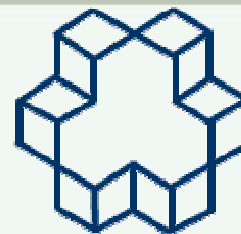




Company Logo

دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی
دانشکده مهندسی و علم مواد



کریستالوگرافی

جلسه ششم
(صفحات و جهات کریستالی)

دکتر رضا اسلامی فارسانی

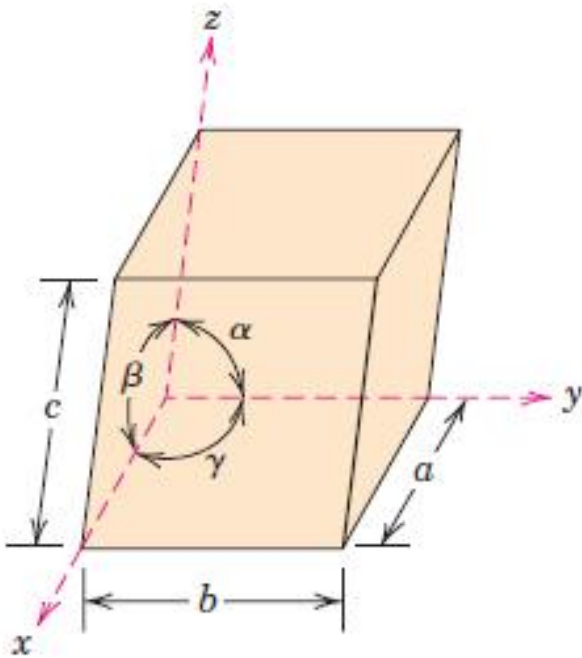


مقدمه



برای تعیین جهات و صفحات کریستالی از سه عدد صحیح استفاده می شود.

برای تعیین این سه عدد از سلول واحدی استفاده می شود که یال های آن بر روی سه محور X ، Y و Z قرار گرفته و مبداء مختصات روی یکی از رئوس سلول واحد قرار گیرد.

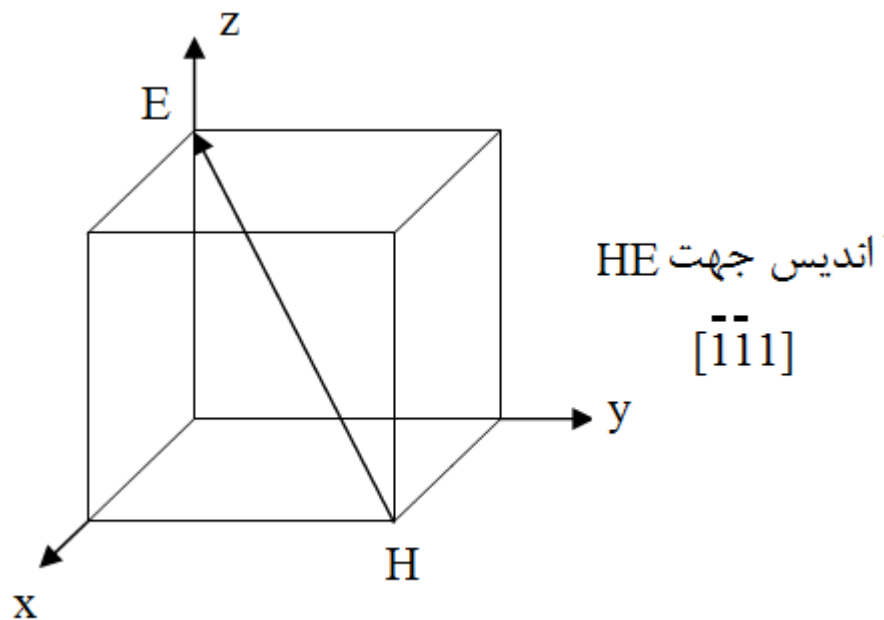


جهت کریستالی



اندیس گذاری جهات کریستالی در ساختارهای مکعبی:

جهت HE را در نظر بگیرید. برای نشان دادن این جهت اگر از نقطه مبدا (H) شروع کرده تا به مقصد (E) برسیم لازم است ابتدا یک واحد در خلاف جهت Y به سمت چپ، سپس یک واحد در جهت محور Z به سمت بالا و در نهایت به اندازه یک واحد در خلاف جهت X حرکت کرده تا به نقطه E برسیم.

