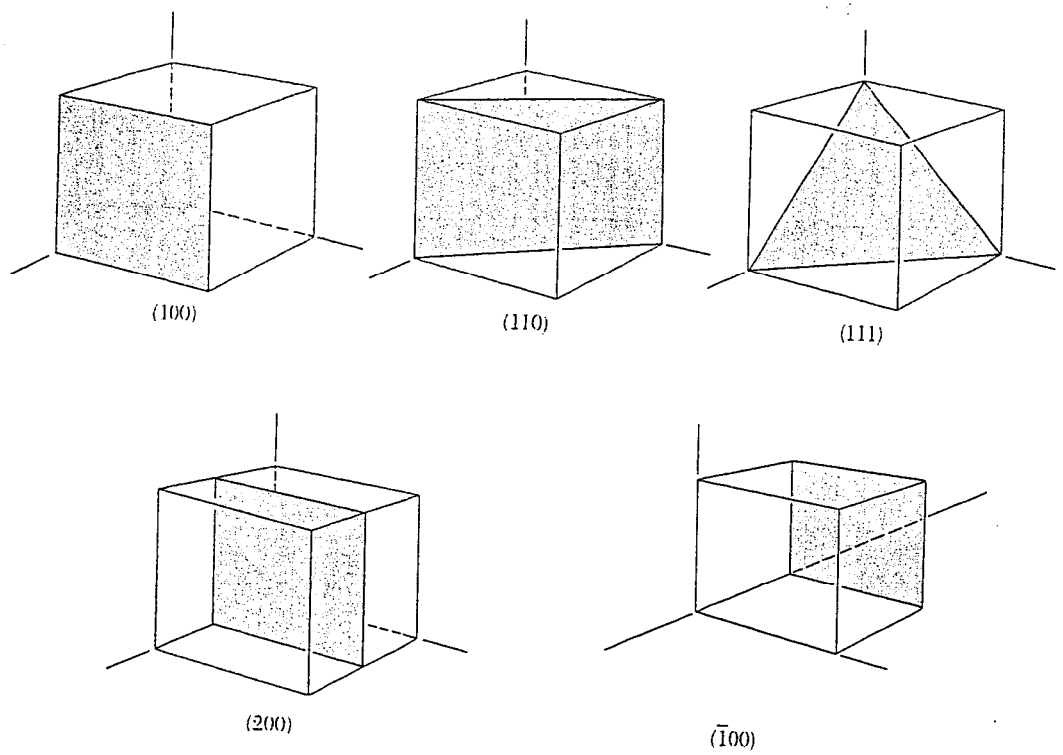
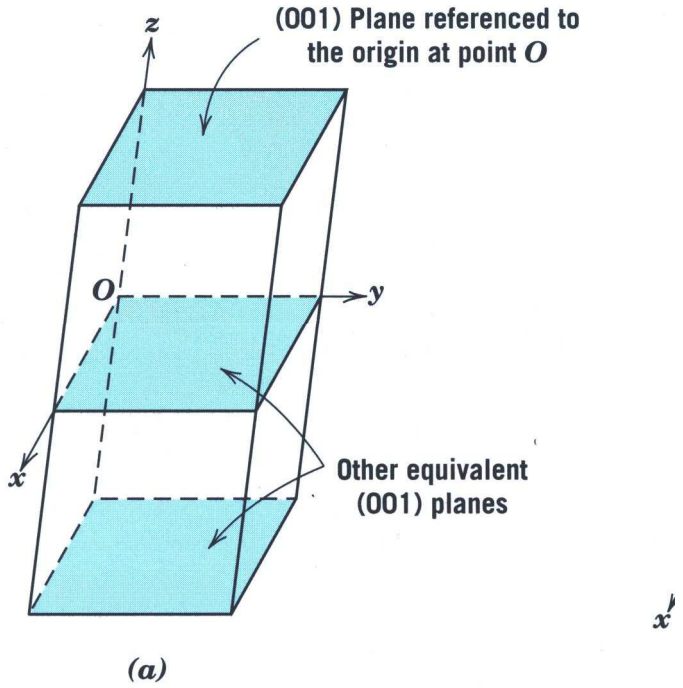


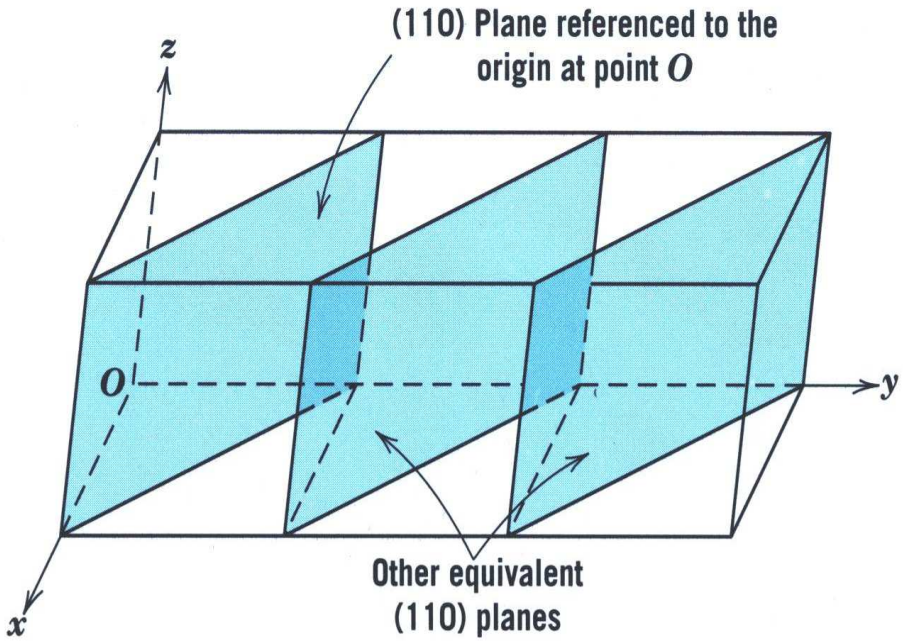
Figure 16 Indices of important planes in a cubic crystal. The plane (200) is parallel to (100) and to (1̄00).

001 Plane


z
(001) Plane referenced to
the origin at point O
O
y
x
Other equivalent
(001) planes
x'

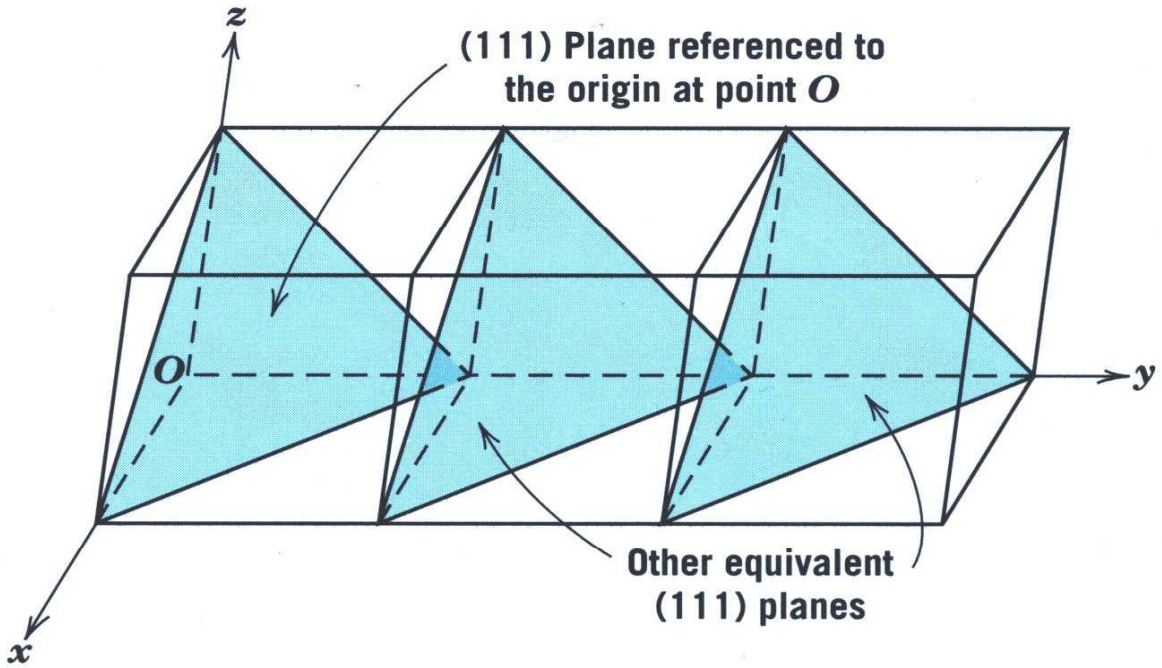
(a)

110 Planes


(110) Plane referenced to the origin at point O
z
O
y
x
Other equivalent (110) planes

(b)

111 Planes


z
(111) Plane referenced to
the origin at point O
O
y
x
Other equivalent
(111) planes

(c)

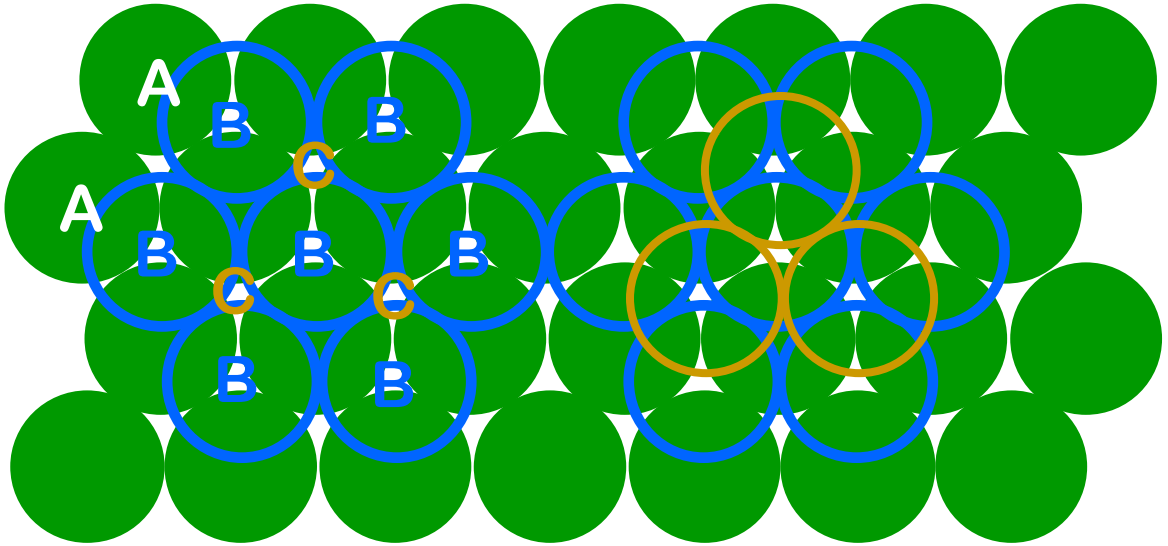
Simple Crystal Structures

- There are several crystal structures of common interest: sodium chloride, cesium chloride, hexagonal close-packed, diamond and cubic zinc sulfide.
- Each of these structures have many different realizations.

