بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه صنعتی خواجه نصیر الدین طوسی
دانشکده مهندسی و علم مواد

کریستالوگرافی

جلسه هفتم
(دانسیته اتمی خطی و سطحی)

دکتر رضا اسلامی فارسانی

دانسیته اتمی خطی و صفحه ای

✓ برای بدست آوردن تراکم اتمی در امتداد یک خط و همچنین بر روی یک صفحه، به ترتیب از مفاهیم دانسیته خطی و دانسیته صفحه ای استفاده می شود. برای این دو مفهوم، دو رابطه تعریف شده است.

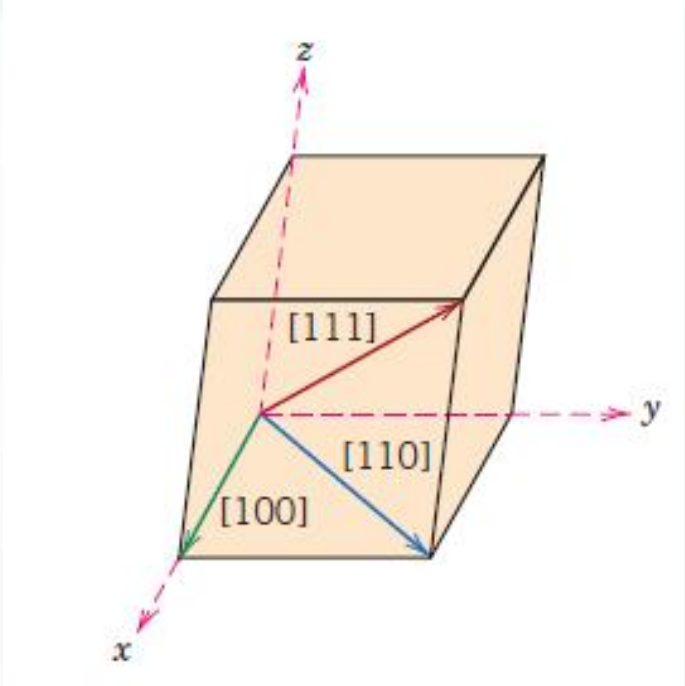
✓ لغزش و حرکت اتم ها و تغییر شکل ناشی از این لغزش عموماً در جهات و صفحات متراکم انجام می شود. جهت و صفحه متراکم، جهت و صفحه ای با بالاترین تراکم اتمی هستند یا به عبارتی، جهت و صفحه ای هستند که بیشترین تعداد اتم ها را در بر می گیرند. در سلول های واحد ساختارهای بلوری مختلف، جهات و صفحات متراکم، متفاوت می باشند.

دانسیته اتمی خطی

$$\text{دانسیته خطی LD} = \frac{\text{تعداد اتمها روی جهت مذکور}}{\text{طول جهت}}$$

Linear Density

در محاسبه میزان دانسیته خطی، اتم های دو انتهای جهت، نصف اتم در نظر گرفته می شوند.



نمایش جهات ۱۰۰، ۱۱۰ و ۱۱۱ در سلول واحد مکعبی

دانسیته اتمی خطی در جهات هم خانواده <۱۰۰>

$$LD_{\langle 100\rangle SC} = \frac{2\times\frac{1}{2}}{a} = \frac{1}{a}$$

$$a = 2R$$

$$LD_{\langle 100\rangle BCC} = \frac{2\times\frac{1}{2}}{a} = \frac{1}{a}$$

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

$$LD_{\langle 100\rangle FCC} = \frac{2\times\frac{1}{2}}{a} = \frac{1}{a}$$

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

جهات هم خانواده <۱۰۰>
بیانگر اضلاع سلول واحد
مکعبی هستند.

دانسیته اتمی خطی در جهات هم خانواده <۱۱۰>

$$LD_{\langle 110\rangle SC} = \frac{2\times\frac{1}{2}}{a\sqrt{2}} = \frac{1}{a\sqrt{2}}$$

$$a = 2R$$

$$LD_{\langle 110\rangle BCC} = \frac{2\times\frac{1}{2}}{a\sqrt{2}} = \frac{1}{a\sqrt{2}}$$

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

$$LD_{\langle 110\rangle FCC} = \frac{2\times\frac{1}{2}+1}{a\sqrt{2}} = \frac{2}{a\sqrt{2}}$$

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

جهات هم خانواده <۱۱۰>
بیانگر اقطار وجوه سلول
واحد مکعبی هستند.

