



رشد بلور

محمد احمدی دریاکناری



- ۱- نمره کوییز و تمرین ۳
- ۲- سمینار ۴
- ۳- نمره میانترم ۳ نمره
- ۴- نمره پایان ترم ۱۰



- crystal growth technology, K.Byrappa

- مقدمه ای بر رشد بلور اصول و تمرین، مولف اچ ال بالت، مترجم حمید رضا قلی دیزجی

- سایت های اینترنتی



برنامه درسی

هفته	موضوع
1 , 2	مقدمه ای بر کریستالوگرافی
3,4,5	نواقص کریستالی ، نابجایی ها و مکانیزم استحکام دهی و ساختار سرامیک ها
6	رشد از فاز جامد
7,8	رشد از مذاب
9, 10	رشد از محلول های مایع
11	رشد بلور از فاز بخار
12	رشد لایه های بلوری نازک

یک جلسه سمینار و یک جلسه میانترم



سمینارها

- ساختارهای کریستالی در زئولیت و روش های سنتز آنها و کاربرد آن
- الماس مصنوعی و روش های سنتز و کاربرد آن
- روش های سنتز نیتريد بورن مکعبی و کاربرد آن
- روش های سنتز Sic و کاربرد آن
- روش های سنتز YSZ و کاربرد آن
- روش های سنتز دی اکسید روی و کاربرد آن
- روش های سنتز گرافن و کاربرد آن
- روش های سنتز هیدروکسی آپاتیت
- روش های سنتز کاتد LMNO در باتری یون لیتیم
- روش های سنتز مکسین Mxenes و کاربرد آنها



مقدمه

- مواد از دیدگاه‌های مختلف قابل تقسیم‌بندی هستند. از یک دیدگاه مواد به سه دسته جامد، مایع و گاز، از دیدگاهی دیگر مواد به سه دسته فلز، سرامیک و پلیمر و از دیدگاه رسانایی، مواد به سه دسته رسانا، نیمه‌رسانا و عایق تقسیم می‌شوند.
- از منظر دیگر، مواد به دو دسته بلوری و آمورف تقسیم می‌شوند.



مقدمه

- شناخت صحیح فلزات، سرامیکها و برخی از مواد پلیمری بدون توجه به ساختار اتمی و کریستالی آنها میسر نیست.
- اتم ها و مولکول ها با نظم قابل تحسینی در کنار هم قرار گرفته و نتیجه چنین نظمی ایجاد ساختار های بلورینی است که از تنوع نسبتا بالایی برخوردار می باشند.
- براساس پژوهش های انجام شده، این بلور ها در شکل مناسبی دسته بندی شده اند و از آنجایی که حضور هر اتم در موقعیت خاص و در راستای تعیین شده اهمیت زیادی را در تعیین کلیه خواص مواد ایجاد می کنند. این محل ها، جهت ها و همچنین صفحاتی که اتم ها روی آن ها واقع شده اند، تعیین اندیس شده اند.



سیستم های کریستالی

سلول واحد: کوچکترین حجم اتم تکراری که می تواند الگوهای یک شبکه کریستالی را در برگیرد

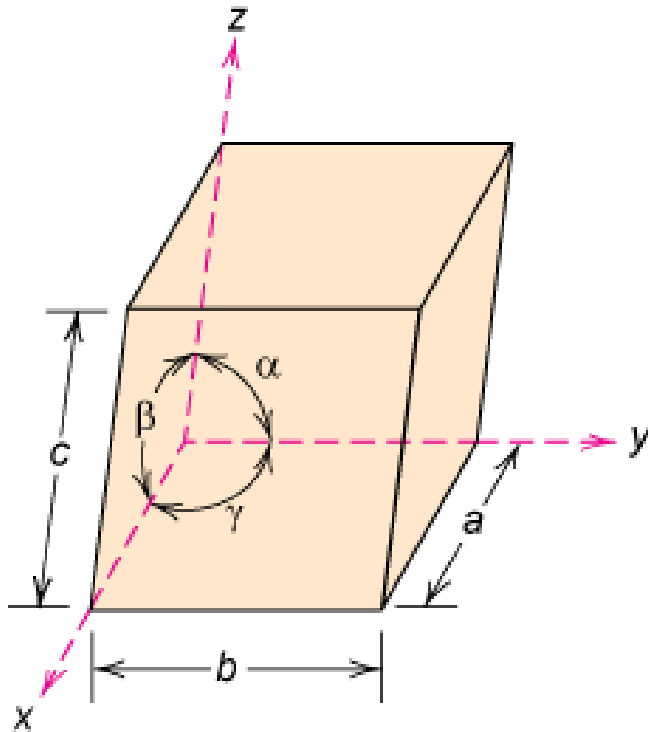


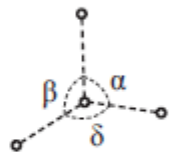
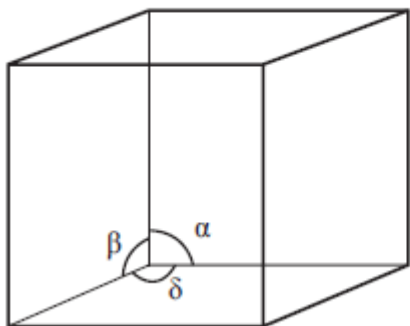
Fig. 3.4, Callister 7e.

سیستم های کریستالی 7

شبکه ها 14

a, b, c ثابت های شبکه هستند

سیستم مکعبی



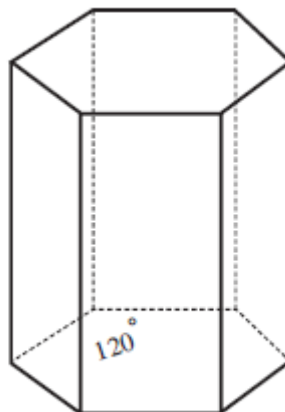
$$a = b = c$$

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

$$a = b \neq c$$

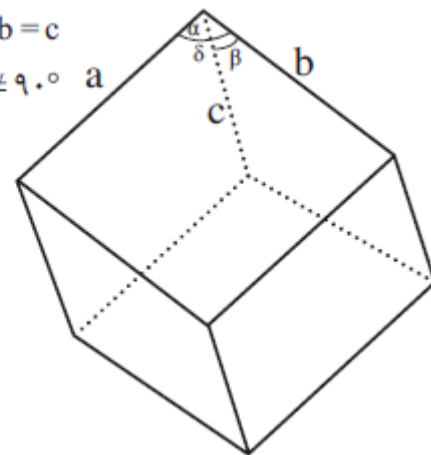
$$\alpha = \beta = 90^\circ$$

$$\gamma = 120^\circ$$

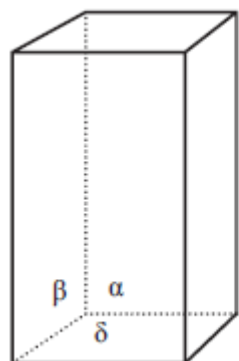


$$a = b = c$$

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

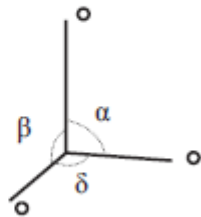


سیستم هگزاگونال



$$a = b \neq c$$

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

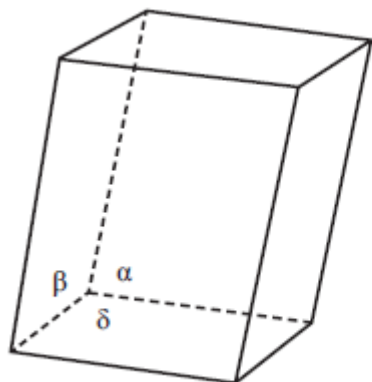
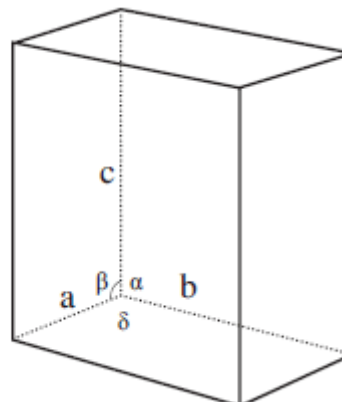


سیستم تراگونال

$$a \neq b \neq c$$

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

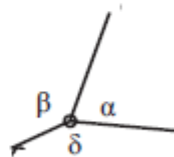
سیستم ارتورویک



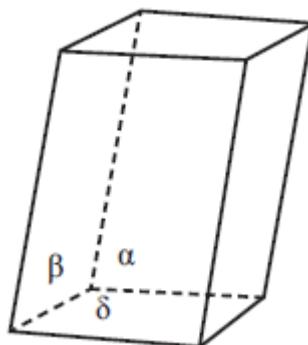
$$a \neq b \neq c$$

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

$$\beta > 90^\circ$$

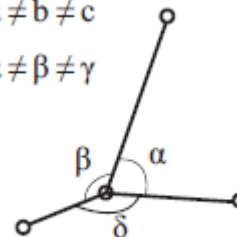


مونوکلینیک



$$a \neq b \neq c$$

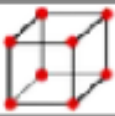

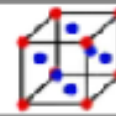
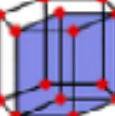

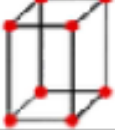
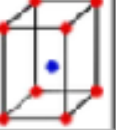
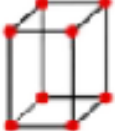
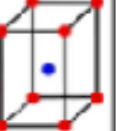
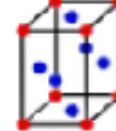
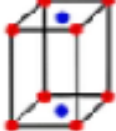
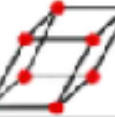
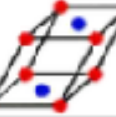
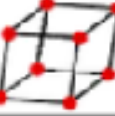
$$\alpha \neq \beta \neq \gamma$$



تری کلینیک



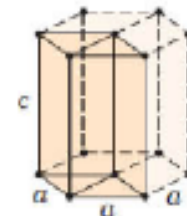
شبکه های براوه

سیستم بلوری	پارامتر های شبکه	ساده	مرکز پر	وجه پر	مرکز دار
مکعبی	$a=b=c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				
هگزاگونال	$a_1 = a_2 = a_3 \neq c$ $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 120^\circ, \gamma = 90^\circ$				
رومبوهدرال	$a=b=c$ $\alpha - \beta - \gamma \neq 90^\circ$				
تراگونال	$a=b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				
اورتورومبیک	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				
مونوکلینیک	$a \neq b \neq c$ $\gamma \neq 90^\circ, \beta = \alpha$				
تری کلینیک	$a \neq b \neq c$ $90^\circ \neq \gamma \neq \beta \neq \alpha$				