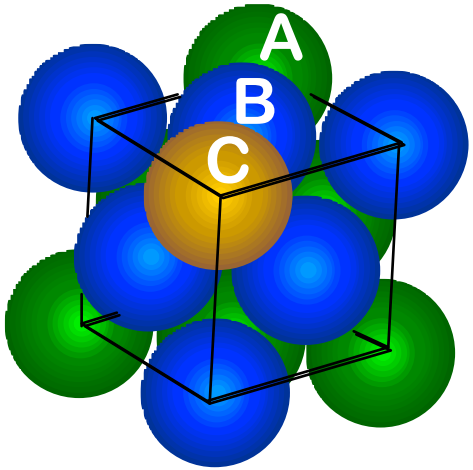
Close-packed structures

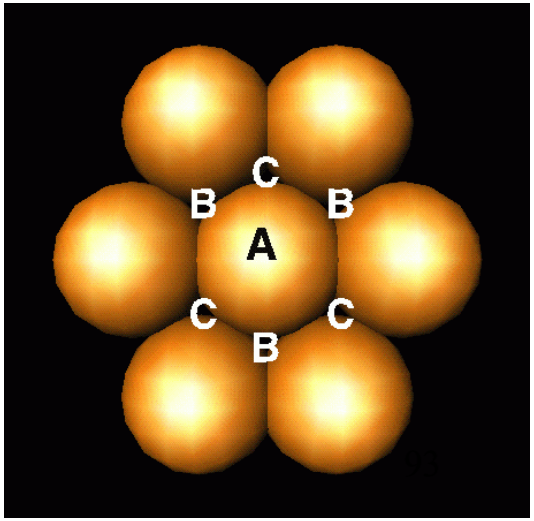
FCC STACKING SEQUENCE

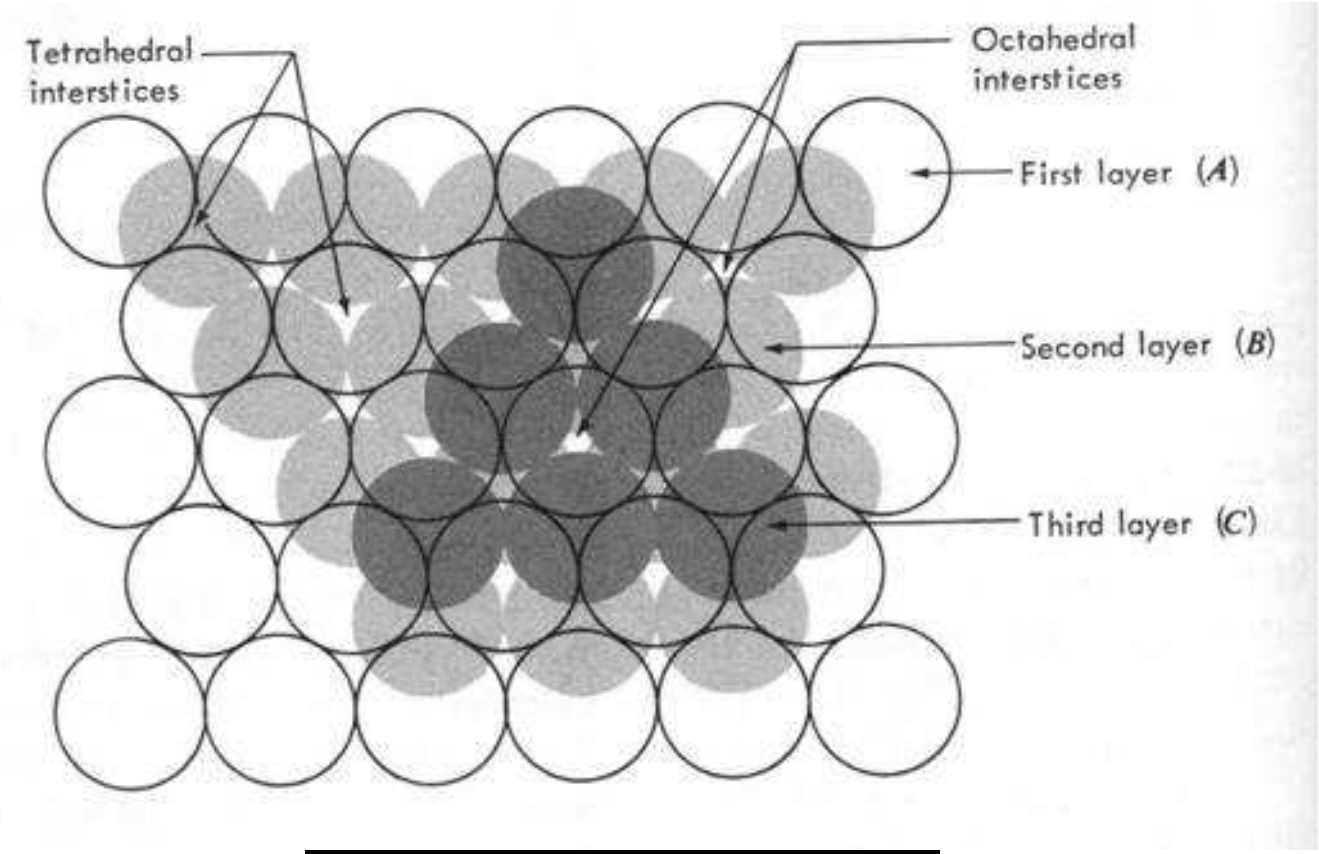
- **ABCABC... Stacking Sequence**
- **2D Projection**

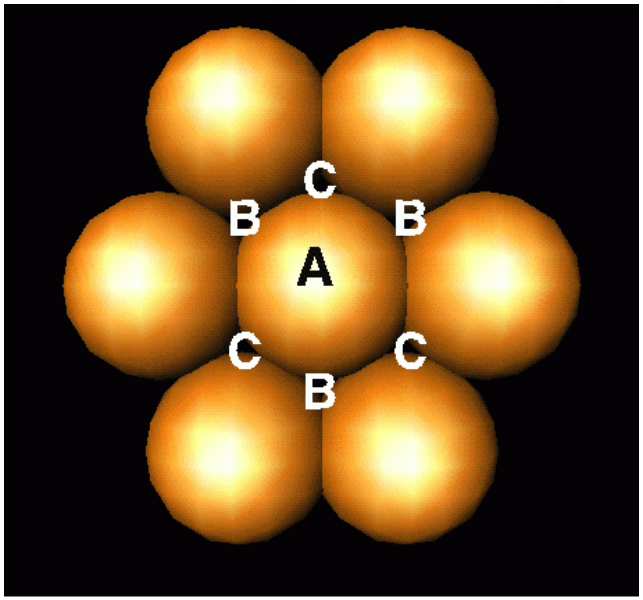


- **FCC Unit Cell**

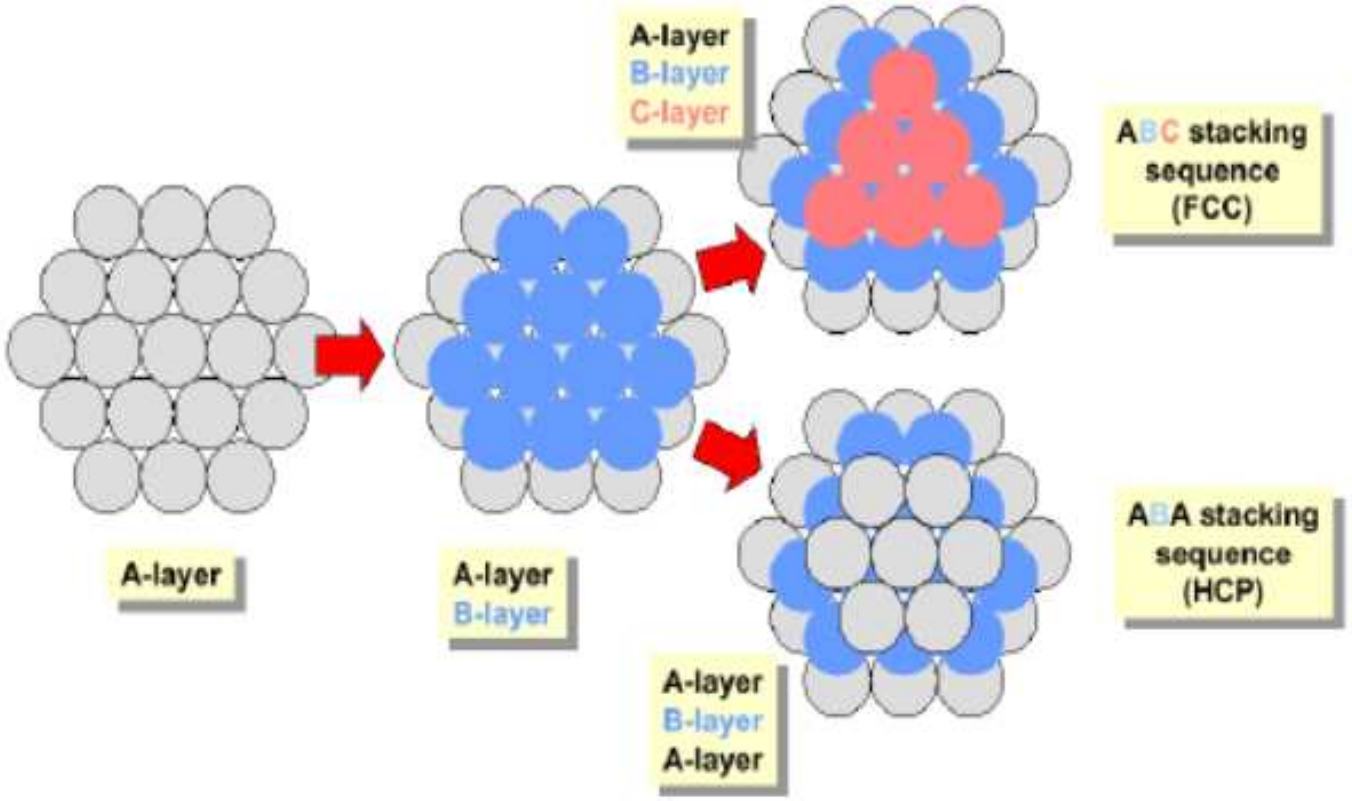





Tetrahedral interstices
Octahedral interstices
First layer (A)
Second layer (B)
Third layer (C)


C
B
B
A
C
C
B

Closed-packed structure

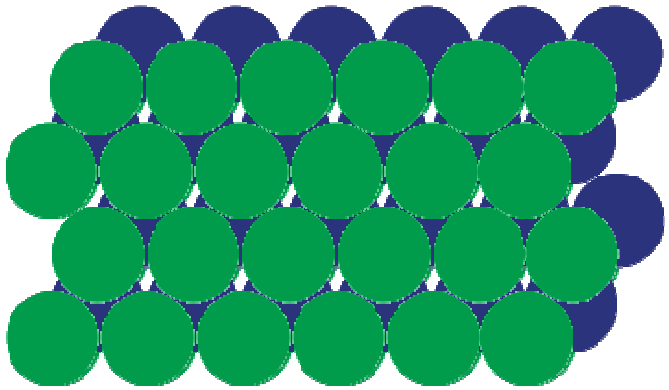


fcc=ABCABC….

