

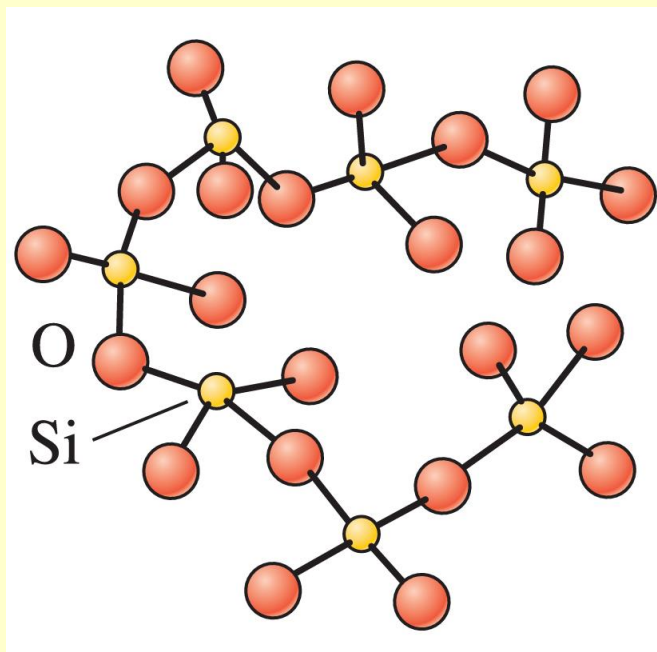
علم مواد

ساختارهای بلوری

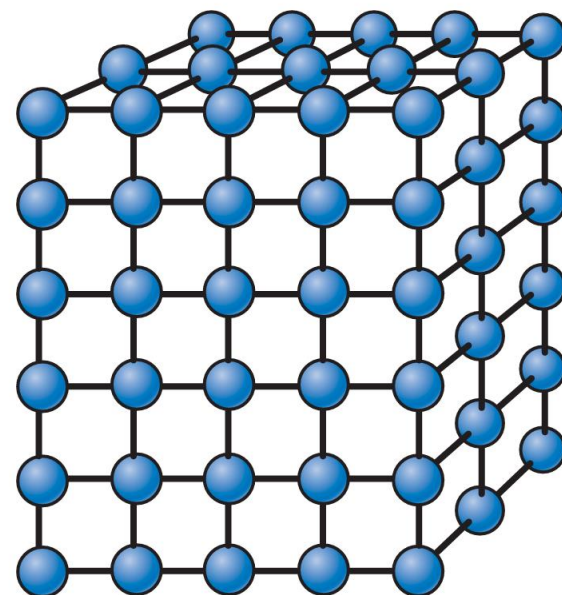
Crystal Structure



دسته‌بندی مواد از نظر ساختار



(ب) مواد آمورف



(الف) مواد بلوری

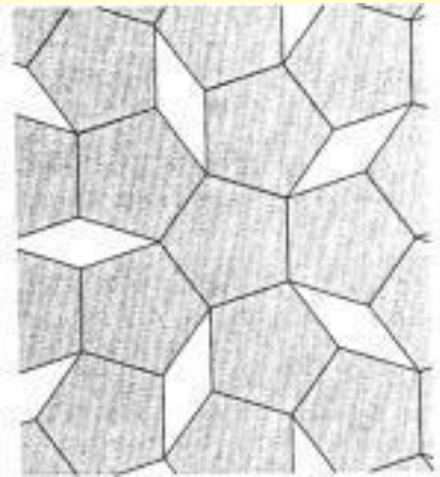
الف) فلزات، آلیاژها، بسیاری از سرامیک‌ها و برخی پلیمرها دارای نظم بلندبرد در آرایش اتم‌ها یا یون‌ها هستند که در سراسر ماده تکرار می‌شود.
ب) شیشه‌های سیلیکاتی، تنها نظم کوتاه‌برد دارند.

- مواد بلوری دارای نظم بلنددامنه در ساختار خود هستند و با آرایش خاصی از اتم‌ها که حاصل تعادل بین نیروهای دافعه و جاذبه بین اتم‌ها است، به طور متوالی در کنار هم قرار گرفته و بلور را تشکیل می‌دهند.
- این آرایش خاص که واحد تشکیل دهنده‌ی بلور است، **سلول واحد** نامیده می‌شود. برای سلول واحد، می‌توان شکل هندسی در نظر گرفت.
- این شکل به تعداد و نوع اتم‌های سازنده بستگی دارد، زیرا نیروهای دافعه و جاذبه بین اتم‌های مختلف فرق دارند.

سلول واحد

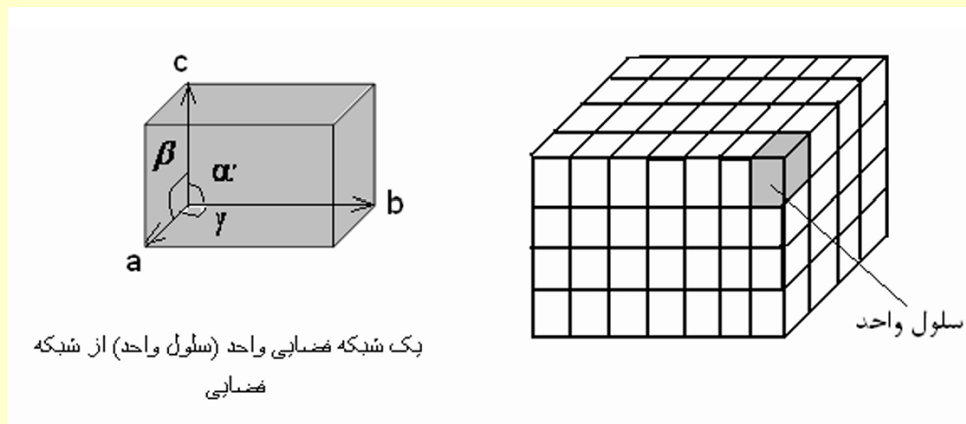
○ واحد تشکیل دهنده شبکه بلوری که از تکرار آن در جهت سه محور، بتوان شبکه بلوری را به وجود آورد، مانند مکعب

○ شکل هندسی سلول واحد باید به گونه ای باشد که از تکرار آن در سه جهت، بتوان فضا را به صورت کامل پر کرد (با تکرار شکل های پنج ضلعی در کنار هم نمی توان یک صفحه را پر کرد در صورتی که با شش ضلعی می توان صفحه را پر کرد)



شبکه بلوری

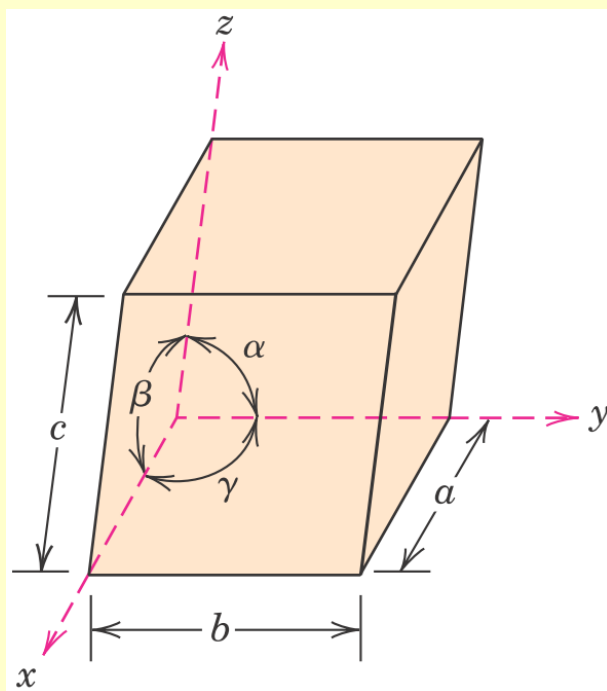
- شبکه بلوری در واقع مجموعه‌ای از نقاط هندسی است که به صورت منظم و تکراری در فضا قرار گرفته‌اند.
- شبکه بلوری همان سیستم بلوری است که در آن موقعیت قرارگیری نقاط شبکه درون سلول واحد نیز مشخص شده است.



شبکه سه بعدی

- شبکه های سه بعدی نیز مانند شبکه های دوبعدی تعریف می شوند. اگر یکی از نقاط شبکه به عنوان مبدا مختصات در فضای سه بعدی انتخاب شود، موقعیت سایر نقاط را می توان با بردار انتقال $P(uvw)$ به صورت زیر تعریف کرد:

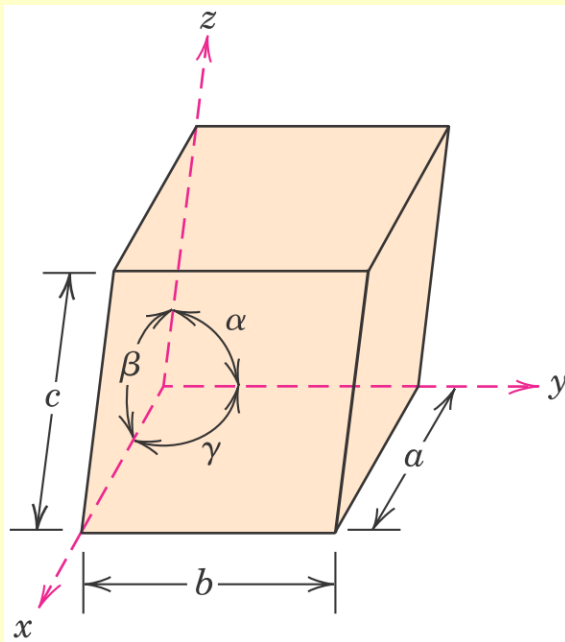
$$P(uvw) = ua + vb + wc$$



- که در آن a ، b و c بردارهای پایه با طول برابر طول اضلاع متوازی السطوح و u ، v و w اعداد صحیح هستند. با قرار گرفتن بردارهای پایه در زوایای مشخص نسبت به هم، یک متوازی السطوح سلول واحد بلور به وجود می آید. به بردارهای پایه و زوایای بین آن ها پارامترهای شبکه گفته می شود.

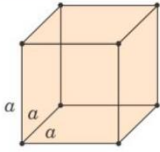
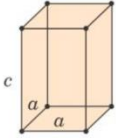
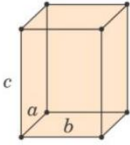
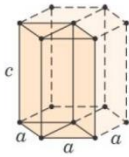
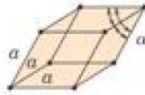
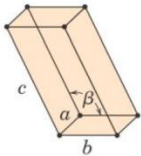
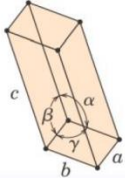
پارامتر شبکه (ثابت شبکه)

- پارامترهای شبکه (ثابت شبکه) که اندازه و شکل سلول واحد را بیان می کنند شامل اندازه‌ی هر یک از وجوه سلول واحد و زاویه‌های بین این وجوه می شود.

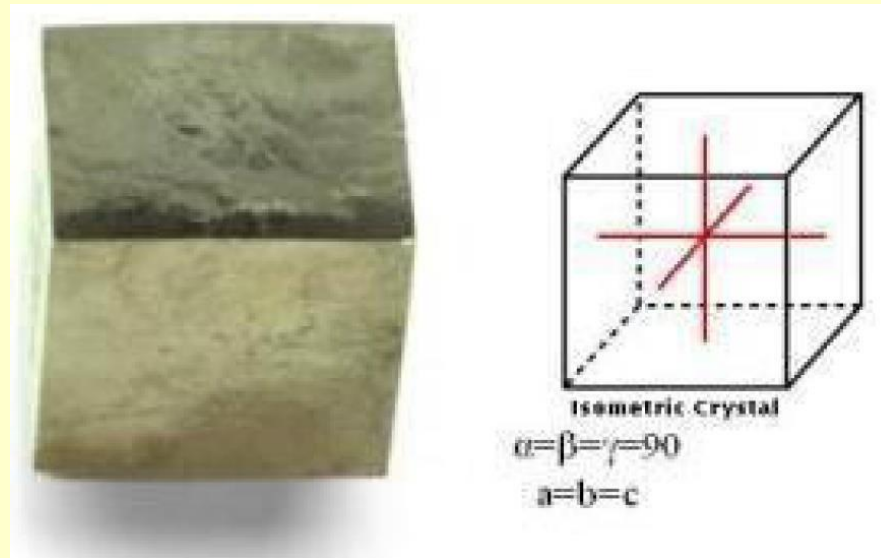


- ۱- طول بردار در امتداد محور x (a)
- ۲- طول بردار در امتداد محور y (b)
- ۳- طول بردار در امتداد محور z (c)
- ۴- زاویه‌ی بین بردارهای b و c (α)
- ۵- زاویه‌ی بین بردارهای a و c (β)
- ۶- زاویه‌ی بین بردارهای a و b (γ)

هفت سیستم بلوری (Crystal Systems)

<i>Crystal System</i>	<i>Axial Relationships</i>	<i>Interaxial Angles</i>	<i>Unit Cell Geometry</i>
Cubic	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Orthorhombic	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	
Rhombohedral	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	
Monoclinic	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	
Triclinic	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	

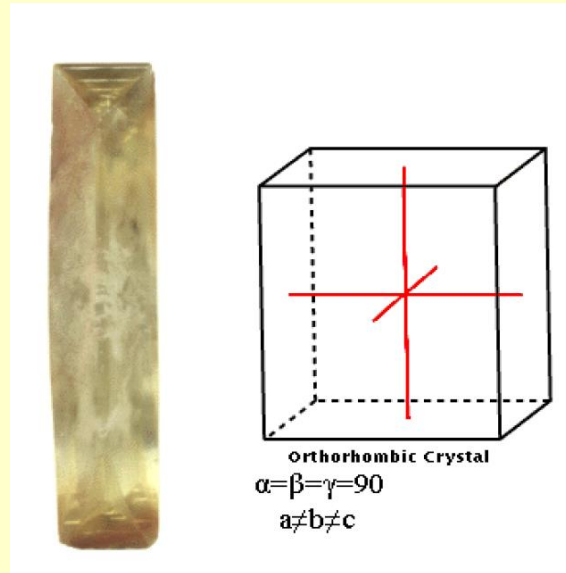
سیستم بلوری مکعبی



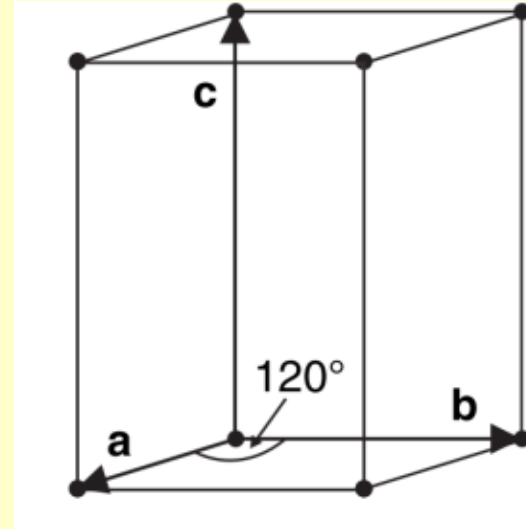
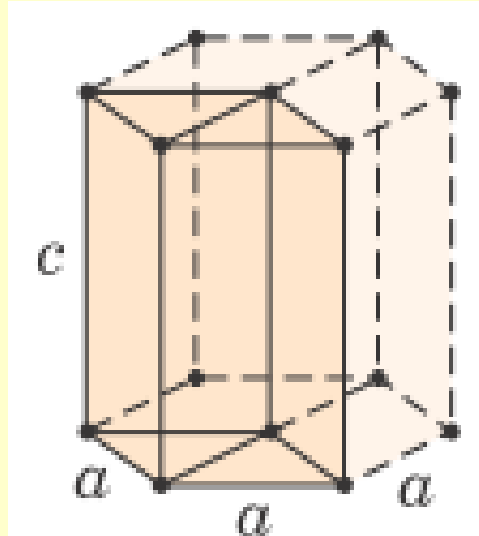
سیستم بلوری تتراگونال