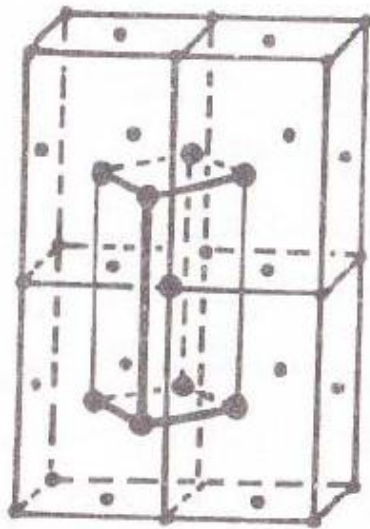
Hexagonal

$$a = b \neq c$$

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

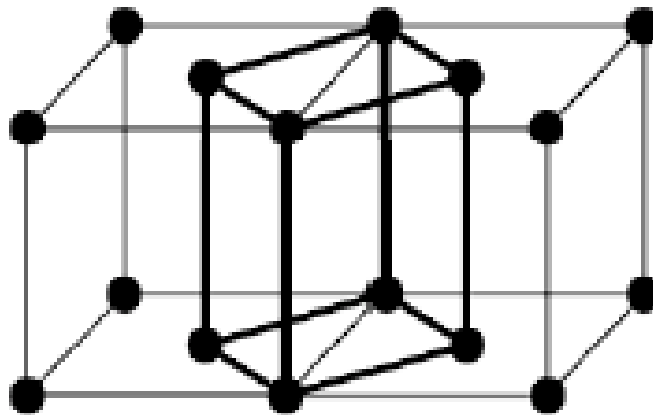


چرا تتراگونال مرکزسطحی نداریم؟



- ثابت کنید شبکه مکعبی با قاعده مرکزدار تبدیل به شبکه تتراگونال هست؟

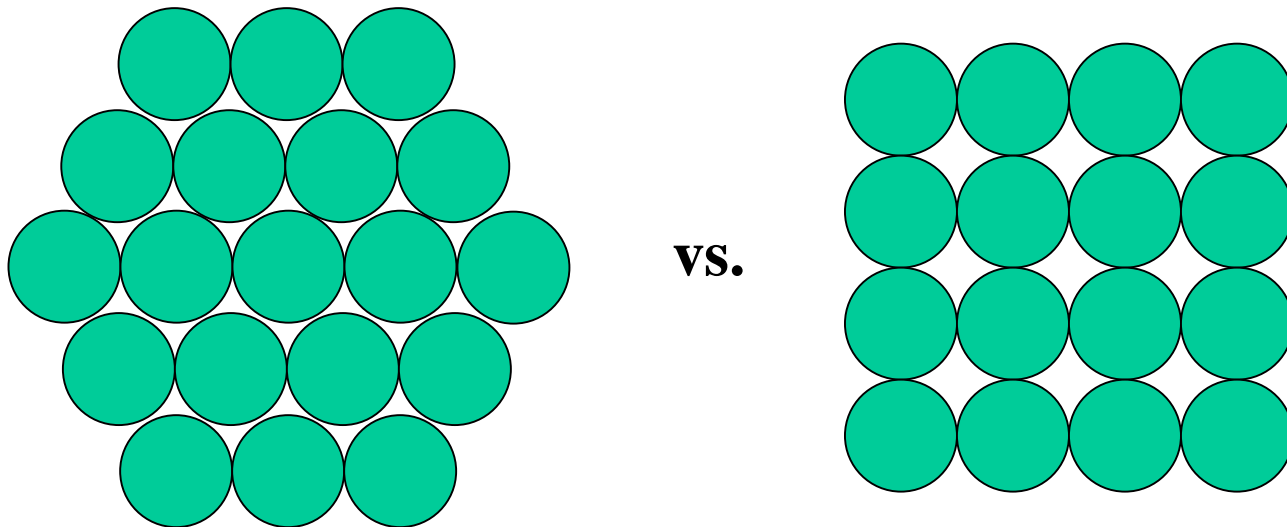
شبکه مکعبی با قاعده مرکز دار قابل تبدیل به شبکه تتراگونال است.



ساختار کریستالی فلزات

- چگونه می توان اتم های فلزی را برای به حداقل رساندن فضای خالی مرتب کرد؟

دو بعدی



اکنون این لایه های ۲ بعدی را برای ایجاد ساختار ۳ بعدی بسازید

ساختارهای کریستالی فلزی

- تمایل به فشردگی زیاد دارد.

- دلایل برای فشردگی زیاد:

- به طور معمول تنها یک عنصر اتمی وجود دارد بنابراین شعاع اتمی همه آنها یکسان هست

- بین اتم هایش پیوند فلزی هست و پیوندهای فلزی جهتدار نیست.

- فواصل نزدیکترین همسایه به منظور کاهش دادن انرژی پیوند، تمایل دارد کم باشد

- ساده ترین ساختارهای کریستالی دارد.

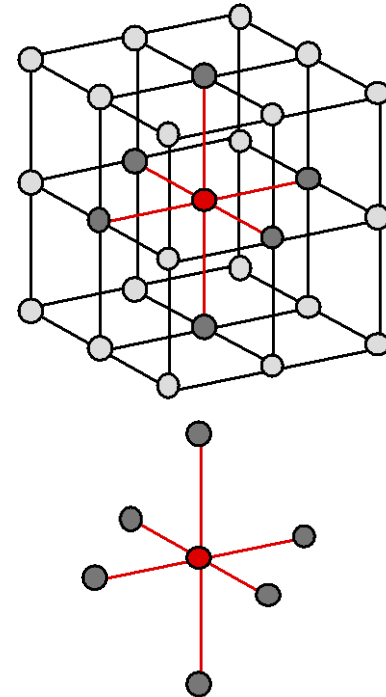
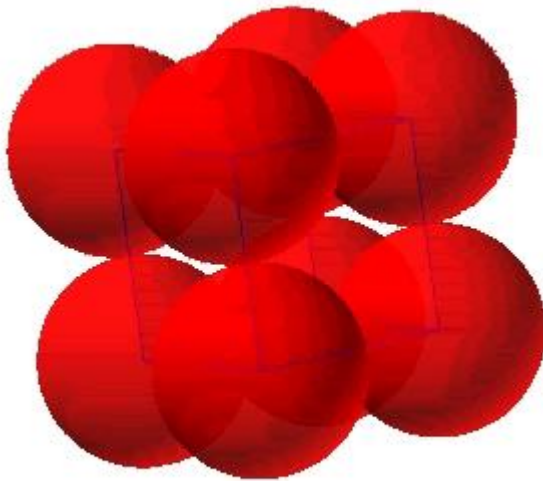
ما در این ارائه، سه نوع ساختار کریستالی بررسی می کنیم



(SC) ساختار کریستالی مکعبی

• در نتیجه فشردگی کم، کمیاب هستند (تنها پلوتونیوم این ساختار دارد)

- $\# \text{ عدد همسایگی} = 6$
(نزدیکترین همسایه ها $\#$)



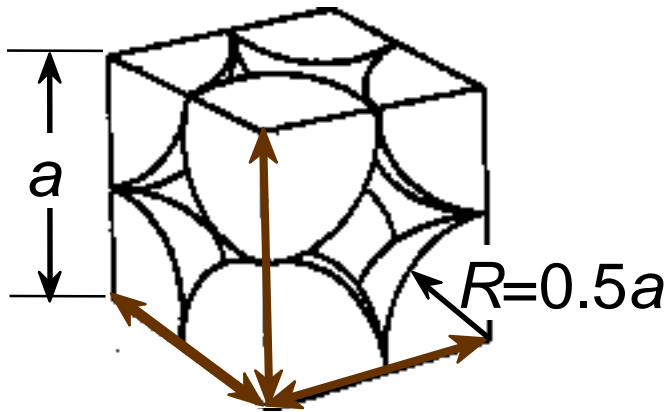
(Courtesy P.M. Anderson)

(APF) فاکتور فشردگی اتم

$$APF = \frac{\text{حجم اتم ها در سلول واحد}^*}{\text{حجم واحد شبکه}}$$

*فرض می شود اتم ها به صورت کره های سخت باشند

0.52 = برای یک ساختار مکعبی



$$APF = \frac{\text{حجم اتم} \times 1}{\text{حجم سلول واحد}}$$

$\frac{4}{3} \pi (0.5a)^3$

a^3

جهات فشرده]

8 x 1/8 = در بر می گیرد

1 سلول واحد/اتم

Adapted from Fig. 3.23,
Callister 7e.

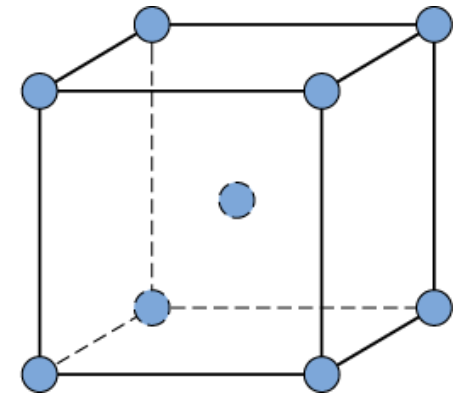
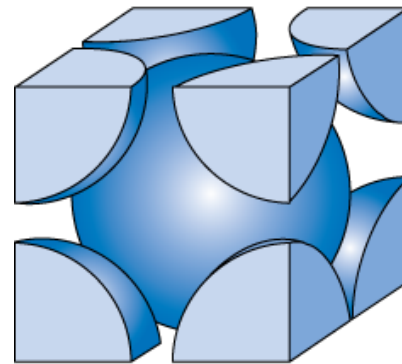
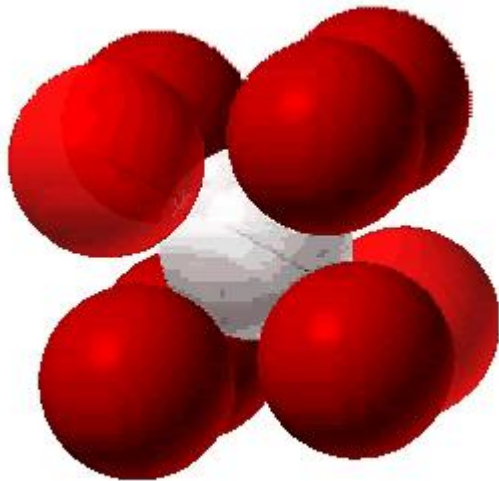


(BCC) ساختار مکعبی مرکزدار

اتم ها با همدیگر در امتداد قطرهای مکعب با هم در تماسند.
توجه: همه اتم ها یکسان هستند، تنها اتم مرکز برای دیدن ساده متفاوت شده است

مولیبدن, تانتالوم, $Cr, W, Fe (\alpha)$: مثال

- عدد همسایگی $\# = 8$

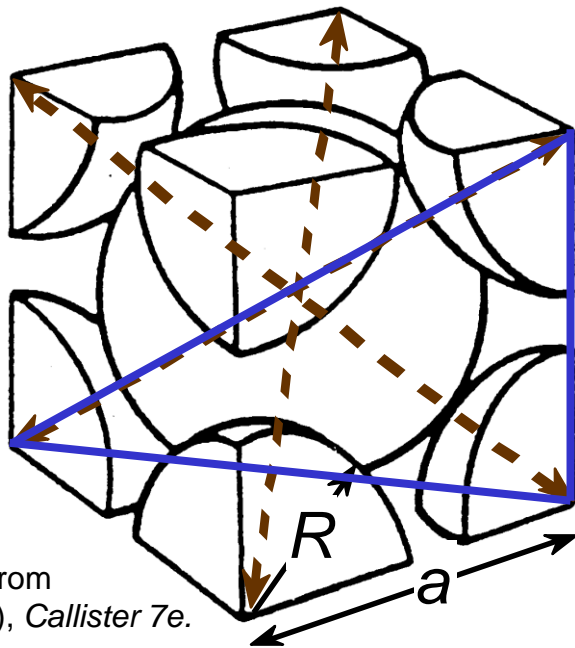


Adapted from Fig. 3.2,
Callister 7e.

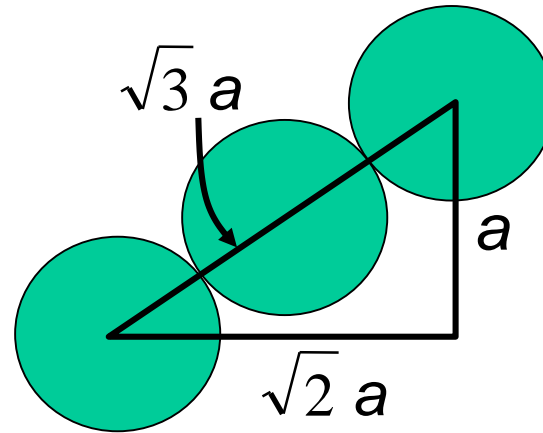
1/8 \times گوشه ها 8 + مرکز 1: سلول واحد/اتم ها 2

BCC : فاکتور فشردگی اتمی

برای ساختار مکعبی مرکزدار = 0.68



Adapted from Fig. 3.2(a), Callister 7e.



جهات فشرده :

$$\text{طول} = 4R = \sqrt{3} a$$

$$\text{APF} = \frac{\text{اتم ها}}{\text{سلول واحد}} \rightarrow 2 \frac{4}{3} \pi (\sqrt{3}a/4)^3 \leftarrow \frac{\text{حجم}}{\text{اتم}}$$

$$\text{APF} = \frac{\quad}{a^3} \leftarrow \frac{\text{حجم}}{\text{سلول واحد}}$$

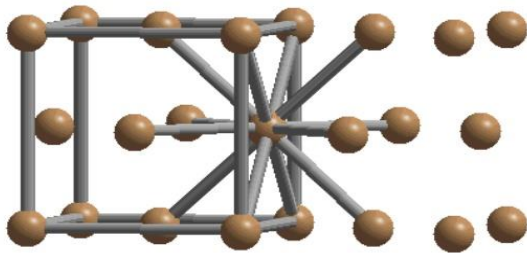


FCC) ساختار مکعبی درسطوح مرکزدار

• اتم ها با همدیگر در امتداد قطرهای سطح با هم در تماسند.