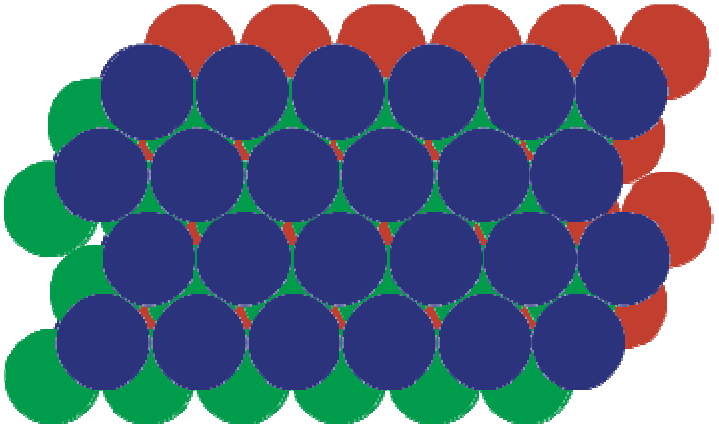
hcp=ABAB…..

Close-packed structures: fcc and hcp

hcp
ABABAB...

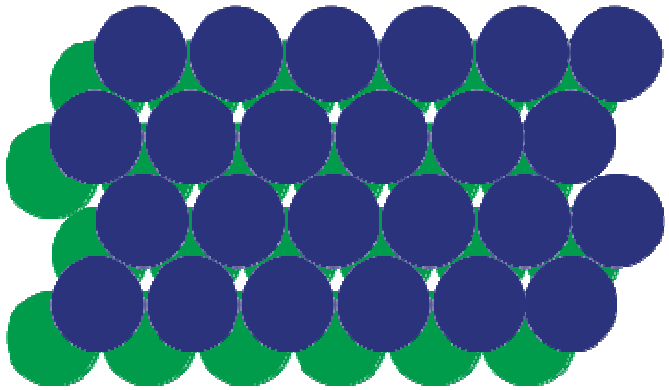


fcc
ABCABCABC...

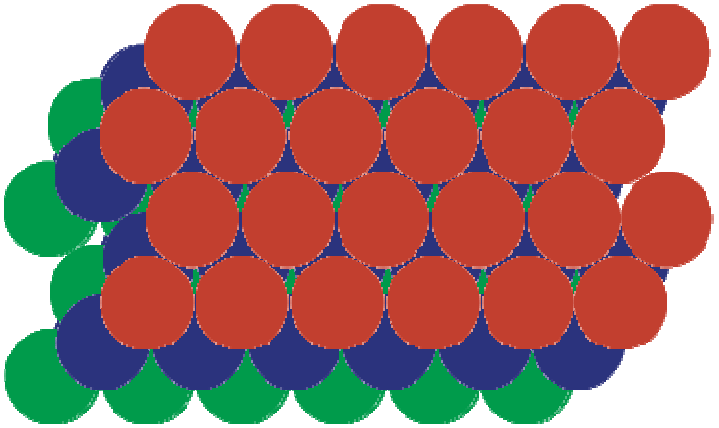


Close-packed structures: fcc and hcp

hcp
ABABAB...



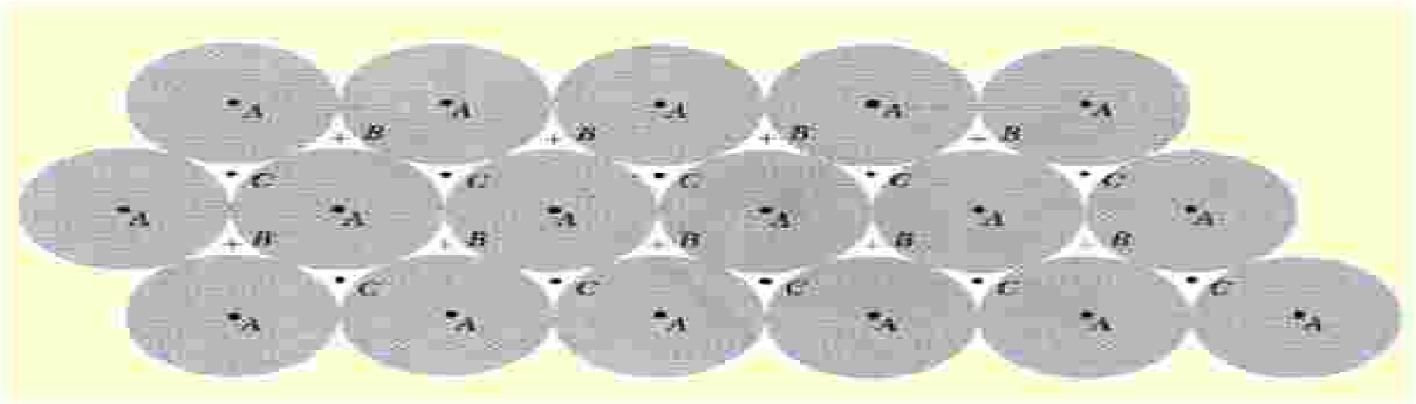
fcc
ABCABCABC...



- The hexagonal close-packed (hcp) and face-centred cubic (fcc) and structure have the same packing fraction

ساختار تنگ پکیده شش گوشي (hcp)

شكل زير يک لايه تنگ پكيده از كره ها كه مراكز آنها با A مشخص شده است. لايه دوم يكساني از كره ها را مي توان به گونه اي روي اين لايه قرار داد كه مراكز آنها بالاي نقاطي كه با B مشخص شده است. (يا ، به طور معادل، بالاي نقاطي كه با C مشخص شده است) قرار گيرند.



لايه دوم را مي توان با قرار دادن هر كره از B در تماس با سه كره از لايه زيرين به گونه اي كه در شكل هاي صفحه بعد نشان داده شده اضافه كرد :

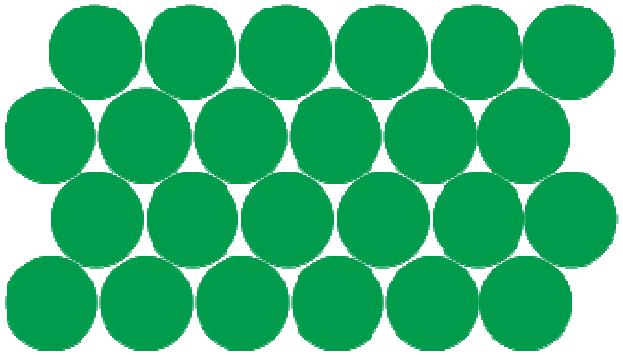
اگر مراكز كره هاي لايه دوم بالاي نقاط B قرار گيرند ، دو گزينش غير معادل براي لايه سوم موجود خواهد بود.

مراكز كره هاي اين لايه مي توانند يا بالاي نقاط A و يا بالاي نقاط C قرار گيرند.
اگر بالاي Aقرار گيرند دنباله ABABAB... به وجود مي آيد و ساختار به صورت تنگ پكيده شش گوشي(hcp) مي شود.

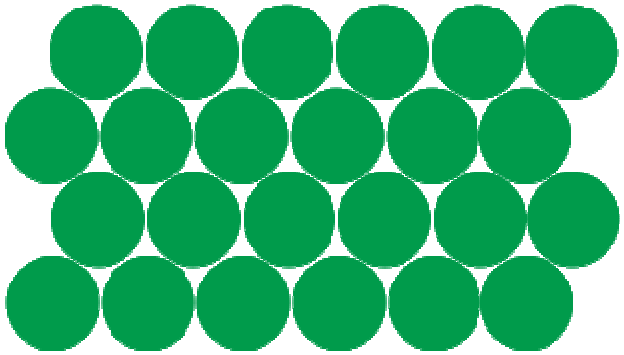
اگر مراكز كره هاي لايه سوم روي C قرار گيرند دنباله ABCABCABC... به وجود خواهد آمد و ساختار به گونه اي مكعبي مركز سطحي (fcc) درمي آيد و به آن CCPمي گويند.

Close-packed structures: fcc and hcp

hcp
ABABAB...

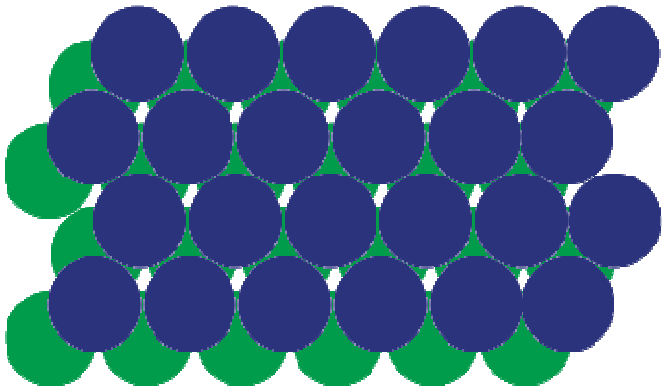


fcc
ABCABCABC...

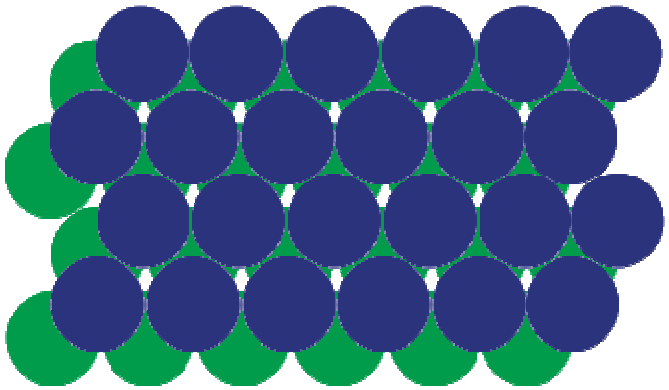


Close-packed structures: fcc and hcp

hcp
ABABAB...

