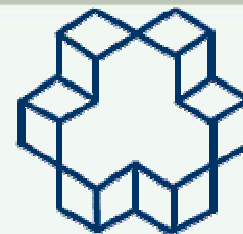




Company Logo

دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی
دانشکده مهندسی و علم مواد



کریستالوگرافی

جلسه پنجم
(سیستم های بلوری رایج در فلزات)

دکتر رضا اسلامی فارسانی



شبکه های براوه



شبکه براوه آرایه نامحدودی از نقاط گسترده در فضا است که چینش و جهت آن مستقل از نقطه مبدا باشد و از رابطه زیر پیروی کند:

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

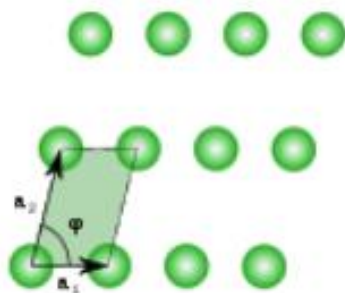
n_i ها اعداد صحیح و $\mathbf{a}_i$ ها بردارهای اولیه ای هستند که در جهات مختلف شبکه را می سازند.

از لحاظ هندسی در سه بعد تنها 14 گونه شبکه براوه مستقل می تواند وجود داشته باشد. این 14 گونه در 7 دستگاه بلوری دسته بندی شده اند.

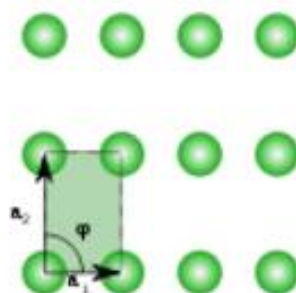
انواع شبکه های براوه



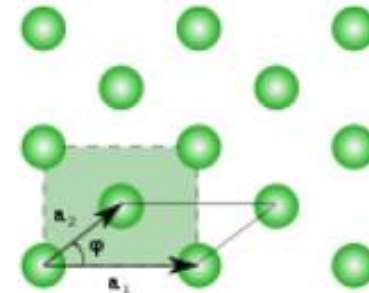
در دو بعد 5 حالت شبکه براوه وجود دارد.



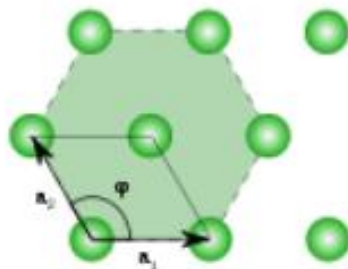
$|a_1| \neq |a_2|, \varphi \neq 90^\circ$
متوازی الاضلاع



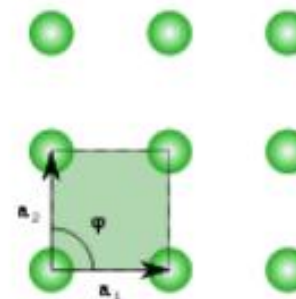
$|a_1| \neq |a_2|, \varphi = 90^\circ$
مستطیل (راست گوشه)



$|a_1| \neq |a_2|, \varphi \neq 90^\circ$
مستطیل مرکزدار



$|a_1| = |a_2|, \varphi = 120^\circ$
شش گوش



$|a_1| = |a_2|, \varphi = 90^\circ$
مربع



انواع شبکه های براوه

انتقال نقطه مادی واحد (ذره تشکیل دهنده ماده) در سه جهت مختلف باعث تشکیل شبکه فضایی یا شبکه ترانسیلاسیون می شود که در مجموع باعث تشکیل شبکه های 14 گانه براوه می شود. سه نوع از شبکه های 14 گانه براوه وجود دارد:

شبکه ساده یک دانه ای: شبکه متشکل از اجتماع سلول های اولیه یک دانه ای. 7 فرم از این شبکه ها وجود دارد.

شبکه ساده دو دانه ای: شبکه متشکل از اجتماع سلول های اولیه دودانه ای. 5 فرم از این شبکه ها داریم که علاوه بر رئوس (گوشه ها)، ذرات تشکیل دهنده در مرکز سلول یا مراکز قاعده ها قرار دارد.

شبکه چهاردانه ای براوه: شبکه متشکل از اجتماع سلول های اولیه چهاردانه ای. 2 فرم از این نوع شبکه داریم که ذرات علاوه بر رئوس در مراکز وجوه نیز قرار دارند.