توجه: همه اتم ها یکسان هستند، تنها اتم های مرکز سطوح برای دیدن ساده متفاوت شده است

FCC-coordination number

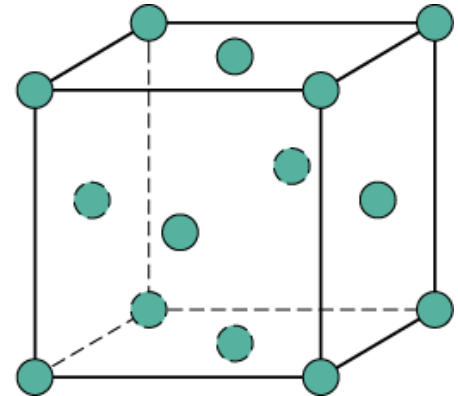
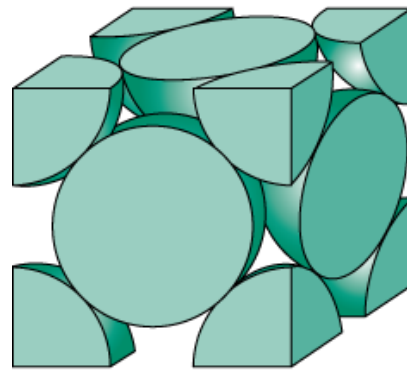


$$4+4+4=12$$

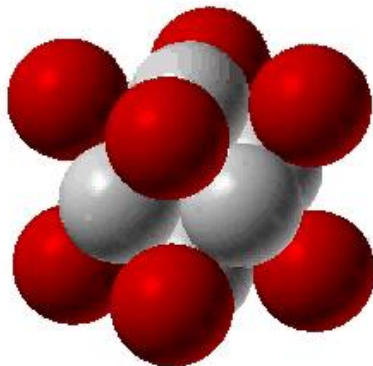
Hari Prasad

مثال: Al, Cu, Au, Pb, Ni, Pt, Ag

• عدد همسایگی = 12



Adapted from Fig. 3.1, Callister 7e.



(Courtesy P.M. Anderson)

$1/8 \times 8$ گوشه ها + $1/2 \times 6$ سطح : سلول واحد / ۴ اتم



FCC : فاکتور فشردگی اتمی

0.74 = برای ساختار مکعبی
بیشترین فاکتور فشردگی اتمی در این ساختار

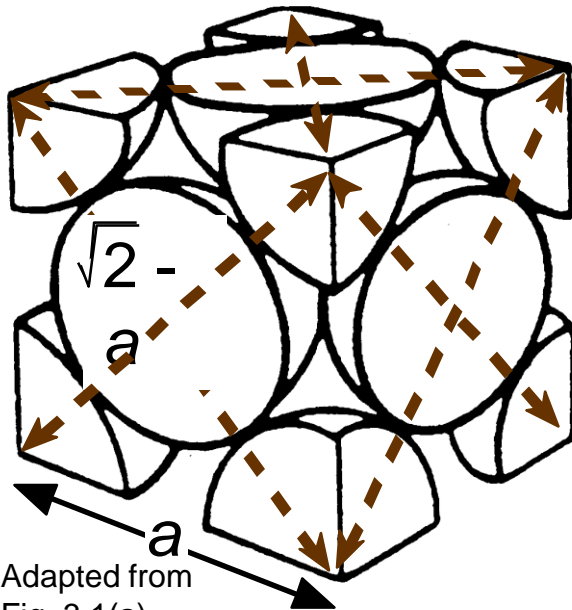
جهت فشردده

$$\text{طول} = 4R = \sqrt{2} a$$

سلول واحد در بر می گیرد:

$$6 \times 1/2 + 8 \times 1/8$$

$$= 4 \text{ سلول واحد/ اتم}$$



Adapted from
Fig. 3.1(a),
Callister 7e.

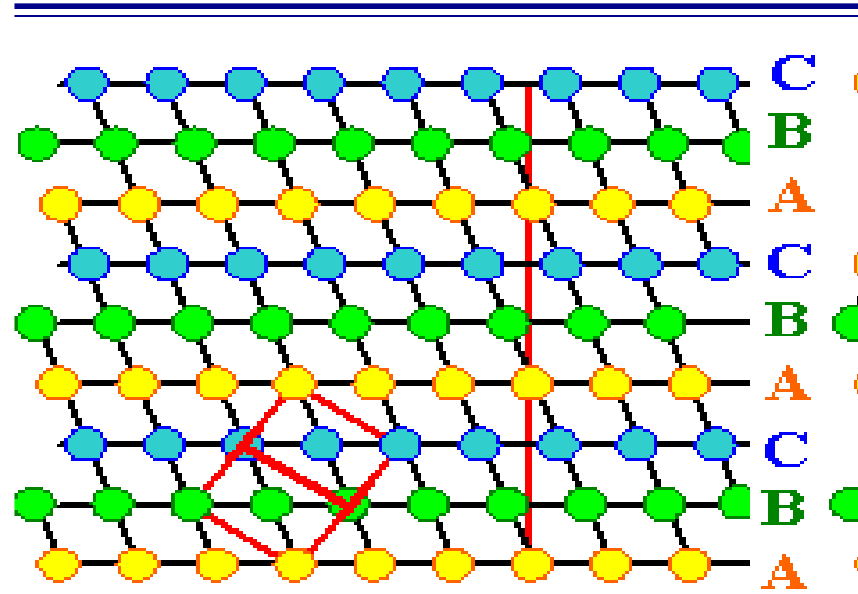
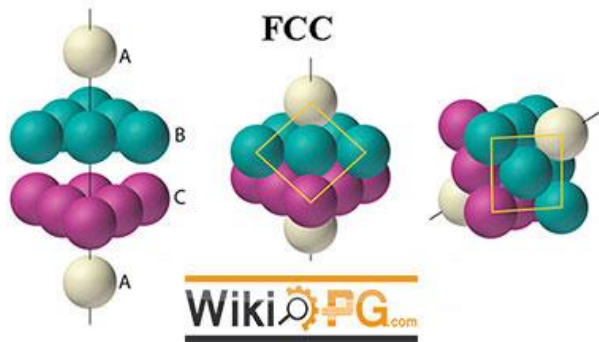
$$\text{APF} = \frac{\text{اتم ها}}{\text{سلول واحد}} \rightarrow 4 \frac{4}{3} \pi (\frac{\sqrt{2}a}{4})^3 \leftarrow \frac{\text{حجم}}{\text{اتم}}$$

$$\frac{a^3 \leftarrow \frac{\text{حجم}}{\text{سلول واحد}}}{a^3}$$



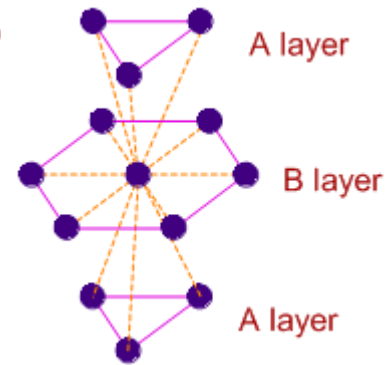
FCC ترتیب انباشتگی

ABCABC... ترتیب انباشتگی



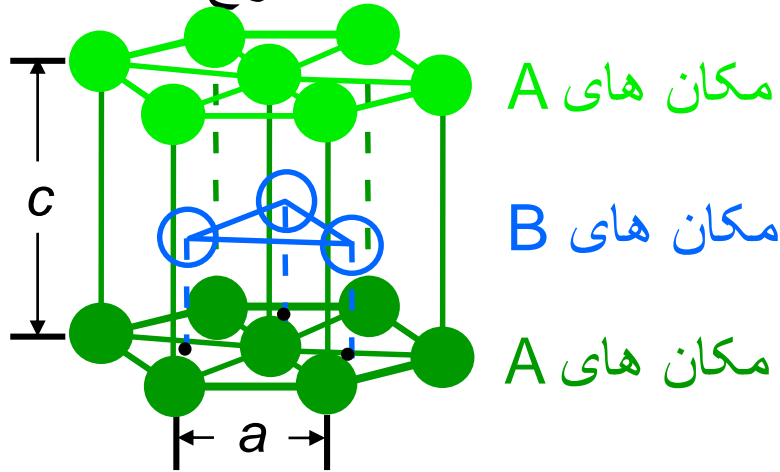
سلول واحد FCC

(HCP) ساختار فشرده هگزا گونال

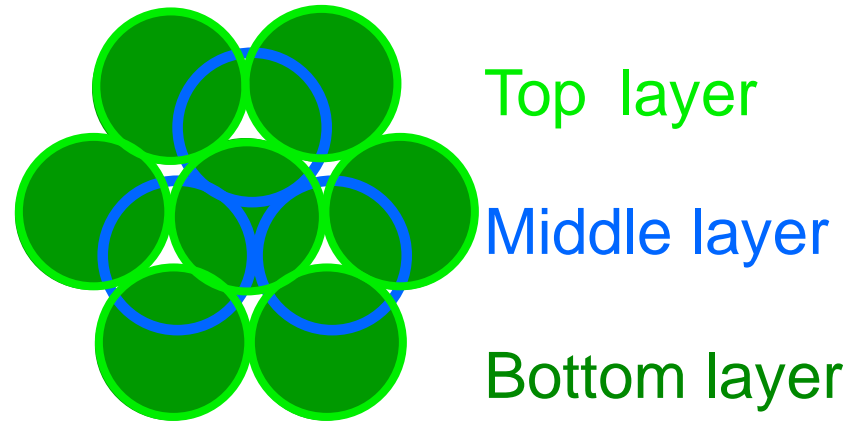


ترتیب انباشتگی ABAB...

• طرح سه بعدی



• طرح دو بعدی



عدد همسایگی = ۱۲

• فاکتور فشردگی اتم ها = 0.74

• $c/a = 1.633$

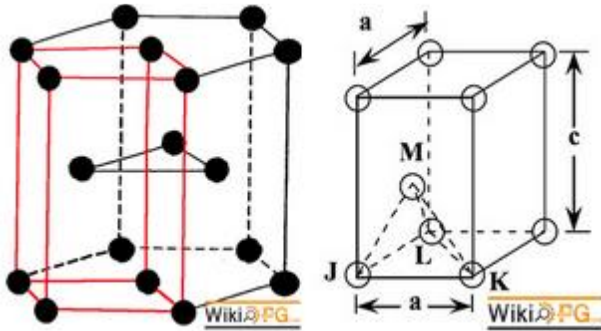
سلول واحد/اتم ها 6

مثال: Cd, Mg, Ti, Zn



محاسبه c/a در سلول واحد hcp

برای محاسبه نسبت ایده آل c/a در ساختار hcp ابتدا باید سلول واحد hcp را به سه بخش تقسیم نمود. شکل زیر نشان دهنده یک سوم سلول واحد hcp است. در شکل زیر چهار وجهی JKLM را باید در نظر گرفت. فاصله نقطه M از دو صفحه قاعده برابر با $c/2$ است. بنابراین طول MH برابر با $c/2$ خواهد بود.