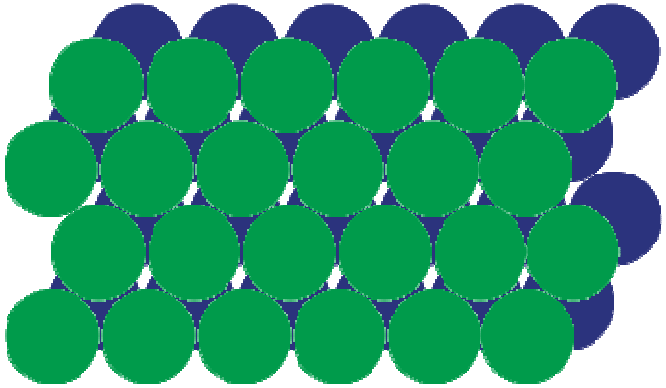


fcc
ABCABCABC...

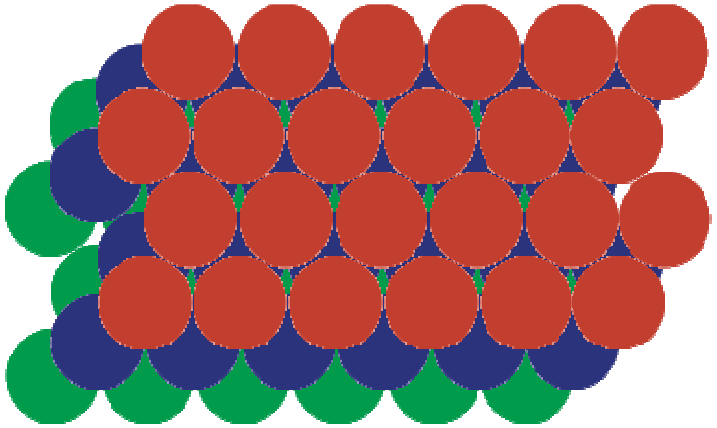


Close-packed structures: fcc and hcp

hcp
ABABAB...

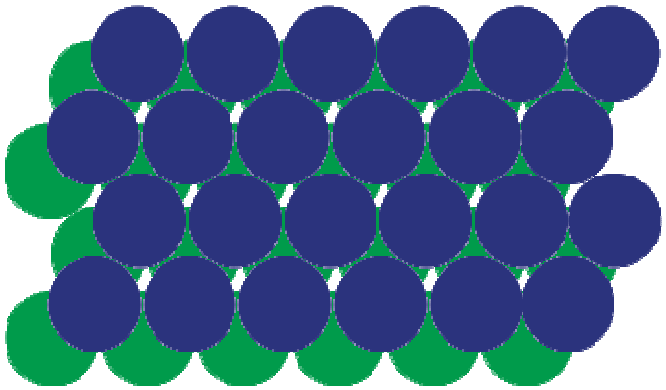


fcc
ABCABCABC...

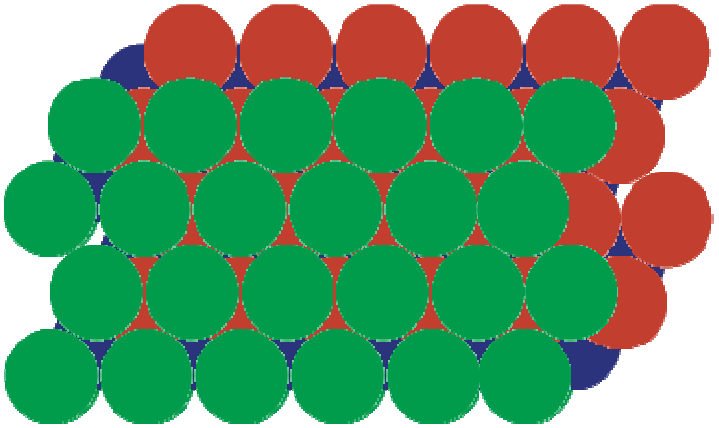


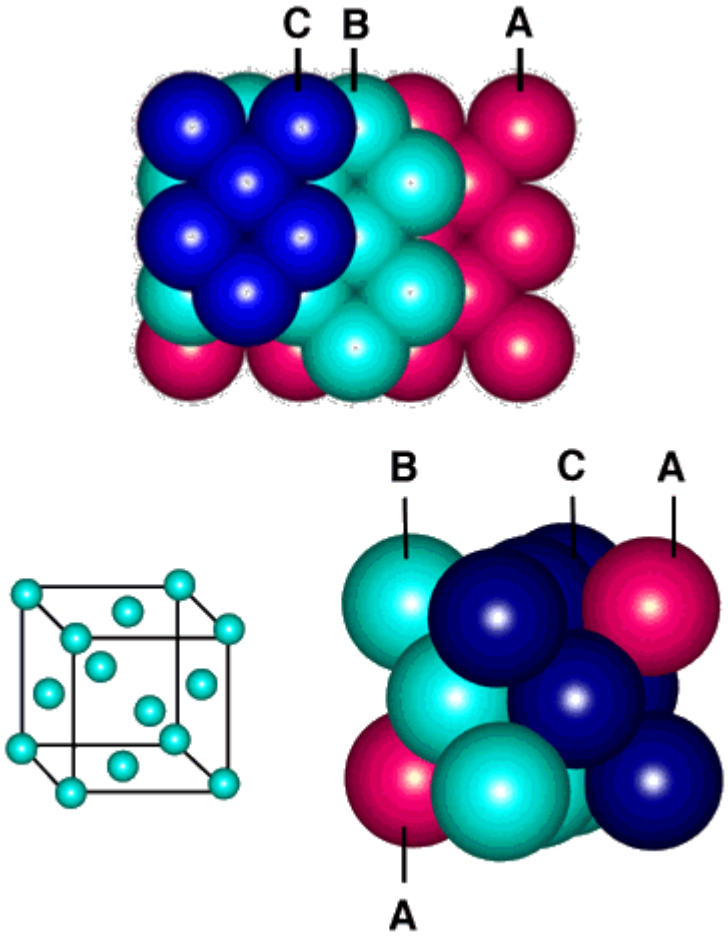
Close-packed structures: fcc and hcp

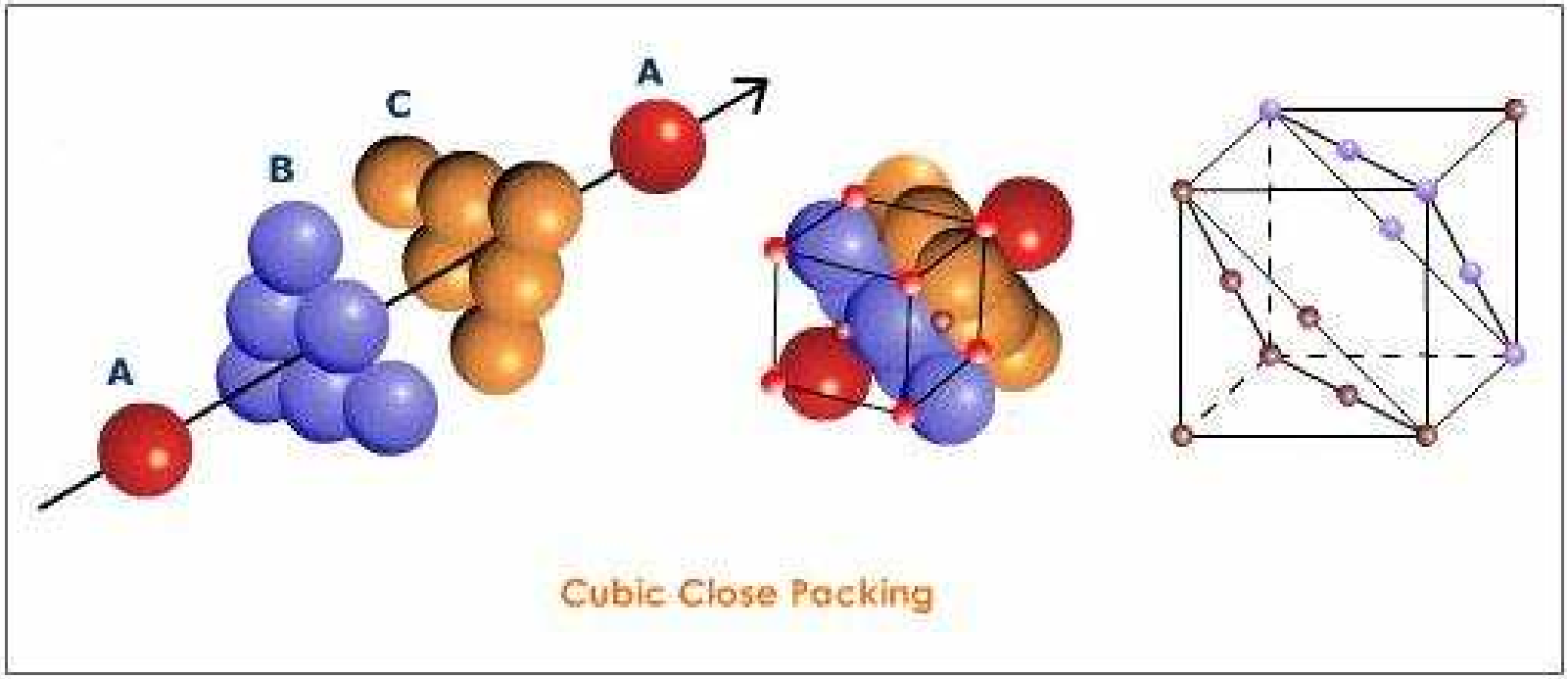
hcp
ABABAB...