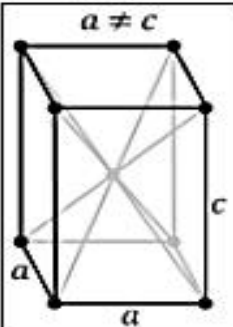
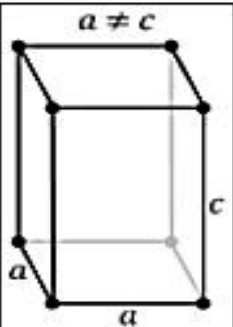
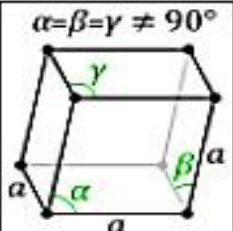
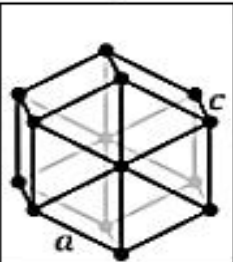
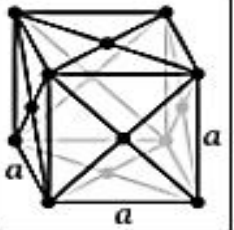
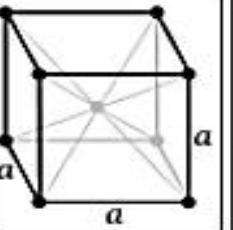
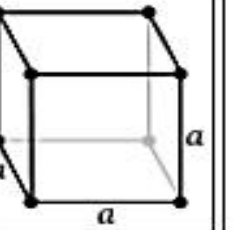
انواع شبکه های براوه



نوع شبکه فضایی	مکعبی	تتراگونال	هگزاگونال	ارتورومبیک	مونوکلینیک	رومبهدرال	تری کلینیک
یک دانه ای	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
دو دانه ای	✓	✓		✓			
				✓	✓		
چهار دانه ای	✓			✓			

انواع شبکه های براوه در سه بعد

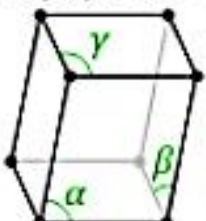
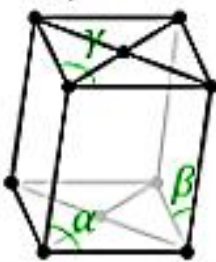
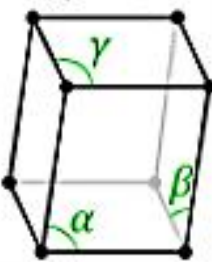
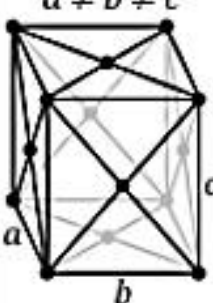
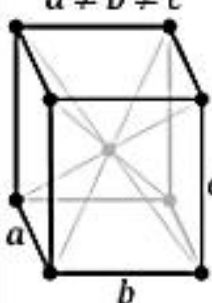
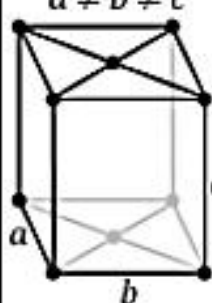
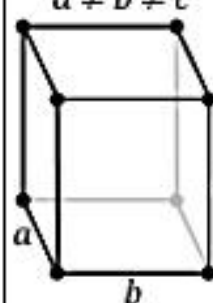


مرکزپر	ساده	چهار گوشه (تتراگونال)	
			
		لوزی پهلو (رهمبهدرال)	
		شش گوشه (هگراگونال)	
وجوه مرکزپر	مرکزپر	ساده	مکعبی
			



انواع شبکه های براوه در سه بعد



				$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$ 	سه شیب (تریکلینیک)
				مرکزیر $\beta \neq 90^\circ$ $\alpha, \gamma = 90^\circ$ 	تک شیب (مونوکلینیک)
				ساده $\beta \neq 90^\circ$ $\alpha, \gamma = 90^\circ$ 	
وجوه مرکزیر $a \neq b \neq c$ 	مرکزیر $a \neq b \neq c$ 	قاعدۀ مرکزیر $a \neq b \neq c$ 	ساده $a \neq b \neq c$ 	راست لوزی (ارترومبیک)	