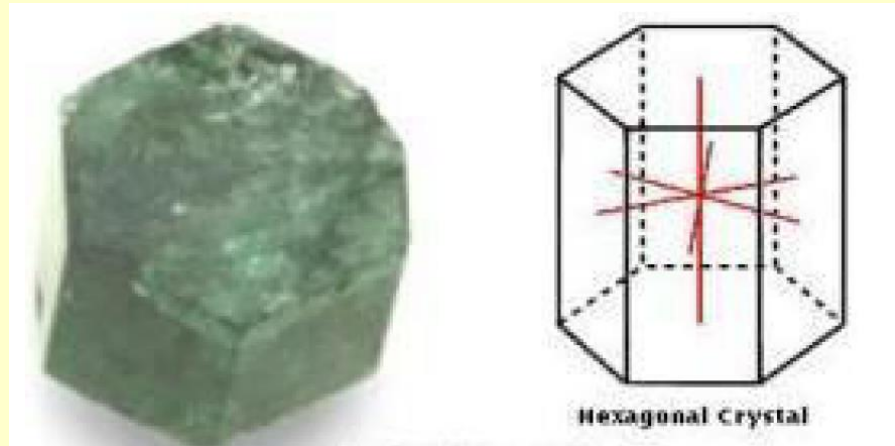
سیستم بلوری اورتورمبیک



سیستم بلوری هگزاگونال (شش گوش)



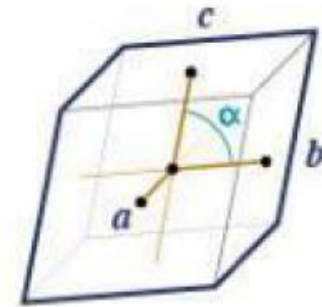
$$\alpha=\beta=90, \gamma=120$$
$$a=b\neq c$$



سیستم بلوری رمبوهدرال

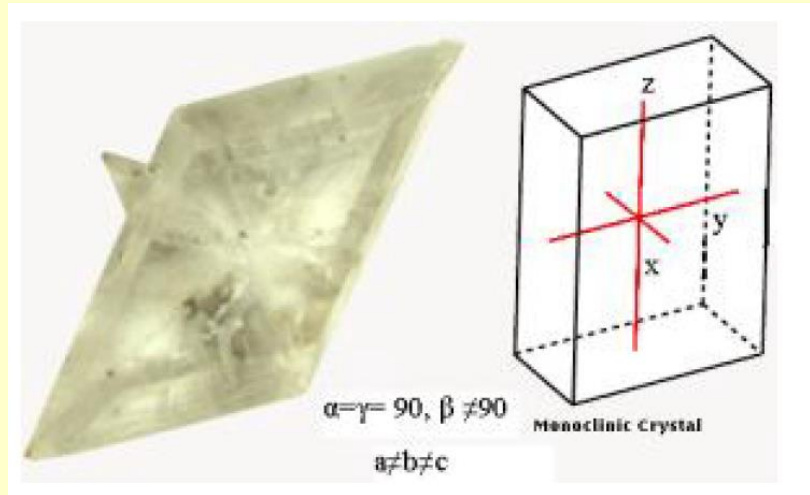


$$\alpha = \gamma = \beta \neq 90^\circ$$
$$a = b = c$$



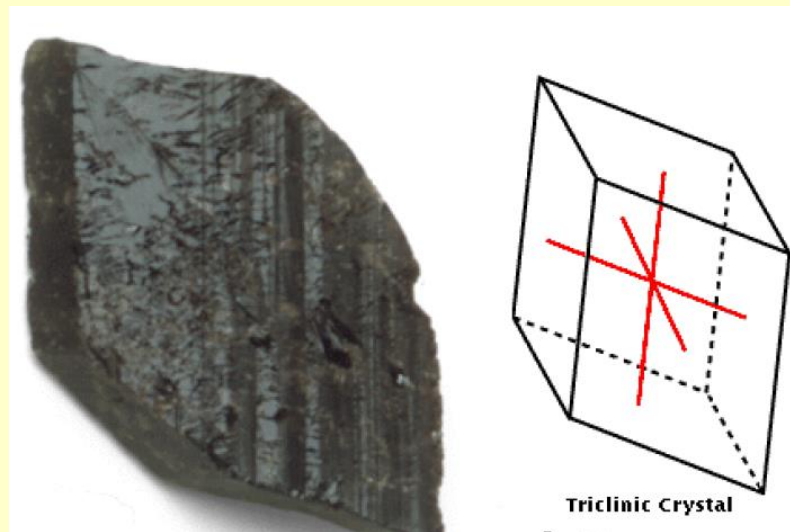
Rhombohedral Unit-Cell

سیستم بلوری مونوکلینیک



سیستم بلوری تریکلینیک

$a \neq b \neq c$



$$a \neq b \neq c \text{ و } \alpha \neq \gamma \neq \beta \neq 90^\circ \bullet$$

شبکه های سه بعدی براوه

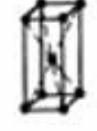
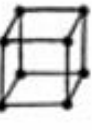
Auguste Bravais

1811-1863

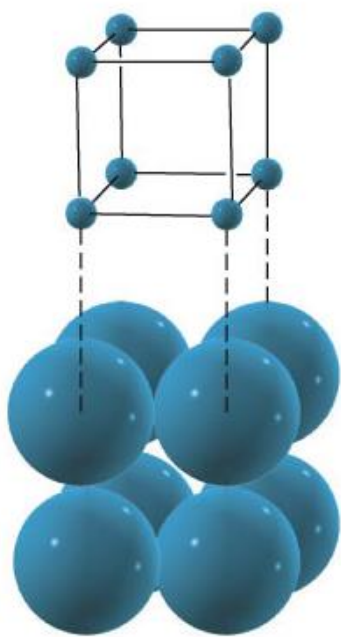


14 lattices

چهارده شبکه سه بعدی براوه

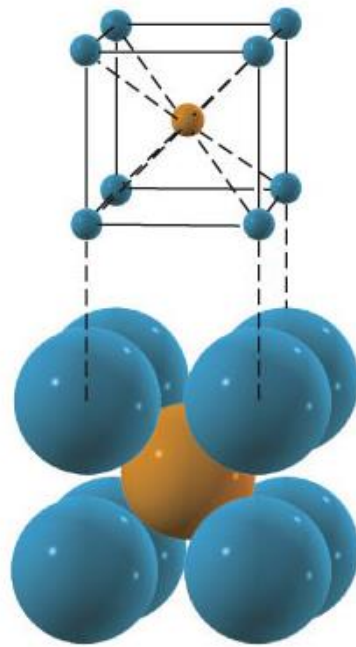
	ساده Primitive	فاصله‌های مرکز دار Base Centred	مرکزدار Body Centred	سطوح مرکزدار Face Centred
تری‌کلینیک Triclinic				
مونوکلینیک Monoclinic				
هکزاگونال (Trigonal) (تری‌گونال)				
رومبهدرال (Trigonal) (تری‌گونال)				
ارتورومبیک Orthorhombic				
تتراگونال Tetragonal				
مکعبی Cubic				

شبکه های ساده، مرکزدار، وجوه مرکزدار و قاعده مرکزدار

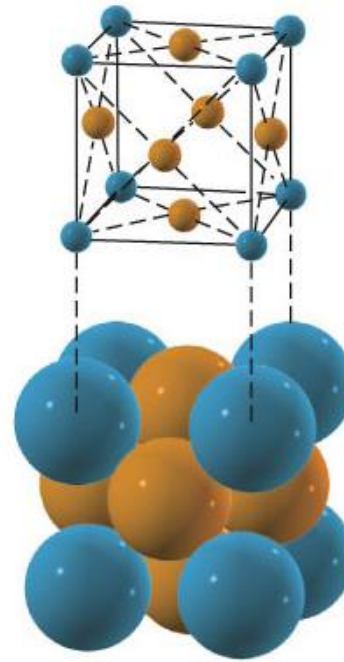


Primitive

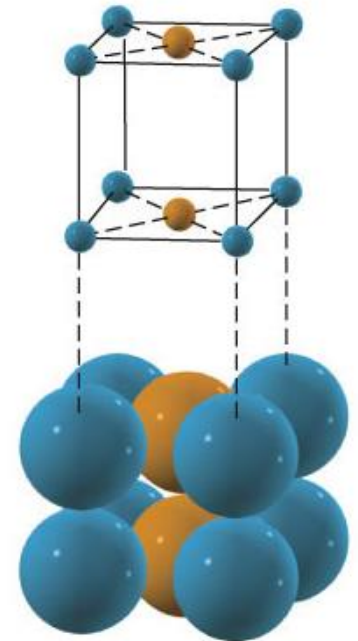
© 2007 Thomson Higher Education



Body-centered

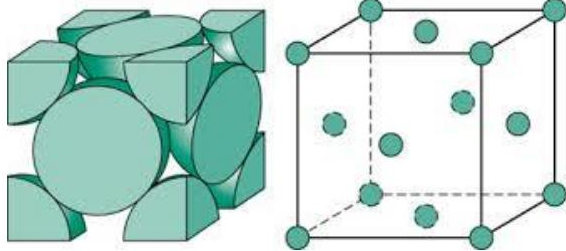


Face-centered

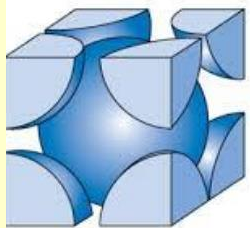


Side-centered

ساختارهای رایج در فلزات:

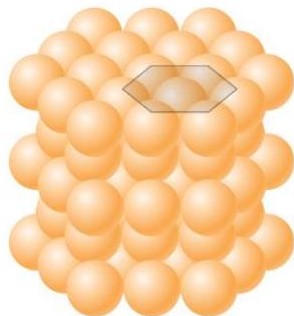
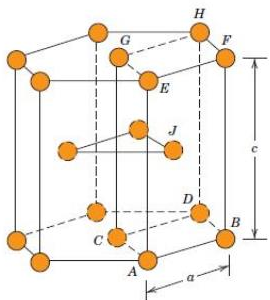