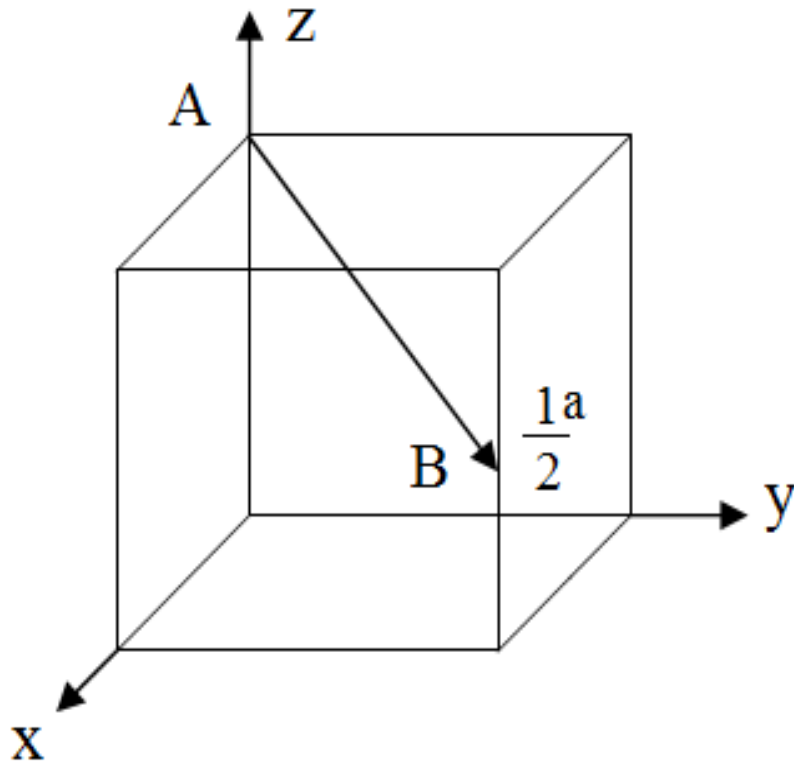


مواردی که در خلاف جهت یک محور حرکت می شود اندیس مربوطه دارای علامت منفی در بالای اندیس خواهد بود.

جهت کریستالی



مثال 1. اندیس جهت کریستالی AB را در سیستم مکعبی زیر مشخص کنید.



شروع از نقطه A

حرکت به اندازه یک واحد a در جهت X

حرکت به اندازه یک واحد a در جهت Y

حرکت به اندازه $\frac{1}{2}$ واحد a در خلاف جهت Z

رسیدن به نقطه انتهایی B

برای صحیح کردن اعداد را در ۲ ضرب می کنیم

$$[22\bar{1}]$$

جهات کریستالی



ضرب کردن جهت در یک عدد صحیح منجر به تغییر آن جهت نمی شود.
برای مثال جهات $[100]$ و $[200]$ یکی هستند.