از آنجایی که اتم های موجود در نقاط J، K و M در تماس با یکدیگر قرار دارند، بنابراین:

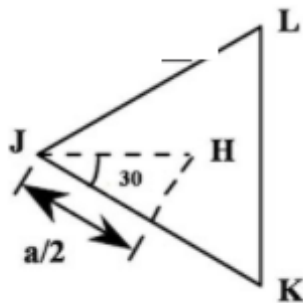
$$JM = JK = 2R = a$$

$$(JM)^2 = (JH)^2 + (MH)^2$$

در مثلث JHM رابطه روبرو برقرار است:
 $a^2 = (JH)^2 + (c/2)^2$ (رابطه 1)

چون مثلث JKL متساوی الاضلاع است بنابراین:

$$\cos 30 = \frac{a/2}{JH} = \frac{\sqrt{3}}{2} \Rightarrow JH = \frac{a}{\sqrt{3}}$$



با قرار دادن عبارت فوقی در رابطه 1:

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

$$\Rightarrow a^2 - \frac{a^2}{3} = \frac{c^2}{4} \Rightarrow \frac{2a^2}{3} = \frac{c^2}{4}$$

$$\frac{c^2}{a^2} = \frac{8}{3} \Rightarrow \frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1.633$$

$$\begin{aligned}
 \text{APF} &= \frac{N_{\text{atoms}} V_{\text{atom}}}{V_{\text{crystal}}} \\
 &= \frac{6(4/3)\pi r^3}{[(3\sqrt{3})/2](a^2)(c)} \\
 &= \frac{6(4/3)\pi r^3}{[(3\sqrt{3})/2](2r)^2(\sqrt{\frac{2}{3}})(4r)} \\
 &= \frac{6(4/3)\pi r^3}{[(3\sqrt{3})/2](\sqrt{\frac{2}{3}})(16r^3)} \\
 &= \frac{\pi}{\sqrt{18}} \\
 &\approx 0.74.
 \end{aligned}$$



دانسیتہ تئوری

$$\rho = \frac{\text{جرم اتم ہا در سلول واحد}}{\text{حجم کلی سلول واحد}} = \text{دانسیتہ}$$

$$\rho = \frac{nA}{V_C N_A}$$

N_A	A	
n	x	$\Rightarrow x = \frac{nA}{N_A}$

n = سلول واحد/تعداد اتم ہا

A = وزن اتمی

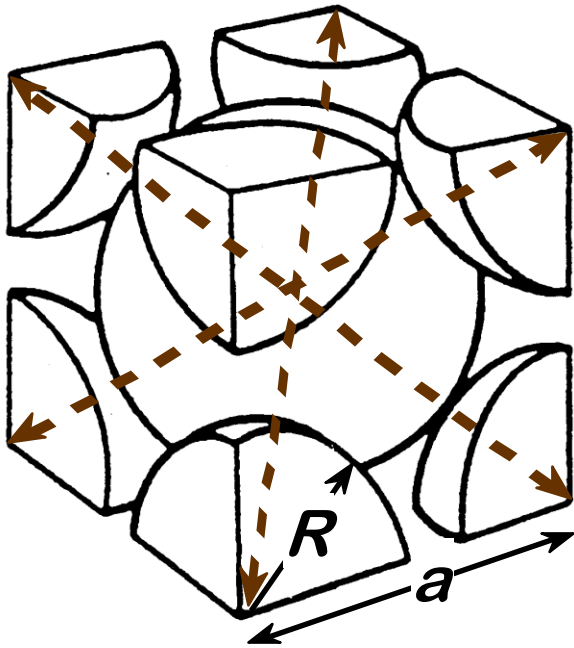
V_C = حجم = a^3

N_A = عدد آواگادرو

= مول/اتم ہا 6.023×10^{23}



دانسیتہ تئوری



- مثال: Cr (BCC)

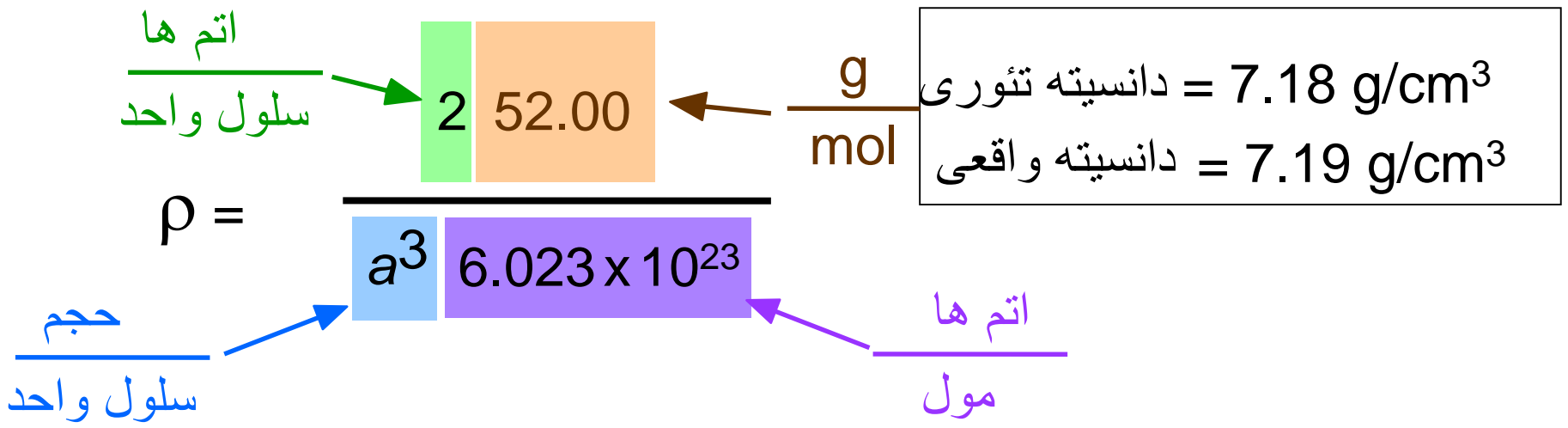
$$A = 52.00 \text{ g/mol}$$

$$R = 0.125 \text{ nm}$$

$$n = 2$$

$$a = 4R\sqrt{3} = 0.2887 \text{ nm}$$





- فلز نیکل دارای بلور مکعبی مرکز سطحی FCC می باشد، شعای اتمی آن برابر ۱,۲۴۶ آنگستروم و جرم اتمی آن برابر ۵۸,۷۱ گرم بر مول می باشد. دانسیته تئوری این فلز به دست آورید؟

$$\rho = \frac{\text{جرم اتم ها در سلول واحد}}{\text{حجم کلی سلول واحد}} \quad \rho = \frac{nA}{V_C N_A}$$

$$n = 4 \text{ = سلول واحد/ تعداد اتم ها}$$

$$A = 58.71 \text{ = وزن اتمی}$$

$$V_C = a^3 \text{ = حجم}$$

$$V_C = 43.77 * 10^{-24}$$

$$4R = \sqrt{2} a \rightarrow a = 3.524 * 10^{-8} \text{ cm}$$

$$N_A = 6.023 * 10^{23} \text{ = عدد آوگادرو مول/ اتم ها}$$

$$\rho = 8.91 \text{ gr/cm}^3$$



- فلز تیتانیوم در دمای معمولی دارای ساختار بلوری هگزاگونال پیشرفته HCP می باشد، با توجه به اینکه شعاع متوسط اتمی این عنصر فلزی تقریباً $0,1446$ نانومتر و وزن اتمی آن برابر $47/9$ گرم بر مول می باشد، دانسیته تئوری آن را به دست آورید؟



سیستم	γ	β	α	c	b	a	فرمول شیمیایی	
هگزاگونال ارتورمیک منوکلینیک مکعبی تتراگونال تریگونال	$108/5^\circ$	$112/3^\circ$	$97/5^\circ$	8/86	7/12	5/57	Ti ₅ O ₉	
	90°	90°	90°	4/05	4/05	4/05	Al	
				4/95		2/66	Zn	
				4/37	3/56	11/5	V ₂ O ₅	
		$117/7^\circ$		12/48	6/34	6/80	NaSb	
				4/27			Cu ₂ O	
				2/95		4/59	TiO ₂	
			$46/1^\circ$			6/36	CaCO ₃	
		90°	90°	90°	6/74	5/09	4/52	Fe ₃ C
		$110/5^\circ$	$101/2^\circ$	$92/4^\circ$	9/19	9/18	9/07	P ₄ S ₁₀
منوکلینیک مکعبی	90°	$80/1^\circ$		3/86	5/62	7/05	Pb ₂ O ₃	
	90°	90°	90°	5/63	10/59	10/59	β -U	
	90°	$89/9^\circ$	90°	3/82	7/50	7/27	W ₂ O ₃	
					4/44		MgO	
تریگونال	$55/3^\circ$	$55/3^\circ$	$55/3^\circ$	5/13	5/13	5/13	Al ₂ O ₃	
			$53/2^\circ$			6/76	FeCl ₃	
	90°	90°	90°	6/17	5/17	3/53	AgNO ₂	
	120°	90°	90°	7/37	4/52	4/52	H ₂ O	
ارتورمیک تتراگونال				4/20	6/43	6/24	CaCl ₂	
				6/37	3/87		CaC ₂	



بلور میکروکلین KAlSi_3O_8 که ساختار تری کلینیک دارد.

<https://fa.wikipedia.org/wiki/%D9%85%DB%8C%DA%A9%D8%B1%D9%88%DA%A9%D9%84%DB%8C%D9%86>

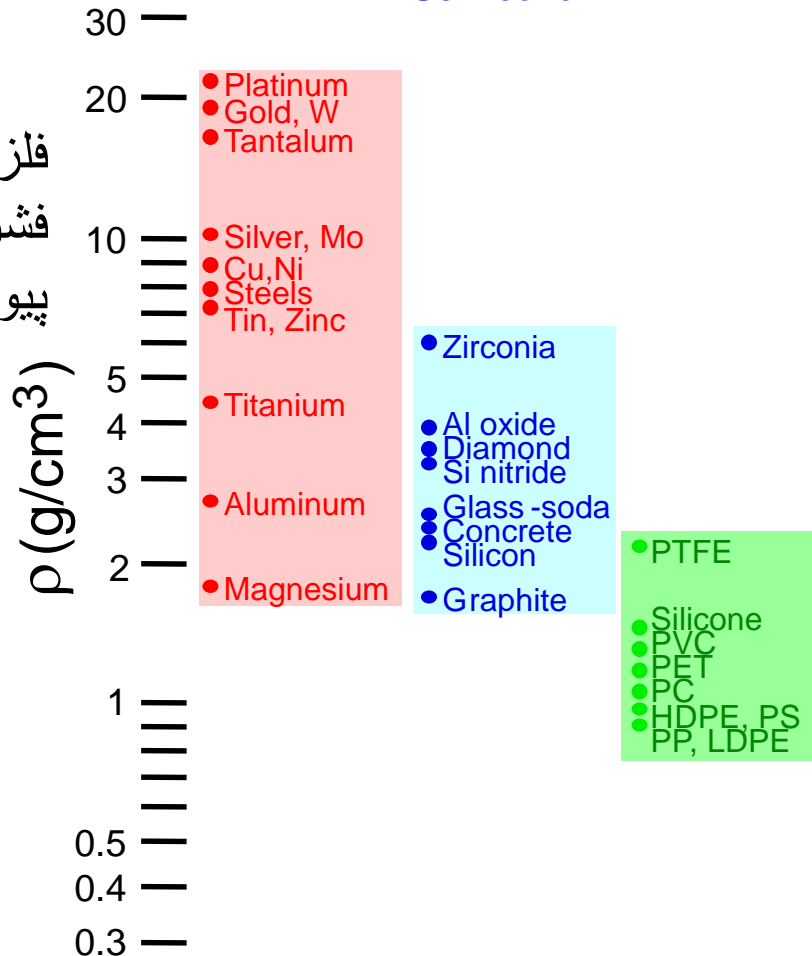


کلاس های دانسیته مواد

به طور کلی فلزات ρ > سرامیک ها ρ > پلیمر ها ρ

Metals/ Alloys Graphite/ Ceramics/ Semicond Polymers

چرا؟
 فلزات دارند...
 فشردگی زیاد
 پیوند فلزی و اغلب جرم اتمی زیاد دارند
 سرامیک ها دارند...
 اغلب جرم اتمی کمی
 عناصر سبک
 پلیمرها دارند...
 دانسیته فشردگی پایین
 اغلب آمورف
 عناصر سبک
 (C,H,O)



کریستال ها به عنوان بلوک ساختمانی

تعدادی کاربردهای مهندسی، تک کریستال ها دارند:

-- تک الماس ها

کریستال هایی برای سایش



(Courtesy Martin Deakins, GE Superabrasives, Worthington, OH. Used with permission.)

-- تیغه های توربین

Fig. 8.33(c), Callister 7e.
(Fig. 8.33(c) courtesy of Pratt and Whitney).



• خواص مواد بلوری اغلب به ساختار کریستالی ارتباط داده می شود.