• مکعبی با وجوه مرکز پر (FCC): Cu, Al, Au و Ag

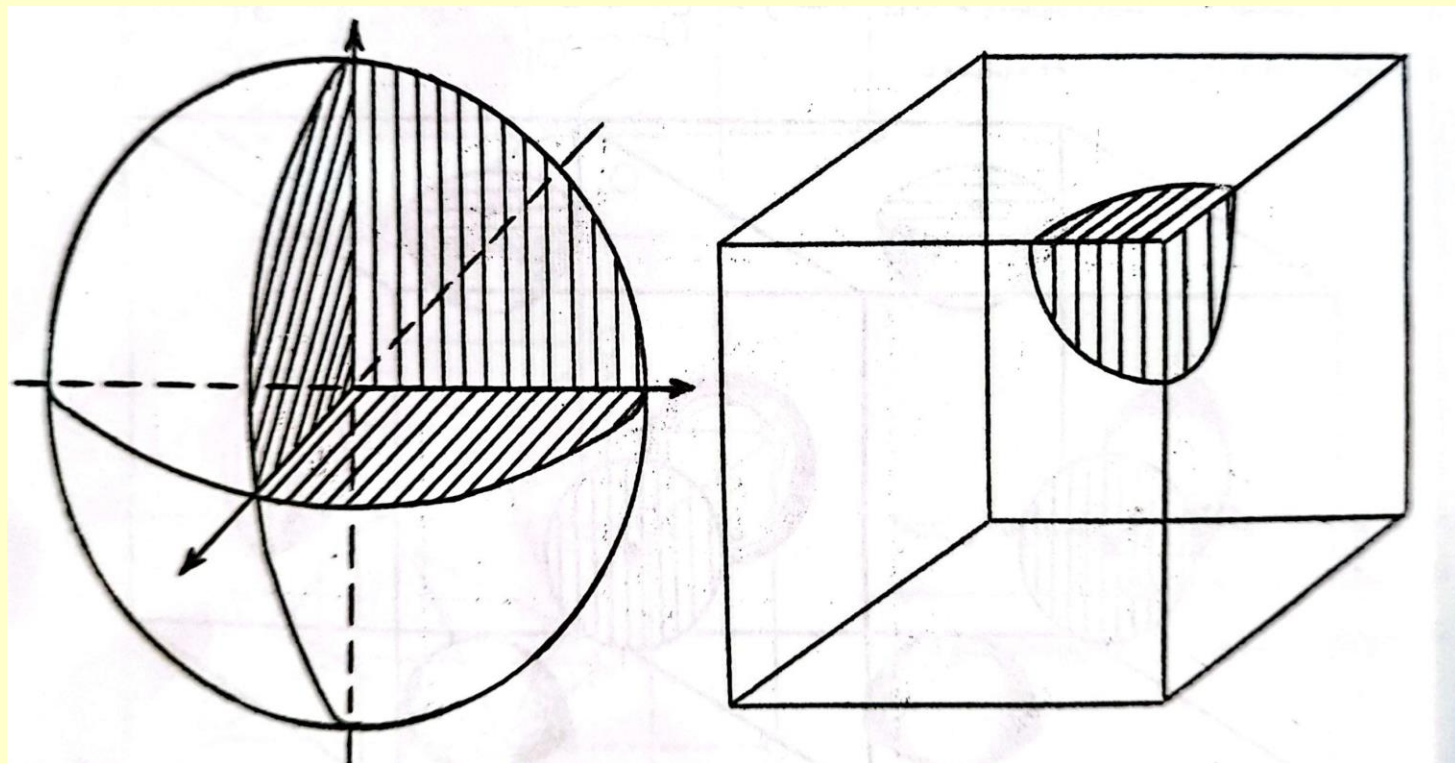


• مکعبی مرکز پر (BCC): Cr, α -Fe و W

• هگزاگونال متراکم (HCP): Cd, Mg, Ti و Zn

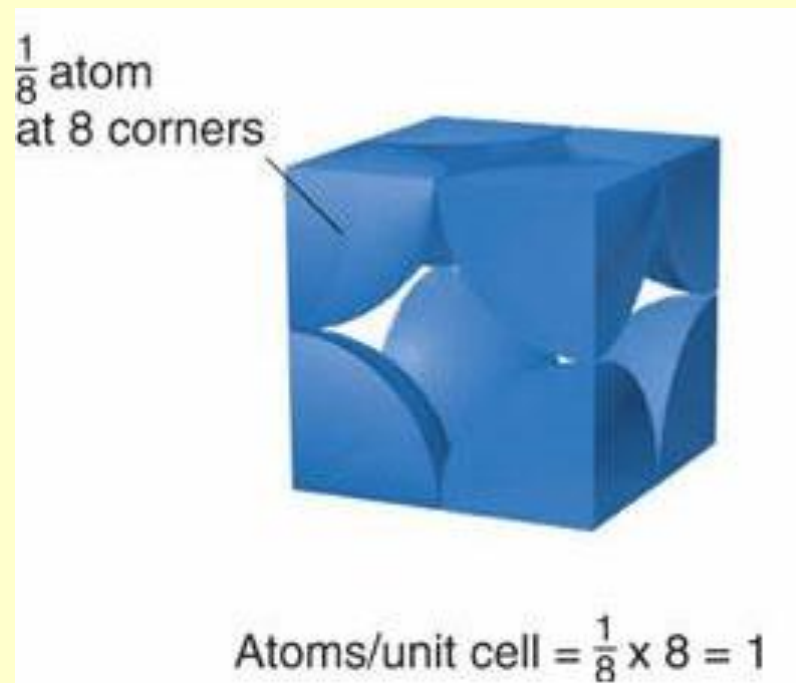
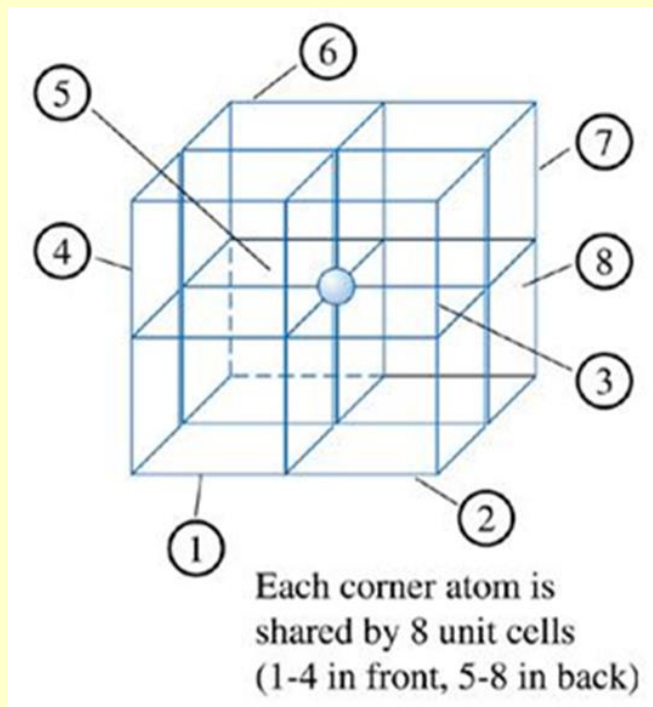


تعداد نقاط شبکه به ازای یک سلول واحد (N)



سهم اتم گوشه در سلول واحد: $\frac{1}{8}$

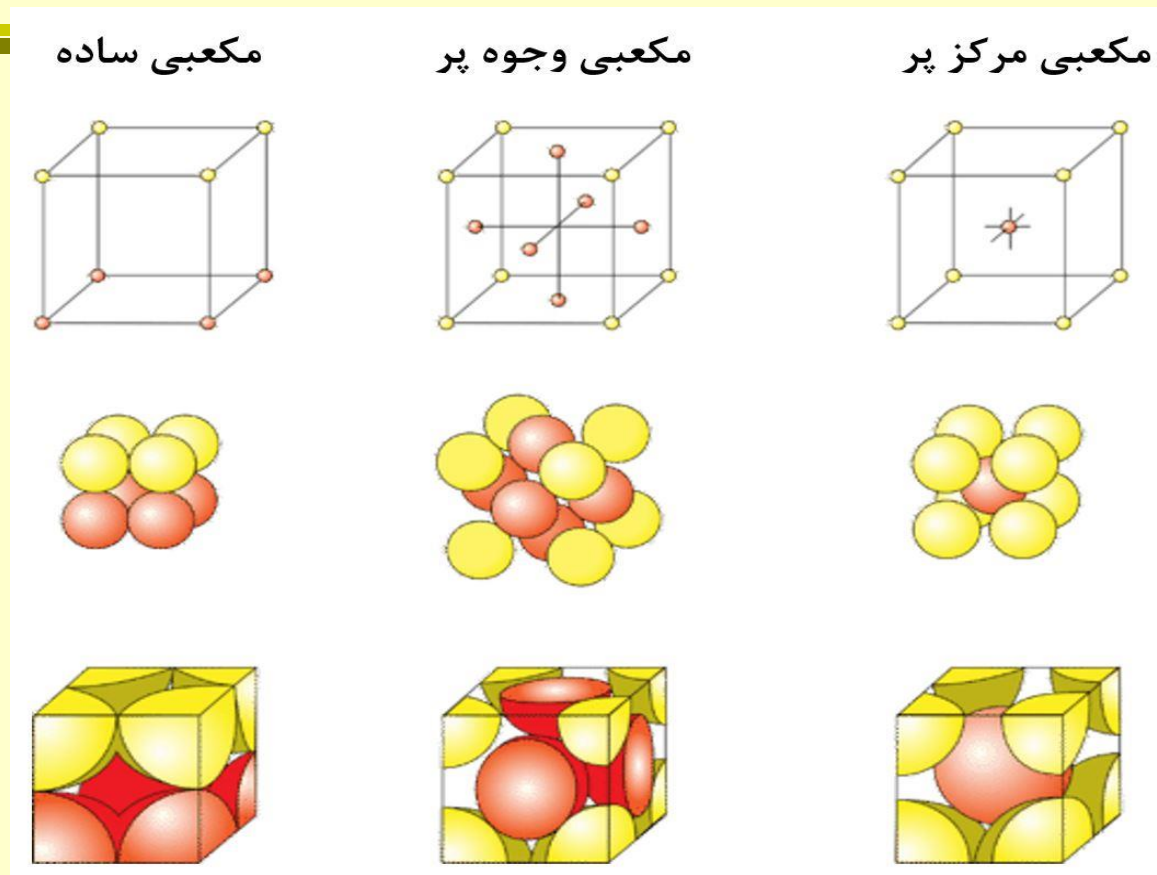
تعداد نقاط شبکه به ازای یک سلول واحد (N)



نحوهی محاسبه‌ی تعداد اتم‌ها به ازای سلول واحد مکعبی ساده: (الف) سهم هر کره در یک شبکه‌ی مکعبی ساده، (ب) نحوه اشتراک هر اتم گوشه با ۷ سلول واحد مجاور.

به همین ترتیب، اتمی که روی یال قرار داشته باشد، بین چهار سلول واحد مشترک بوده و $\frac{1}{4}$ آن متعلق به هر سلول واحد است.

تعداد اتم در سلول واحد: SC، BCC، FCC

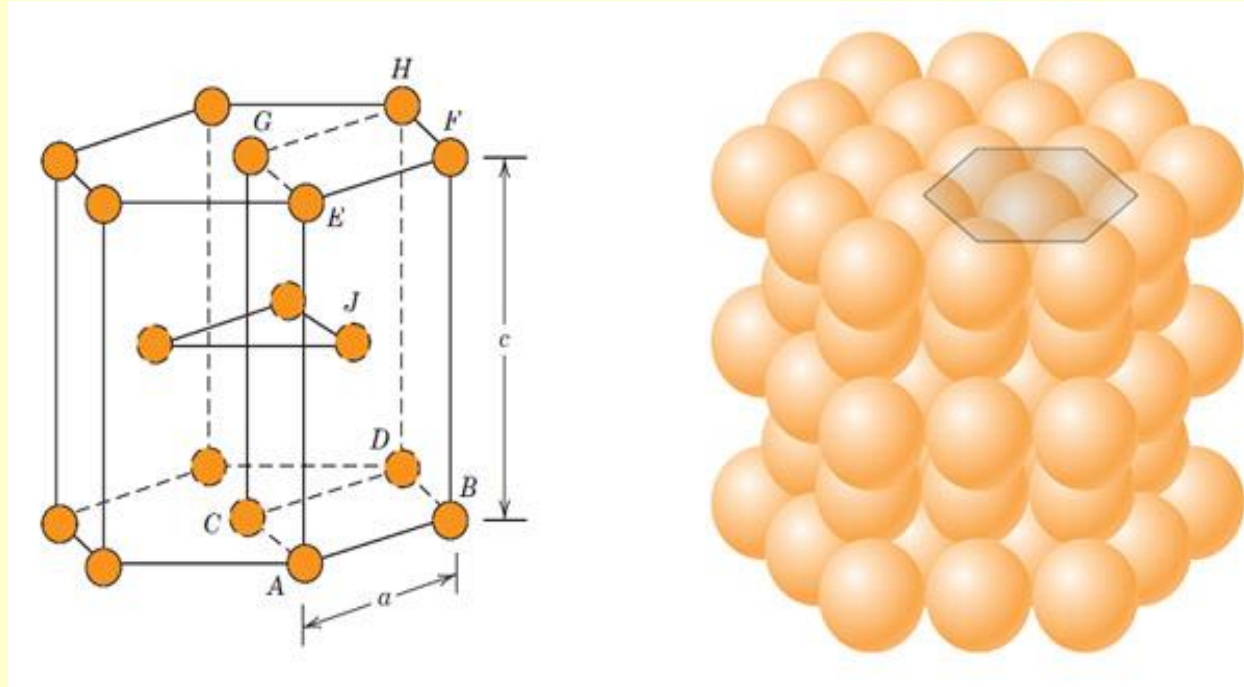


SC = Simple Cubic «مکعبی ساده» $\rightarrow N = 8 \times 1/8 = 1$

FCC = Face-Centered Cubic «مکعبی وجوه پر / وجه مرکزی» $\rightarrow N = 8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4$

BCC = Body-Centered Cubic «مکعبی مرکز پر / حجم مرکزی» $\rightarrow N = 8 \times 1/8 + 1 = 2$

تعداد اتم در سلول واحد HCP

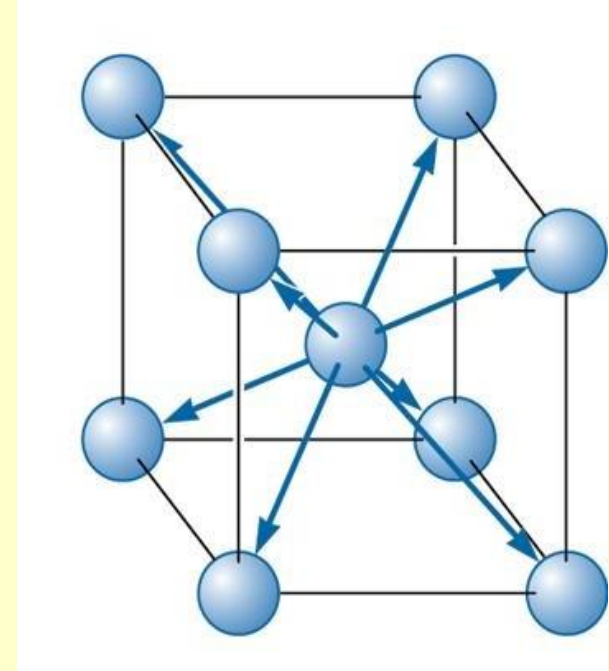
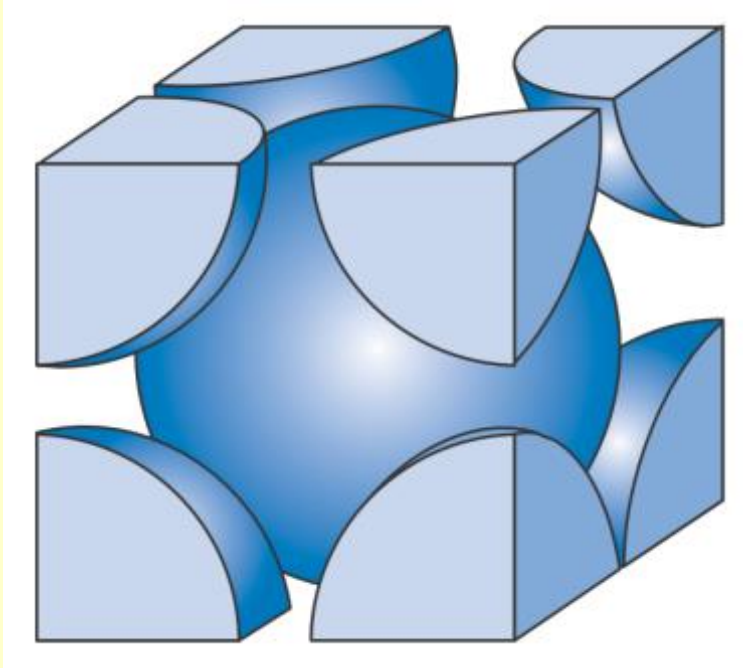


HCP (Hexagonal Close-Packed) «شش گوشه‌ای» $N = 12 \times \frac{1}{6} + 2 \times \frac{1}{2} + 3 = 6$

عدد همسایگی (عدد هماهنگی)

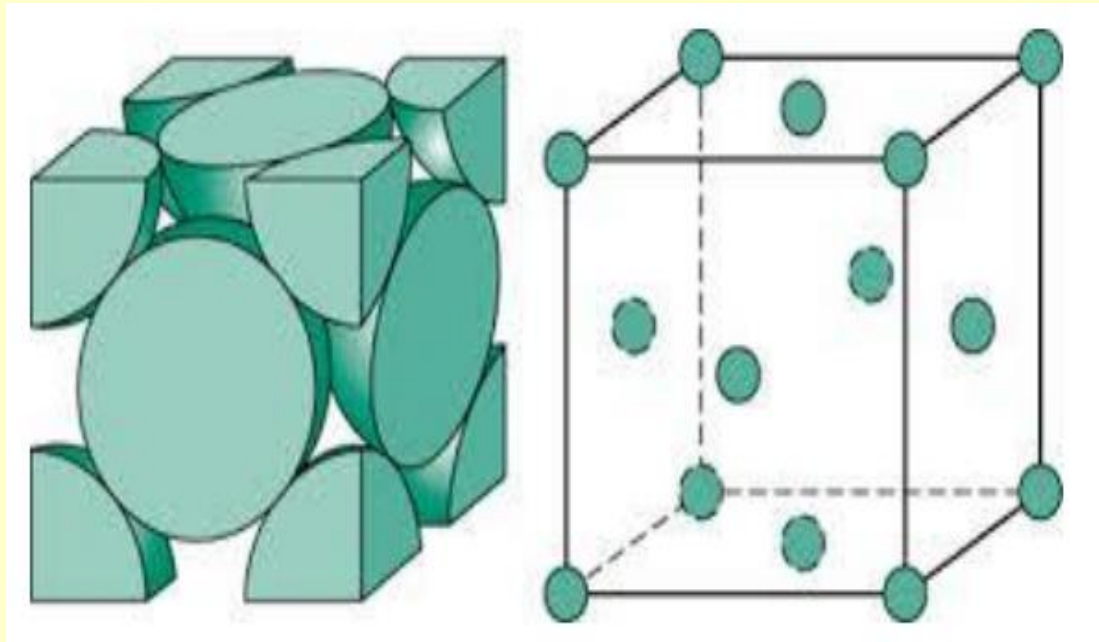
- تعداد نزدیک‌ترین اتم‌ها (یا نقاط شبکه) به یک اتم/نقطه‌ی انتخاب‌شده (coordination number) یا عدد همسایگی می‌گوییم.
- این عدد نشانه‌ای برای میزان فشردگی اتم‌ها در کنار یکدیگر است.
- در بلورهای ساده که تنها یک اتم در هر نقطه‌ی شبکه وجود دارد، عدد همسایگی اتم‌ها با ساختار شبکه متناسب است.