نکته 1

نکته 2

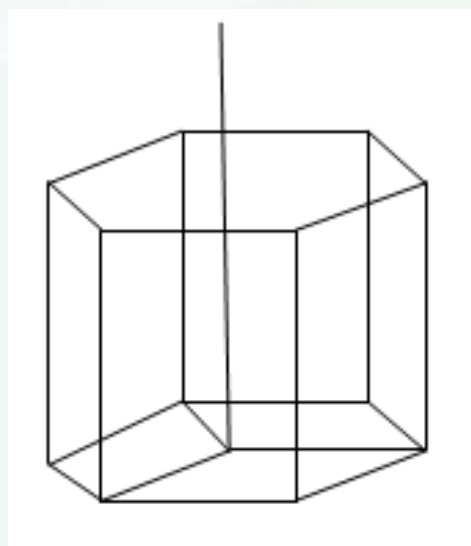
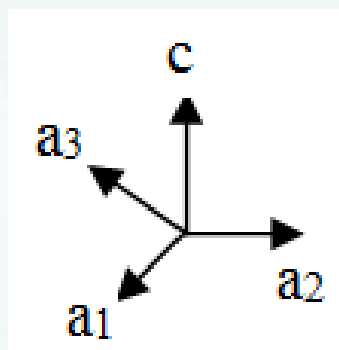
جهات با اندیس‌های مشابه را جهات هم‌خانواده گویند. تفاوت در نحوه قرارگیری اندیس‌ها ناشی از نحوه تعیین محورهای مختصات است.
برای نمایش جهات هم‌خانواده از علامت $\langle \rangle$ استفاده می‌شود.

$$\langle 100 \rangle = [001], [00\bar{1}], [100], [\bar{1}00], [010], [0\bar{1}0]$$



اندیس گذاری جهات کریستالی در ساختار HCP

در ساختارهای HCP سه محور a_1 ، a_2 و a_3 همگی در داخل یک صفحه منفرد با نام صفحه basal تحت زاویه 120° درجه نسبت به هم قرار دارند. محور c عمود بر این صفحه است.



جهات کریستالی



اندیس جهات کریستالی در ساختار HCP به صورت $[u \ v \ t \ w]$ تعریف می شود که به ترتیب بیانگر میزان حرکت در امتداد محورهای a_1 , a_2 , a_3 و c را نشان میدهد.

نکته 1. اگر جهتی در صفحه قاعده واقع شود هیچ مولفه ای در امتداد محور c نخواهد داشت و چهارمین رقم در اندیس همواره صفر خواهد بود.

نکته 2. همواره داریم که:

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

جهات کریستالی



برای تعیین اندیس جهات کریستالی در ساختار HCP ابتدا مختصات سه تایی $[u'v'w']$ که به ترتیب میزان حرکت در امتداد محورهای a_1 ، a_2 و c را نشان داده تعیین کرده و سپس با استفاده از روابط زیر آن را به مختصات چهارتایی تبدیل می کنیم.

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

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

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

$$w = w'$$

جهت کریستالی



مثال 2. تعیین اندیس جهت کریستالی AB در سیستم HCP

$$[u'v'w'] = [100]$$

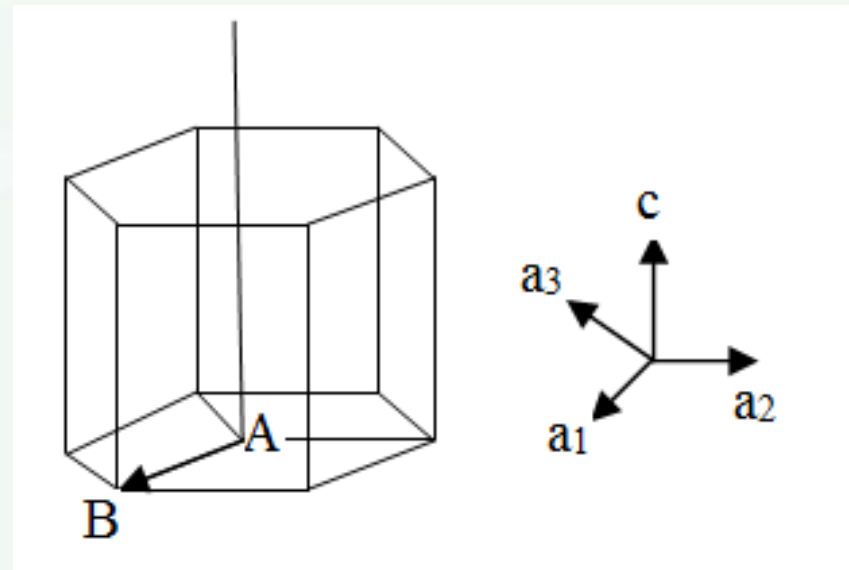
$$u = \frac{1}{3}(2u' - v') = \frac{1}{3}(2 \times 1 - 0) = \frac{2}{3}$$