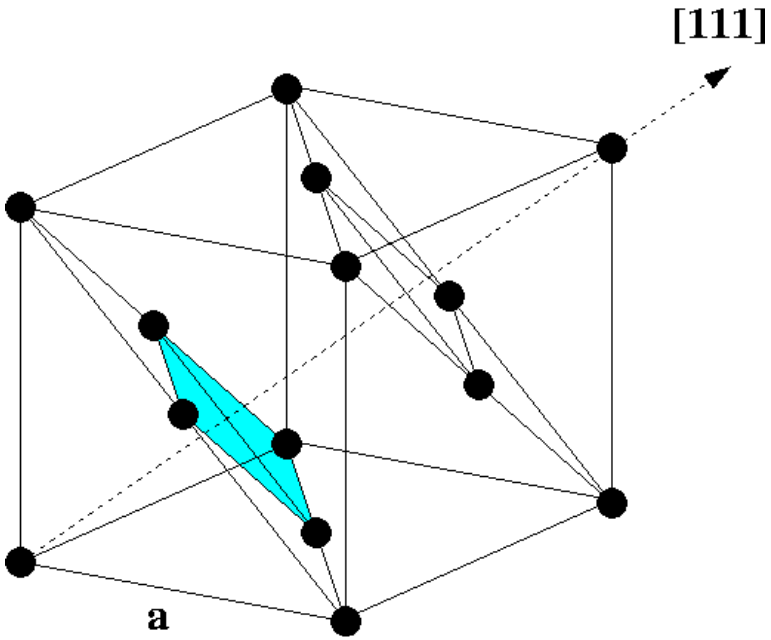


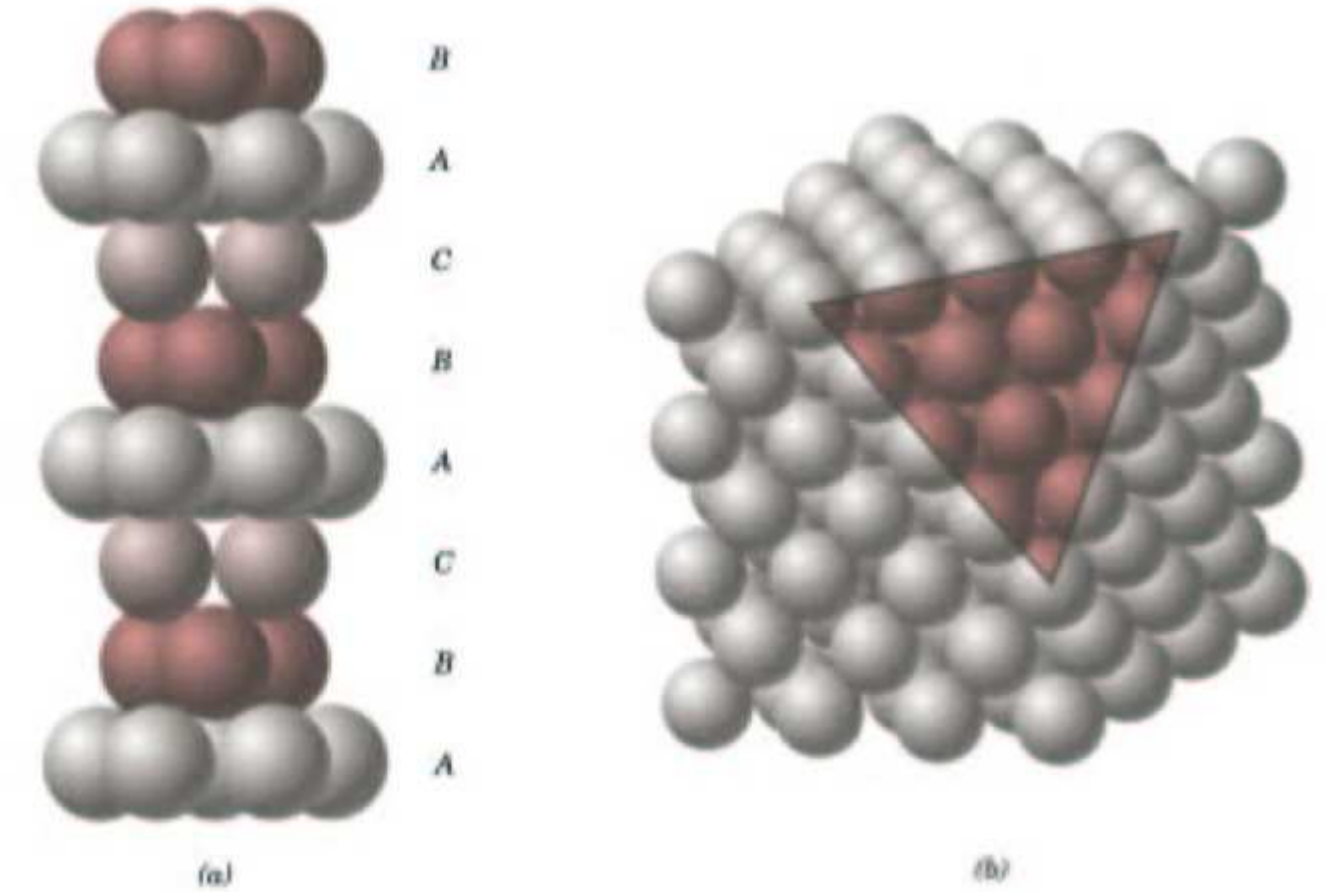
fcc
ABCABCABC...




C
B
A
B
C
A
A

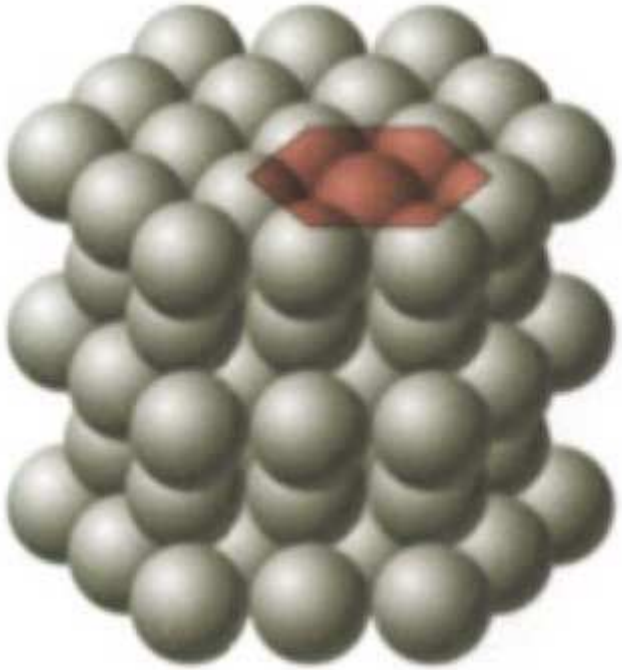

A
C
B
A
Cubic Close Packing

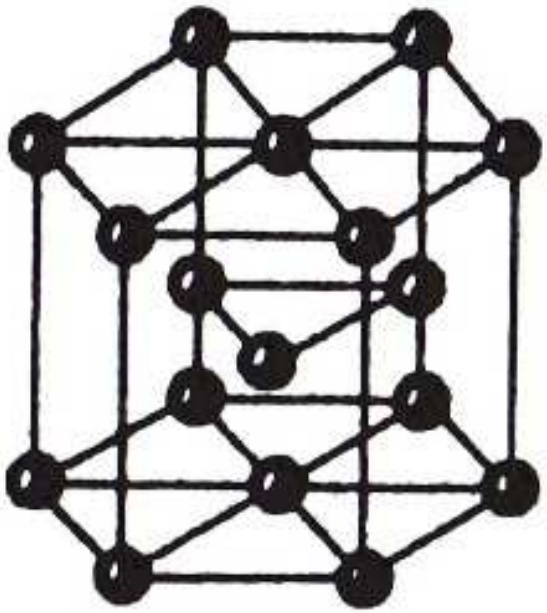

[111]
a



چیدمان متوالی صفحات اتمی در ساختار FCC به صورت ABCABCABC

ساختار هگزاگونال فشرده
Hexagonal Closed Pack (HCP)

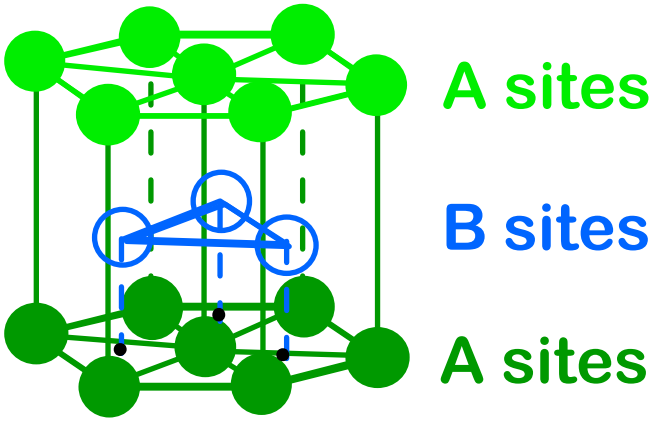




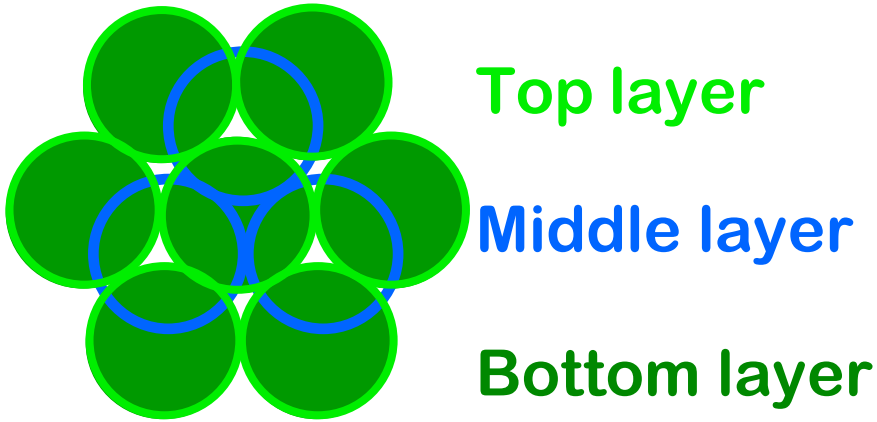
در ساختار هگزاگونال فشرده، اتم‌های صفحه بالای سلول درست روی اتمهای صفحه پایین سلول هستند ولی اتمهای صفحه میانی موقعیت متفاوتی دارند.

HEXAGONAL CLOSE-PACKED STRUCTURE (HCP)