عدد همسایگی (عدد هماهنگی)



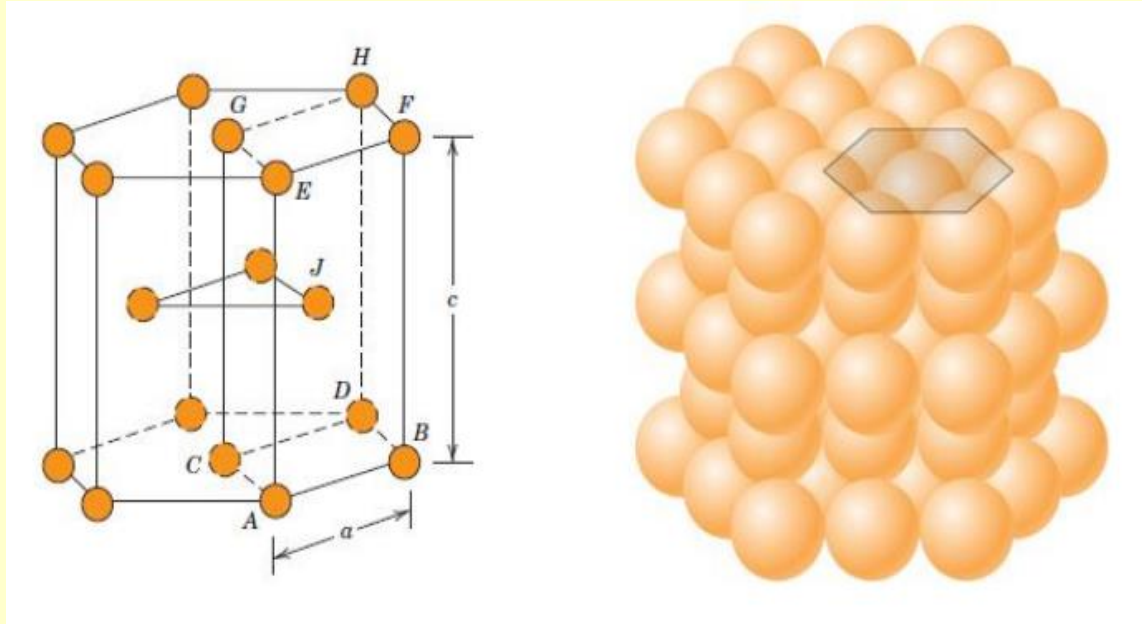
عدد همسایگی نقطه شبکه واقع در مرکز مکعب مرکزدار (BCC)، برابر ۸ است. یعنی این نقطه شبکه با ۸ نقطه شبکه مجاور (که در گوشه‌های مکعب قرار دارند)، در تماس است.

عدد همسایگی (عدد هماهنگی)



عدد همسایگی FCC برابر ۱۲ است

عدد همسایگی (عدد هماهنگی)



عدد همسایگی HCP برابر ۱۲ است

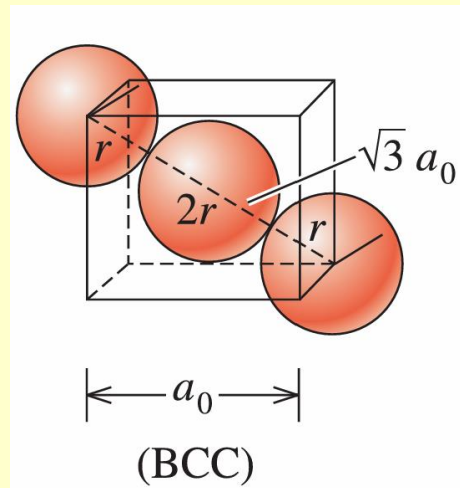
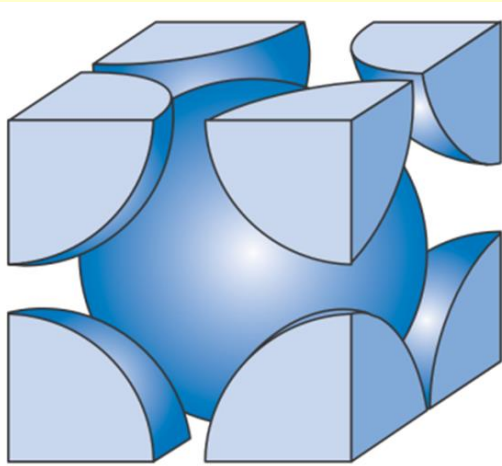
ضریب فشردگی اتمی (atomic packing factor, APF)

- ضریب فشردگی اتمی (APF) نشان دهنده‌ی کسری از حجم شبکه یا ساختار است که توسط اتم‌ها یا به عبارت بهتر نقاط شبکه اشغال شده است. برای محاسبه‌ی APF شبکه‌ها کافی است حجم نقاط شبکه را از ضرب تعداد نقاط شبکه در حجم هریک از نقاط (حجم کره) به دست آورده و آن را بر حجم سلول واحد تقسیم کنیم:

$$APF = \frac{V_s}{V_c} = \frac{N \left(\frac{4}{3} \pi r^3 \right)}{V_c}$$

ضریب فشردگی اتمی (atomic packing factor, APF)

BCC:



طول قطر فضایی مکعب:

$$d = \sqrt{a^2 + a^2 + a^2}$$

$$d = \sqrt{3} a$$

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

$$a = \boxed{\frac{4r}{\sqrt{3}}}$$

ضریب فشردگی اتمی (atomic packing factor, APF)

BCC: $a = \boxed{4r/\sqrt{3}}$

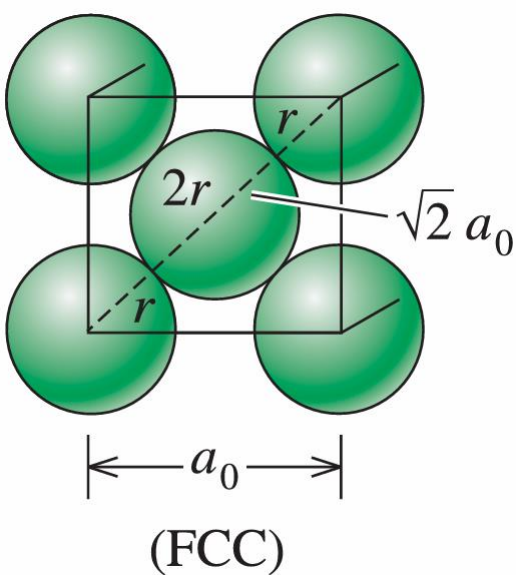
حجم کره $V = \frac{4}{3} \pi r^3$ $V = 2 \times \frac{4}{3} \pi r^3$ $V = \frac{8}{3} \pi r^3$

حجم مکعب $V = a^3$ $V = \left(\frac{4r}{\sqrt{3}} \right)^3$ $V = \left(\frac{64r^3}{3\sqrt{3}} \right)$

$$APF = \frac{\frac{8}{3} \pi r^3}{\frac{64r^3}{3\sqrt{3}}} \quad APF = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} = 0.68$$

ضریب فشردگی اتمی (atomic packing factor, APF)

FCC:

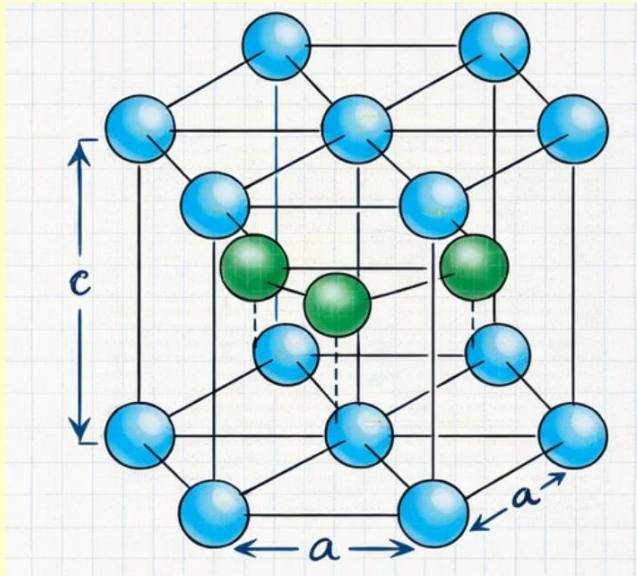


$$\text{Packing factor} = \frac{(4 \text{ atoms/cell}) \left(\frac{4}{3} \pi r^3 \right)}{a_0^3}$$

Since for FCC unit cells, $a_0 = 4r/\sqrt{2}$

$$\text{Packing factor} = \frac{(4) \left(\frac{4}{3} \pi r^3 \right)}{(4r/\sqrt{2})^3} = \frac{\pi}{\sqrt{18}} \cong 0.74$$

ساختار هگزاگونال فشرده (HCP)



- در شبکه HCP دو پارامتر شبکه داریم:
← a فاصله بین مراکز اتم‌های مجاور در صفحه شش ضلعی
← c ارتفاع سلول واحد در راستای عمودی

- در شبکه HCP ایده‌آل ارتباط c و a به صورت زیر است:

$$\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1.63$$

- تذکر: در فلزات HCP واقعی نسبت از مقدار ایده‌آل انحراف مثبت یا منفی دارد.
- ضریب فشردگی اتمی: $(APF)_{HCP} = 0.74$

ضریب فشردگی اتمی (atomic packing factor, APF)

HCP:

حجم یک اتم:

$$V_{atom} = \frac{4}{3}\pi r^3$$

پس حجم 6 اتم:

$$V_{atoms} = 6 \times \frac{4}{3}\pi r^3$$

$$V_{atoms} = 8\pi r^3$$

در HCP:

$$a = 2r$$

نسبت ایده آل:

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

پس:

$$c = 1.633a$$

سلول HCP یک منشور شش ضلعی است.

مساحت شش ضلعی:

$$A = \frac{3\sqrt{3}}{2}a^2$$

پس حجم:

$$V_{cell} = A \times c$$

$$V_{cell} = \frac{3\sqrt{3}}{2}a^2c$$

ضریب فشردگی اتمی (atomic packing factor, APF)

HCP:

$$a = 2r$$

$$a^2 = 4r^2$$

$$V_{cell} = \frac{3\sqrt{3}}{2} \times 4r^2 \times c$$

$$V_{cell} = 6\sqrt{3}r^2c$$

$$c = 1.633(2r) = 3.266r$$

$$V_{cell} = 6\sqrt{3}r^2(3.266r)$$

$$APF = \frac{8\pi r^3}{24\sqrt{2}r^3}$$

$$APF \approx 0.74$$

تحولات آلوتروپیک

آلوتروپی یعنی یک عنصر خالص بتواند در حالت جامد، در دماها یا فشارهای مختلف، در چند ساختار بلوری متفاوت پایدار شود.

آهن سه آلوتروپی دارد:

- در دمای محیط، دارای ساختار BCC است که آهن آلفا یا فریت نامیده می شود.
- در دمای بالای 912°C ، ساختار بلوری آهن به FCC تبدیل می شود که آهن گاما یا آستنیت نامیده می شود.
- از دمای 1394°C ، تا دمای ذوب در 1538°C ، مجدداً ساختار BCC پایدار است که آهن دلتا نامیده می شود.

محاسبه‌ی چگالی نظری مواد بلوری

$$P = \frac{N \times A}{N_A \times V_{uc}}$$

- N : تعداد اتم به ازای سلول واحد، A : جرم اتمی، V_{uc} : حجم سلول واحد، NA : عدد آووگادرو
- **تذکر:** براساس این رابطه، چگالی مواد بلوری تابع وزن اتمی و نحوه‌ی چیده شدن اتم‌ها (نوع ساختار بلوری) است.
- **مثال:** شعاع اتمی مس 0.128nm ، ساختار بلوری آن FCC و وزن اتمی آن 63.5g/mol است. چگالی نظری آن را محاسبه و با مقدار اندازه‌گیری شده مقایسه کنید.

$$\rho = \frac{nA}{V_C N_A} = \frac{nA_{Cu}}{(16R^3 \sqrt{2}) N_A}$$

$$= \frac{(4atoms/unitcell)(63.5g/mol)}{[16\sqrt{2}(1.28 \times 10^{-8} cm)^3 / unitcell] (6.023 \times 10^{23} atoms/mol)}$$

$$= 8.89 g/cm^3$$

- مقدار تجربی چگالی مس $8.94 g/cm^3$ است که تطابق خوبی با مقدار پیش‌بینی شده در بالا دارد.

- ۱- APF در ساختارهای بلوری فلزات مستقل از نوع اتم است.
- ۲- فلزات تمایل به افزایش CN دارند. هرچه APF بیش تر باشد CN نیز بیش تر است.
- ۳- APF نمایانگر فشرده بودن ساختار بلوری است.
- ۴- یکی از راههای کنترل ساختار بلوری، کنترل عناصر آلیاژی^۱ است. برای مثال، در فولادها، از عناصر پایدارکننده FCC (با ساختار FCC) و یا عناصر پایدارکننده BCC (با ساختار BCC) استفاده می شود.