$$v = \frac{1}{3}(2v' - u') = \frac{1}{3}(2 \times 0 - 1) = -\frac{1}{3}$$

$$t = -(u + v) = -\left(\frac{2}{3} - \frac{1}{3}\right) = -\frac{1}{3}$$

$$w = w' = 0$$

$$[uvtw] = [2\bar{1}\bar{1}0]$$





مثال 3. تعیین اندیس جهت کریستالی CD در سیستم HCP

$$[u'v'w'] = [0\bar{1}1]$$

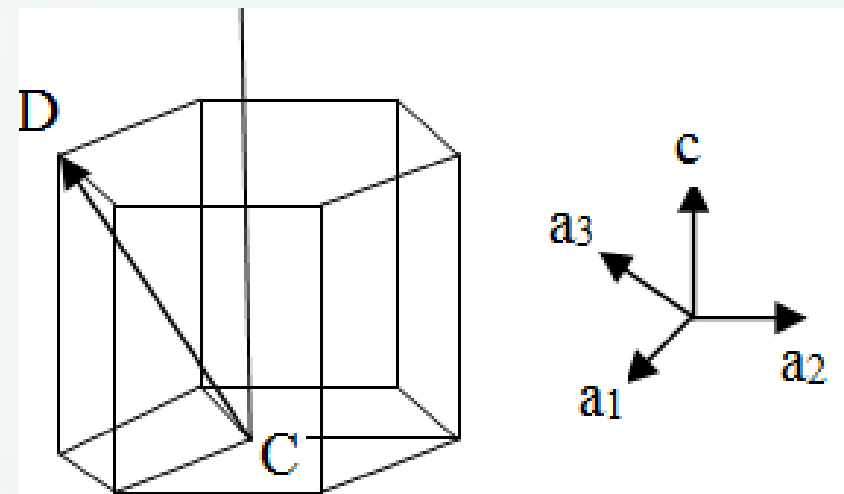
$$u = \frac{1}{3}(2u' - v') = \frac{1}{3}(2 \times 0 + 1) = \frac{1}{3}$$

$$v = \frac{1}{3}(2v' - u') = \frac{1}{3}(2 \times (-1) - 0) = -\frac{2}{3}$$

$$t = -(u + v) = -\left(\frac{1}{3} - \frac{2}{3}\right) = \frac{1}{3}$$

$$w = w' = 1$$

$$[uvtw] = [1\bar{2}13]$$



صفحات کریستالی



روش های اندیس گذاری صفحات کریستالی عبارتند از:

• روش میلر

• روش وایس

• روش کسینوس ها



روش میلر

ü مشخص کردن وضعیت صفحات کریستالی نسبت به محورهای مختصات.
ü فاصله بین دو اتم در روی هر کدام از محورها به عنوان واحد در نظر گرفته می شود.

ü هر راسی از مکعب را می توان به عنوان مبدا انتخاب نمود.

اگر صفحه ای با یکی از محورهای مختصات موازی باشد بدین معناست که آن را در بی نهایت قطع می کند.



روش میلر

۱) مشخص کردن محل برخورد صفحه با محورهای مختصات و تعیین فاصله نقطه برخورد تا مبدا

۲) معکوس کردن فاصله و تبدیل اعداد کسری به اعداد صحیح در ساده ترین حالت ممکن

۳) اگر صفحه ای یکی از محورهای مختصات را در طرف منفی قطع کند اندیس میلر آن منفی خواهد بود. در این حالت علامت منفی روی اندیس قرار می گیرد.