- **ABAB... Stacking Sequence**
- **3D Projection**

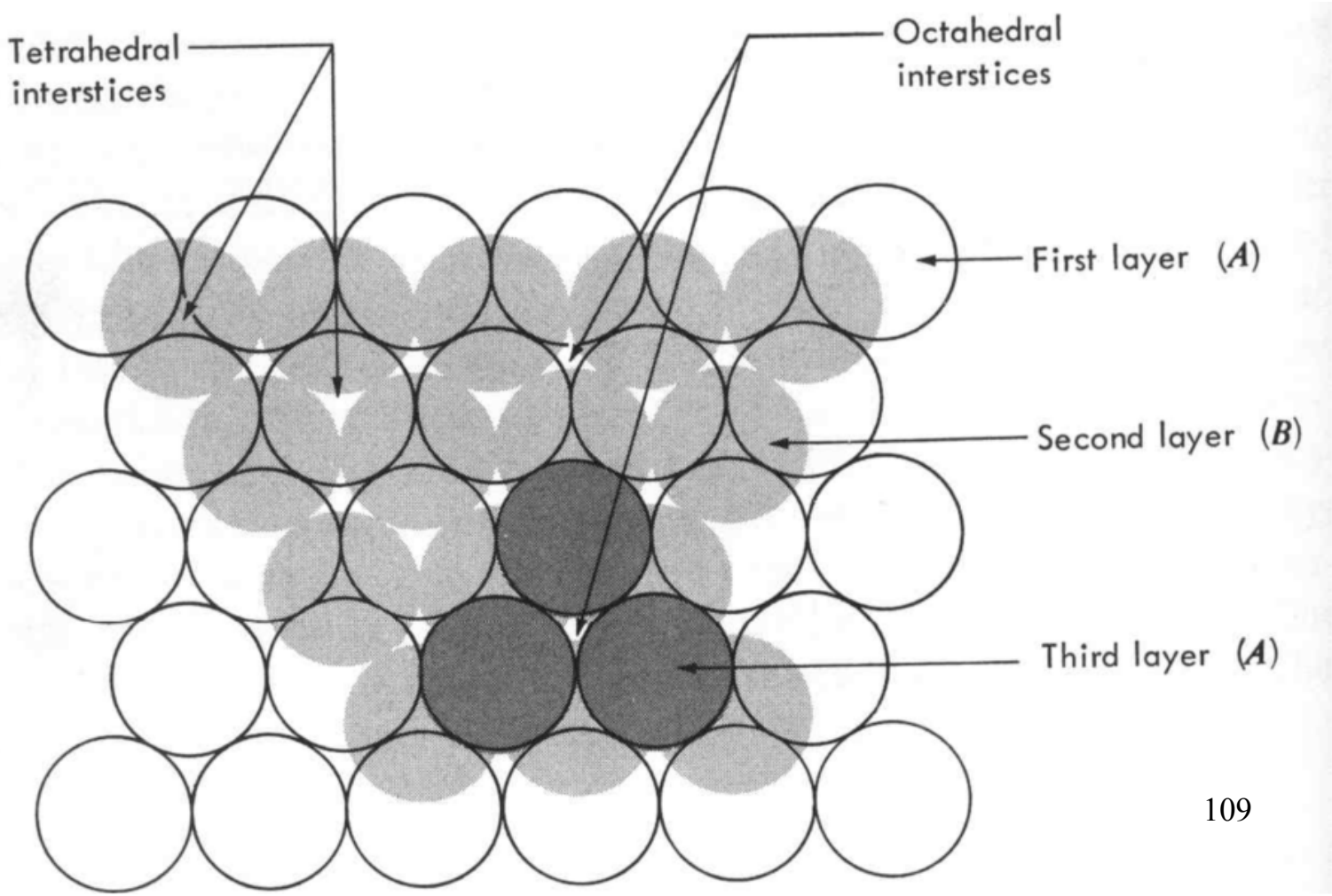


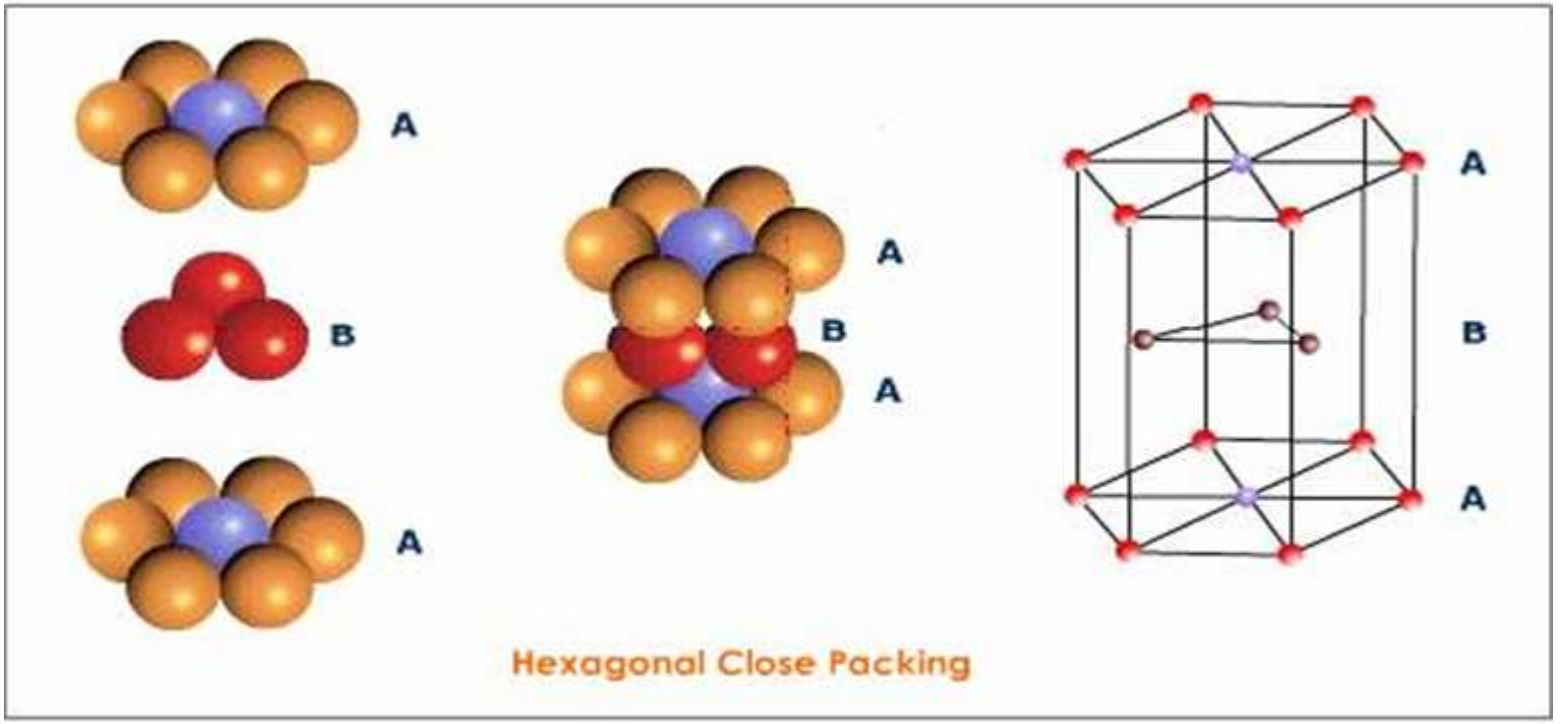
- **2D Projection**

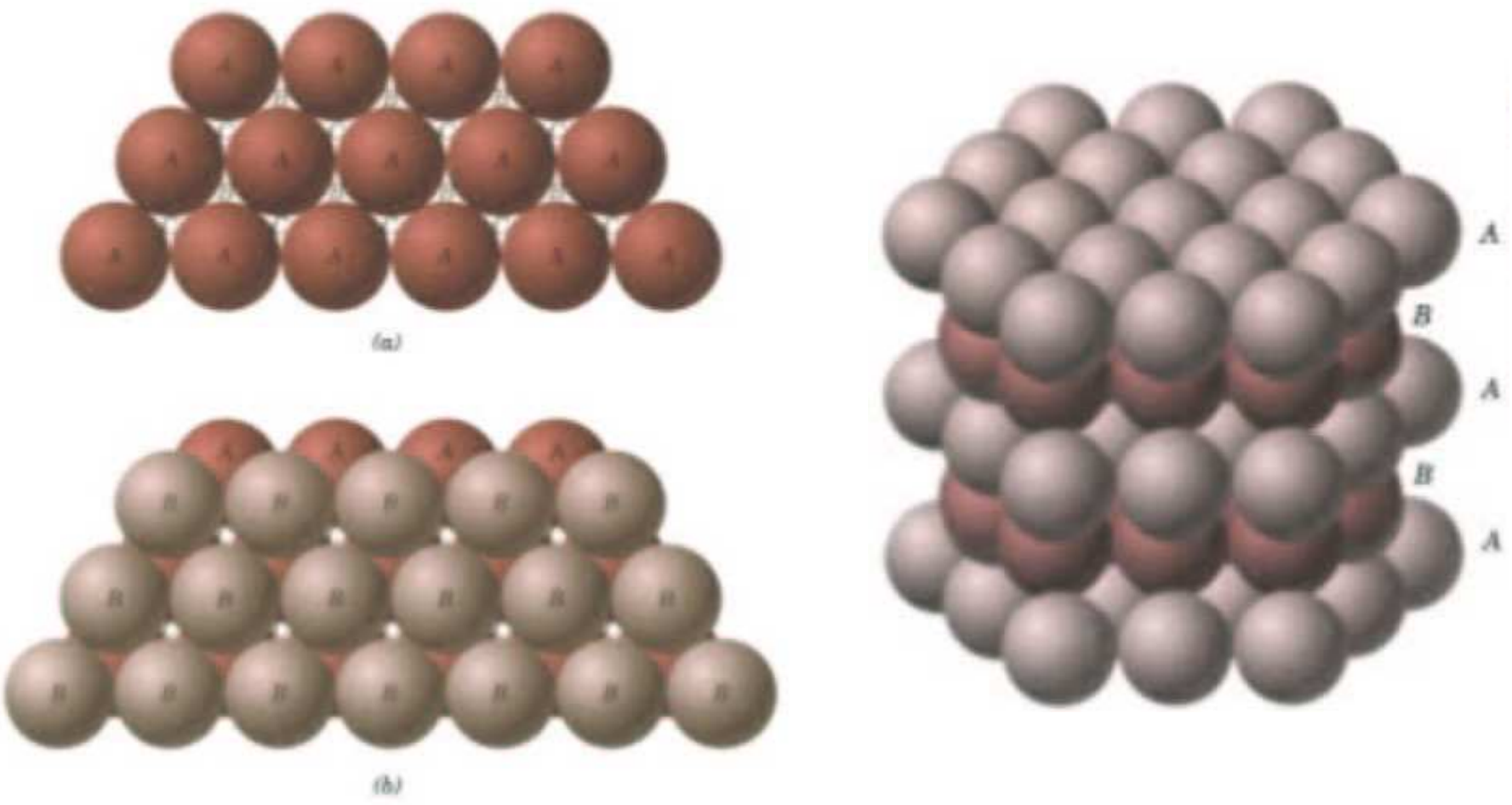


APF for a HCP structure = 0.74

در ساختار HCP، صفحه قاعده بلور بیشترین فشردگی اتمی را دارد (۱ صفحه فشرده) و مثل صفحه اکتاهدرال در ساختار FCC دارای ۳ جهت فشرده است.

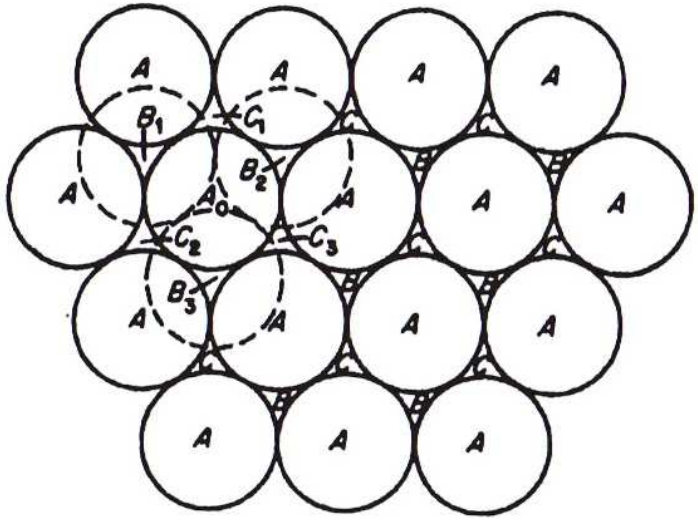



A
B
A
A
B
A
A
B
A
Hexagonal Close Packing



چیدمان متوالی صفحات اتمی در ساختار هگزاگونال فشرده به صورت ABABAB

عدد همسایگی در سیستم های FCC و HCP با توجه به شکل برابر ۱۲ است. (اتم های اطراف اتم A_0 را بشمارید!).