-- مثال: شکست برشی فلزات در امتداد صفحات کریستالی فشرده و صفحات فشرده خیلی راحت تر از بقیه مکان ها می باشد



(Courtesy P.M. Anderson)

پلی کریستال ها

غیر همگن

بیشتر مواد مهندسی پلی کریستال هستند



Adapted from Fig. K, color inset pages of *Callister 5e*. (Fig. K is courtesy of Paul E. Danielson, Teledyne Wah Chang Albany)

همگن

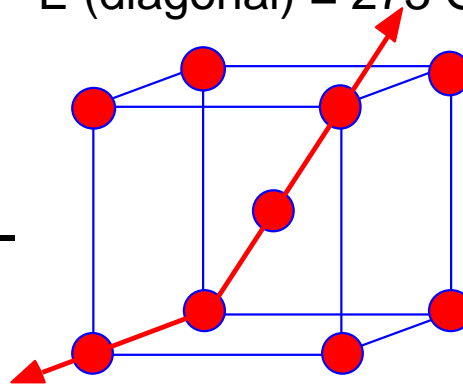
- صفحه نیوبیوم- هافنیم- تنگستن با یک اشعه الکترونی .
- دانه یک تک کریستال است .
- اگر دانه ها به طور اتفاقی جهت یابی شوند، خواص کلی اجزا به طور جهتدار نیست .
- نوع اندازه های دانه محدود است در رنج ۱ نانومتر تا ۲ سانتی متر می باشد .

تک کریستال در مقابل پلی کریستال

• تک کریستال ها

$$E \text{ (diagonal)} = 273 \text{ GPa}$$

-خواصی که با جهت متغیر هست



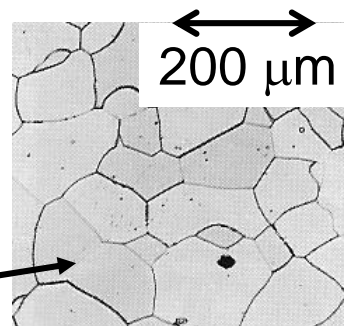
Data from Table 3.3, *Callister 7e*.
(Source of data is R.W. Hertzberg, *Deformation and Fracture Mechanics of Engineering Materials*, 3rd ed., John Wiley and Sons, 1989.)

-مثال : مدول الاستیته (E) در آهن BCC

$$E \text{ (edge)} = 125 \text{ GPa}$$

• پلی کریستال ها

-خواصش شاید با جهت تغییر کند یا نکند.



Adapted from Fig. 4.14(b), *Callister 7e*.
(Fig. 4.14(b) is courtesy of L.C. Smith and C. Brady, the National Bureau of Standards, Washington, DC [now the National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD].)

-اگر دانه ها به طور تصادفی باشند- ایزوتروپیک .
- خواص با جهت تغییر نمیکند ($E_{\text{poly iron}} = 210 \text{ GPa}$)

گر دانه ها در جهت خاصی تغییر شکل یافته باشند (غیر ایزوتروپیک)-

خواص با جهت تغییر می کند

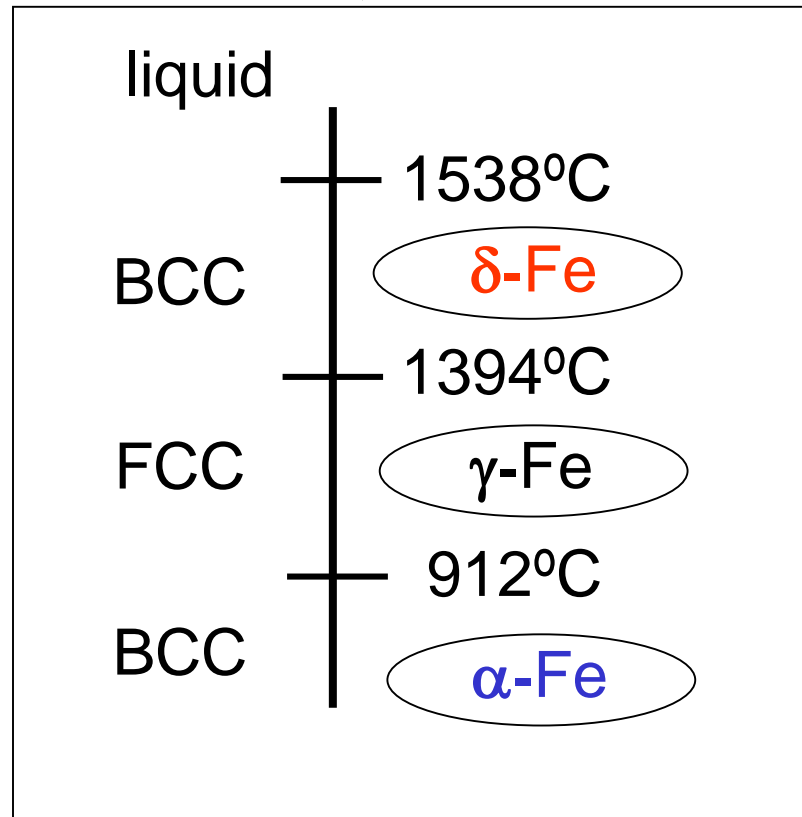


پلی مورفیسم

- دو یا ساختار کریستالی بیشتر برای مواد مشابه (آلوتروپی/پلی مورفیسم)

سیستم آهن

carbon
diamond, graphite



• مثال: درصد تغییرات نسبی حجمی در استحاله آلوتروپیک آهن bcc به آهن fcc را حساب کنید. ثابت شبکه bcc برابر با $2/۸۶۳$ و ثابت شبکه fcc برابر با $۳/۵۹۱$ آنگستروم میباشد.

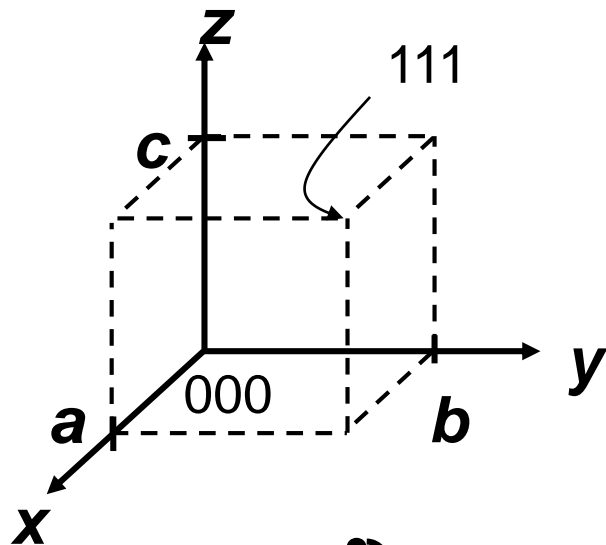
- | | | | |
|--|-----|--------|-----|
| • $V_{bcc} = a^3 = (2.863)^3 = 23.467 \text{ \AA}^3$ | bcc | -----> | fcc |
| • $V_{fcc} = a^3 = (3.591)^3 = 46.307 \text{ \AA}^3$ | V1 | | V2 |
| | N=2 | | N=4 |

$$\% \Delta V = \frac{(V_2 - V_1)}{V_1} \times 100$$

$$\% \Delta V = \frac{46.307 - 2(23.467)}{2(23.467)} \times 100 = -1.34 \%$$



مشخصات سلول واحد کریستالوگرافی - مختصات نقاط



مختصات نقاط برای مراکز سلول واحد این گونه هستند

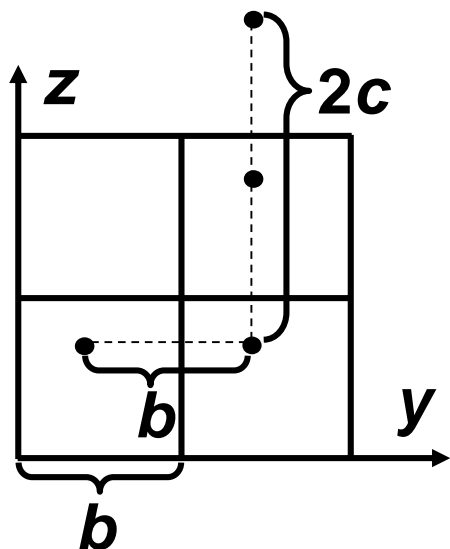
$$a/2, b/2, c/2 \quad \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$$

مختصات نقاط برای گوشه های سلول واحد این

گونه هستند 111

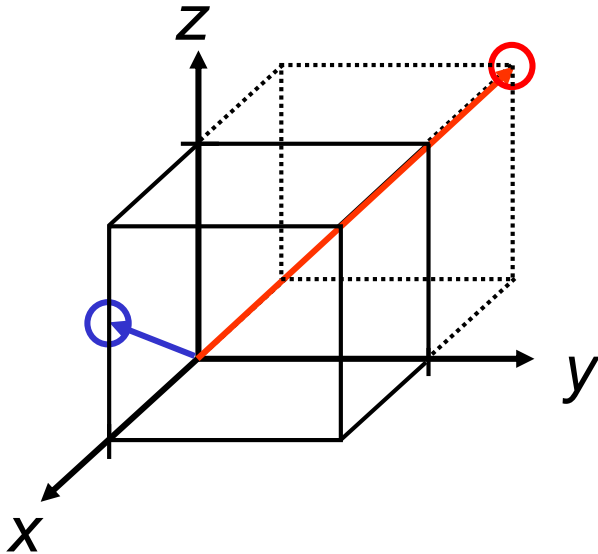
انتقال: عدد صحیحی از ثابت شبکه ←

موقعیت یکسانی در سلول واحد ایجاد می کنند



جهات کریستالوگرافی

الگوریتم



- ۱- بردار برای عبور دادن از مبدا تغییر مکان داده می شود. (اگر لازم باشد)
- ۲- ابعاد بردار را در جهات کریستالوگرافی تعیین می کنیم.
- ۳- مطابق با کوچکترین مقادیر صحیح.
- ۴- در براکت های مربع بدون کاما قرار می گیرد

$[uvw]$

$$\text{ex: } 1, 0, \frac{1}{2} \Rightarrow 2, 0, 1 \Rightarrow [201]$$

$$-1, 1, 1 \Rightarrow [\bar{1}11]$$

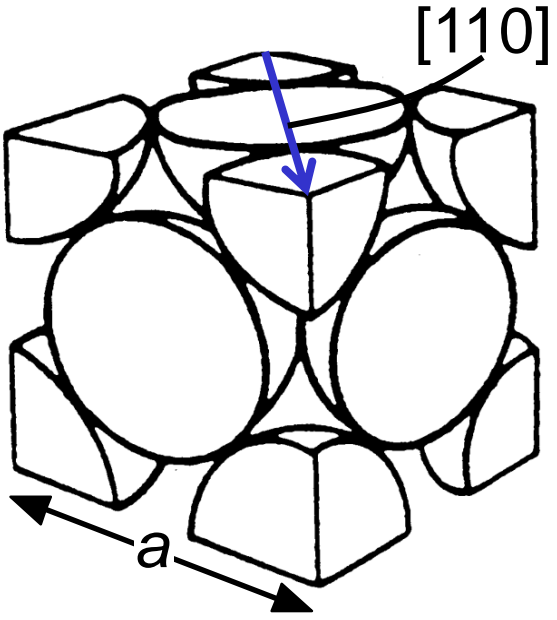
جایی که یک شاخصه منفی ارایه میکند

$\langle UVW \rangle$ جهات هم خانواده



دانسیتة خطی

• $LD = \frac{\text{تعداد اتم ها}}{\text{طول جهت بردار واحد}} \equiv \text{دانسیتة خطی اتم ها}$



ex: linear density of Al in $[110]$ direction

$a = 0.405 \text{ nm}$

اتم ها

طول

$$LD = \frac{2}{\sqrt{2}a} = 3.5 \text{ nm}^{-1}$$

جهات کریستالوگرافی HCP

الگوریتم

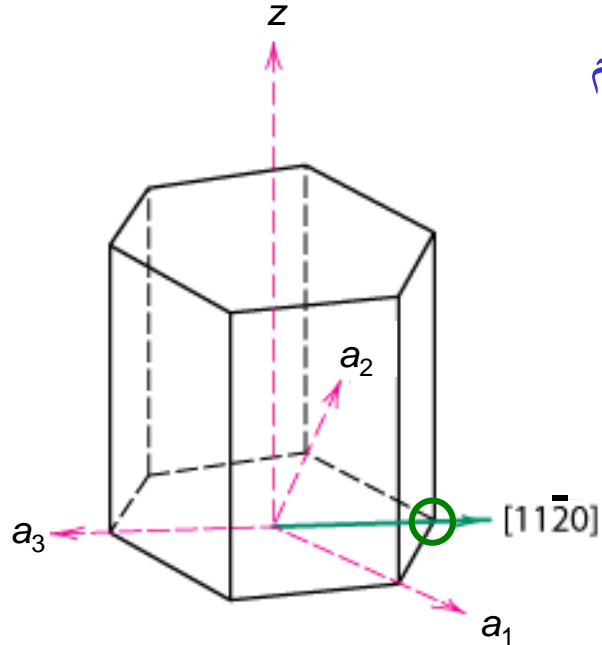
1- بردار برای عبور دادن از مبدا تغییر مکان داده می شود.
(اگر لازم باشد)

2- ابعاد بردار در جهات a_1, a_2, a_3, c می باشد.