روش میلر

\bar{u} کلیه صفحات موازی دارای اندیس میلر برابر خواهند بود. یعنی (hkl) نشان دهنده اندیس میلر نه یک صفحه بلکه گروهی از صفحات است که با هم موازی هستند. در این حالت، مکان اندیس ها عوض نشده، بلکه مقادیر ثابت بوده و تنها علامت اعداد تغییر می کند.

\bar{u} صفحات هم خانواده نیز وجود دارند. در این حالت، مقادیر اندیس ها ثابت بوده، اما مکان و علامت آنها می تواند تغییر کند.

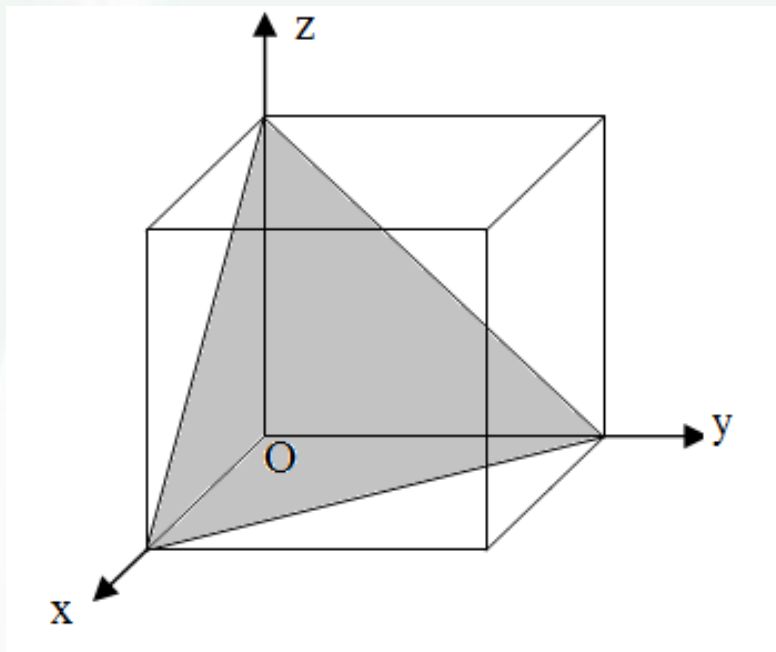
برای نمایش صفحات هم خانواده از علامت $\{ \}$ استفاده می شود.

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

صفحات کریستالی



مثال 4.

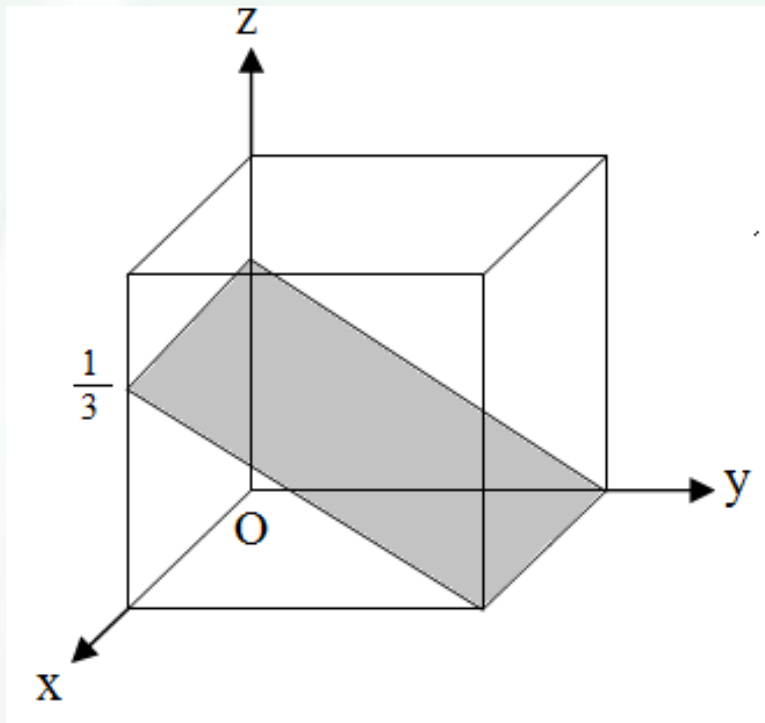


x	y	z	مبدأ: نقطه O
۱	۱	۱	محل تقاطع با محور
۱	۱	۱	معکوس کردن
(۱۱۱)			اندیس میلر

صفحات کریستالی



مثال 5.