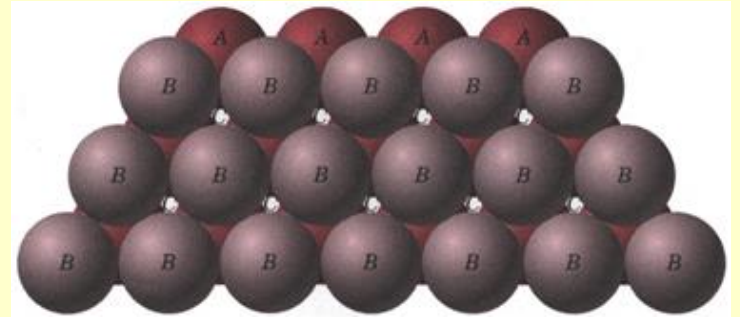
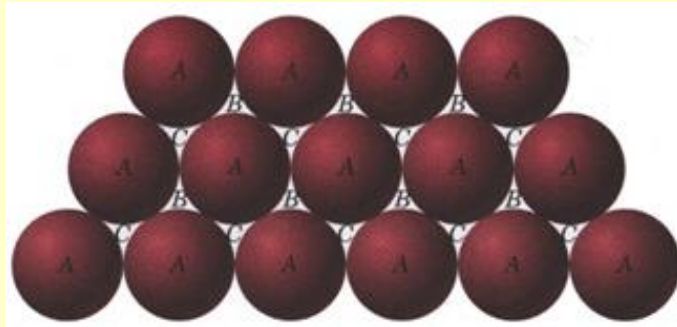
^۱عناصری فلزی یا غیرفلزی هستند که در مقادیر معین به فلز پایه اضافه می شوند تا یک آلیاژ ایجاد شود. به هر ماده‌ی فلزی که دارای دو یا چند عنصر است، آلیاژ می گویند.

ساختارهای بلوری فشرده در فلزات

- ساختارهای بلوری مکعب وجوه مرکزدار (FCC) و هگزاگونال (HCP)
 - هر دو دارای ضریب فشردگی 0.74 هستند که موثرترین نحوه‌ی چیده شدن کره‌ها یا اتم‌های با قطر یکسان است.
 - دارای فضاهاى خالی هم شکل هستند.
 - ساختار بلوری آن‌ها دارای حداقل فضای خالی و حداکثر تعداد همسایه برای هر اتم (۱۲) است
 - هر دو ساختار بلوری را می‌توان با چیدن صفحات فشرده (یعنی صفحه‌هایی که حداکثر چگالی چیده شدن اتمی را دارند) روی هم، ایجاد کرد
 - تفاوت بین دو ساختار در ترتیب چیده شدن این صفحات است

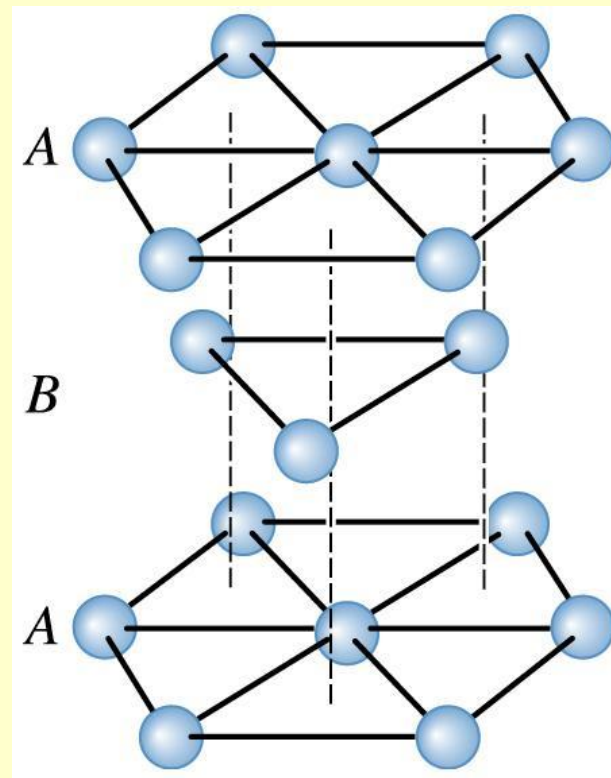
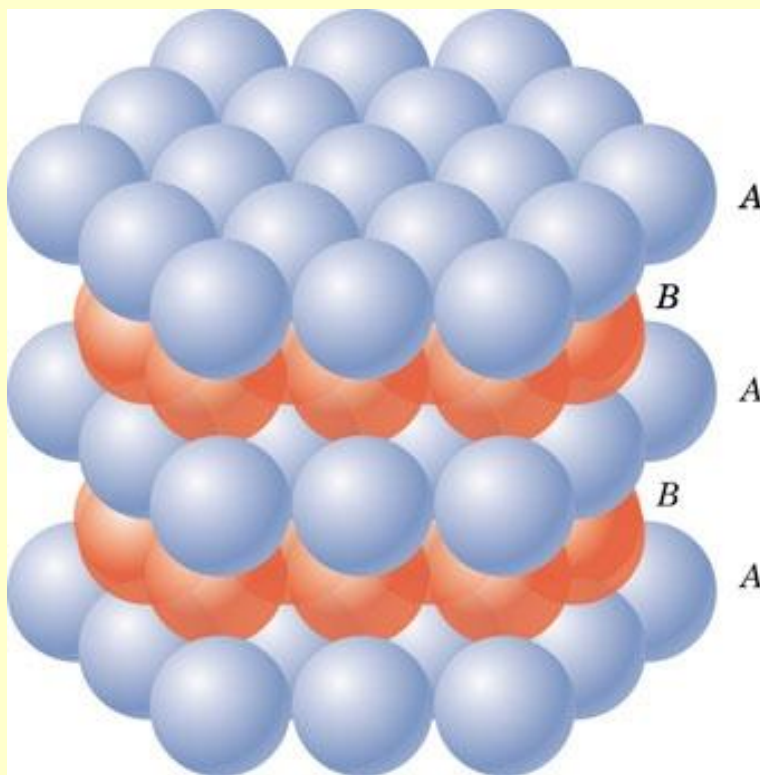
نحوه چیده شدن صفحات فشرده

- مرکزهای تمام اتم‌ها در صفحه‌ی فشرده با علامت A نام‌گذاری می‌شود
- دو دسته فرورفتگی معادل هم توسط سه اتم مجاور به وجود می‌آید که اتم‌های صفحه‌ی بعدی می‌توانند در این حفره‌ها قرار بگیرند.



- فرورفتگی‌های یک در میان که مثلث با راس رو به بالا تشکیل می‌دهند به صورت اختیاری با علامت B و بقیه‌ی فرورفتگی‌ها که مثلث با راس رو به پایین تشکیل می‌دهند با علامت C مشخص شده‌اند.
- صفحه‌ی فشرده‌ی دوم می‌تواند به صورتی روی صفحه‌ی اول قرار بگیرد که مراکز اتم‌های آن روی موقعیت‌های B یا C باشند، تا اینجا هر دو این موقعیت‌ها معادل هستند. فرض کنید که موقعیت‌های B به طور دلخواه انتخاب شده‌اند، در این صورت ترتیب چیده شدن، AB نامیده می‌شود.

نحوه چیده شدن صفحات فشرده در ساختار HCP

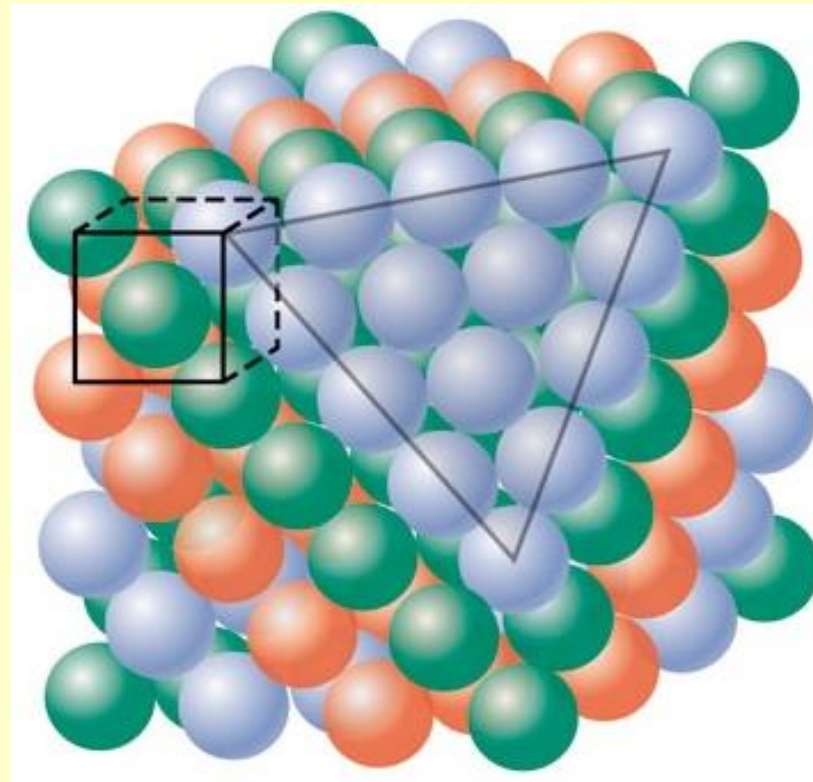
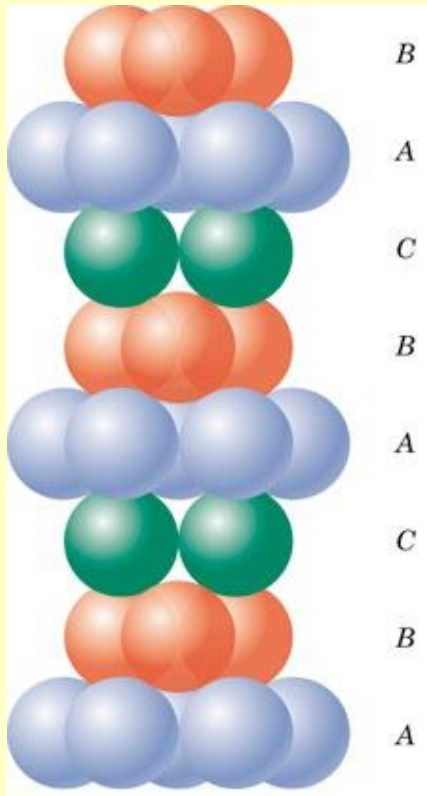


© 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

- برای HCP، مرکزهای این لایه مستقیماً روی موقعیت‌های اولیه‌ی A قرار دارند. این ترتیب چیده شدن، ABABAB...، صفحه‌های فشرده دائماً تکرار می‌شود.
- البته آرایش ACAC... نیز معادل همین است.

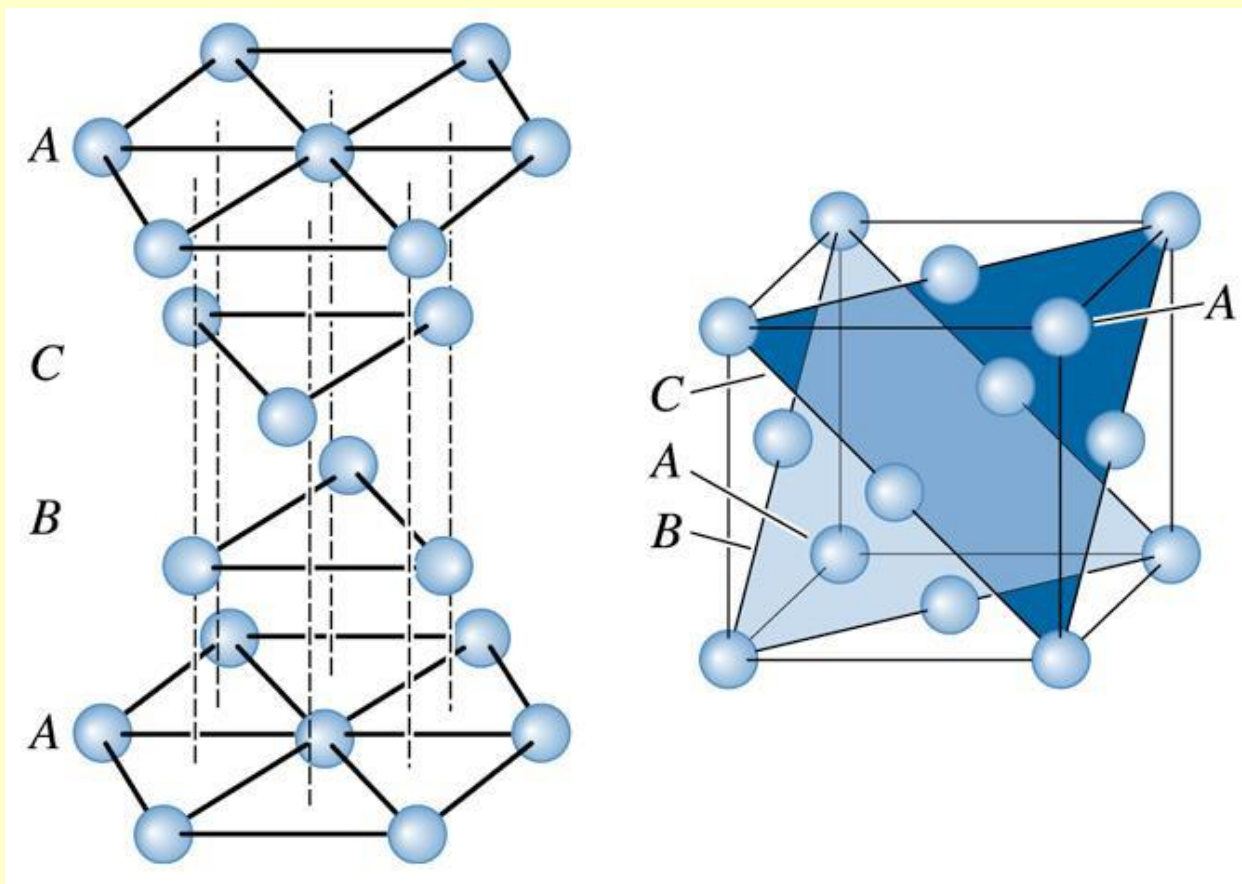
نحوه چیده شدن صفحات فشرده در ساختار FCC

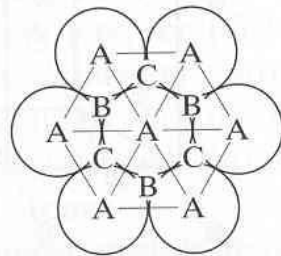
- برای ساختار بلوری FCC، مرکزهای صفحه‌ی سوم روی موقعیت‌های C صفحه‌ی اول قرار دارند. این آرایش ABCABCABC... صفحه‌های فشرده را به وجود می‌آورد؛ یعنی آرایش اتمی به صورت سه صفحه اتمی، تکرار می‌شود.



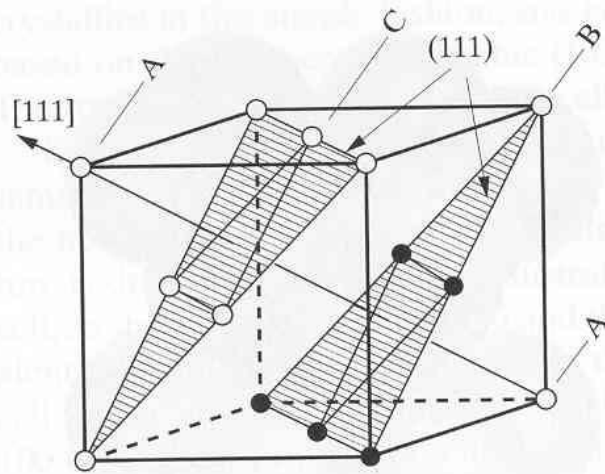
نحوه چیده شدن صفحات فشرده در ساختار FCC

- برای ساختار بلوری FCC، مرکزهای صفحه‌ی سوم روی موقعیت‌های C صفحه‌ی اول قرار دارند. این آرایش ABCABCABC... صفحه‌های فشرده را به وجود می‌آورد؛ یعنی آرایش اتمی به صورت سه صفحه اتمی، تکرار می‌شود.