3- مطابق با کوچکترین مقادیر صحیح.

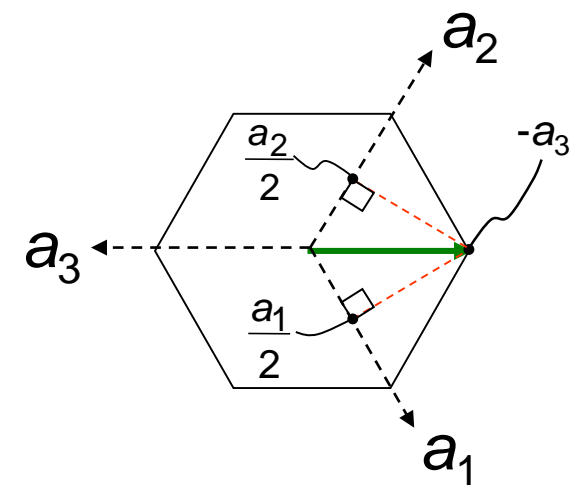
4- در براکت های مربع بدون کاما قرار می گیرد

$[uvtw]$



Adapted from Fig. 3.8(a), Callister 7e.

مثال: $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -1, 0 \Rightarrow [11\bar{2}0]$



جهات کریستالوگرافی HCP

• ساختارهای هگزاگونال

– ۴ پارامتر مختصات شبکه میلر – براوه میتواند به صورت زیر با شاخصه ۳ پارامتری در ارتباط باشند.

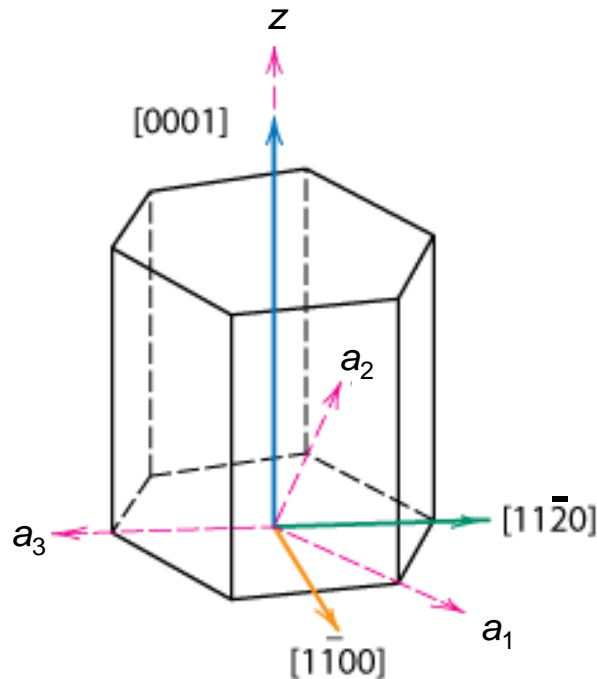


Fig. 3.8(a), Callister 7e.

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

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

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

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

$$w = w'$$

صفحات کریستالوگرافی – شاخصه میلر

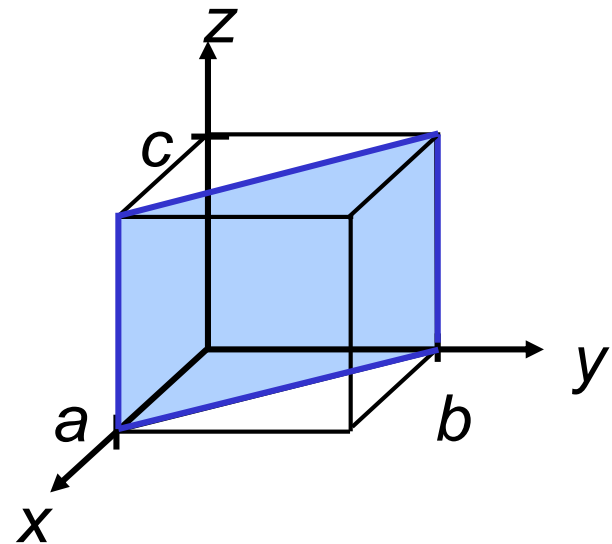
- شاخصه های میلر
- سه محور مختصاتی برای یک صفحه در کجا قطع می شود و سپس معکوس میشود، اعداد کسری تبدیل به عدد صحیح می شود. همه صفحات موازی دارای شاخصه میلر یکسان می باشند
- الگوریتم
 - ۱- صفحه در چه جایی محورهای مختصات را قطع می کند.
 - ۲- یادداشت کن معکوس مقادیر قطع شده در محورهای مختصات
 - ۳- تا کوچکترین مقادیر صحیح کاهش بدهید.
 - ۴- در پرانتزهای بدون کاما قرار می گیرد

(hkl)

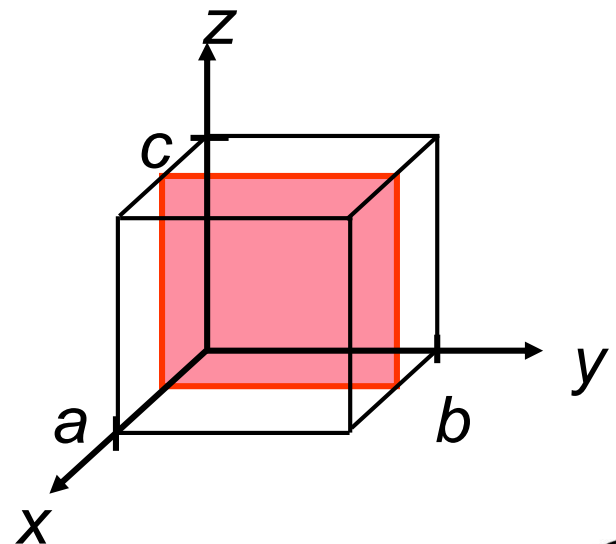


صفحات کریستالوگرافی

مثال	a	b	c
1. قطع شده در محورها.	1	1	∞
2. معکوس	1/1	1/1	1/ ∞
3. کاهش	1	1	0
4. (110) شاخصه میلر	1	1	0

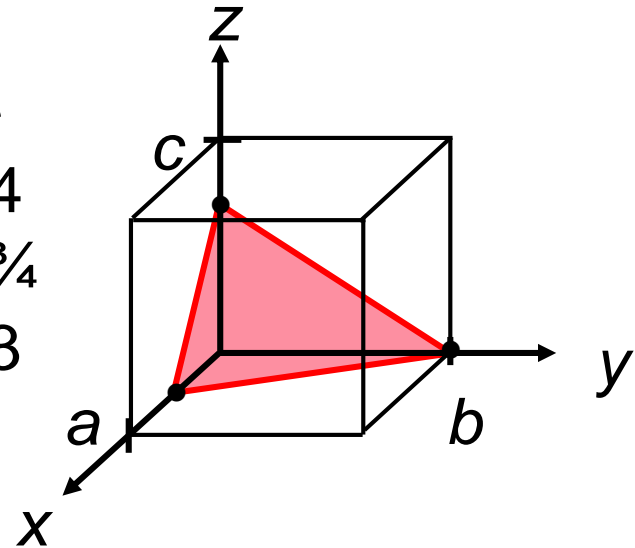


مثال	a	b	c
1. قطع شده در محورها.	1/2	∞	∞
2. معکوس	1/1/2	1/ ∞	1/ ∞
3. کاهش	2	0	0
4. شاخصه میلر	(100)		



صفحات کریستالوگرافی

مثال	a	b	c
1. قطع شده در محورها	$1/2$	1	$3/4$
2. معکوس	$1/1/2$	$1/1$	$1/3/4$
3. کاهش	2	1	$4/3$
4. شاخصه میلر	6	3	4
	(634)		



{hkl} صفحات هم خانواده

Ex: $\{100\} = (100), (010), (001), (\bar{1}00), (0\bar{1}0), (00\bar{1})$

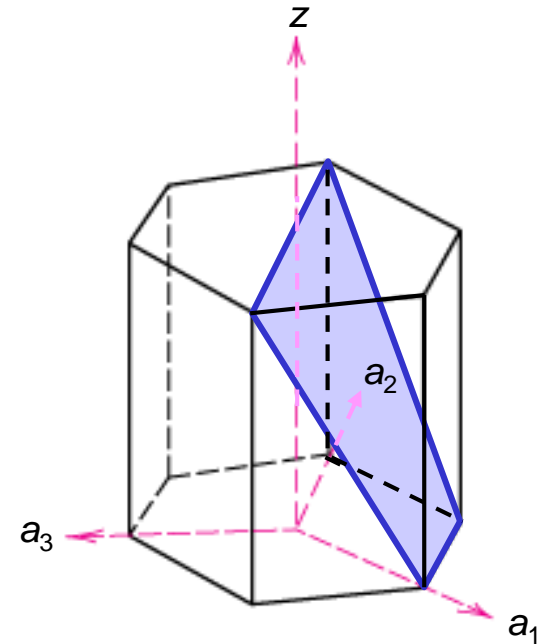


(HCP) صفحات کریستالوگرافی

- در سلول واحد هگزاگونال عقیده مشابهی وجود دارد.

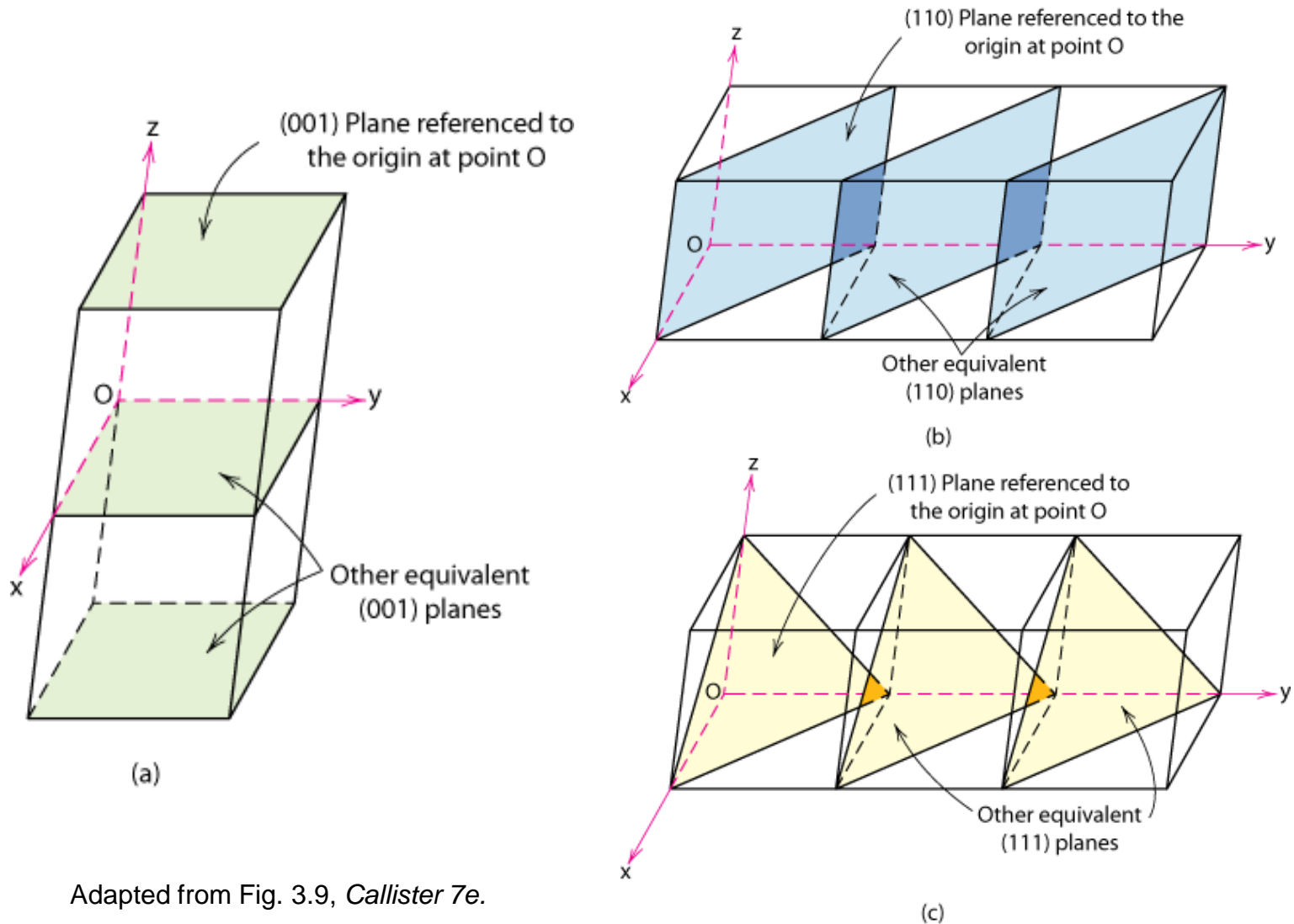
مثال	a_1	a_2	a_3	c
1. قطع شده در محورها	1	∞	-1	1
2. معکوس	1	$1/\infty$	-1	1
3. کاهش	1	0	-1	1
4. شاخصه های اندیس میلر				

$(10\bar{1}1)$



Adapted from Fig. 3.8(a), Callister 7e.