نحوه محاسبه تعداد اتم در سلول واحد

تعداد اتم در سلول واحد شبکه های مکعبی، تتراگونال، رومبوئدرال، ارتورومبیک، تری کلینیک و منوکلینیک (همگی از نوع ساده) برابر است با:

$$8 \times \frac{1}{8} = 1atom$$

تعداد اتم در سلول واحد شبکه های مکعبی، تتراگونال و ارتورومبیک (همگی از نوع مرکزپر) برابر است با:

$$8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2atom$$

تعداد اتم در سلول واحد شبکه های مکعبی و ارتورومبیک (هر دو از نوع وجوه مرکزپر) برابر است با:

$$(8 \times \frac{1}{8}) + (6 \times \frac{1}{2}) = 4atom$$



نحوه محاسبه تعداد اتم در سلول واحد

۱) تعداد اتم در سلول واحد شبکه های ارتورومبیک و منوکلینیک (هر دو از نوع با قاعده مرکز پر) برابر است با:

$$(8 \times \frac{1}{8}) + (2 \times \frac{1}{2}) = 2atom$$

۲) تعداد اتم در سلول واحد هگزاگونال، در حالت اولیه، یک اتم و در حالتی که سلول واحد را متشکل از 3 متوازی السطوح در نظر بگیریم، سه اتم است.

۳) تعداد اتم در سلول واحد هگزاگونال متراکم برابر است با:

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

سیستم های رایج کریستالی در فلزات



چهار سیستم کریستالی رایج در فلزات عبارتند از:

• ساختار مکعبی ساده Simple Cubic (SC) یا مکعبی اولیه یا اصلی Primitive Cubic (PC)

• ساختار مکعبی با وجوه مرکزپر Face Centered Cubic (FCC)

• ساختار مکعبی مرکزپر Body Centered Cubic (BCC)

• ساختار هگزاگوناال متراکم Hexagonal Close Packed (HCP)

• در همه حالت های فوق، اتم ها به صورت کره هایی به شعاع R در نظر گرفته می شوند.



تعاریف

عدد همسایگی (Coordination Number = CN): عدد همسایگی یا عدد کوردینانس یا عدد هم آرایی هر ساختار بلوری عبارت است از تعداد نزدیکترین همسایگان آن اتم در شبکه (تعداد نزدیک ترین اتم ها به آن اتم در شبکه).

پارامتر شبکه (a): پارامتر شبکه در ساختارهای کریستالی فاصله بین اتمی برای کمترین سطح انرژی است.

تبادل نیروهای جاذبه و دافعه که در اثر کنار هم قرار گرفتن مجموعه بارهای مثبت و منفی اتم ها در یک شبکه بوجود آمده اند، تعیین کننده پارامتر شبکه است.



فاکتور تراکم اتمی یا فاکتور چیدمان اتمی یا ضریب فشردگی

Packing Factor (PF) یا Atomic Packing Factor (APF)

بیانگر بخشی از حجم سلول واحد است که توسط اتم ها اشغال شده است.

نسبت حجم اتم های موجود در سلول واحد به حجم سلول واحد.

ساختار مکعبی ساده (SC)



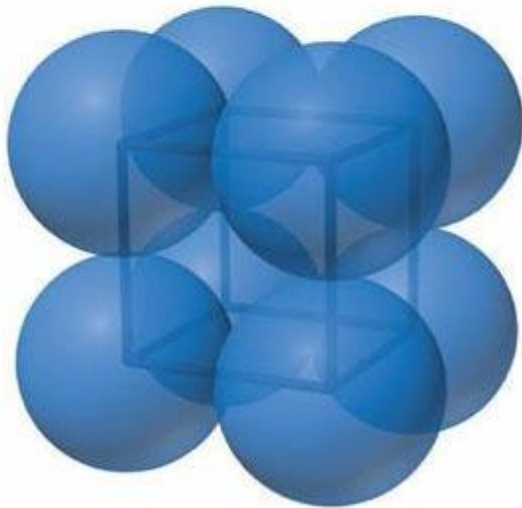
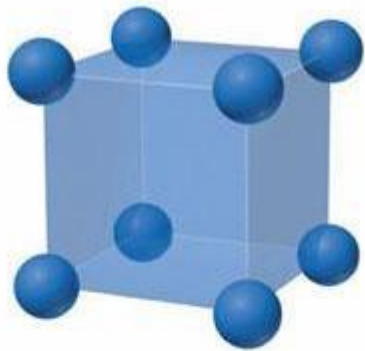
۱ محل قرارگیری اتم ها: در 8 گوشه مکعب.