در ساختار (HCP)، هر اتم واقع در گوشه به ۶ سلول تعلق دارد و هر اتم واقع در مرکز هر قاعده به دو سلول مجاور هم متعلق است. با احتساب ۳ اتم موجود در درون ساختار، به هر سلول واحد ۶ اتم تعلق می‌گیرد.

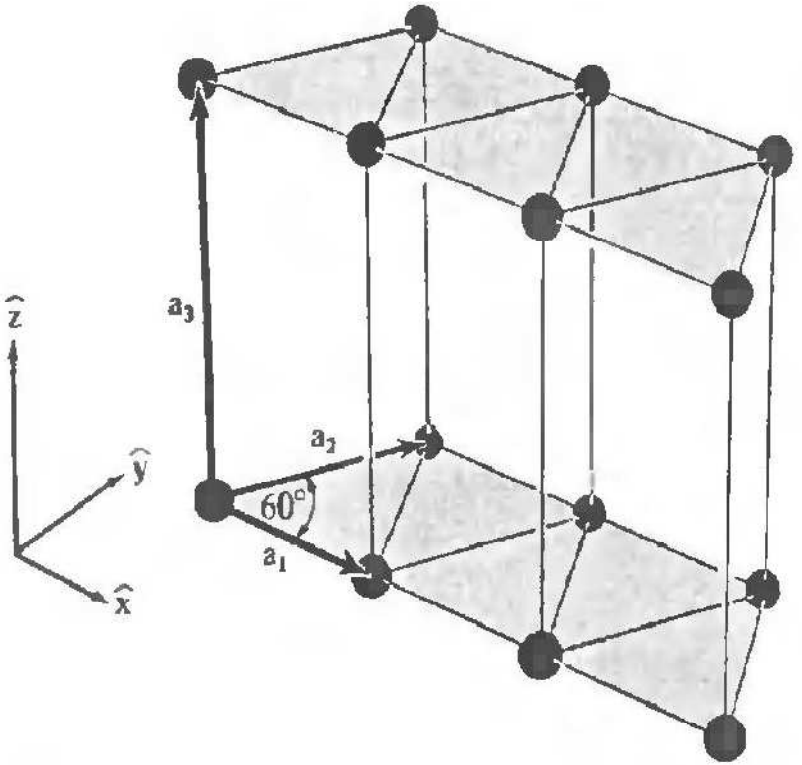
$$\left(12\times\frac{1}{6}\right)+\left(2\times\frac{1}{2}\right)+3=6$$

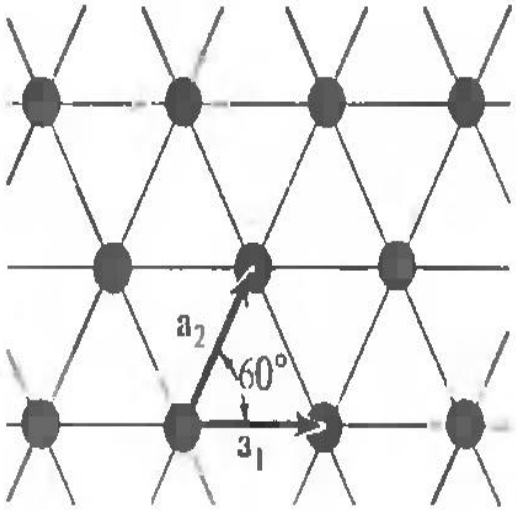
مقایسه سیستم های FCC و HCP نشان می دهد که عدد همسایگی در هر دو سیستم برابر ۱۲ و ضریب تراکم اتمی آنها برابر 0.74.

بنابراین دو سیستم از جهاتی مشابه هم هستند.

توالی چیدمان صفحات اتمی در شبکه FCC به صورت ABCABCABC... و در در ساختار HCP به صورت ABABAB... است.
بنابراین یک جابجایی عرضی در یکی از صفحات فشرده میتواند ساختمان شبکه را از HCP به FCC و یا بالعکس تغییر دهد.

Simple hexagonal Bravaise lattice





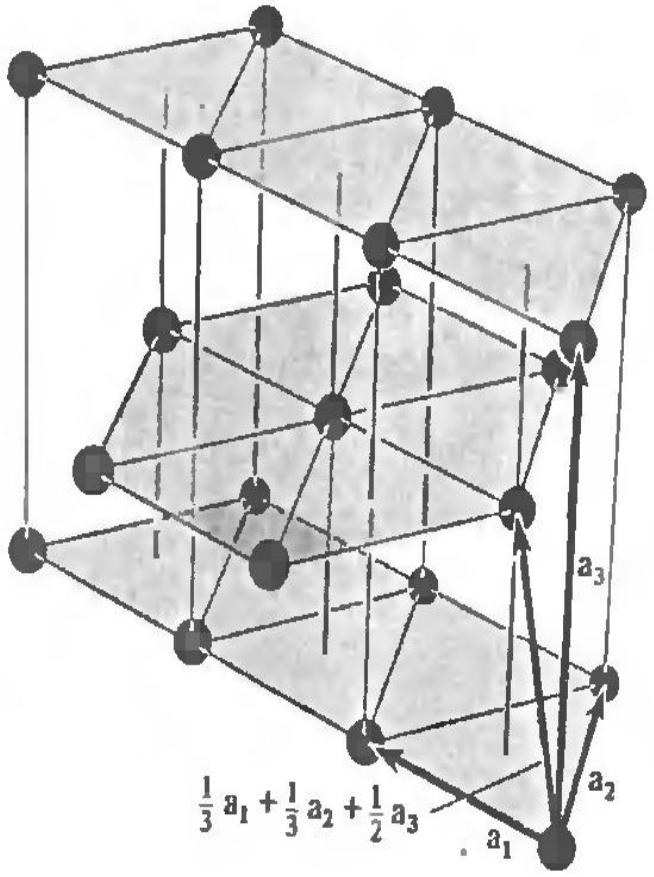
Primitive vectors

$$a\,\hat{\mathbf{x}}$$

$$\frac{a}{2}\hat{\mathbf{x}} + \frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{\mathbf{y}}$$

$$c\,\hat{\mathbf{z}}$$

Hexagonal closed –packed (hcp)



Basis

0

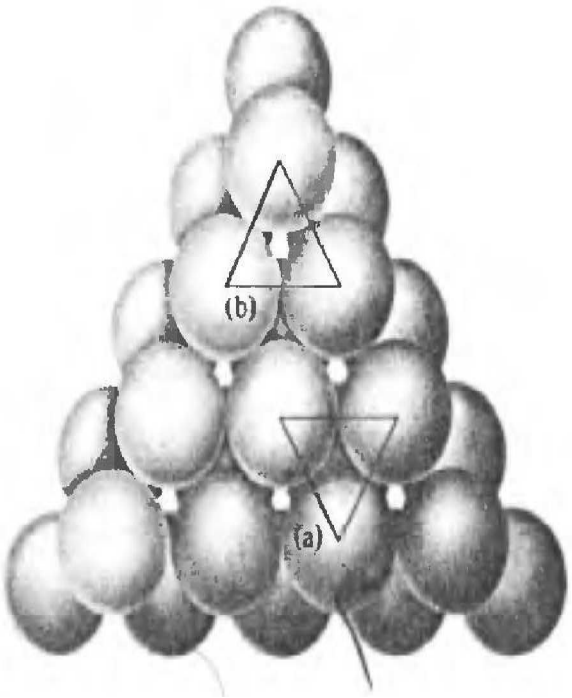
$$\frac{1}{3}\vec{a}_1+\frac{1}{3}\vec{a}_2+\frac{1}{2}\vec{a}_3$$

Primitive vectors

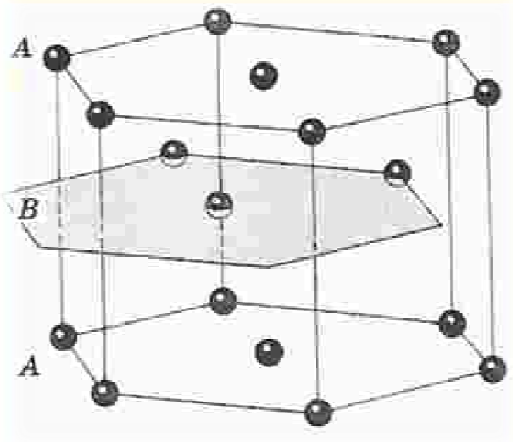
$$a\,\hat{\mathbf{x}}$$

$$\frac{a}{2}\hat{\mathbf{x}}+\frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{\mathbf{y}}$$

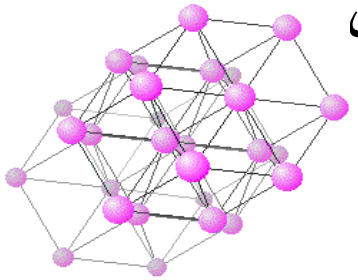
$$c\,\hat{\mathbf{z}}$$



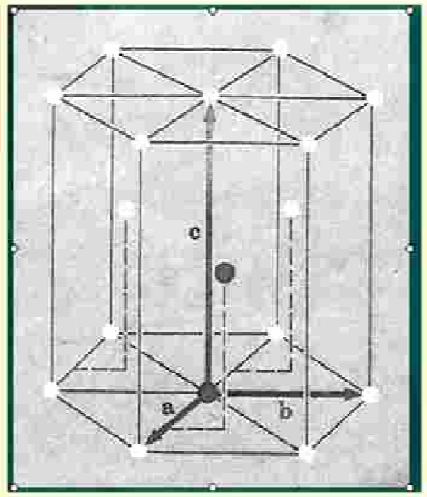
$$c=\sqrt{\frac{8}{3}}a=1.63299a$$



ساختار تنگ پکيده شش گوشي (hcp)، در اين ساختار مکان هاي اتمي يک شبکه فضايي را به وجود نمي آورد. شبکه فضايي يک شش گوشي ساده است که به هر نقطه شبکه آن پايه اي اتم يکسان مربوط مي



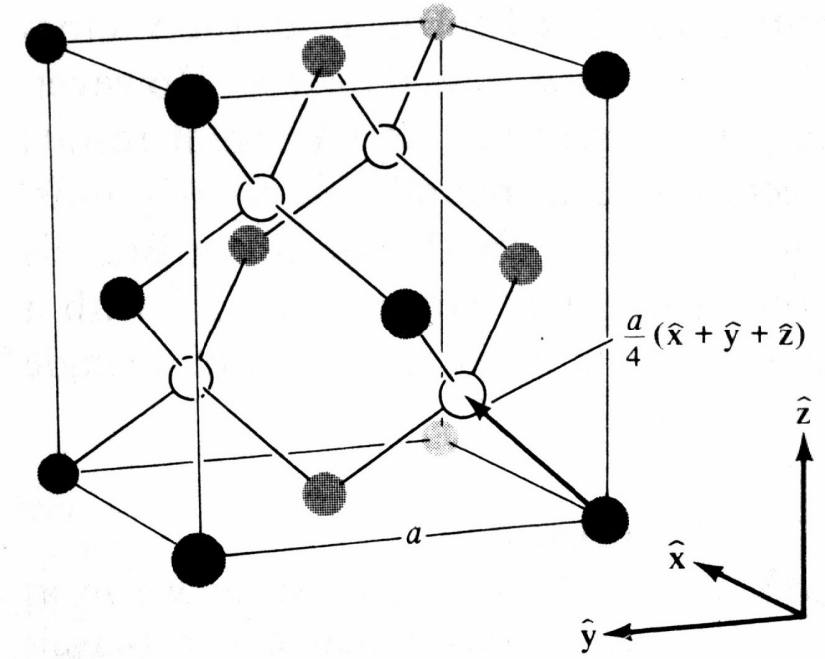
ياخته بسيط شش گوشي. a=b و زاويه بين آنها° 120 است محور C بر صفحه َa,b عمود است.