صفحات کریستالوگرافی



Adapted from Fig. 3.9, Callister 7e.



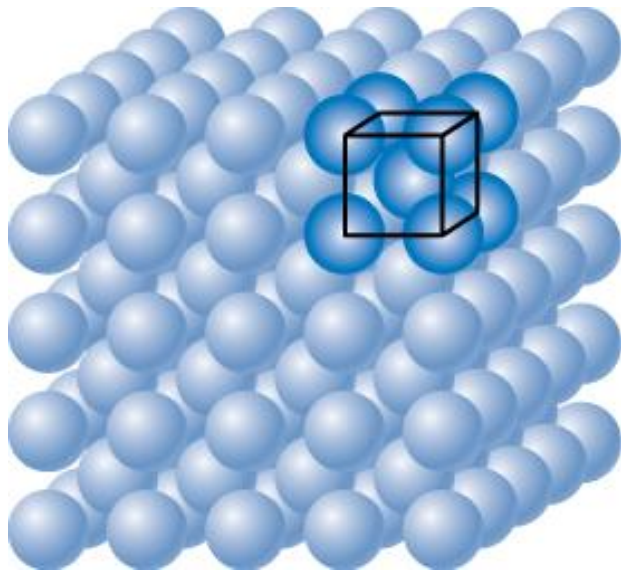
صفحات کریستالوگرافی

- ما می خواهیم فشردگی صفحات کریستالوگرافی آنها بررسی کنیم.
 - فویل آهن می تواند به عنوان کاتالیست استفاده شود. فشردگی اتمی صفحات در معرض کاتالیست قرار گرفته، مهم می باشد.
- الف) مساحت صفحات کریستالوگرافی (111) و (۱۰۰)؟
- ب) محاسبه دانسیته صفحه ای هر کدام از این صفحه ها؟

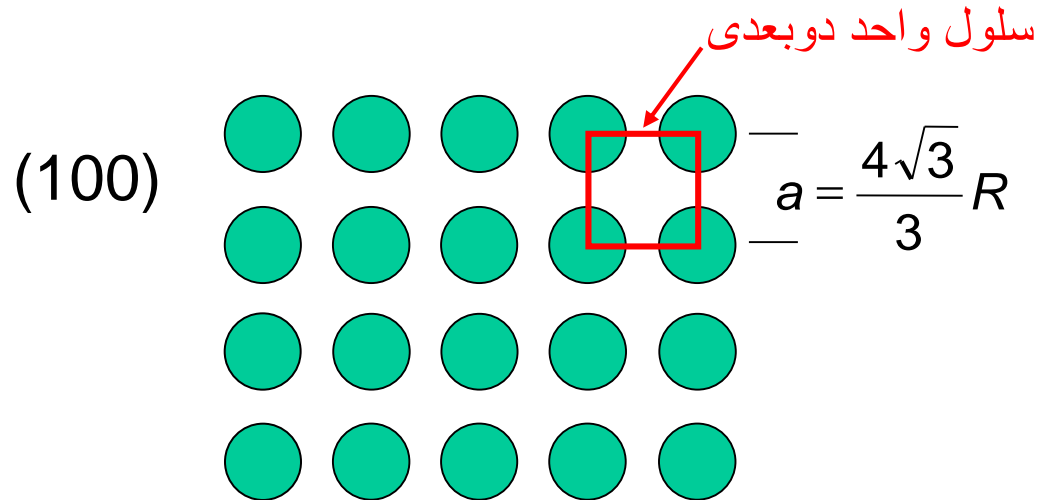


دانسیتة صفحه ای آهن (۱۰۰)

حل: آهن در دمای کمتر از ۹۱۲ درجه دارای ساختار BCC می باشد



Adapted from Fig. 3.2(c), Callister 7e.



$R = 0.1241 \text{ nm}$ شعاع اتمی آهن

تعداد اتم ها

سلول واحد دوبعدی

دانسیتة صفحه ای

سطح

سلول واحد دوبعدی

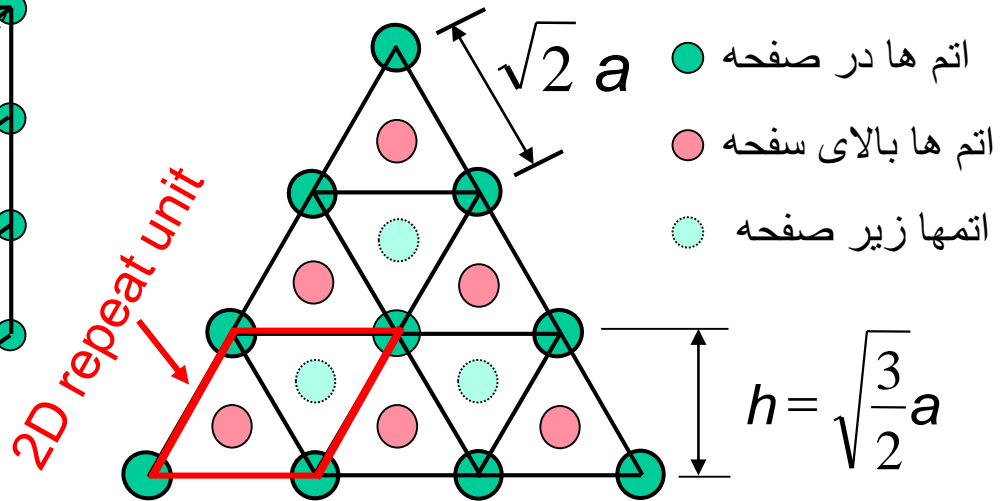
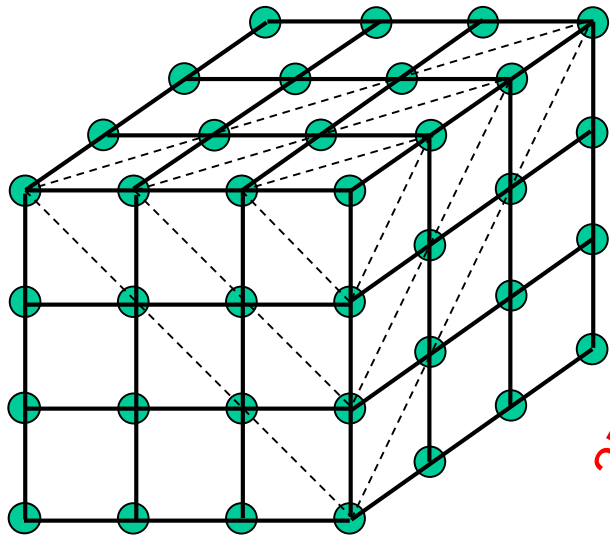
$$= \frac{1}{a^2} = \frac{1}{\left(\frac{4\sqrt{3}}{3} R\right)^2} = 12.1 \frac{\text{atoms}}{\text{nm}^2} = 1.2 \times 10^{19} \frac{\text{atoms}}{\text{m}^2}$$



دانسیتة صفحه ای آهن در صفحه (۱۱۱)

صفحه (۱۱۱) : حل

سل واحد سطح / ۱ اتم در صفحه



$$\text{area} = \sqrt{2} ah = \sqrt{3} a^2 = \sqrt{3} \left(\frac{4\sqrt{3}}{3} R \right)^2 = \frac{16\sqrt{3}}{3} R^2$$

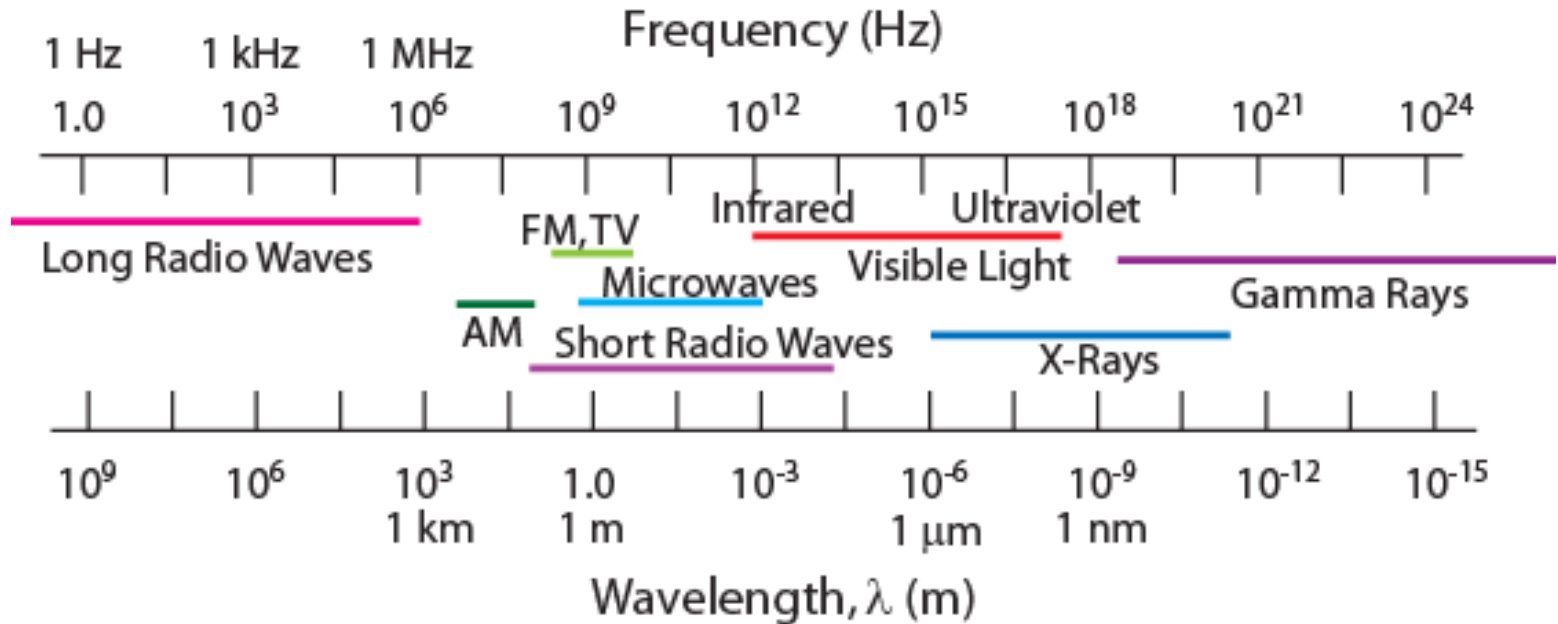
اتم ها
 سل واحد سطح
 دانسیته صفحه ای =
 سطح
 سل واحد سطح

$$= \frac{1}{\frac{16\sqrt{3}}{3} R^2} = 7.0 \frac{\text{atoms}}{\text{nm}^2} = 0.70 \times 10^{19} \frac{\text{atoms}}{\text{m}^2}$$



اشعه ایکس

Electromagnetic Spectrum



- فاصله های کمتر از طول موج نمی توان به دست آورد.