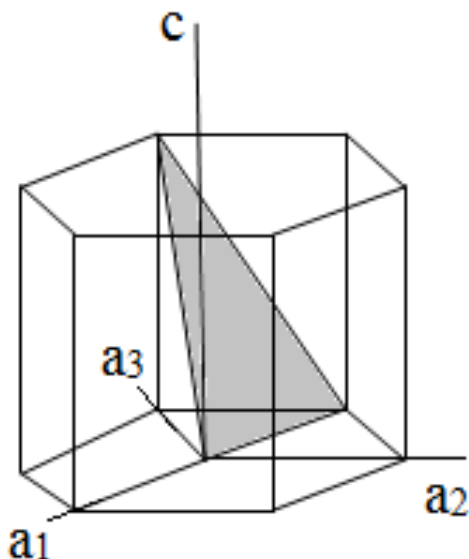


x	y	z	مبدأ: نقطه O
∞	1a	$\frac{2}{3}a$	محل تقاطع با محور
0	1	$\frac{3}{2}$	معکوس کردن
(023)			اندیس میلر

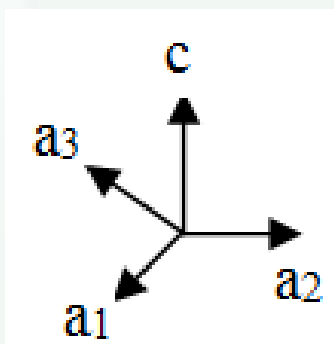
صفحات کریستالی



مثال 6.



a_1	a_2	a_3	c	
∞	$1a$	*	$1c$	محل تقاطع با محور
0	1	*	1	معکوس کردن
$(01\bar{1}1)$				اندیس میلر



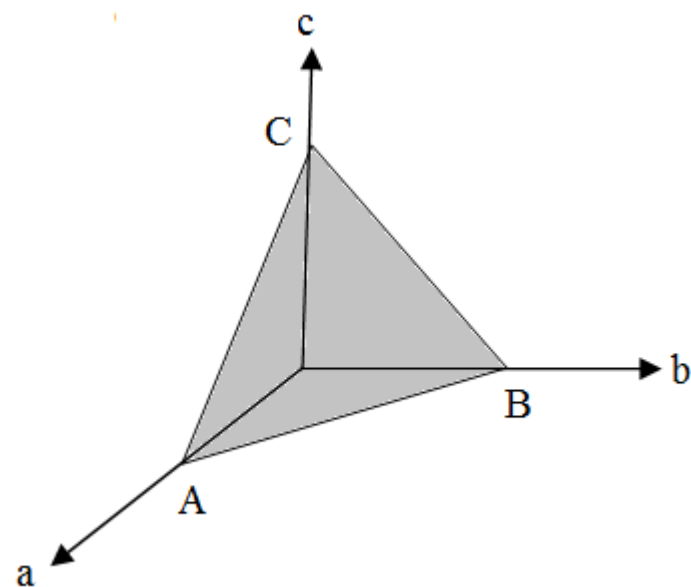
همواره مجموع سه اندیس اول معادل صفر است.





روش وایس

هرگاه صفحه ای محورهای مختصات را در نقاط A ، B و C قطع کند برای مشخص نمودن آن میتوان از پارامترهای OA ، OB و OC استفاده کرد. در این حالت، صفحه فوق را با نسبت پارامترها یعنی $OA:OB:OC$ نمایش می دهند.