دانسیته اتمی خطی در جهات هم خانواده <۱۱۱>

$$LD_{\langle 111\rangle SC} = \frac{2\times\frac{1}{2}}{a\sqrt{3}} = \frac{1}{a\sqrt{3}}$$

$$a = 2R$$

$$LD_{\langle 111\rangle BCC} = \frac{2\times\frac{1}{2}+1}{a\sqrt{3}} = \frac{2}{a\sqrt{3}}$$

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

$$LD_{\langle 111\rangle FCC} = \frac{2\times\frac{1}{2}}{a\sqrt{3}} = \frac{1}{a\sqrt{3}}$$

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

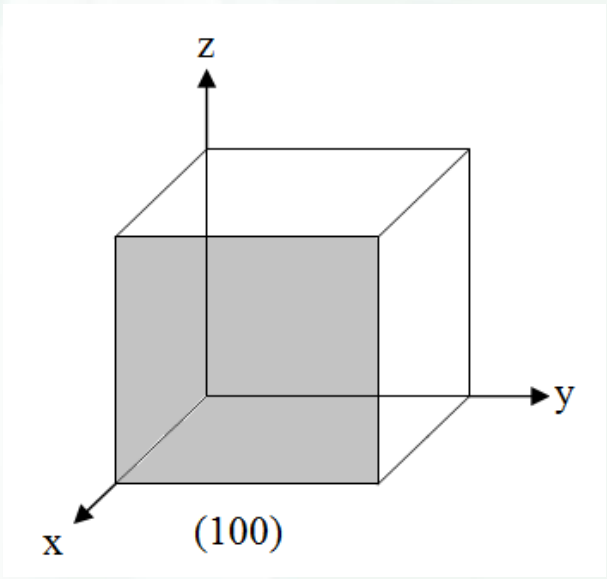
جهات هم خانواده <۱۱۱>
بیانگر اقطار سلول واحد
مکعبی هستند.

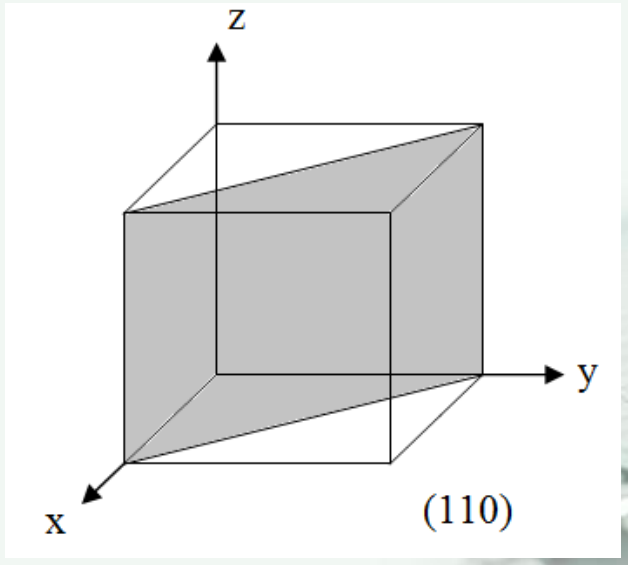
دانسیته اتمی سطحی (صفحه ای)