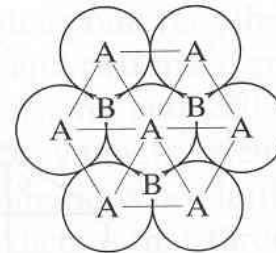




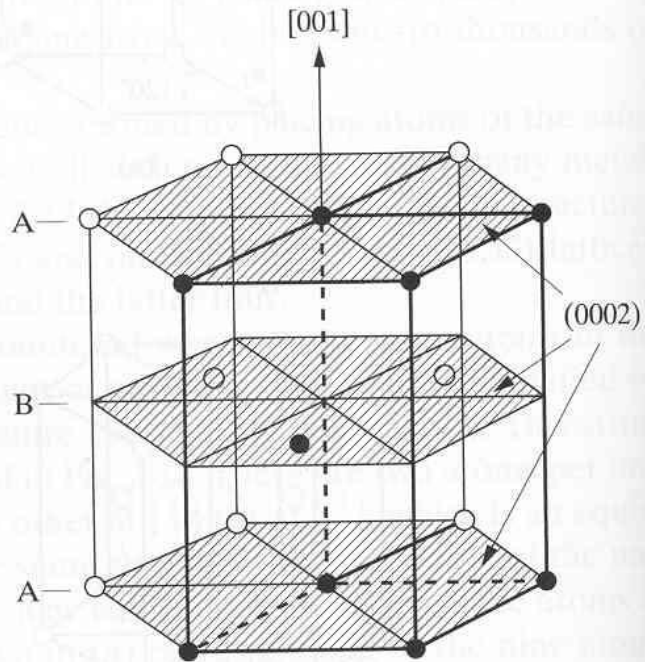
STACKING OF (111) PLANES



FACE-CENTERED CUBIC

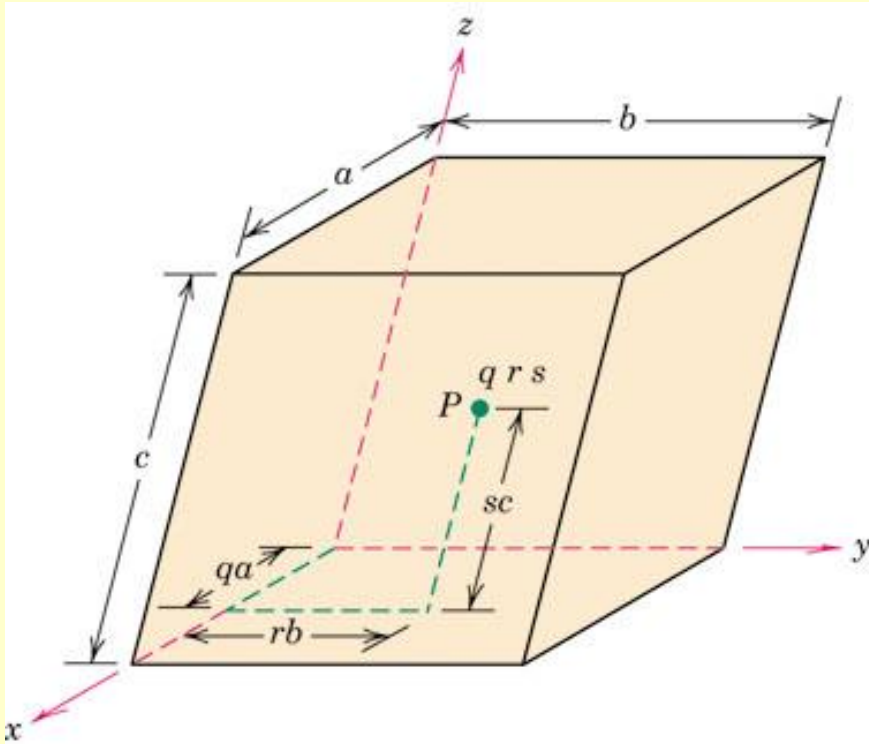


STACKING OF (0002) PLANES



HEXAGONAL CLOSE-PACKED

مختصات نقطه

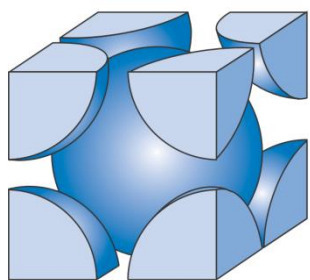


- روش تعیین $q r s$ برای نقطه P درون سلول واحد.

- مختصات q (که به صورت کسری است) مربوط به فاصله qa در امتداد محور x است که a طول لبه y سلول واحد است.

- مختصات r و s نیز به روش مشابه برای محورها y و z تعیین می‌شوند.

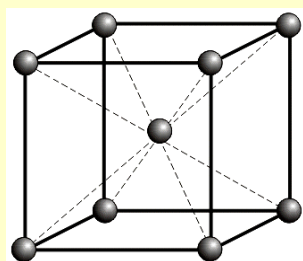
ساختار مکعبی مرکز پر (BCC)



• ۸ اتم در گوشه‌های مکعب و ۱ اتم در مرکز مکعب قرار دارند

• موقعیت اتم‌ها: $(0,0,0)$, $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

• برخی فلزات دارای ساختار BCC: آهن در دمای اتاق؛ W، Mo، V، Cr و Ti در دمای بالا



• مشخصه‌های مهم شبکه‌ی BCC:

— تعداد اتم به ازای واحد شبکه (N): $N = 8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$

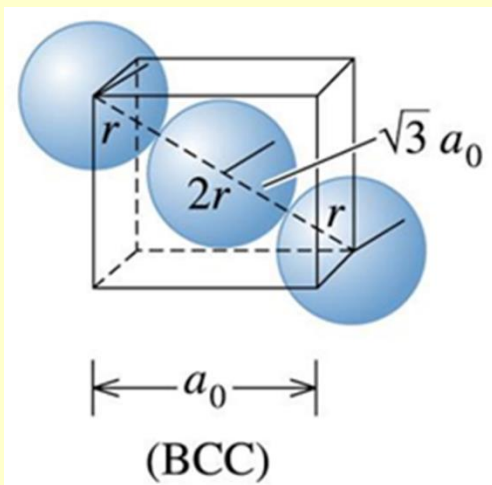
— عدد همسایگی: C.N=8

— ارتباط بین پارامتر شبکه (a_0) و شعاع اتمی (r):

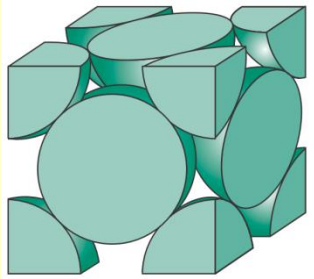
اتم‌ها در جهت قطر اصلی مکعب برهم مماس هستند،

بنابراین خواهیم داشت: $a_0 \cdot \sqrt{3} = 4r$

— ضریب فشردگی اتمی: $(APF)_{BCC} = 0.68$



ساختار مکعبی وجوه مرکزدار (FCC)



• ۸ اتم در گوشه‌های سلول واحد مکعبی و ۶ اتم در مرکز وجوه آن قرار دارند

• - موقعیت اتم‌ها: $(0,0,0)$ $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right)$ $\left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right)$ $\left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$

• - برخی فلزات دارای ساختار FCC: Al, Cu, Au, Ag, Ni, Pb

• برخی مشخصه‌های ساختار FCC:

— تعداد اتم به ازای واحد شبکه (N): $N_{FCC} = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$

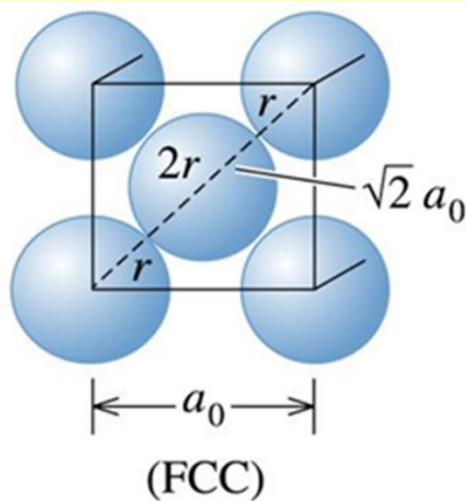
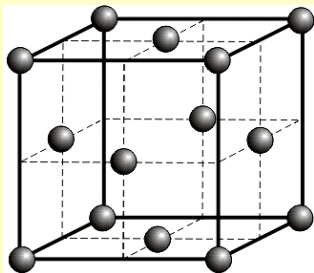
— عدد همسایگی: $(C.N)_{FCC} = 12$

— ارتباط بین پارامتر شبکه (a_0) و شعاع اتمی (r):

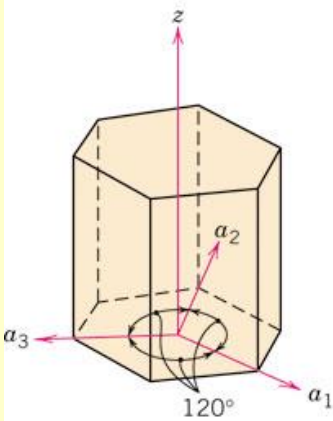
اتم‌ها در جهت قطر فرعی مکعب برهم مماس هستند.

بنابراین خواهیم داشت: $a_0 \sqrt{2} = 4r$

— ضریب فشردگی اتمی: $(APF)_{FCC} = 0.74$



ساختار هگزاگونال فشرده (HCP)



۱۲ اتم در گوشه‌های ۶ ضلعی، ۲ اتم در مرکز قاعده‌ی بالا و پایین

و ۳ اتم در وسط شبکه
موقعیت اتم‌ها: $(0,0,0)$ و $\left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right)$

چند فلز دارای ساختار HCP: Ti، در دمای اتاق، Mg، Be، Cd، Co و Zn

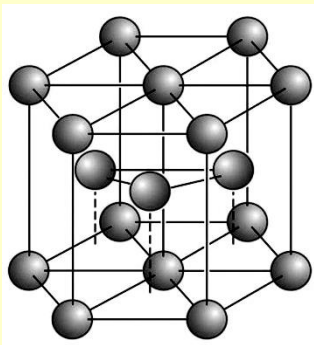
چند مشخصه‌ی مهم ساختار HCP عبارتند از:

تعداد اتم به ازای واحد شبکه (N): $N_{HCP} = 12 \times \frac{1}{6} + 2 \times \frac{1}{2} + 3 = 6$

عدد همسایگی: $(C.N)_{HCP} = 12$

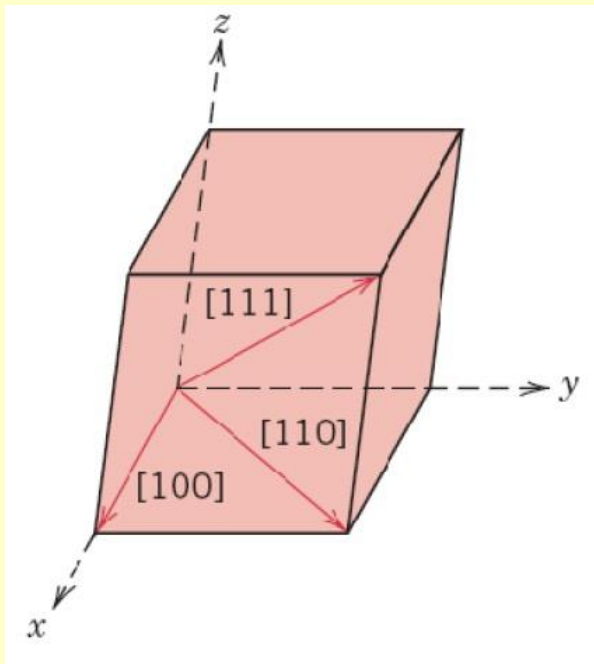
ارتباط بین پارامتر شبکه (a_0) و شعاع اتمی (r): ۱- اتم‌ها در جهت ضلع شبکه

مماس هستند پس: $a_0 = 2r$



اندیس های میلر

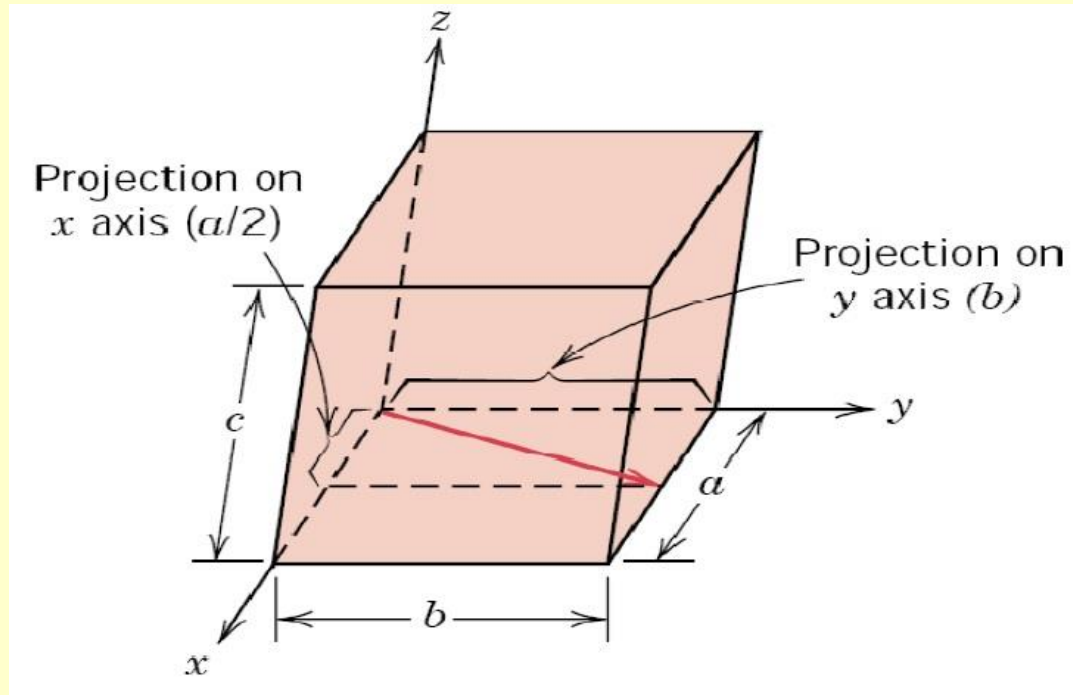
- جهات کریستالی به صورت $[uvw]$ بیان می گردند.
- اعداد ممکن است مثبت یا منفی باشند.
- مختصات انتها و ابتدای بردار را به دست می آوریم و از هم کم میکنیم.
- در صورت کسری بودن اعداد، تمامی آنها در کوچکترین مضرب مشترکشان ضرب میگردند.