اگر a_0 ، b_0 و c_0 بردارهای واحد روی محورهای مختصات باشند و m ، n و p ضرایب عددی باشند صفحه نامبرده به صورت زیر نمایش داده می شود.

$$ma_0:nb_0:pc_0$$

صفحات کریستالی



روش وایس

گوگرد آلفا دارای ساختار بلوری ارتورومبیک است و مقادیر a_0 ، b_0 و c_0 آن به ترتیب ۱۰/۴۸، ۱۲/۹۲ و ۲۴/۵۵ انگستروم است. اگر ضرایب عددی m ، n و p مساوی یک باشند داریم:

$$ma_0 : nb_0 : pc_0 = 10.48 : 12.92 : 24.55$$

$$b_0 = 1$$

$$0.813 : 1 : 1.903$$

در روش وایس، صفحات کریستالی توسط نسبت مستقیم طول های قطع شده توسط محورها مشخص می شوند.

اگر صفحه ای موازی یکی از محوره های مختصات باشد پارامتر مربوطه به آن با علامت بی نهایت نشان داده می شود. مثلاً صفحه $1a : 2b : \infty c$ ، صفحه ای است که محوره های a و b را قطع کرده و با محور c موازی است.

صفحات کریستالی



روش کسینوس ها

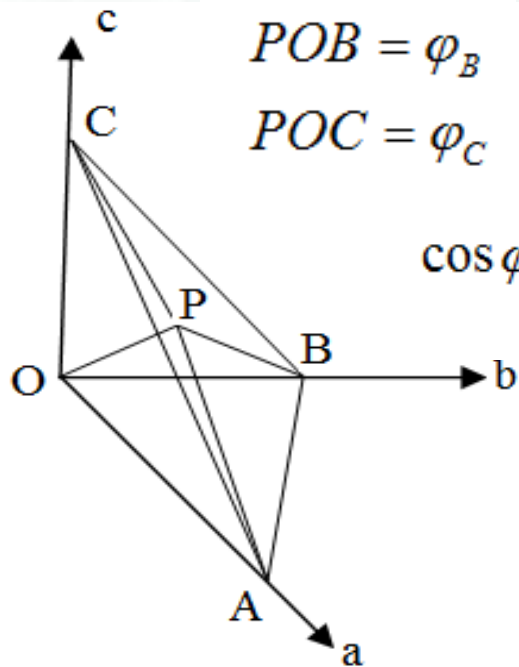
در این روش، از مبدا مختصات بر صفحه ABC (صفحه مورد نظر) عمود کرده و محل برخورد با صفحه (پای عمود) را با P نمایش می دهیم. سپس از نقطه P به نقاط A ، B و C وصل می کنیم تا سه مثلث قائم الزاویه OPA ، OPB و OPC حاصل شود.

$$POA = \varphi_A$$

$$POB = \varphi_B$$

$$POC = \varphi_C$$

زوایای حاصله را به صورت روبرو نامگذاری می کنیم.



$$\cos \varphi_A : \cos \varphi_B : \cos \varphi_C = \frac{OP}{OA} : \frac{OP}{OB} : \frac{OP}{OC} = \frac{1}{OA} : \frac{1}{OB} : \frac{1}{OC} = h : k : l$$

با تقسیم نسبت ها بر OP رابطه فوق ساده می شود.
نسبت کسینوس ها مانند نسبت اندیس های میلر است.
چون در روش میلر، معکوس OA ، معادل h است و ...



روش کسینوس ها

برای محاسبه اندیس صفحات در روش کسینوس ها معمولاً رابطه زیر بکار می رود:

$$\frac{1}{\cos \varphi_A} : \frac{1}{\cos \varphi_B} : \frac{1}{\cos \varphi_C} = h : k : l = \frac{\cos \varphi_B}{\cos \varphi_A} : 1 : \frac{\cos \varphi_B}{\cos \varphi_C}$$