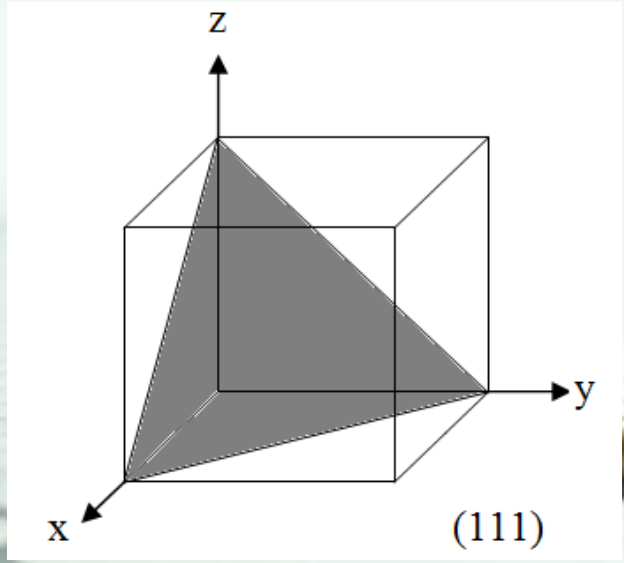
$$\text{دانسیته سطحی} \quad PD = \frac{\text{تعداد اتمهای قرارگرفته روی صفحه}}{\text{مساحت سطحی}}$$

Planar Density

در محاسبه میزان دانسیته سطحی، اتم های گوشه های صفحه، یک چهارم اتم در نظر گرفته می شوند.







نمایش صفحات ۱۰۰، ۱۱۰ و ۱۱۱ در سلول واحد مکعبی

دانسیته اتمی سطحی در صفحات هم خانواده ۱۰۰

$$PD_{\{100\}SC} = \frac{4 \times \frac{1}{4}}{a^2} = \frac{1}{a^2}$$

$$a = 2R$$

$$PD_{\{100\}BCC} = \frac{4 \times \frac{1}{4}}{a^2} = \frac{1}{a^2}$$

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

$$PD_{\{100\}FCC} = \frac{4 \times \frac{1}{4} + 1}{a^2} = \frac{2}{a^2}$$

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

صفحات هم خانواده {۱۰۰}
بیانگر وجوه سلول واحد
مکعبی هستند.

دانسیته اتمی سطحی در صفحات هم خانواده ۱۱۰

$$PD_{\{110\}SC} = \frac{4 \times \frac{1}{4}}{a \times (a\sqrt{2})} = \frac{1}{a^2\sqrt{2}}$$

$$a = 2R$$

$$PD_{\{110\}BCC} = \frac{4 \times \frac{1}{4} + 1}{a \times (a\sqrt{2})} = \frac{2}{a^2\sqrt{2}}$$

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

$$PD_{\{110\}FCC} = \frac{(4 \times \frac{1}{4}) + (2 \times \frac{1}{2})}{a \times (a\sqrt{2})} = \frac{2}{a^2\sqrt{2}}$$

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

صفحات هم خانواده {۱۱۰} بیانگر صفحات قطری سلول واحد مکعبی هستند.

دانسیته اتمی سطحی در صفحات هم خانواده ۱۱۱

$$PD_{\{111\}SC} = \frac{3\times\frac{1}{6}}{\frac{\left(a\sqrt{2}\right)^2\sqrt{3}}{4}} = \frac{\frac{1}{2}}{\frac{a^2\sqrt{3}}{2}}$$

$$a = 2R$$

$$PD_{\{111\}BCC} = \frac{3\times\frac{1}{6}}{\frac{(a\sqrt{2})^2\sqrt{3}}{4}} = \frac{\frac{1}{2}}{\frac{a^2\sqrt{3}}{2}}$$

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

$$PD_{\{111\}FCC} = \frac{(3\times\frac{1}{6})+(3\times\frac{1}{2})}{\frac{(a\sqrt{2})^2\sqrt{3}}{4}} = \frac{2}{\frac{a^2\sqrt{3}}{2}}$$

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

مثال هایی در خصوص دانسیته اتمی خطی و صفحه ای

مثال ۱- دانسیته خطی اتم ها در امتداد [۱۱۰] را در شبکه کریستالی مس (برحسب اتم بر میلی متر) تعیین کنید؟ شعاع اتمی مس، ۱/۲۷۸ آنگستروم است.

پاسخ: 3.9×10^{6} اتم بر میلی متر

مثال ۲- دانسیته صفحه (۱۰۰) در شبکه کریستالی سرب را با ساختار fcc (برحسب اتم بر میلی متر مربع) محاسبه کنید؟ شعاع اتمی سرب، ۱/۷۵۰ آنگستروم است.

پاسخ: 8.2×10^{12} اتم بر میلی متر مربع