۲ تعداد اتم در سلول واحد:

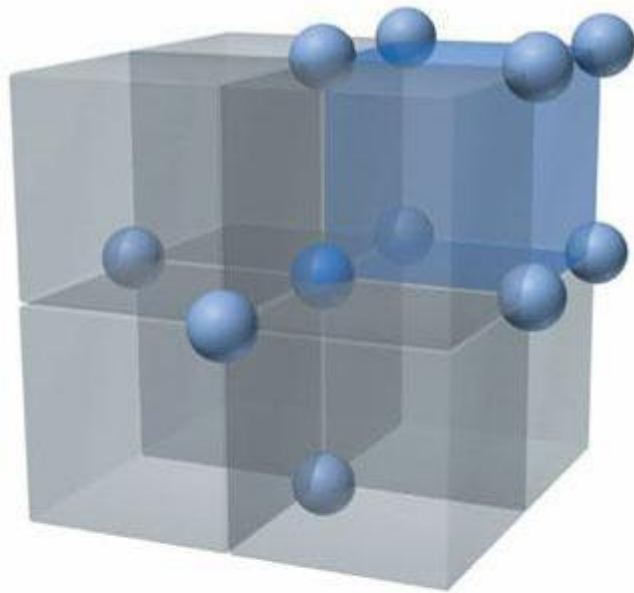
$$8 \times \frac{1}{8} = 1 \text{ atom}$$

۳ رابطه حاکم بین پارامتر شبکه و شعاع اتمی:

$$a = 2R$$



ساختار مکعبی ساده (SC)



Coordination number = 6

$\frac{1}{8}$ atom
at 8 corners



Atoms/unit cell = $\frac{1}{8} \times 8 = 1$

$$PF = \frac{1 \times \frac{4}{3} \pi R^3}{a^3} = \frac{1 \times \frac{4}{3} \pi R^3}{(2R)^3} = 0.52$$

ساختار مکعبی مرکزپر (BCC)



• محل قرارگیری اتم ها: در 8 گوشه و همچنین مرکز مکعب.

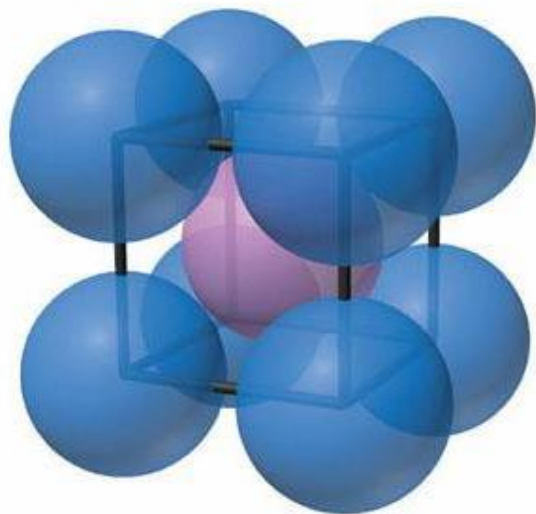
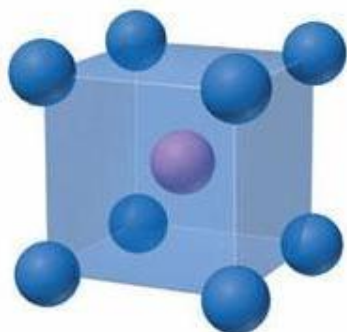
• تعداد اتم در سلول واحد:

$$8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2 \text{ atom}$$

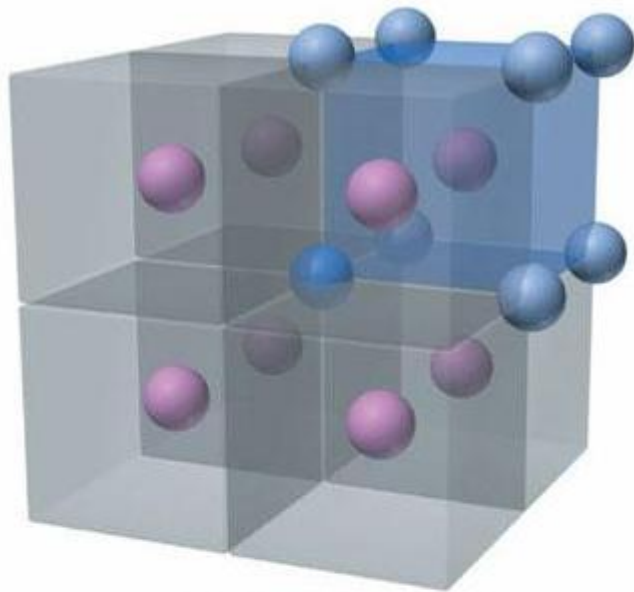
• رابطه حاکم بین پارامتر شبکه و شعاع اتمی:

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

Body-centered cubic



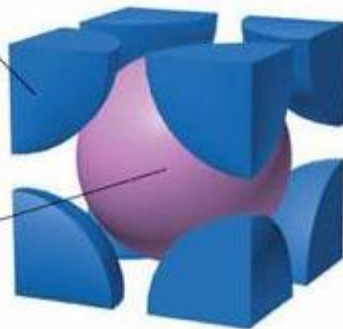
ساختار مکعبی مرکزپر (BCC)



Coordination number = 8

$\frac{1}{8}$ atom
at 8 corners

1 atom
at center



$$\text{Atoms/unit cell} = \left(\frac{1}{8} \times 8\right) + 1 = 2$$

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

ü عدد همسایگی: 8

ساختار مکعبی با وجوه مرکزپر (FCC)



• محل قرارگیری اتم ها: در 8 گوشه و همچنین مرکز وجوه مکعب.

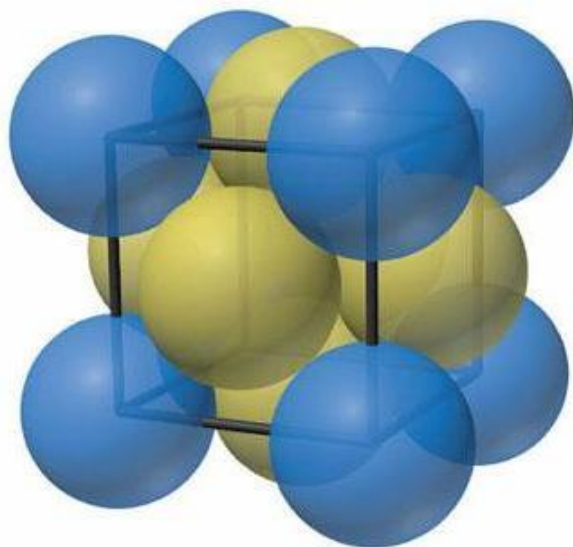
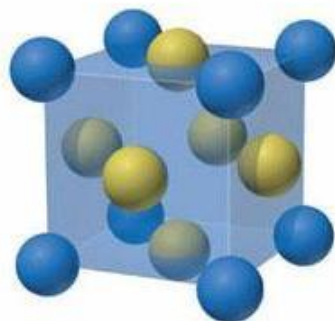
• تعداد اتم در سلول واحد:

$$(8 \times \frac{1}{8}) + (6 \times \frac{1}{2}) = 4 \text{ atom}$$

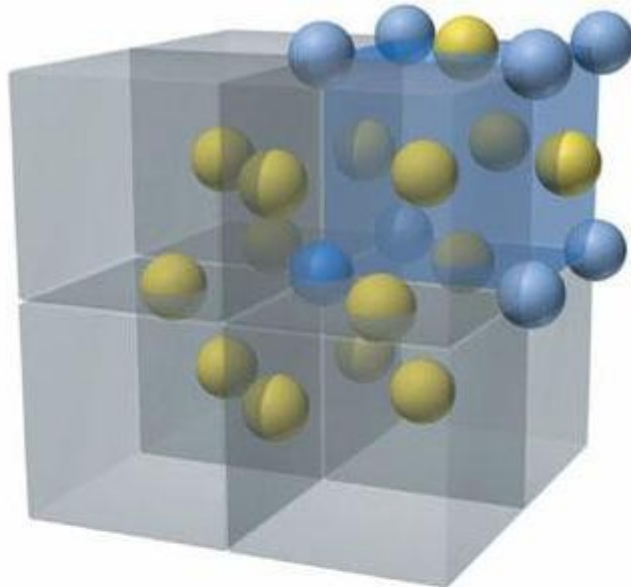
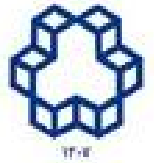
• رابطه حاکم بین پارامتر شبکه و شعاع اتمی:

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

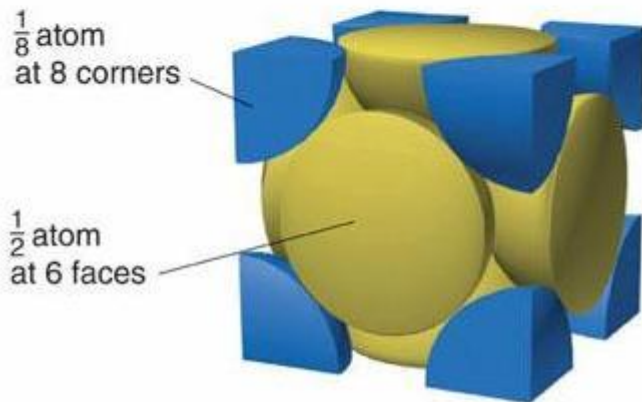
Face-centered cubic



ساختار مکعبی با وجوه مرکزپر (FCC)



Coordination number = 12



$$\text{Atoms/unit cell} = \left(\frac{1}{8} \times 8\right) + \left(\frac{1}{2} \times 6\right) = 4$$

$$PF = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi R^3}{a^3} = \frac{4 \times \frac{4}{3} \pi R^3}{\left(\frac{4R}{\sqrt{2}}\right)^3} = 0.74$$

ü عدد همسایگی: 12

ساختار هگزاگونال متراکم (HCP)

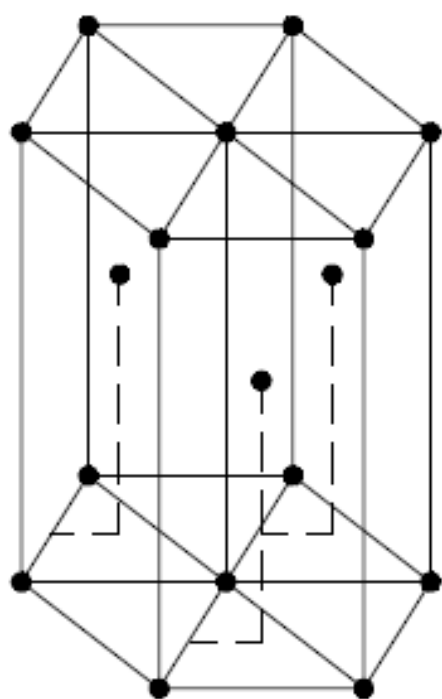


• محل قرارگیری اتم ها: شش گوشه و مرکز سطوح شش ضلعی بالا و پایین و همچنین سه اتم در صفحه ای بین سطوح بالا و پایین.

• تعداد اتم در سلول واحد:

$$\left[2 \times \left(6 \times \frac{1}{6} \right) \right] + \left[2 \times \frac{1}{2} \right] + 3 = 6 \text{ atom}$$

• عدد همسایگی: 12

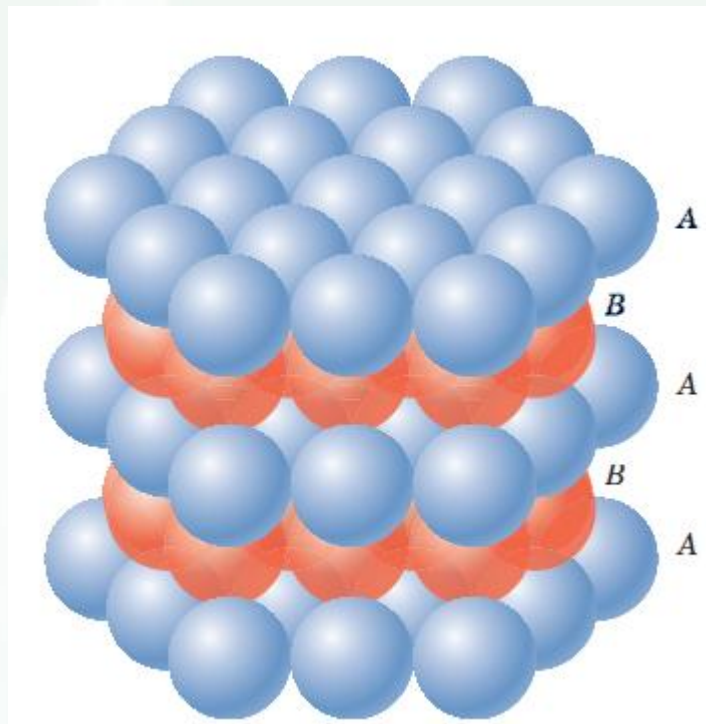


HEXAGONAL
CLOSE PACKED

ساختار هگزاگونال متراکم (HCP)