دو اتم مربوط به يک پايه با دايره هاي سياه نشان داده شده اند. يک اتم پايه در مبداء (000) و اتم ديگر در (2/1 3/1 3/2)

Diamond lattice

ساختار الماس را مي توان بصورت دو ساختار fccكه نسبت به يكديگر به اندازه يک چهارم قطر اصلي جابجا شده اند ، در نظر گرفت.



Basis

0

$$\frac{a}{4}\left(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z}\right)$$

Primitive vectors

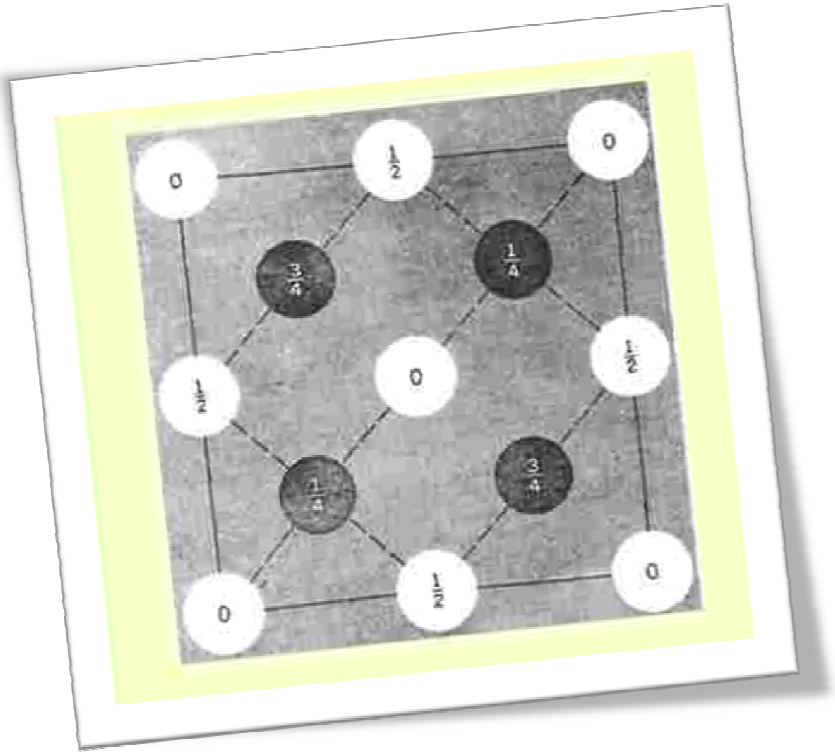
$$a\hat{x}$$

$$a\hat{y}$$

$$a\hat{z}$$

ساختار الماسي

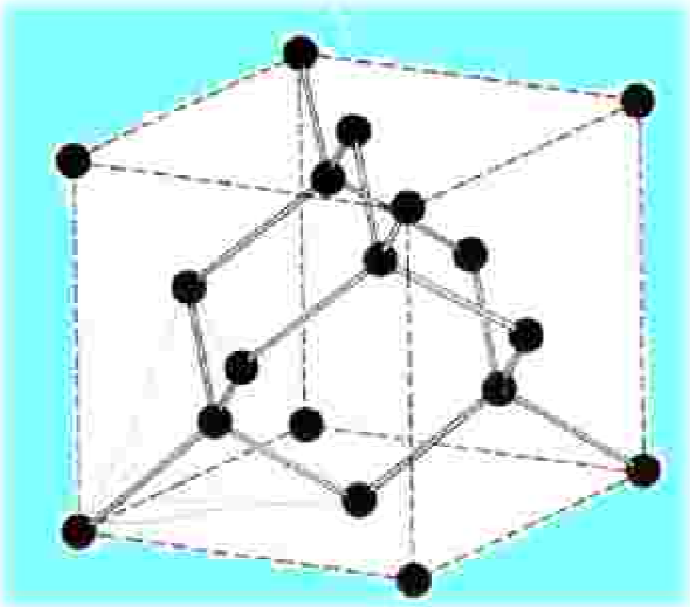
- ساختار الماسی ،ساختار نیمه رسانای سیلیسیم و ژرمانیم است و با ساختار چند نیم رسانای مهم با ترکیب دو تایی ارتباط دارد.
- شبکه فضایی الماس مکعبی مرکز سطحی است.



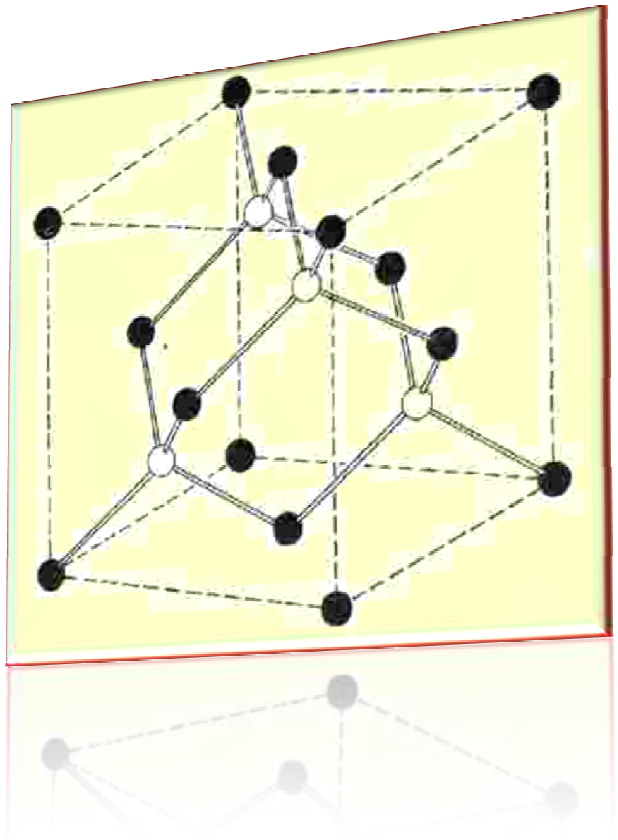
- **در ساختار الماسی به هر نقطه شبکه ای FCC پایه ی بسیطی شامل دو اتم یکسان با مختصات** 000 **و** 1/4 ¼ ¼ ¼ **مربوط میشود**
- **تصویرِ مکان اتم ها در یاخته مکعبی ساختارَ الماسی بر روی یک وجه مکعب. کسرها ارتفاع از قاعده را بر حسب طول یک ضلع مکعب مشخص می کنند.**

ساختار بلور الماس که در آن آرایش پیوند چار وجهي نشان داده شده است.

هر اتم چهار همسایه اول و 12 همسایه دوم دارد.



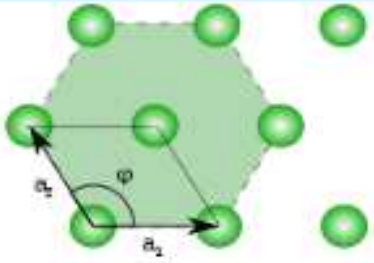
ساختار مكعبي روي سولفيد



ساختار مكعبي سولفيد روي از قرار دادن اتم هاي Znروي يک شبکه fccو اتم هاي Sرويي شبکه fccديگر نتيجه مي شود.

در اطراف هر اتم در فاصله هاي مساوي از آن چهار اتم از نوع مخالف قرار دارد که در گوشه هاي يک چهار وجهي منظم مرتب شده اند.

hexagonal



2D planes formed by equilateral triangles
Stack these planes on top of each other

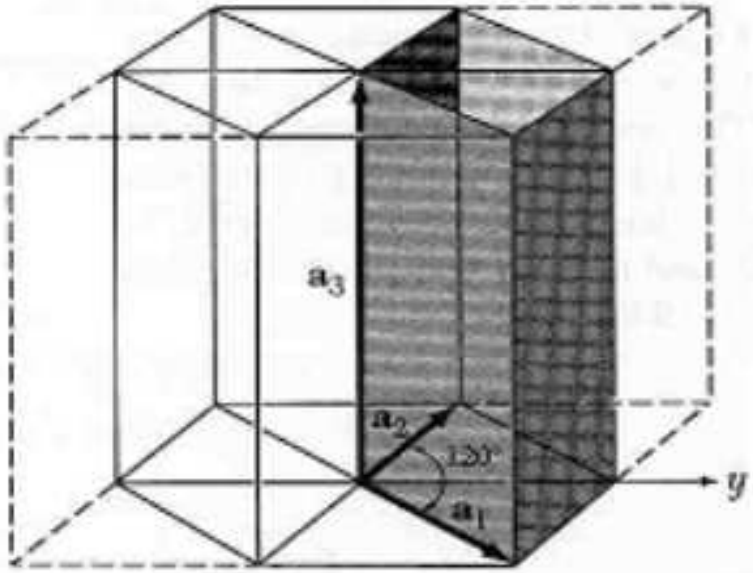


Figure 12 Relation of the primitive cell in the hexagonal system (heavy lines) to a prism of hexagonal symmetry. Here $a_1 = a_2 \neq a_3$.

Primitive cell: a right prism based on a rhombus with an included angle of 120 degree.

Volume (primitive cell):

$$Vol = Area \times height$$

$$= 2\left(\frac{1}{2} \times \frac{\sqrt{3}}{2} a_1^2\right) a_3 = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c$$