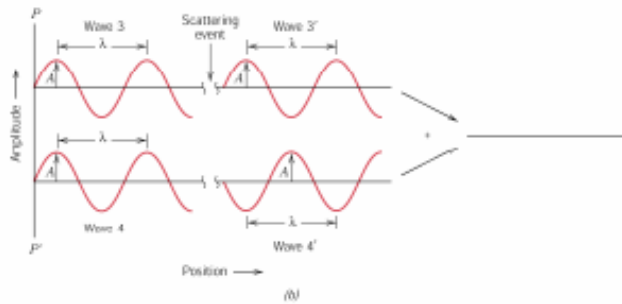
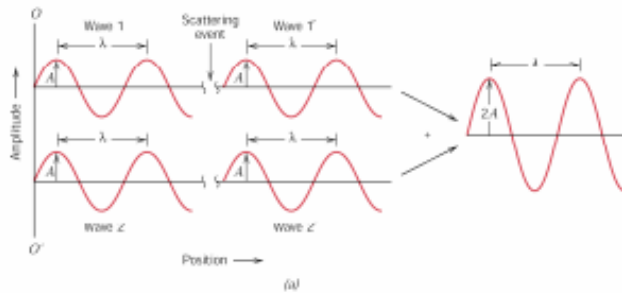


- زمانی که یک الکترون در یک میدان متناوب الکترومغناطیسی قرار می گیرد، شروع به نوسان می کند. فرکانس نوسان الکترون برابر فرکانس نوسان میدان خواهد بود. برخورد اشعه ایکس به اتم، سبب می شود الکترون های اطراف اتم، برابر با فرکانس پرتو تابیده شده، شروع به نوسان کنند.
- پرتو های عبور کرده از اتم، تقریباً در تمام جهات، تداخلات غیر سازنده دارند و موج های ترکیب شده در یک فاز نیستند و هیچ تصویری از نمونه جامد نخواهند داد.
- قرار گرفتن اتم ها در یک ساختار کریستالی که دارای ساختاری منظم است، سبب می شود تا در تعداد کمی از جهات، تداخلات سازنده بوجود بیاید. بدین ترتیب پرتو هایی که از نمونه کریستالی عبور می کنند، هم فاز هستند و با ایجاد تصویری مناسب، نمونه را در چندین جهت، ترک می کنند. از این رو یک پرتو پراش یافته را می توان به این صورت توصیف کرد که چندین اشعه تفرق یافته هستند که متقابلاً، همدیگر را تقویت می کنند.

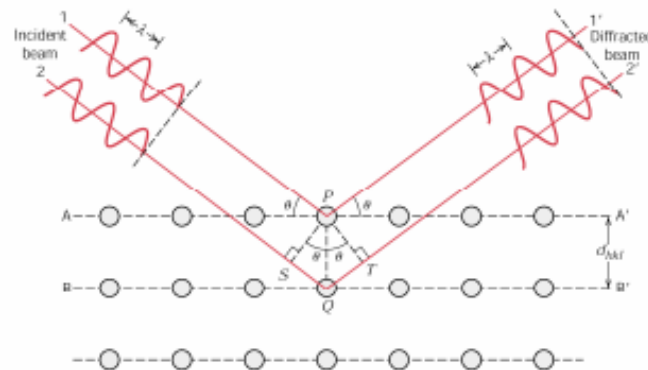


اشعه ایکس تعیین کننده ساختار کریستالی می باشد

دو موج در صورت وجود هم فازی همدیگر را تقویت می کنند. قابل ذکر هست که دو پرتو زمانی که طول مسیر آنها صفر بوده و یا اختلاف آنها عدد صحیح از طول موج باشد، کاملاً هم فاز خواهند بود.



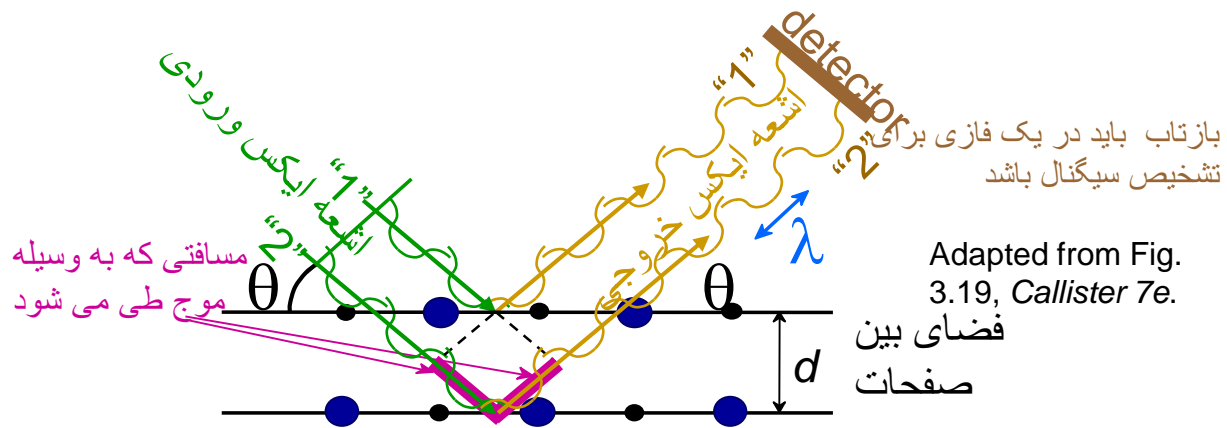
$$n\lambda = \overline{SQ} + \overline{QT}$$



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

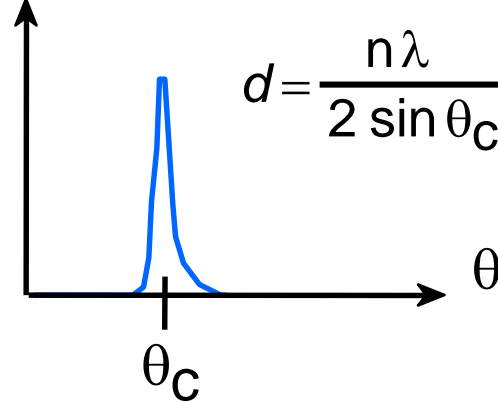
$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$





اندازه گیری زاویه بحرانی θ_c محاسبه فاصله بین صفحه ای اجازه می دهد.

شدت اشعه ایکس



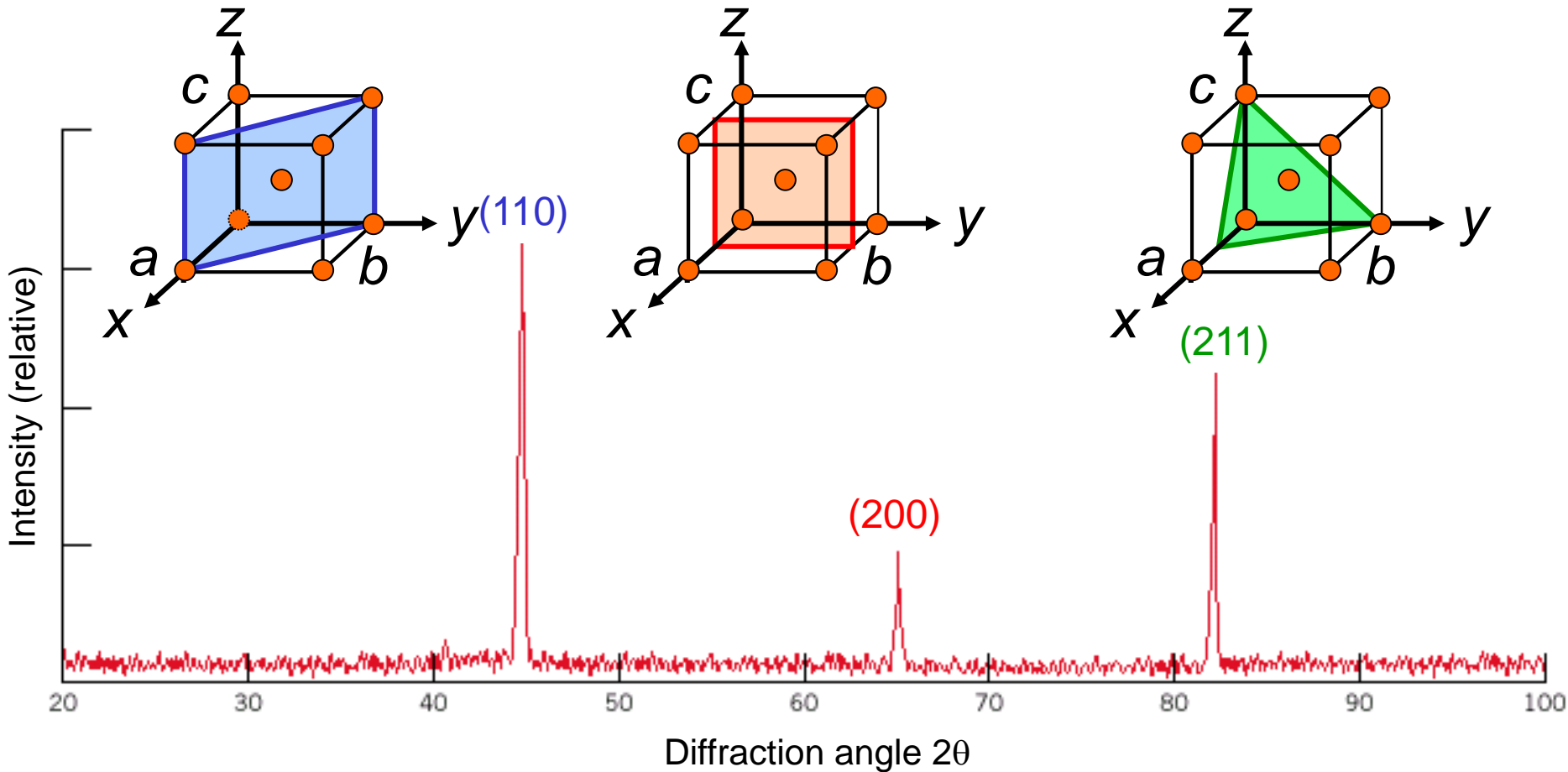
قوانین پراش اشعه ایکس برای فلزات

Reflection Rules of X-Ray Diffraction for the Common Metal Structures

Crystal structure	Diffraction does not occur when	Diffraction occurs when
Body-centered cubic (bcc)	$h + k + l = \text{odd number}$	$h + k + l = \text{even number}$
Face-centered cubic (fcc)	h, k, l mixed (i.e., both even and odd numbers)	h, k, l unmixed (i.e., are all even numbers or all are odd numbers)
Hexagonal close packed (hcp)	$(h + 2k) = 3n, l$ odd (n is an integer)	All other cases



الگوی پراش اشعه ایکس



α -iron (BCC) الگوی تفرق برای پلی کریستال ها

Adapted from Fig. 3.20, Callister 5e.

- اگر پرتو اشعه ایکس مس به طول موج $1,54$ آنگستروم از صفحه (111) یک بلور مکعبی، پراش در زاویه $20/3$ درجه ایجاد کند، ثابت شبکه آن را به دست آورید؟



$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$$

مکعبی

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

تتراگونال

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

ارتھورمبیک

$$\frac{1}{d^2} = \frac{(h^2 + k^2 + l^2) \sin^2 \alpha + 2(hk + kl + hl)(\cos^2 \alpha - \cos \alpha)}{a^2(1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha)}$$

رہنہدرا ل
(تریگونال)

$$\frac{1}{d^2} = \frac{4}{3} \left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} \right) + \frac{l^2}{c^2}$$

ہکزاگونال
(تریگونال)

$$\frac{1}{d^2} = \frac{1}{\sin^2 \beta} \left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2 \sin^2 \beta}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} - \frac{2hl \cos \beta}{ac} \right)$$

منوکلینیک

$$\frac{1}{d^2} = \frac{1}{V^2} (S_{11}h^2 + S_{22}k^2 + S_{33}l^2 + 2S_{12}hk + 2S_{23}kl + 2S_{13}hl)$$

تریکلینیک

$$V = abc \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}$$

$$S_{11} = b^2 c^2 \sin^2 \alpha,$$

$$S_{12} = abc^2 (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma),$$

$$S_{22} = a^2 c^2 \sin^2 \beta,$$

$$S_{23} = a^2 bc (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha),$$

$$S_{33} = a^2 b^2 \sin^2 \gamma,$$

$$S_{13} = ab^2 c (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta),$$