روابط حاکم بین پارامترهای شبکه و شعاع اتمی:



$$a = 2R$$

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

$$PF = \frac{6 \times \frac{4}{3} \pi R^3}{(6 \frac{a^2 \sqrt{3}}{4}) c} = \frac{\frac{24}{3} \pi R^3}{\frac{6 \sqrt{3}}{4} a^3 \frac{c}{a}} = \frac{\frac{24}{3} \pi R^3}{\frac{6 \sqrt{3}}{4} (2R)^3 \sqrt{\frac{8}{3}}} = 0.74$$

ساختارهای کریستالی و شعاع اتمی برخی فلزات



<i>Metal</i>	<i>Crystal Structure^a</i>	<i>Atomic Radius^b</i> (nm)	<i>Metal</i>	<i>Crystal Structure</i>	<i>Atomic Radius</i> (nm)
Aluminum	FCC	0.1431	Molybdenum	BCC	0.1363
Cadmium	HCP	0.1490	Nickel	FCC	0.1246
Chromium	BCC	0.1249	Platinum	FCC	0.1387
Cobalt	HCP	0.1253	Silver	FCC	0.1445
Copper	FCC	0.1278	Tantalum	BCC	0.1430
Gold	FCC	0.1442	Titanium (α)	HCP	0.1445
Iron (α)	BCC	0.1241	Tungsten	BCC	0.1371
Lead	FCC	0.1750	Zinc	HCP	0.1332

^a FCC = face-centered cubic; HCP = hexagonal close-packed; BCC = body-centered cubic.

^b A nanometer (nm) equals 10^{-9} m; to convert from nanometers to angstrom units ($\text{\AA}$), multiply the nanometer value by 10.



سلول واحد براساس تعریف ارائه شده، کوچکترین جز یک شبکه کریستالی است که تمامی خصوصیات آن شبکه را دارا می باشد، لذا می توان به عنوان نمونه با تعیین چگالی سلول واحد، چگالی یا وزن مخصوص ماده را تعیین کرد.

با داشتن نوع سلول واحد برای یک جسم بلوری و مقدار شعاع اتم های آن یا پارامتر شبکه می توان چگالی واقعی ماده را بدست آورد. همچنین می توان با داشتن چگالی و نوع ساختار بلوری، شعاع اتمی و پارامتر شبکه (فاصله بین اتم ها) را محاسبه نمود.

چگالی فلزات



چگالی سلول واحد (چگالی ماده بلوری) = وزن سلول واحد (وزن همه اتم های یک سلول واحد) تقسیم بر حجم آن سلول واحد

وزن هر اتم از تقسیم وزن اتمی بر عدد آووگادرو بدست می آید. با قرار دادن نسبت مذکور در رابطه و ساده کردن آن، برای محاسبه چگالی فلزات رابطه کلی زیر حاصل می شود:

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

n = number of atoms associated with each unit cell

A = atomic weight

V_C = volume of the unit cell

N_A = Avogadro's number (6.023×10^{23} atoms/mol)



چگالی فلزات



مثال: مس با ساختار FCC دارای شعاع اتمی معادل 0.128 نانومتر و وزن اتمی 63.5 گرم بر مول است. چگالی مس را محاسبه کنید.

$$\begin{aligned}\rho &= \frac{nA_{\text{Cu}}}{V_C N_A} = \frac{nA_{\text{Cu}}}{(16R^3 \sqrt{2}) N_A} \\ &= \frac{(4 \text{ atoms/unit cell})(63.5 \text{ g/mol})}{[16\sqrt{2}(1.28 \times 10^{-8} \text{ cm})^3/\text{unit cell}](6.023 \times 10^{23} \text{ atoms/mol})} \\ &= 8.89 \text{ g/cm}^3\end{aligned}$$

$$V_C = a^3 = \left(\frac{4R}{\sqrt{2}}\right)^3 = \frac{64R^3}{2\sqrt{2}} = 16\sqrt{2}R^3$$