اندیس های میلر

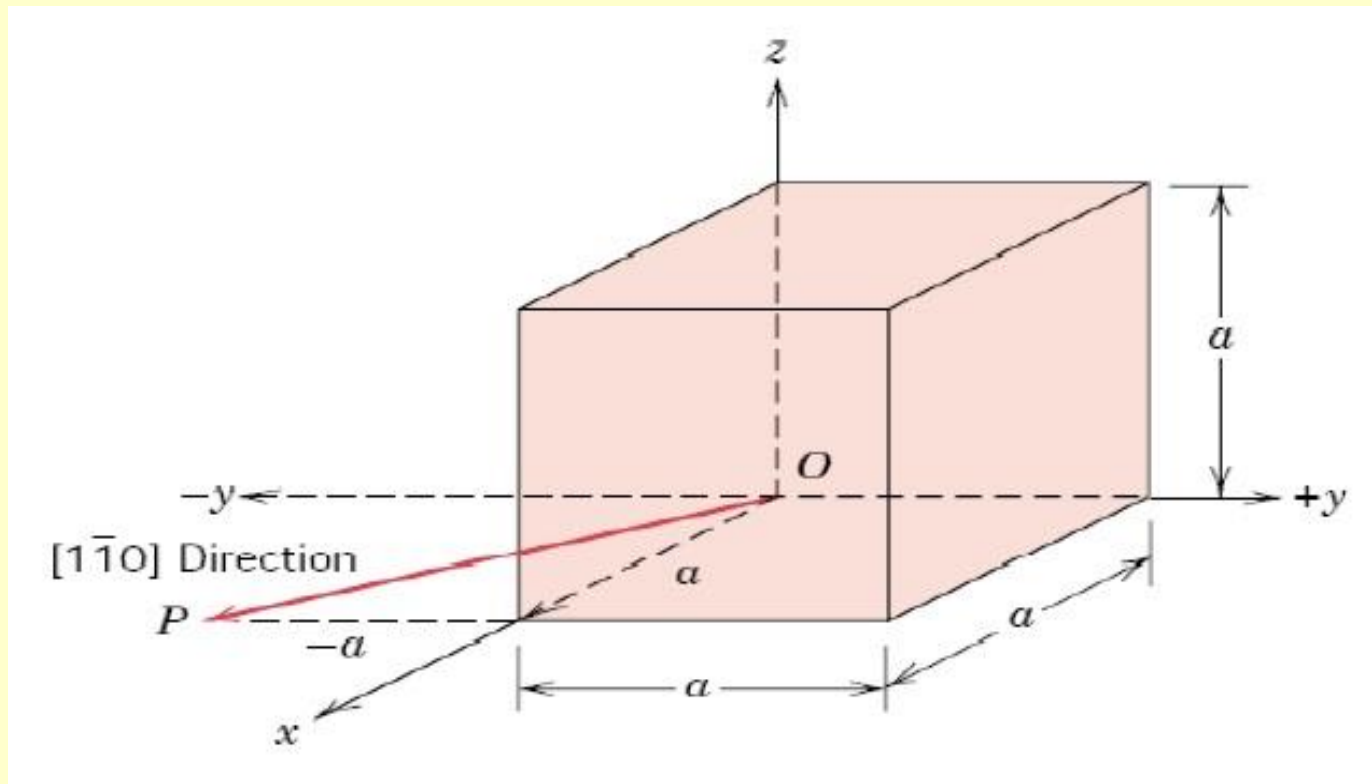
• مثال:

اندیس میلر را در جهت نشان داده شده مشخص کنید.



اندیس های میلر

مثال:



اندیس های میلر

HCP:

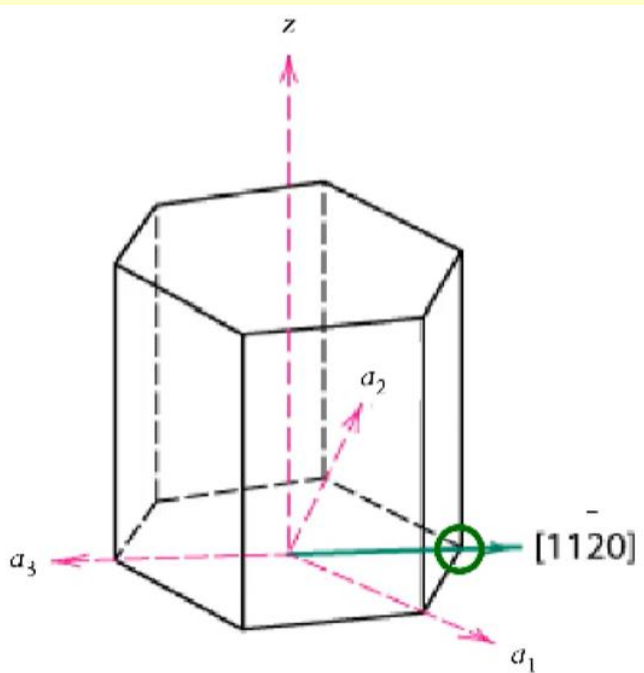
۱- بردارها با حفظ جهت و اندازه به مبدا منتقل می شوند.

۲- تصویر بردار بر روی محورهای a_1 ، a_2 ، a_3 و c داخل سلول واحد تعیین می شود.

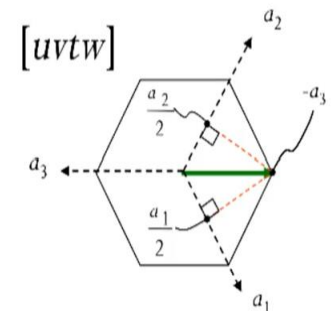
۳- به کوچکترین اعداد صحیح تبدیل می شوند (با ضرب یا تقسیم در یک مضرب مشترک).

۴- داخل براکت بدون کاما نمایش داده می شوند.

$$a_1 + a_2 = -a_3$$

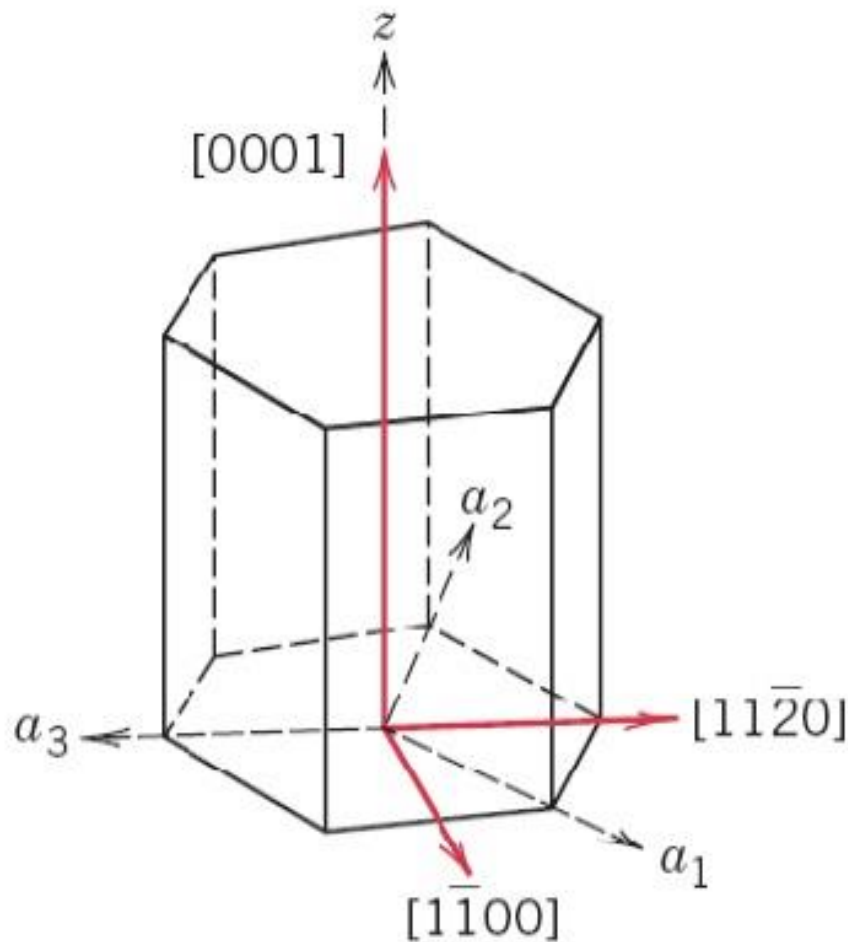


ex: $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -1, 0 \Rightarrow [1\bar{1}20]$



خط چین های قرمز رنگ تصویر بردار بر روی محورهای a_1 و a_2 هستند.

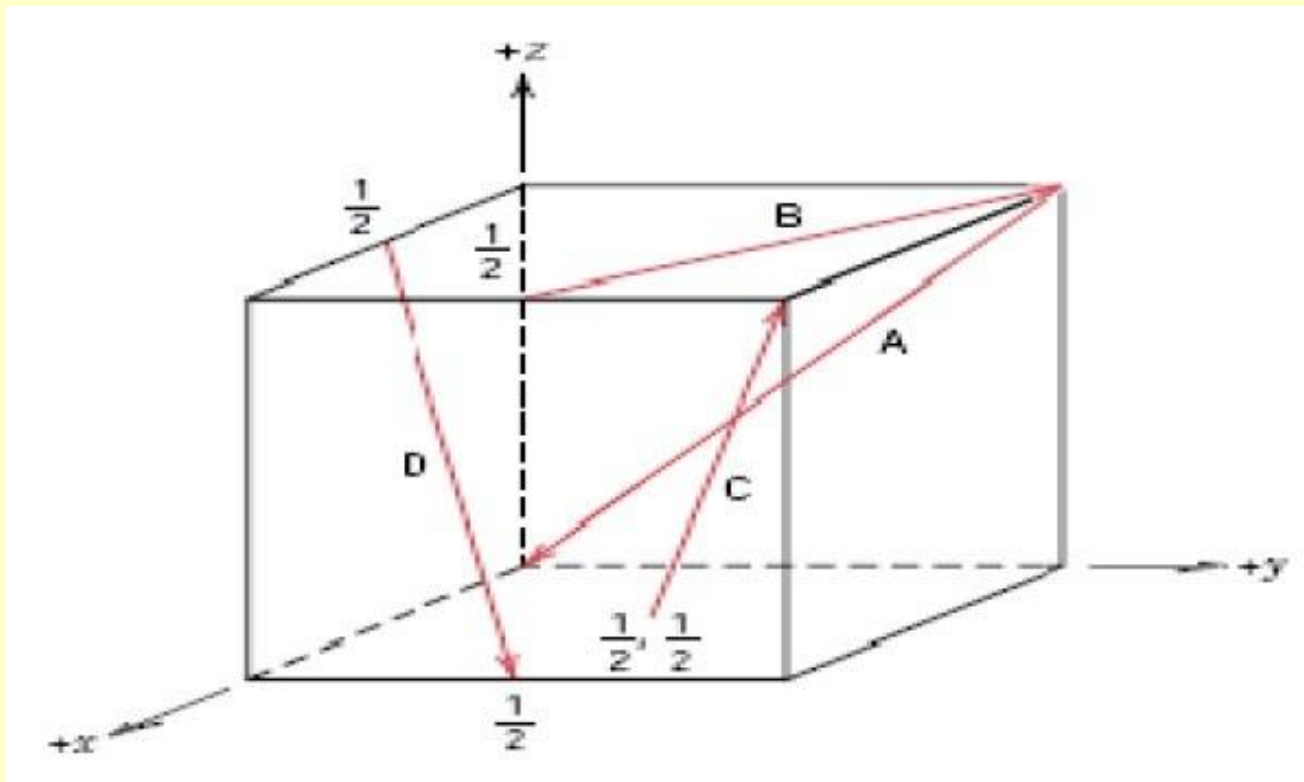
اندیس های میلر در هگزاگونال



اندیس های میلر

تمرین:

اندیس میلر جهات زیر را بدست آورید.



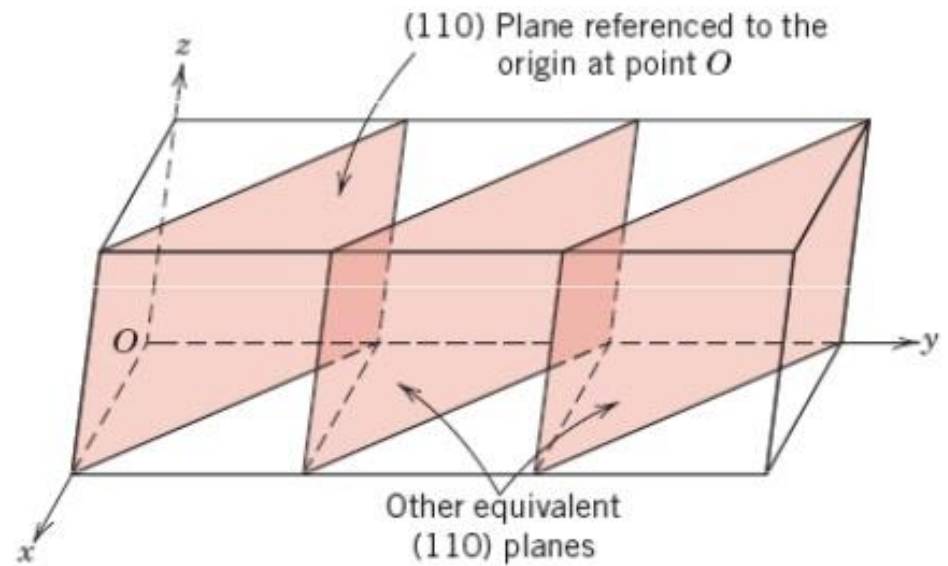
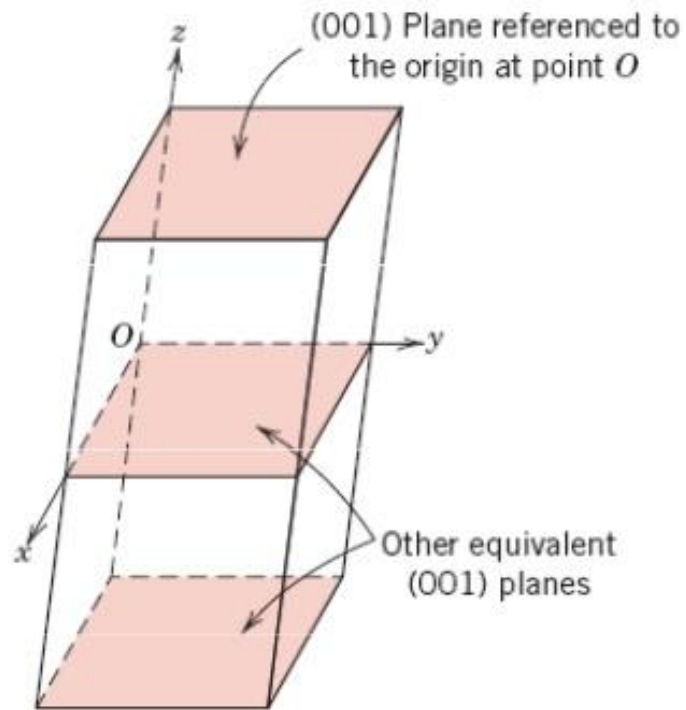
اندیس های میلر صفحات

- صفحه بلوری یک صفحه فرضی است که محورهای شبکه بلوری را در نقاط مشخصی قطع می کند و رفتار بلور (چگالی، لغزش، خواص مکانیکی و...) را مشخص می کند.
- محل برخورد صفحه با محورهای مختصات را تعیین می کنیم.
- مقادیر این برخوردها را معکوس می کنیم.
- اگر اعداد کسری باشند، همه را در کوچک ترین مضرب مشترک ضرب می کنیم تا اعداد صحیح به دست آید.
- اعداد به صورت (hkl) نوشته می شوند.
- این اعداد ممکن است مثبت یا منفی باشند.
- فاصله بین دو صفحه بلوری متوالی با d نشان داده می شود.

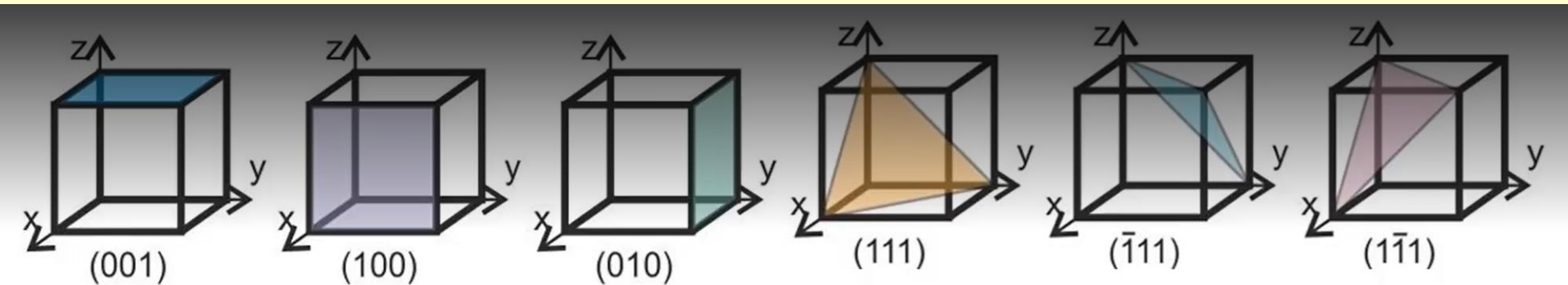
فاصله ی بین صفحه ای در شبکه های مکعبی:

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

اندیس های میلر در صفحات

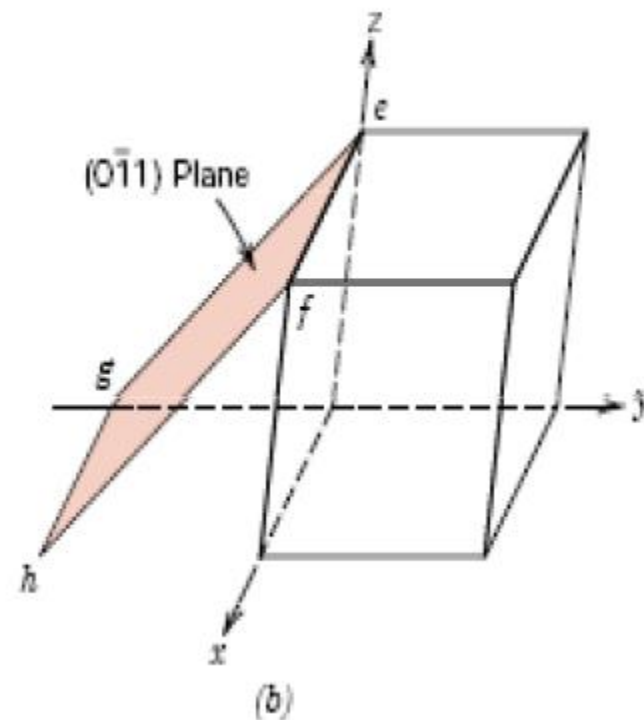
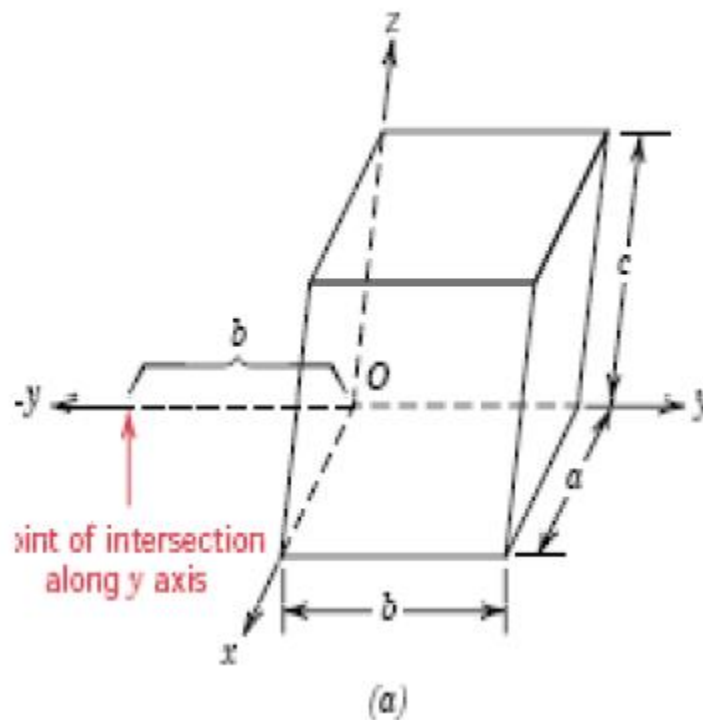


اندیس های میلر در صفحات



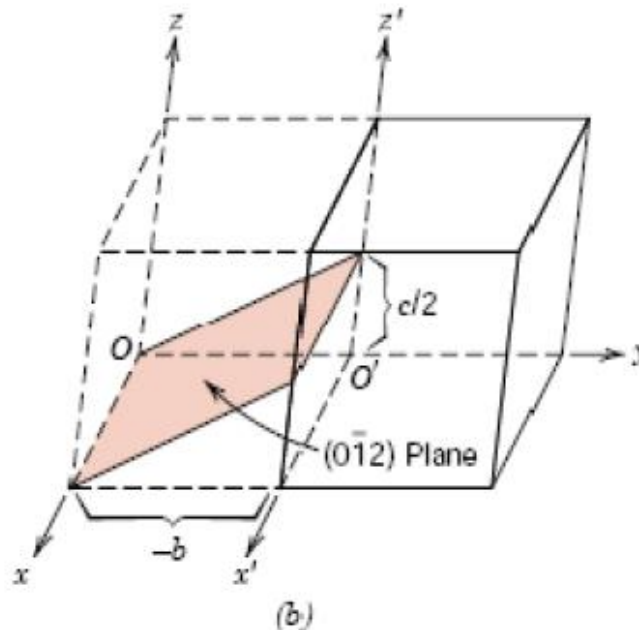
اندیس های میلر در صفحات

• مثال :



اندیس های میلر در صفحات

• مثال :



	x	y	z
Intercepts	∞	$-b$	$c/2$
Intercepts (in terms of lattice parameters)	∞	-1	$\frac{1}{2}$
Reciprocals	0	-1	2
Reductions (unnecessary)			
Enclosure		$(0\bar{1}2)$	

لغزش (Slip)

وقتی به یک فلز تنش برشی وارد می‌شود (مثلاً خم می‌کنیم)، اتم‌ها نمی‌توانند تصادفی حرکت کنند چون در یک شبکه بلوری منظم قرار دارند. ساده‌ترین راه تغییر شکل این است که یک لایه از اتم‌ها روی لایه دیگر سر بخورد. به این حرکت لایه‌های اتمی روی هم **لغزش (Slip)** می‌گویند.

نتیجه لغزش:

- فلز تغییر شکل پلاستیک می‌دهد. (یعنی دائمی تغییر شکل می‌دهد).
- این حرکت معمولاً با حرکت نابجایی‌ها (dislocations) در کریستال انجام می‌شود.

لغزش (Slip)

صفحه لغزش (Slip Plane):

صفحه لغزش صفحه‌ای در شبکه بلوری است که لغزش در آن اتفاق می‌افتد. ویژگی مهم:

- معمولاً متراکم‌ترین صفحه اتمی است.
- چون اتم‌ها در آن نزدیک‌ترند، حرکت روی آن راحت‌تر است.

جهت لغزش (Slip Direction):

جهت لغزش جهتی در داخل صفحه لغزش است که اتم‌ها در آن جهت حرکت می‌کنند.

ویژگی مهم:

- معمولاً متراکم‌ترین جهت اتمی در آن صفحه است.

سیستم لغزش (Slip System):

سیستم لغزش ترکیب صفحه لغزش و جهت لغزش است.

لغزش (Slip)

BCC

جهت‌های لغزش فعال و متراکم در BCC:
 $\langle 111 \rangle$

صفحات لغزش در BCC:
 $\{110\}$ ← مهم‌ترین و راحت‌ترین صفحه لغزش
 $\{112\}$
 $\{123\}$

کل سیستم لغزش BCC = ۴۸

لغزش (Slip)

صفحات لغزش در FCC:
 $\{111\}$

این خانواده شامل ۴ صفحه است:

(111)

$(\bar{1}11)$

$(1\bar{1}1)$

$(11\bar{1})$

جهت‌های لغزش فعال و متراکم در FCC:
 $\langle 110 \rangle$

این خانواده شامل ۱۲ جهت است (۶ جهت اصلی و ۶ جهت مخالف).

اما در هر صفحه $\{111\}$ فقط ۳ جهت از $\langle 110 \rangle$ داخل آن صفحه قرار می‌گیرند.

کل سیستم لغزش ۱۲ = FCC

لغزش (Slip)

در ساختار HCP چند نوع لغزش داریم (پایه‌ای، منشوری و هرمی) که تفاوتشان در موقعیت صفحه و جهت لغزش در سلول بلوری است.

نوع لغزش	صفحه لغزش	جهت لغزش	تعداد سیستم لغزش	چگالی اتمی	شرایط فعال شدن
پایه‌ای (Basal)	(0001)	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	3	بیشترین	دمای پایین
منشوری (Prismatic)	$\{10\bar{1}0\}$	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	3	متوسط	دمای بالاتر
هرمی (Pyramidal)	$\{10\bar{1}1\}$	$\langle 11\bar{2}3 \rangle$	6 (یا بیشتر)	کم	دمای بالا

بنابراین در HCP

- در دمای معمول: حدود ۶ سیستم لغزش فعال
- در دماهای بالاتر: می‌تواند تا حدود ۱۲ سیستم یا بیشتر فعال شود.

لغزش (Slip)

مقایسه شکل پذیری سه ساختار اصلی

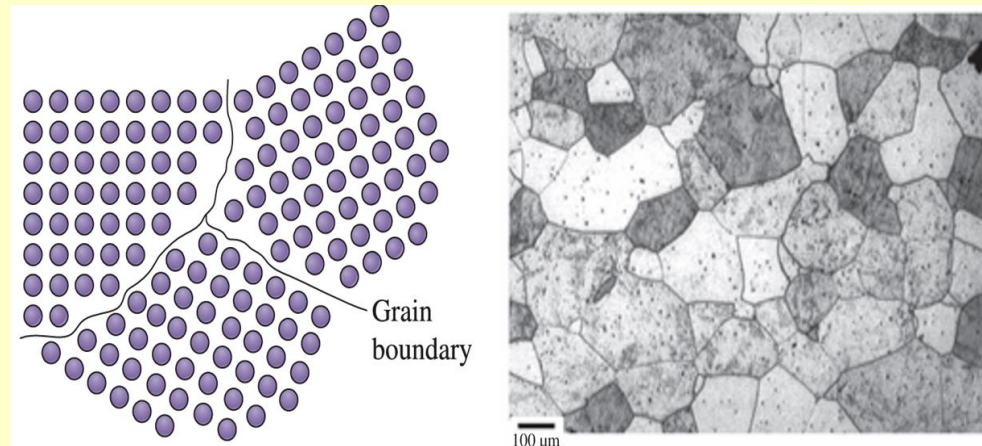
از بیشترین به کمترین:

- FCC بیشترین شکل پذیری را دارد چون هم صفحاتش و هم جهتهایش بیشترین چگالی اتمی را دارند و سیستمهای لغزشش کاملاً فعال و کم انرژی‌اند. صفحه و جهت کاملاً متراکم ← لغزش آسان
- BCC جهت متراکم دارد ولی صفحه متراکم واقعی ندارد (وابسته به دما) ← لغزش سخت‌تر
- HCP فقط یک صفحه راحت دارد. (لغزش محدود) ← شکل پذیری کم

تک کریستال ها و چند کریستال ها

چند کریستال ها (Polycrystal)

- از بسیاری دانه های کوچک تشکیل شده.
- هر دانه یک جهت گیری بلوری خاص دارد.
- بین دانه ها مرزدانه (grain boundary) وجود دارد.
- به دلیل جهت های تصادفی دانه ها، به صورت تقریبی¹ isotropic هستند.
- مثال: تقریباً همه فلزات صنعتی چند کریستال هستند (فولاد، آلومینیوم، مس، تیتانیوم...).



¹ isotropic یا همسانگردی یعنی خواص ماده در همه جهت ها یکسان است و با تغییر جهت، تغییری نمی کنند.

تک کریستال ها و چند کریستال ها

تک کریستال (Single Crystal)

- کل ماده فقط یک دانه (grain) دارد.
- جهت گیری شبکه بلوری در سراسر نمونه یکسان است.
- هیچ مرزدانه ای وجود ندارد.
- رفتار آنها وابسته به جهت گیری بلوری است. در واقع خواص جهت دار ($Anisotropic^1$) دارند.
- مقاومت، سختی، انعطاف و لغزش در جهت های خاص متفاوت است.

مثال ها: ویفرهای سیلیکونی، یاقوت، توربین های سوپراآلیاژی تک بلور، بلور نمک بزرگ.

$Anisotropic^1$ یا ناهمسانگردی: یعنی خواص یک ماده در جهت های مختلف متفاوت باشد؛ به این معنی که اگر یک خاصیت (مثل استحکام، سختی یا هدایت حرارتی) را در یک جهت اندازه بگیریم یک مقدار به دست می آید و اگر همان خاصیت را در جهت دیگری اندازه بگیریم، مقدار متفاوتی خواهد داشت.